



Michał SZUCKI<sup>1</sup>, Józef S. SUCHY<sup>2</sup>, Daniel. GURGUL<sup>3</sup>

## ODWZOROWANIE POWIERZCHNI SWOBODNEJ PRZY MODELOWANIU PROCESU WYPEŁNIANIA FORMY ODLEWNICZEJ METODĄ SIATKOWĄ BOLTZMANN

### STRESZCZENIE

Praca koncentruje się na zagadnieniu wykorzystaniu Metody Siatkowej Boltzmana do modelowania procesu zalewania formy odlewniczej. Przedstawiono tu pokrótce podstawowe elementy algorytmu obliczeniowego dla jednofazowych przepływów płynu w układach typu D2Q9. Szczegółowo opisano sposoby pozwalające na uwzględnienie w modelu powierzchni swobodnej bez konieczności wykonywania dodatkowych obliczeń związanych z obecnością drugiej fazy. Dokładnie scharakteryzowano warunki brzegowe, mające zastosowanie w modelowaniu procesów odlewniczych, występujące zarówno na granicy faz jak i styku ciekłego metalu i ścianek układu.

Zasadnicza część pracy objęła analizę dokładności odwzorowania powierzchni swobodnej dla metody siatkowej Boltzmana. W tym celu przeprowadzono walidację zaproponowanego modelu w oparciu o dostępne w literaturze rozwiązania analityczne jak i wyniki z komercyjnego programu symulacyjnego ProCAST. Zaproponowano również usprawnienia do algorytmu obliczeniowego obejmujące odmienną technikę usuwania artefaktów oraz dokładniejsze metody wyznaczania lokalnego kierunku normalnego do powierzchni swobodnej. Wskazano także rozwiązania pozwalające na uproszczoną symulację procesu zamykania w metalu pęcherzy gazowych.

**Słowa kluczowe:** *Metoda siatkowa Boltzmana, LBM, przepływy z powierzchnią swobodną, warunki brzegowe, D2Q9, artefakty*

### 1. WSTĘP

Proces wypełniania formy odlewniczej ciekłym metalem należy do najważniejszych czynników warunkujących otrzymanie wysoko jakościowych i pozbawionych wad odlewów. Jednym z podstawowych narzędzi wspierających technologów przy projektowaniu układów wlewowych, są obecnie komputerowe programy symulacyjne. W przeważającej większości, modele przepływów w tych aplikacjach oparte są o numeryczne rozwiązanie równania Naviera-Stokesa (NS).

<sup>1</sup> mgr inż. Michał SZUCKI, *mszucki@agh.edu.pl*,

- Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, Wydział Odlewnictwa AGH

<sup>2</sup> prof. zw. dr hab. inż. Józef Szczepan SUCHY,

- Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, Wydział Odlewnictwa AGH

<sup>3</sup> mgr inż. Daniel GURGUL,

- Katedra Inżynierii Stopów i Kompozytów Odlewanych, Wydział Odlewnictwa AGH

Ciekawą alternatywa dla standardowych algorytmów obliczeniowej mechaniki płynów (CFD) jest wykorzystanie metody siatkowej Boltzmana (z ang. Lattice Boltzmann Method, w skrócie LBM). Dane literaturowe wskazują, że algorytmy LBM, w porównaniu do tradycyjnych metod opartych o równania NS, mogą bardziej efektywnie wykorzystywać współczesne jednostki obliczeniowe. Dodatkowo ze względu na konstrukcję modelu, w którym większość operacji wykonywana jest lokalnie bez odwoływania się do stanu komórek sąsiednich z bieżącego kroku czasowego, metodę siatkową Boltzmana można w łatwy sposób adaptować do pracy na procesorach wielordzeniowych czy systemach klastrowych [1, 2]. Z tego powodu algorytmu numeryczne wykorzystujące LBM są z powodzeniem stosowane w różnych dziedzinach nauki (np. w medycynie czy meteorologii [3, 4]). Dostępne w literaturze analizy prowadzone zwłaszcza dla przepływów jednofazowych wskazują również, że metoda ta charakteryzuje się dużą zgodnością uzyskiwanych wyników z rzeczywistym przebiegiem procesu [5].

Podczas zalewania formy odlewniczej szereg zjawisk mających bezpośredni wpływ na jakość końcowego wyrobu, takich jak zamykanie w metalu pęcherzy gazowych, występuje na powierzchni swobodnej. Stąd właściwe odwzorowanie granicy pomiędzy fazą ciekłą a gazem wypełniającym formę stanowi jedno z podstawowych wymagań jakie stawiane jest programom symulacyjnym.

Zagadnienie wykorzystania metody siatkowej Boltzmana do modelowania przepływów występujący w przemyśle odlewniczym nie zostało dotychczas podjęte na szeroką skalę. Nie prowadzono również kompleksowych badań mających na celu analizę odwzorowania powierzchni swobodnej dla algorytmów opartych o LBM. Stąd podjęcie przez autorów tej tematyki wydaje się być w pełni uzasadnione.

## 2. METODA SIATKOWA BOLTZMANNA

Pod względem historycznym metoda Siatkowa Boltzmana wywodzi się z automatu komórkowego dyfuzji gazów (*Lattice Gas Automata*). W porównaniu do pierwowzoru układ nie jest opisywany przez wartość zmiennych logicznych ale poprzez zbiór zmiennych rzeczywistych warunkujących prawdopodobieństwo z jakim określony jest stan danej komórki siatki.

Dzięki temu zabiegowi algorytmy oparte o LBM charakteryzują się znacznie wyższą efektywnością numeryczną. Metoda ta ma również solidne podstawy fizyczne i można pokazać, że charakterystyczne dla niej zależności opisujące ewolucję modelu są wynikiem dyskretyzacji równania Boltzmana.

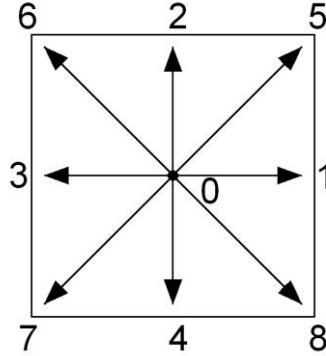
Przedstawiony w niniejszej pracy model działa w oparciu o dwumiarową (2D) regularną siatkę o kwadratowych komórkach. Stan każdej z nich określony jest poprzez 9 dyskretnych funkcji rozkładu cząsteczek  $f$ , stąd też typ tego modelu określa się mianem D2Q9 (2 wymiary, 9 prędkości). Ewolucja modelu następuje w wyniku przepływów grup cząsteczek płynu pomiędzy sąsiadującymi komórkami oraz interakcji pomiędzy grupami cząsteczek w obrębie danej komórki. Ma to swoje odzwierciedlenie w zmianach wartości funkcji rozkładu  $f_i$ , które to z kolei umożliwiają obliczenie podstawowych, lokalnych parametrów płynu takich jak gęstość, ciśnienie czy prędkość. Metodę siatkową Boltzmana można więc traktować jako podejście mezoskopowe, znajdujące się gdzieś pomiędzy makroskopowymi równaniami NS, a dynamiką molekularną [6].

## 2.1. Przepływy jednofazowe

W literaturze najczęściej spotyka się algorytmy LBM wykorzystujące tzw. aproksymację BGK (Bhatnagar-Gross-Krook approximation) równia siatkowego Boltzmanna (LBE):

$$f_i(x + e_i, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (1)$$

gdzie  $i \in \langle 0..8 \rangle$  (rys. 1). Zależność (1) określa ewolucję funkcji dystrybucji  $f$  w kolejnych krokach czasowych i dla kolejnych komórek dyskretnej siatki.



Rys. 1. Zbiór dyskretnych prędkości dla komórki siatki

Funkcja równowagowego rozkładu  $f^{eq}$  ma postać:

$$f_i^{eq}(\rho(x, t), u(x, t)) = f_i^{eq}(x, t) = \omega_i \rho \left[ 1 + 3(e_i \cdot u) + \frac{9}{2}(e_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2}u^2 \right], \quad (2)$$

gdzie  $e_i$  to zbiór bezwymiarowy, dyskretnych prędkości. Wartości parametrów z zależności (2) dla omawianego tu modelu typu D2Q9 zestawiono w tabeli 1.

Tabela 1. Parametry dla modelu D2Q9		
	$\omega$	$\frac{1}{2}e_i^2$
$i=0$	4/9	0
$i=1,2,3,4$	1/9	1/2
$i=5,6,7,8$	1/36	1

Występująca w równaniu (2) gęstość  $\rho$  i prędkość  $u$  obliczyć można na podstawie:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \quad \rho u = \sum_{i=0}^8 f_i e_i. \quad (3)$$

Analogicznie jak ma to miejsce w automacie komórkowym dyfuzji gazów, równanie (1) rozwiązywane jest w dwóch krokach nazywanych z ang. *Streaming* i *Collision*:

$$f_i(x, t) = f_i(x + e_{inv}, t - \Delta t), \quad (4)$$

*Collision*:

$$f_i(x, t+1) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)], \quad (5)$$

gdzie  $inv$  oznacza kierunek odwrotny do  $i$ .

Metoda siatkowa Boltzmanna działa w oparciu o uogólnione parametry bezwymiarowe. Nadanie płynowi rzeczywistych, fizycznych własności odbywa się poprzez czas relaksacji  $\tau$ :

$$\tau = 3\nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + 0.5, \quad (6)$$

gdzie  $\nu$  to lepkość kinematyczna płynu,  $\Delta t$  i  $\Delta x$  to odpowiednio krok czasowy i krok siatki.

W celu zapewnienia stabilności numerycznej metody czas relaksacji powinien mieścić się w zakresie:

$$0.5 \leq \tau \leq 2.5, \quad (7)$$

Na podstawie zależności (6) i (7) można stwierdzić, że dla danego kroku czasowego i przestrzennego, metoda ta jest zbieżna dla  $\nu$  z pewnego obustronnie domkniętego przedziału<sup>4</sup>.

## 2.2. Przepływy z powierzchnią swobodną

W przypadku procesu zalewania formy odlewniczej mamy zazwyczaj do czynienia z przepływami co najmniej dwufazowymi. Jedną fazę stanowi płynący metal drugą natomiast gaz (powietrze) wypełniający formę. Istnieje szereg różnorodnych modeli dla przepływów wielofazowych opartych o metodą siatkową Boltzmanna [7, 8]. Szczególnie interesujące rozwiązanie, związane ściśle z technologią wykonywania odlewów znaleźć można w pracy [9]. Wadą większości z tych modeli jest niska efektywność algorytmu obliczeniowego wynikająca z konieczności modelowania zarówno fazy ciekłej jak i gazowej.

W omawianych procesach odlewniczych granicę rozdziału faz stanowi powierzchnia swobodna ciekłego metalu. Z punktu widzenia istotności przedstawionych tu rozwiązań dla zastosowań przemysłowych, podstawowe znaczenie mają zjawiska zachodzące w cieczy jak i na powierzchni swobodnej. Z pewnym uproszczeniem można natomiast potraktować fazę gazową, biorąc pod uwagę jedynie średnie ciśnienie jakie wywierane jest na ciekły metal i ścianki formy.

W niniejszej pracy autorzy bazują na rozwiązaniu oryginalnie zaproponowanym do modelowania procesu tworzenia pian metalicznych [10]. Pewne modyfikacje do tej metody oraz szczegółowy opis algorytmu obliczeniowego można znaleźć w pracy [11], dotyczącej komputerowej, trójwymiarowej animacji przepływów.

W celu uwzględnienia w modelu powierzchni swobodnej konieczny jest podział komórek siatki na trzy odrębne typy: to jest komórki puste (E), komórki całkowicie wypełnione cieczą (F) i komórki interfejsu (I). Komórki puste są w obliczeniach każdorazowo pomijane. Komórki cieczy traktowane są tak jak w przypadku przepływów jednofazowych. Natomiast wszystkie obliczenia związane z przemieszczaniem się powierzchni swobodnej wykonywane są w komórkach interfejsu. W celu zachowania bilansu masy w układzie muszą one tworzyć ciągłą granicę oddzielającą fazę ciekłą i gazową.

Podczas ruchu cieczy masa wymieniana jest pomiędzy sąsiadującymi z sobą komórkami. Śledzenie powierzchni swobodnej odbywa się poprzez kontrolowanie jej zmian w komórkach I. Jeżeli komórka interfejsu w punkcie  $x$  ma obok w kierunku  $(x + e_i)$  komórkę typu F to zmiana jej masy w tym kierunku określona jest wzorem:

$$\Delta m_i(x, t + 1) = f_{inv}(x + e_i, t) - f_i(x, t). \quad (8)$$

<sup>4</sup> Istnieją metody, jak np. „Smagorinsky sub-grid model” [13], umożliwiające poprawienie stabilności numerycznej model.

Dla dwóch sąsiadujących komórek interfejsu należy dodatkowo wziąć pod uwagę pole powierzchni przez którą wymieniana jest masa:

$$\Delta m_i(x, t + \Delta t) = f_{inv}(x + e_i, t) - f_i(x, t) \cdot \frac{\varepsilon(x + e_i, t) + \varepsilon(x, t)}{2}. \quad (9)$$

Nowa masa dla każdej komórki interfejsu obliczana jest ze wzoru:

$$m(x, t + \Delta t) = m(x, t) + \sum_{i=0}^8 \Delta m_i(x, t + \Delta t). \quad (10)$$

W przypadku komórek cieczy masa zawsze równa jest gęstości  $\rho$ . Natomiast dla komórek interfejsu zależność pomiędzy masą, a gęstością określona jest zależnością:

$$\varepsilon = \frac{m}{\rho}, \quad (11)$$

gdzie  $\varepsilon$  to lokalny udział fazy ciekłej zmieniający się od 0 do 1. Wartość „0” oznacza, że komórka jest pusta natomiast „1”, że jest całkowicie wypełniona cieczą. Pozostałe obliczenia wykonywane dla komórek interfejsu są identyczne jak w punkcie 2.1 (*Streaming i Collision*).

Komórki I, w których w danym kroku czasowym  $\varepsilon \geq 1$  lub  $\varepsilon \leq 0$  są odpowiednio przekształcane na komórki cieczy i komórki puste. W ramach głównej pętli obliczeniowej należy również ponownie „domknąć” interfejs poprzez konwersje komórek E i F na komórki I.

### 3. WARUNKI BRZEGOWE

#### 3.1. Warunek brzegowy na powierzchni swobodnej

Każda komórka interfejsu sąsiaduje z komórkami typu E. W pustych komórkach funkcje rozkładu  $f$  są nieokreślone. Stąd nie można stosować zależności (4) w przypadku gdy komórką sąsiednią w danym kierunku  $i$  jest komórka typu E. W takiej sytuacji należy zrekonstruować funkcje rozkładu pochodzące z tych kierunków. Jeżeli dla komórki interfejsu w punkcie  $x$  sąsiednia komórka ( $x + e_i$ ) jest pusta, wówczas zależność (4) przyjmuje postać:

$$f_{inv}(x, t) = f_i^{eq}(\rho_A, u) + f_{inv}^{eq}(\rho_A, u) - f_i(x, t - \Delta t), \quad (12)$$

gdzie  $\rho_A$  to bezwymiarowa gęstość, odpowiadająca zgodnie ze wzorem (20) ciśnieniu jakie wywiera gaz wypełniający formę na powierzchni swobodną metalu. Domyślna wartość  $\rho_A = 1$  oznacza, że ciecz bez żadnych przeszkód może zajmować komórki puste (ciśnienie nie wpływa na przepływ).

Zgodnie z oryginalnym algorytmem należy przy pomocy równania (12) zrekonstruować również funkcje rozkładu napływające z kierunku normalnego do interfejsu.

#### 3.2. Warunki brzegowe na ściankach układu

Jednym z podstawowych czynników wpływających na kinetykę przepływu metalu poprzez elementy układu wlewowego są siły tarcia pomiędzy cieczą, a ściankami formy. Problem ten jest szczególnie istotny w przypadku form o chropowatej powierzchni, a więc i najczęściej stosowanych w przemyśle form piaskowych. Wyhamowywanie cieczy w wyniku tarcia o powierzchnie zewnętrzną bardzo dobrze oddaje tzw. warunek brzegowy „no-slip”. Powoduje on zerowanie prędkości stycznych i normalnych w warstwie komórek leżących bezpośrednio przy brzegu układu. Jeżeli komórka cieczy lub interfejsu w punkcie  $x$  ma w kie-

runku  $(x + e_i)$  ściankę formy to wówczas równanie (4) zastępowane jest zależnością:

$$f_i(x, t) = f_{inv}(x, t - \Delta t). \quad (13)$$

Przeciwieństwem tego warunku jest tzw. warunek „free-slip”. W tym przypadku jedynie prędkości normalne do brzegu są równe zero, natomiast prędkości styczne pozostają bez zmian. Odpowiada to sytuacji kiedy ciecz sływa po idealnie gładkiej powierzchni. Metody implementacji tego warunku można znaleźć w pracy [12].

Oczywiście dwa powyższe skrajne przypadki nie rozwiązują w pełni zagadnienia oddziaływania pomiędzy poruszającą się cieczą a formą. W praktyce przemysłowej mamy często do czynienia z sytuacją pośrednią, gdy ścianki zarówno nie są idealnie gładkie jak i nie wyhamowują całkowicie stykającej się z nimi warstewki metalu. W takiej sytuacji zastosowany może być warunek „part-slip” [13] umożliwiający kontrolę stopnia chropowatości powierzchni zmieniającego się od 0 do 1 („0” oznacza warunek free-slip natomiast „1” no-slip).

### 3.3. Inne warunki brzegowe

Typowym dla odlewniczych programów symulacyjnych jest warunek „inlet” rozumiany jako miejsce wpływu metalu do rozpatrywanego układu. Zasadniczo rozróżnia się dwa jego typy: wpływ odbywa się przy założonym ciśnieniu lub prędkość. Implementacja tego warunku brzegowego w algorytmach opartych o LBM jest stosunkowo prosta. W literaturze najczęściej spotyka się metodę opartą o tzw. zasadę „bounce back” [14]:

$$f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t) = -(f_{inv}(x, t) - f_{inv}^{eq}(x, t)) \quad (14)$$

Funkcja rozkładu równowagowego  $f_i^{eq}$  może zostać obliczona na podstawie przyjętej gęstości (ciśnienia)  $\rho_{in}$  lub prędkości  $u_{in}$  na wypływie. Stąd dla komórki cieczy lub interfejsu funkcje dystrybucji napływające od brzegu typu „inlet” obliczane są z zależności:

$$f_i(x, t) = f_i^{eq}(\rho_{in}, u) - (f_{inv}(x, t) - f_{inv}^{eq}(x, t)) \quad (15)$$

lub

$$f_i(x, t) = f_i^{eq}(\rho, u_{in}) - (f_{inv}(x, t) - f_{inv}^{eq}(x, t)) \quad (16)$$

## 4. ODWZOROWANIE POWIERZCHNI SWOBODNEJ

### 4.1. Normalne

Podczas wspomnianego w punkcie 2.2 „domykania” interfejsu bardzo często zdarza się, że masa  $m$  w nowo powstałej komórce cieczy jest większa od lokalnej gęstości lub, że w komórce pustej jest on różna od zera. W celu zachowania bilansu masy w układzie konieczne jest rozesłanie jej nadmiaru (lub niedomiaru) do sąsiadujących komórek I. W oryginalnym algorytmie zaproponowanym w pracy [11], masa ta nie jest rozprowadzana równomiernie, a ważona w zależności od lokalnego kierunku normalnego do interfejsu.

Jak już wspomniano, podczas rekonstrukcji funkcji rozkładu w komórkach I również obliczany jest kierunek normalny. Standardowo w literaturze [13] proponuje się obliczanie normalnej za pomocą centralnego ilorazu różnicowego z 4 komórek sąsiednich.

$$n = 0.5 \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{j-1,k} - \varepsilon_{j+1,k} \\ \varepsilon_{j,k-1} - \varepsilon_{j,k+1} \end{pmatrix}, \quad (17)$$

gdzie  $j, k$  oznaczają odpowiednio położenie w poziomie i pionie danej komórki na dyskretnej siatce.

Taki sposób obliczania kierunku normalnego wymaga minimalnej liczby obliczeń. Można jednak przypuszczać, że metoda ta charakteryzować się będzie niską dokładnością.

W niniejszej pracy przetestowano dodatkowe dwie funkcje:

$$n = \left( \frac{\begin{matrix} \varepsilon_{j+1,k+1} + \varepsilon_{j+1,k} + \varepsilon_{j+1,k-1} - \varepsilon_{j-1,k+1} - \varepsilon_{j-1,k} - \varepsilon_{j-1,k-1} \\ \varepsilon_{total} \end{matrix}}{\begin{matrix} \varepsilon_{j-1,k+1} + \varepsilon_{j,k+1} + \varepsilon_{j+1,k+1} - \varepsilon_{j-1,k-1} - \varepsilon_{j,k-1} - \varepsilon_{j+1,k-1} \\ \varepsilon_{total} \end{matrix}} \right), \quad (18)$$

oraz

$$n = \left( \frac{\begin{matrix} \left[ 2(\varepsilon_{j+2,j+1} + \varepsilon_{j+2,k} + \varepsilon_{j+2,k-1} - \varepsilon_{j-2,k+1} - \varepsilon_{j-2,k} - \varepsilon_{j-2,k-1}) + \varepsilon_{k+1,j+2} + \varepsilon_{j+1,k+1} + \right. \\ \left. + \varepsilon_{j+1,k} + \varepsilon_{j+1,k-1} + \varepsilon_{j+1,k-2} - \varepsilon_{j-1,k+2} - \varepsilon_{j-1,k+1} - \varepsilon_{j-1,k} - \varepsilon_{j-1,k-1} - \varepsilon_{j-1,k-2} \right] \\ \varepsilon_{total} \end{matrix}}{\begin{matrix} \left[ 2(\varepsilon_{j-1,k-2} + \varepsilon_{j,k-2} + \varepsilon_{j+1,k-2} - \varepsilon_{j-1,k+2} - \varepsilon_{j,k+2} - \varepsilon_{j+1,k+2}) - \varepsilon_{j-2,k+1} - \varepsilon_{j-1,k+1} - \right. \\ \left. - \varepsilon_{j,k+1} - \varepsilon_{j+1,k+1} - \varepsilon_{j+2,k+1} + \varepsilon_{j-2,k-1} + \varepsilon_{j-1,k-1} + \varepsilon_{j,k-1} + \varepsilon_{j+1,k-1} + \varepsilon_{j+2,k-1} \right] \\ \varepsilon_{total} \end{matrix}} \right), \quad (19)$$

gdzie  $\varepsilon_{total}$  to suma udziału fazy ciekłej we wszystkich komórkach, których środki znajdują się w rozpatrywanym otoczeniu o promieniu  $R$ . W przypadku gdy na wyznaczony kierunek normalny wpływ ma 8 komórek sąsiednich (równanie (18))  $R = \sqrt{\Delta x}$ , natomiast dla 20 komórek (równanie (19))  $R = \Delta x \sqrt{5}$ .

Przy doborze alternatywnych metod obliczania normalnych wzięto pod uwagę wyniki pracy [15].

## 4.2. Artefakty

Podczas przemieszczania się powierzchni swobodnej w pewnych przypadkach zdarza się, że pojedyncze komórki interfejsu pozostają z tyłu, całkowicie otoczone przez ciecz lub komórki puste. Komórki te widoczne są podczas wizualizacji wyników jako artefakty. Jak pokazuje doświadczenie autorów ich obecność może również wpływać na stabilność numeryczną modelu.

Istniejące w literaturze [13] techniki usuwania artefaktów zasadniczo sprowadzają się do prostej, wymuszonej konwersji komórek otoczonych jedynie przez komórki cieczy lub komórki puste odpowiednio na komórki typu F i E. Metody te mogą jednak w pewnych przypadkach zaburzyć bilans masy w układzie jak również wpływać na kształt powierzchni swobodnej. W rzadkich sytuacjach zdarza się również, że pomimo ich zastosowania artefakty nadal pozostają widoczne.

Zaproponowana tu metoda wiąże się z koniecznością wykonywania dodatkowych obliczeń, gwarantuje jednak usunięcie wszystkich błędnych komórek interfejsu przy jednoczesnym zachowaniu bilansu masy i poprawnego odwzorowania powierzchni swobodnej.

W miejscu opisanej w punkcie 2.2 transformacji komórek interfejsu, w oparciu o zmiany udziału fazy ciekłej  $\varepsilon$ , wykonywana jest konwersja tymczasowa. Ma ona na celu zidentyfikowanie tych elementów dyskretnej siatki, które w następnym kroku czasowym będą widoczne jako artefakty.

Komórki, które zostaną zamknięte w cieczy lub będą otoczone tylko przez komórki puste są następnie, odpowiednio konwertowane na komórki typu F i E. Zgodnie z teorią, masa

w powstałych w ten sposób komórkach cieczy musi być równa lokalnej gęstości, podobnie masa w komórkach pustych powinna być zerowa. Stąd nadmiar lub niedomiar masy rozprowadzany jest do sąsiadujących komórek interfejsu, analogicznie jak miało to miejsce w punkcie 2.2. Następnie ponownie obliczany jest udział fazy ciekłej  $\varepsilon$  dla wszystkich elementów siatki. Dopiero na tej podstawie dokonywana jest właściwa transformacja komórek interfejsu.

#### 4.3. Wpływ gazów wypełniających formę na kształt i położenie powierzchni swobodnej

Jednym z negatywnych zjawisk, które występuje zwłaszcza podczas przepływów turbulentnych i może istotnie wpłynąć na jakość finalnego odlewu, jest zamykanie w metalu pęcherzy gazowych. Jak już wspomniano w przedstawionym tu modelu faza gazowana jest pomijana, co skutkuje tym, że ciecz może bez żadnych przeszkód zajmować komórki typu E. W rzeczywistości zanikanie (lub zwiększanie objętości) pęcherzy gazowych zależy będzie przede wszystkim od bilansu sił, ciśnienia metalostatycznego cieczy z jednej strony i ciśnienia gazu w pęcherzu z drugiej.

Podstawy zaproponowanej tu metody, pozwalającej na uwzględnienie tych zjawisk w modelu LBM opisano w pracy [6]. Dla każdego podobszaru gazu, o znanej objętości, otoczonego przez ciekły metal dane jest początkowe ciśnienie  $p_G$ . Zmiana tego ciśnienia w wyniku kurczenia się lub rozszerzania rozpatrywanego podobszaru może być wyznaczona na podstawie równania Clapeyrona. Wpływ ciśnienia gazu  $p_G$  na kształt i położenie powierzchni swobodnej uwzględniany jest poprzez bezwymiarową gęstość  $\rho_G$ . Zależność pomiędzy ciśnieniem a gęstością gazu doskonałego dla metody LBM opisuje wzór:

$$p_G = c_s^2 \cdot \rho_G, \quad (20)$$

gdzie  $c_s^2$  to bezwymiarowa prędkość dźwięku charakterystyczna dla metody LBM. W przypadku modelu typu D2Q9  $c_s^2$  równe jest  $1/3$ . Wartość  $\rho_G$  obliczona na podstawie równania (20) podstawiana jest do wzoru (12) w miejsce  $\rho_A$ .

Wypełnianie formy odlewniczej ciekłym metalem jest zazwyczaj procesem bardzo dynamicznym. Pęcherze gazowe są zamykane w metalu, łączą się z sobą, zanikają itp. Stąd jednym z podstawowych wyzwań na etapie numerycznej implementacji modelu jest opracowanie skutecznego algorytmu pozwalającego na identyfikację poszczególnych podobszarów zajmowanych przez gaz (powietrze). Ze względu na fakt, iż omawiany model funkcjonuje w układzie dwuwymiarowym autorzy zastosowali tu metodę graficzną opartą o tzw. procedurę „Flood Fill”, znaną choćby z programu Microsoft Paint. Jej działanie polega na wypełnianiu jednolitym kolorem „A” zamkniętego obszaru bitmapy składającego się z sąsiadujących ze sobą pikseli koloru „B”.

W celu zastosowania tego algorytmu należy utworzyć graficzną reprezentację dyskretnej siatki obliczeniowej. Każdej jej komórce przyporządkowany jest jeden piksel bitmapy, którego kolor zależy od typu fazy (ciecz lub gaz), której dana komórka odpowiada. Do fazy gazowej należy zaliczyć zarówno komórki puste jak i komórki interfejsu. W ten sposób wszystkie piksele odpowiadające komórkom typu E i I mają tą samą barwę „B”. Następnie algorytmu poszukuje kolejnych pikseli oznaczonych przez „B” i w miejscach tych wykonywana jest metoda *FloodFill*, wypełniając w ten sposób losowym kolorem zamknięty podobszar, do którego należy rozpatrywany piksel. Powierzchnia podobszaru to suma pól wszystkich komórek, którym odpowiada dany kolor. Przy jej obliczaniu, dla komórek typu I należy wziąć również pod uwagę lokalny udział fazy ciekłej  $\varepsilon$ .

W przypadku połączenia się dwóch (lub więcej) pęcherzy gazu ich ciśnienie jest uśredniane i przypisywane do nowo powstałego podobszaru.



Przedstawiona tu metoda może być ulepszana poprzez implementację odpowiednich warunków brzegowych, uwzględniających dyfuzję gazów w głąb formy, czy rozpuszczalność gazów w metalu.

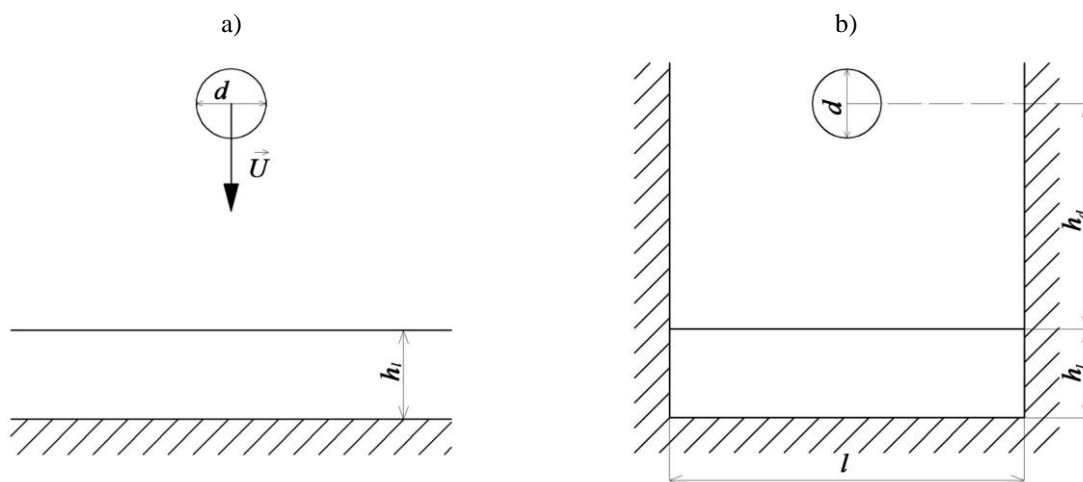
## 5. WYNIKI I DYSKUSJA

W przeważającej większości dostępnych w literaturze standardowych procedur do testowania przepływów z powierzchnią swobodną jako ciecz modelowa stosowana jest woda. Również szereg rozwiązań analitycznych oraz teoretycznych zależności opisujących przepływy dotyczy właśnie tej cieczy. Lepkość kinematyczna stopów odlewniczych (głównie ze względu na ich większą gęstość) jest w stosunku do wody zazwyczaj wyraźnie niższa. Ponieważ jednak dla typowych materiałów stosowanych na odlewy różnice te nie są na tyle duże aby znacząco wpływać na charakter i kinetykę rozpatrywanych przepływów, również w tym przypadku przeprowadzono walidację modelu w oparciu o parametry fizyczne wody ( $\nu = 1.02 \cdot 10^{-6} [m^2 / s]$ ).

Wszystkie testy prowadzone były dla stałej temperatury  $T=const$ . Na obecnym etapie prac pominięto również siły napięcia powierzchniowego.

### 5.1. Kształt i położenie powierzchni swobodnej

W niniejszym opracowaniu wykorzystano dwie standardowe techniki do walidacji modeli przepływów, uwzględniające śledzenie powierzchni swobodnej (z ang. *Interface Tracking*). Szczegółowy opis stosowanych tu procedur można znaleźć w pracach [16, 17]. Do pierwszego testu (zwanego dalej jako „test kropli”) wykorzystano układ modelowy przedstawiony na rys. 2a.



Rys. 2. Układ modelowy dla testu kropli; bez ścianek (a) i ze ściankami (b)

Kropla wody o średnicy  $d$  spada pod wpływem siły grawitacji na cienką warstwę tej samej cieczy. W wyniku zderzenia powstaje korona, której średnica  $d_c$  mierzona jest w kolejnych odstępach czasu. Wielkość układu badawczego została tak dobrana aby umożliwić swobodną ewolucję korony. Na tej podstawie obliczany jest bezwymiarowy czas  $t^*$  oraz bezwymiarowa średnica korony  $d_c^*$  według wzorów:

$$d_c^* = \frac{d_c}{d}, \quad (21)$$

$$t^* = \frac{tU}{d}, \quad (22)$$

gdzie  $U$  to prędkość kropli w chwili zderzenia z powierzchnią cieczy.

W literaturze [16] można znaleźć dwie funkcje teoretyczne opisujące zależność bezwymiarowego czasu  $t^*$  od bezwymiarowej średnicy  $d_c^*$ :

$$d_c^* \sim \sqrt{t^*}, \quad (23)$$

oraz

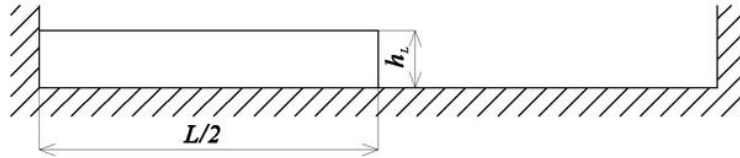
$$d_c^* \sim t^{*0.38}. \quad (24)$$

Eksperyment numeryczny przeprowadzono dla parametrów podanych w tabeli 2.

Tabela 2. Parametry dla testu kropli		
$h$	$U$	$d$
0.00094[m]	0.104[m/s]	0.0015[m]

Uzyskane wyniki przedstawione na rys. 4a jednoznacznie wskazują, że funkcja wykładnicza (24) znacznie lepiej opisuje przebieg procesu. Potwierdzają to również zaczerpnięte z literatury [16] dane doświadczalne.

Druga zastosowana tu procedura testowa to tzw. „Dam Break Test”. Układ wykorzystany w doświadczeniu numerycznym przedstawiono na rys. 3.



Rys. 3. Układ modelowy dla testu „Dam Break”

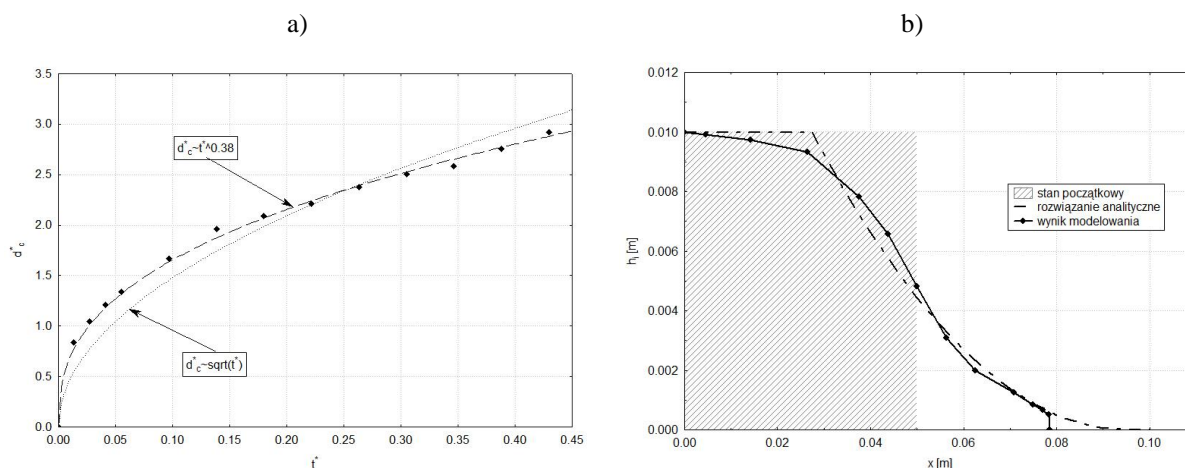
Ciecz o wysokości  $h_L$  w chwili  $t_0$  przyjętej za początek procesu zajmuje lewą połowę układu o długości  $L$ . Następnie pod działanie siły grawitacji  $g$  zaczyna stopniowo wypełniać prawą stronę naczynia. Parametry wykorzystane w doświadczeniu numerycznym zestawiono w tabeli 3.

Tabela 3. Parametry dla „Dam Break Test”		
$L$	$h_L$	$g$
0.1 [m]	0.01[m]	$9.81 \left[ \frac{m}{s^2} \right]$

Wysokość cieczy w danym punkcie  $x$  i czasie  $t$  (licząc od chwili  $t_0$ ) określona jest zależnością [17]:

$$\begin{aligned}
 h_t &= h_L & \text{dla } x \in \left\langle -\frac{L}{2}, -\sqrt{gh_L t} \right\rangle, \\
 h_t &= \frac{\left( \frac{2}{3}gh_L - \frac{x}{3t} \right)^2}{g} & \text{dla } x \in \left( -\sqrt{gh_L t}, 2\sqrt{gh_L t} \right), \\
 h_t &= 0 & \text{dla } x \in \left( 2\sqrt{gh_L t}, L/2 \right).
 \end{aligned} \quad (25)$$

Na rys. 4b. przedstawiono wyniki eksperymentu numeryczne oraz teoretyczną krzywą wyznaczoną na podstawie zależności (25).



Rys.4. Rozwiązanie analityczne oraz wyniki modelowania komputerowego dla testu kropli (a), oraz dla „dam break test” (b)

Również w tym wypadku zgodność pomiędzy wynikami modelowania, a rozwiązaniem analitycznym jest wysoka.

Na podstawie obu przeprowadzonych testów można stwierdzić, że zaproponowany w pracy model charakteryzuje się bardzo dobrym odwzorowaniem powierzchni swobodnej, jak również właściwie opisuje jej ewolucję w czasie.

## 5.2. Walidacja modelu w oparciu o wyniki z programu ProCAST

Wyniki symulacji z aplikacji opracowanej w oparciu o zaproponowany model zestawiono również z danymi uzyskanymi w komercyjnym programie odlewniczym ProCAST<sup>5</sup>. W eksperymencie numerycznym wykorzystano układ modelowy przedstawiony na rysunku 2b. Różni się on od tego zastosowanego w teście kropli głównie obecnością dwóch ścianek oddalonych o od osi układu o 0.0045[m], hamujących swobodny rozrost korony. Na każdej z nich zastosowano warunek brzegowy no-slip. Pozostałe parametry dla zastosowanej procedury testowej przedstawiono w tabeli 4.

Tabela 4. Parametry wykorzystywane przy walidacji modelu w oparciu o wyniki symulacji z programu ProCAST

$h_d$	$h_l$	$d$	$l$	$g$
0.0057[m]	0.0022[m]	0.0018[m]	0.009[m]	$9.81 \left[ \frac{m}{s^2} \right]$

Szczególny nacisk położono na uzyskanie maksymalnie zbliżonych warunków symulacji w obu programach. W tym celu w systemie ProCAST wykorzystano układ 2D oraz pominięto wpływ temperatury i napięcia powierzchniowego na ruch metalu. Zastosowano również siatki o zbliżonej liczbie komórek (około 65 500 elementów) i tych samych warunkach brzegowych na ściankach układu. Wyniki dla wybranych czasów  $t$  w postaci wizualizacji przepływu przedstawiona na rys. 5.

W obu przypadkach przebieg procesu jest bardzo zbliżony. Można również zauważyć minimalnie lepszą rozdzielczość wyników dla programu opartego o LBM, uwidaczniającą się w znanym z literatury [18], zjawisku odrywania się od korny pojedynczych kropelek cieczy.

<sup>5</sup> Wykorzystanie system symulacyjnego ProCAST było możliwe dzięki uprzejmości W. Kapturkiewicza i A. Burelki z Wydziału Odlewnictwa Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie.



Zdaniem autorów zastosowanie zależności (18) stanowi dobry kompromis pomiędzy dokładnością odwzorowania powierzchni a liczbą wykonywanych obliczeń. Należy również pamiętać, że zgodnie z wynikami pracy [15] dalsze zwiększanie rozpatrywanego otoczenia (powyżej 20 komórek) może negatywnie wpłynąć na uzyskiwane wyniki. Spowodowane jest to utratą lokalności obliczeń. Wpływ na kierunek normalnej w danym punkcie będą miały w takim wypadku komórki znacznie od niego oddalone, co z punktu widzenia fizyki procesu jest niepoprawne.

### **Wnioski:**

W pracy pokazano, że metoda siatkowa Boltzmanna stanowić może bardzo interesującą alternatywę dla standardowych metod CDF. Zaproponowany tu model, wraz z przedstawionym algorytmem pozwalającym na uwzględnienie wpływu fazy gazowej na charakter i kinetykę przepływów, może zostać z powodzeniem wykorzystany do modelowania procesu zalewania formy odlewniczej. Dodatkowo opisane w pracy warunki brzegowe pozwalają rozszerzyć to zagadnienie na całą klasę problemów związanych z symulacją ruchu ciekłego metalu.

Wybrana przez autorów metoda uwzględnienia w modelu przepływów z powierzchnią swobodnej jest prosta w implementacji i jednocześnie bardzo efektywna. Przeprowadzone w ramach niniejszej pracy testy wykazały, że charakteryzują się ona także bardzo dobrym odwzorowaniem granicy rozdziału faz. Dzięki zastosowaniu alternatywnej techniki usuwania artefaktów oraz dokładniejszej metody wyznaczania lokalnego kierunku normalnego, jakość uzyskiwanych wyników może być dodatkowo poprawiona.

Z punktu widzenia zastosowań przemysłowych, największym mankamentem algorytmów opartych o LBM jest ich niska stabilność numeryczna, zwłaszcza dla przepływów turbulentnych. Uwzględnienie w modelu cieczy o niskiej lepkości wiązać się będzie w tym przypadku z koniecznością stosowania gęstego podziału czasoprzestrzeni.

### **Literatura**

- [1] – **Pohl T., Deserno F., Thurey N., Rude U., Lammers P., Wellein G., Zeiser T.:** Performance Evaluation of Parallel Large-Scale Lattice Boltzmann Applications on Three Supercomputing Architectures, Conference on High Performance Networking and Computing, IEEE Computer Society, 2004
- [2] – **Thurey N., Pohl T., Rude U.:** *Hybrid Parallelization Techniques for Lattice Boltzmann Free Surface Flows.* Parallel Computational Fluid Dynamics, Vol. 67, 2007, 179-186
- [3] – **Zhong L., Feng S., Gao S.:** *Wind-driven ocean circulation in shallow water lattice Boltzmann model.* Advances in Atmospheric Sciences, Vol. 22, No. 3, 2005, 349-358.
- [4] – **Sun Ch., Munn L. L.:** *Lattice-Boltzmann simulation of blood flow in digitized vessel networks.* Computers and Mathematics with Applications, Vol. 55, 2008, 1594-1600
- [5] – **Begum R., Basit M. A.:** *Lattice Boltzmann Method and its Applications to Fluid Flow Problems.* European Journal of Scientific Research, Vol. 22, No. 2, 2008, 216-231
- [6] – **Koerner C.:** *Integral Foam Molding of Light Metals.* Technology, Springer, 2008
- [7] – **Gunstensen A. K., Rothman D. H., Zaleski S., Zanetti G.:** *Lattice boltzmann model of immiscible fluids.* Physical Review A, Vol. 43, 1991, 4320-4327.
- [8] – **Swift M. R., Orlandini S. E., Osborn W. R., Yeomans J. M.:** *Lattice Boltzmann simulation of liquid-gas and binary-fluid systems.* Physical Review E, Vol. 54, 1996, 5041 - 5052
- [9] – **Ginzburg I., Steiner K.:** *Lattice Boltzmann model for free-surface flow and its application to filling process in casting.* Journal of Computational Physics, Vol. 185, 2003, 61-99
- [10] – **Koerner C., Thies M., Hofmann T., Thurey N., Rude U.:** *Lattice Boltzmann Model for Free Surface Flow for Modeling Foaming.* Journal of Statistical Physics, Vol. 121, 2005, 179-196
- [11] – **Thurey N., Rude U., Koerner C.:** *Interactive Free Surface Fluids with the Lattice Boltzmann Method.* Technical Report 05-4, 2005
- [12] – **Succi S.:** *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond.* Oxford University Press, 2001
- [13] – **Thurey N.:** *Physically based Animation of Free Surface Flows with the Lattice Boltzmann Method,* PhD Thesis, 2007
- [14] – **Zou Q., He X.:** *On pressure and velocity flow boundary conditions and bounceback for the lattice Boltzmann BGK model.* Phys. Fluids, Vol. 9, 1997, 1591-1598

- [15] – **Burbelko A.A., Kapturkiewicz W., Gurgul D.:** *Problem of the artificial anisotropy in solidification modeling by cellular automata method.* Computer Methods in Materials Science – Informatyka w Technologii Materiałów. Vol. 7, No. 1, 2007, 182-188.
- [16] – **Pigeonneau F., Feuillebois F.:** *Impact of a drop on a thin film of the same liquid.* Test-cases for interface tracking methods. 2004, 117-121
- [17] – **Vincent S., Caltagirone J. P.:** *Dam-break flows on dry and wet surfaces.* Test-cases for interface tracking methods, 2004, 123-128
- [18] – **Cossali G. E., Coghe A., Marengo M.:** *The impact of a single drop on a wetted solid surface.* Experiments in Fluids, Vol. 22, 1997, 463-472

*Opracowano w ramach działalności statutowej AGH, nr 11.11.170.318 zad. I*