

Metoda kontrolnih volumena na domenama promjenjivog oblika

Tuković, Željko

Doctoral thesis / Disertacija

2005

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:860089>

Rights / Prava: [In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-19**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb](#)



**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE**

**METODA KONTROLNIH VOLUMENA
NA DOMENAMA PROMJENJIVOG OBLIKA**

DOKTORSKI RAD

Mentor:

Doc.dr.sc. HRVOJE JASAK

ŽELJKO TUKOVIĆ

ZAGREB, 2005

Podaci za bibliografsku karticu

UDK:	532.5:519.6
Ključne riječi:	Metoda kontrolnih volumena, pomicanje mreže, metoda konačnih elemenata, metoda kontrolnih površina, strujanje višefaznog fluida, slobodna površina, metoda praćenja slobodne površine, surfaktanti, mjehurić.
Znanstveno područje:	Tehničke znanosti
Znanstveno polje:	Strojarstvo
Institucija u kojoj je rad izrađen:	Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu
Mentor rada:	Doc.dr.sc. Hrvoje Jasak
Broj stranica:	243
Broj slika:	77
Broj tablica:	10
Broj korištenih bibliografskih jedinica:	90
Datum obrane:	14. veljače 2005. godine.
Povjerenstvo:	Prof.dr.sc. Branimir Matijašević, Doc.dr.sc. Hrvoje Jasak, Prof.dr.sc. Zdravko Virag, Prof.dr.sc. Zoran Mrša, Prof.dr.sc. Ismet Demirdžić
Institucija u kojoj je rad pohranjen:	Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu

Zahvala

Želio bih se zahvaliti svojem mentoru Doc.dr.sc. Hrvoju Jasaku na potpori i pomoći koju mi je nesebično pružao tijekom izrade ovog rada. Također bih se želio zahvaliti Prof.dr.sc. Branimiru Matijaševiću koji je omogućio uvjete potrebne da se ovaj rad uspješno privede kraju.

Zahvaljujem se Doc.dr.sc. Miroslavu Ruševljanu na pomoći pruženoj tijekom uređivanja teksta ovog rada.

Sadržaj

Sadržaj	7
Predgovor	13
Sažetak rada	15
Abstract	17
Ključne riječi	19
Key words	19
Popis oznaka	21
Popis slika	27
Popis tablica	33
1 Uvod	35
1.1 Motivacija	35
1.2 Pregled postojećih spoznaja	38
1.2.1 Metoda kontrolnih volumena na pomičnoj mreži	38
1.2.2 Pomicanje mreže	41
1.2.3 Numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom	43
1.2.4 Metoda kontrolnih površina	45
1.3 Hipoteza rada	46

1.4	Pregled rada	48
2	Matematički model	51
2.1	Uvod	51
2.2	Jednadžbe mehanike kontinuuma za proizvoljni volumen	52
2.3	Uvjeti na granici između dva fluida	54
2.4	Površinska napetost i surfaktanti	58
2.5	Zaključak	60
3	Diskretizacija metodom kontrolnih volumena	61
3.1	Uvod	61
3.2	Diskretizacija domene rješavanja	62
3.3	Diskretizacija transportne jednadžbe	68
3.3.1	Diskretizacija prostornih integrala	68
3.3.2	Vremenska diskretizacija	75
3.3.3	Utjecaj pomicanja mreže	77
3.3.4	Primjena graničnih uvjeta	80
3.4	Sustav linearnih algebarskih jednadžbi	82
3.5	Postupak rješavanja na paralelnim računalima	85
3.6	Zaključak	88
4	Automatsko pomicanje mreže	89
4.1	Uvod	89
4.2	Definicija problema pomicanja mreže	90
4.3	Pregled matematičkih modela pomaka mreže	93
4.3.1	Analogija tlačno – vlačnih opruga	94
4.3.2	Analogija torzijskih opruga	97
4.3.3	Jednadžba ravnoteže elastičnog tijela	100
4.3.4	Laplaceova jednadžba	102
4.3.5	Biharmonička jednadžba	103
4.4	Nova automatska metoda pomicanja mreže	104
4.4.1	Odabir jednadžbe pomaka mreže	104

4.4.2	Prostorno promjenjivi koeficijent difuzije u Laplaceovoj jednađbi pomaka mreže	107
4.4.3	Diskretizacija jednađbe pomaka mreže	108
4.4.3.1	Kompozitni poliedarski konačni element	109
4.4.3.2	Diskretizacija Laplaceove jednađbe	111
4.4.3.3	Diskretizacija jednađbe ravnoteže elastičnog tijela	116
4.4.3.4	Sastavljanje globalnog sustava jednađbi	117
4.4.3.5	Primjena graničnih uvjeta	118
4.4.4	Postupak rješavanja	120
4.4.5	Postupak rješavanja na paralelnim računalima	121
4.5	Testiranje predložene metode pomicanja mreže	122
4.5.1	Usporedba Laplaceove jednađbe pomaka s jednađbom ravnoteže elastičnog tijela	122
4.5.2	Usporedba postupaka automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena	126
4.5.3	Testiranje učinkovitosti minimizacije distorzije mreže primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije	129
4.6	Zaključak	135
5	Metoda kontrolnih površina	137
5.1	Uvod	137
5.2	Diskretizacija prostorne domene rješavanja	138
5.3	Diskretizacija transportne jednađbe	140
5.3.1	Diskretizacija prostornih integrala	142
5.3.2	Vremenska diskretizacija	146
5.3.3	Primjena graničnih uvjeta	147
5.3.4	Sustav linearnih algebarskih jednađbi	148
5.4	Provjera numeričkog modela	149
5.4.1	Difuzijski transport	149
5.4.2	Konvekcijsko-difuzijski transport	151
5.4.3	Nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport	154
5.5	Zaključak	156

6	Numeričko modeliranje strujanja fluida sa slobodnom površinom	157
6.1	Uvod	157
6.2	Diskretizacija sustava Navier-Stokesovih jednažbi na pomičnoj mreži	158
6.2.1	Izvod jednažbe tlaka	159
6.2.2	Granični uvjeti	161
6.2.3	Postupak rješavanja	163
6.3	Metoda praćenja slobodne površine	164
6.3.1	Uvođenje modificiranog tlaka	165
6.3.2	Primjena graničnih uvjeta na slobodnoj površini	166
6.3.3	Pomicanje čvorova slobodne površine	168
6.3.3.1	Očuvanje glatkoće slobodne površine	171
6.3.3.2	Analiza točnosti i stabilnosti	172
6.3.4	Primjena površinske napetosti	173
6.3.4.1	Računanje normale u čvorovima slobodne površine	176
6.3.4.2	Točnost računanja površinskih sila	176
6.3.5	Postupak rješavanja	179
6.3.6	Održanje volumena	180
6.4	Numeričko modeliranje mjehurića	181
6.5	Zaključak	184
7	Rezultati	185
7.1	Uvod	185
7.2	Strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe	186
7.3	Oscilacija slobodne površine u 2-D spremniku	188
7.3.1	Neviskozni fluid pod djelovanjem gravitacijske sile	190
7.3.2	Viskozni fluid pod djelovanjem gravitacijske sile	191
7.3.3	Viskozni fluid pod djelovanjem površinske napetosti	195
7.4	Podizanje mjehurića u mirujućoj tekućini	196
7.4.1	2-D mjehurić	198
7.4.2	3-D mjehurić	201
7.5	Zaključak	211

Sadržaj	11
8 Zaključak	213
8.1 Originalni znanstveni doprinos rada	215
8.2 Budući rad	216
A Reynoldsov transportni teorem	219
B Gaussov integralni teorem za zakrivljenu površinu	221
C Reynoldsov transportni teorem za deformabilnu površinu	223
D Normalno devijatorsko naprezanje na slobodnoj površini	225
E Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko–difuzijski transport na površini sfere	227
Bibliografija	231
Životopis	241
Biography	243

Predgovor

Jedan od razloga popularnosti metode kontrolnih volumena u inženjerskim primjenama je mogućnost korištenja nestrukturiranih mreža sastavljenih od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Takve proizvoljne nestrukturirane mreže u značajnoj mjeri olakšavaju diskretizaciju geometrijski kompliciranih prostornih domena, koje su vrlo česte u inženjerskoj praksi.

Primjena metode kontrolnih volumena pri numeričkom modeliranju problema mehanike kontinuuma kod kojih se oblik prostorne domene mijenja s vremenom uglavnom ovisi o postupku obnove računske mreže tijekom nestacionarne simulacije. Iako se problemu obnove mreže može pristupiti na više načina, većina pristupa temelji se na primjeni pomične odnosno deformabilne mreže. U takvim se pristupima mreža prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene pomicanjem svojih unutrašnjih čvorova, pri čemu se zadržava nepromijenjena topologija mreže. Kombinacija metode kontrolnih volumena i automatskog pomicanja mreže omogućuje numeričko modeliranje problema s promjenjivom prostornom domenom kod kojih je zakon promjene oblika prostorne domene sastavni dio rješenja. U ovu skupinu problema spadaju npr. strujanje višefaznog fluida sa slobodnom površinom i međudjelovanje između fluida i elastičnog tijela.

Strujanje fluida koji sadrži mjehuriće ima važnu ulogu u širokom području industrijskih procesa, na primjer kod transporta ulja, mješanja u kemijskim reaktorima, hlađenja nuklearnih reaktora, u izmjenjivačima topline s dvofaznim medijima itd. Metode koje se danas koriste za numeričko modeliranje ovakvih procesa uglavnom su ograničene točnošću matematičkih modela koji definiraju razmjenu količine gibanja između mjehurića i kontinuirane faze. Ograničena točnost ovih matematičkih modela posljedica je teškoće mjerenja odnosno nedostatka eksperimentalnih podataka potrebnih za definiranje modela. Problem se dodatno komplicira kada se na slobodnoj površini nalaze molekule surfaktanta, koje modificiraju površinsku napetost i na taj način utječu na oblik i stabilnost slobodne površine. Definiranje takvog numeričkog postupka koji bi dozvoljavao numeričko modeliranje dvofaznog fluida sa slobodnom površinom primjenom metode kontrolnih volumena i pomične mreže omogućilo bi direktnu numeričku simulaciju mjehurica plina u tekućini. Definiranje metode kontrolnih površina za diskretizaciju površinske transportne jednadžbe na deformabilnoj površinskoj mreži omogućilo bi analizu učinka surfaktanata na strujanje višefaznog fluida sa slobodnom površinom. Rezultati direktne numeričke simulacije znatno bi pridonijeli povećanju točnosti matematičkih modela koji definiraju međudjelovanje mjehurića i kontinuirane faze.

Sažetak rada

U području inženjerskog interesa postoji niz fizikalnih procesa koji se odvijaju u prostoru čija se granica mijenja u vremenu. U ovom je radu definirana metodologija koja omogućava numeričko modeliranje takvih procesa primjenom metode kontrolnih volumena i pomične računske mreže.

Očuvanje valjanosti i kvalitete računske mreže tijekom simulacije osnovna je poteškoća koja se javlja pri numeričkom modeliranju problema mehanike kontinuuma kod kojih se prostorna domena mijenja u vremenu. U ovom je radu za obnovu mreže odabrano pomicanje mreže, gdje se mreža prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije mreže. Definirana je automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Metoda daje pomake unutrašnjih čvorova mreže na temelju zadanih pomaka graničnih čvorova, bez potrebe za intervencijom korisnika. Za jednadžbu koja definira pomake čvorova mreže odabrana je Laplaceova jednadžba s promjenjivim koeficijentom difuzije. Definirane su dvije zakonitosti promjene koeficijenta difuzije, s ciljem minimizacije distorzije kontrolnih volumena u mreži. Jednadžba pomaka je diskretizirana primjenom metode konačnih elemenata na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu. Predloženi postupak pomicanja mreže testiran je na nekoliko 2-D i 3-D primjera.

Strujanje višefaznog fluida sa slobodnom površinom može se definirati kao problem s promjenjivom prostornom domenom tako, da se pojedine faze fluida promatraju kao subdomene globalne domene. Na subdomenama se definiraju odvojene mreže koje se dotiču na slobodnoj površini. U sklopu rada definiran je postupak praćenja slobodne površine koji objedinjuje postupak rješavanja strujanja primjenom metode kontrolnih volumena na pomičnoj mreži, te postupak pomicanja mreže primjenom metode konačnih elemenata. Primjena dinamičkog uvjeta na slobodnoj površini uključuje utjecaj viskoznosti fluida i promjenjive površinske napetosti. Jedan od razloga nastanka promjenjive površinske napetosti je u neravnomjernoj raspodjeli surfaktanata na slobodnoj površini. Da bi se mogla provesti numerička analiza utjecaja surfaktanata razvijena je i primijenjena metoda kontrolnih površina, koja omogućava diskretizaciju površinske transportne jednadžbe na pomičnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži. Na kraju je postupak praćenja slobodne površine primijenjen za direktnu numeričku simulaciju podizanja mjehurića zraka u vodi. Uz čistu površinu mjehurića, promatran je i slučaj u kojem je površina mjehurića na početku simulacije prekrivena jednoliko raspodijeljenim molekulama netopivog surfaktanta.

Abstract

In the range of engineering interest there exists a number of physical phenomena where the shape of the computational domain changes in time. This Thesis describes a methodology which allows numerical modelling of this kind of the phenomena using the Finite Volume Method (FVM) and moving computational mesh.

The main difficulty which occurs during numerical modelling of continuum mechanics problems with variable spatial domain is maintaining the mesh validity and quality. The mesh update approach chosen in this study is mesh motion, where mesh is adjusting to the variable shape of the spatial domain by moving the internal nodes of the mesh, while keeping the mesh topology unchanged. An automatic mesh motion method is introduced to support simulations on an unstructured mesh consisting of arbitrary polyhedral cells in 3-D. The method provides displacement of the mesh internal nodes based on the prescribed displacement of the boundary nodes with minimal user intervention. Mesh motion is governed by the Laplace equation with variable diffusion coefficient. In order to minimise mesh distortion, two set of rules are proposed which define variable diffusion coefficient. Mesh motion equation is discretised using the Finite Element Method (FEM) using composite polyhedral finite elements. Proposed mesh motion procedure is tested on several 2-D and 3-D test cases.

Multiphase fluid flow with free surface can be defined as a problem with variable spatial domain, where fluid phases are considered as a separate sub-domains of a global spatial domain. On the sub-domains one defines separate computational meshes which are in contact on the free surface. As a part of this study a free surface tracking procedure is defined, consisting of the fluid flow solution using the FVM on moving mesh and mesh motion procedure based on the FEM. Implementation of the dynamic condition on the free surface includes effects of fluid viscosity and variable surface tension. The variable surface tension can occur due to non-homogenous distribution of surfactant on a free surface. In order to allow the numerical analysis of surfactant effects, a Finite Area Method is developed for the discretisation of surface transport equation on the moving unstructured surface mesh. Finally, the free surface tracking procedure is used for numerical modelling of free-rising air bubble in still water. Along with the case where bubble surface is clean, the case where bubble surface is covered with molecules of an insoluble surfactant is also considered.

Ključne riječi

Metoda kontrolnih volumena, pomicanje mreže, metoda konačnih elemenata, metoda kontrolnih površina, strujanje višefaznog fluida, slobodna površina, metoda praćenja slobodne površine, surfaktanti, mjehurić.

Key words

Finite volume method, mesh motion, finite element method, finite area method, multi-phase fluid flow, free surface, free surface tracking method, surfactants, bubble.

Popis oznaka

Latinični znakovi

Oznaka	Opis	Jedinica
a_P	Dijagonalni koeficijent za ćeliju	
a_N	Koeficijent koji odgovara susjednoj ćeliji	
a_i	Dijagonalni koeficijent za čvor	
a^{nb}	Koeficijent koji odgovara susjednom čvoru	
$[A]$	Matrica sustava linearnih algebarskih jednadžbi	
$\mathbf{a}_F$	Ubrzanje ishodišta neinercijalnog koordinatnog sustava	m/s ²
$\mathbf{b}$	Brzina točaka proizvoljne površine na slobodnoj površini	m/s
C_D	Koeficijent uzgona	1
C_L	Koeficijent otpora	1
$\mathbf{d}_f$	Vektor između P i N	m
$\mathbf{d}_b$	Vektor između težišta ćelije i težišta granične stranice	m
$\mathbf{d}_n$	Vektor između težišta ćelije i granične stranice	m
$\mathbf{d}_m$	Vektor između težišta kontrolne površine i graničnog brida	m
$\mathbf{d}_e$	Vektor između težišta dvije susjedne kontrolne površine	m
$\mathbf{e}$	Vektor između dva susjedna čvora mreže	m
e	Totalna specifična energija	J/kg
e_x	Interpolacijski faktor za brid kontrolne površine	1
f_x	Interpolacijski faktor za stranicu ćelije	1
$\mathbf{f}_{Ai}$	Smjer pomicanja čvorova slobodne površine	1
$\mathbf{f}_{Ac}$	Smjer pomicanja kontrolnih točaka slobodne površine	1
F_D	Sila otpora	N

Oznaka	Opis	Jedinica
F_L	Sila uzgona	N
Fr	Froudeov broj	1
$\mathbf{g}$	Gravitacijsko ubrzanje	m/s ²
$\mathbf{I}$	Jedinični tenzor drugog reda	1
$\mathbf{k}_f$	Neortogonalni dio jedinične normale na stranicu ćelije	1
$\mathbf{k}_e$	Neortogonalni dio jedinične binormale na brid kontrolne površine	1
L	Duljina luka	m
L_e	Duljina brida kontrolne površine	m
L_{PN}	Geodetska udaljenost između težišta susjednih kontrolnih površina	m
$\mathbf{m}$	Jedinični vektor vanjske binormale	1
$\mathbf{m}_e$	Jedinični vektor vanjske binormale na bridu kontrolne površine	1
$\dot{m}_f$	Apsolutni maseni tok fluida kroz stranicu ćelije	kg/s
N_i	Funkcija oblika	1
N_t	Broj trokuta koji čine poligonalnu stranicu ćelije	1
N_τ	Broj tetraedara koji čine poliedarsku ćeliju	1
$\mathbf{n}$	Jedinični vektor vanjske normale	1
$\mathbf{n}_f$	Jedinični vektor vanjske normale za stranicu ćelije	1
$\mathbf{n}_t$	Jedinični vektor vanjske normale trokuta	1
$\mathbf{n}_i$	Jedinični vektor normale u čvoru kontrolne površine	1
$\mathbf{n}_P$	Jedinični vektor normale u težištu kontrolne površine	1
$\mathbf{n}_e$	Jedinični vektor normale na bridu kontrolne površine	1
Pe	Pecletov broj	1
p	Tlak	N/m ²
p_m	Modificirani tlak	N/m ²
$\mathbf{q}$	Toplinski tok	W/m ²
$\mathbf{q}_\phi$	Površinski izvor/ponor svojstva ϕ	
$\mathbf{q}_\Phi$	Difuzijski tok surfaktanta uzduž slobodne površine	mol/(m s)

Oznaka	Opis	Jedinica
Q	Izvor/ponor energije	W/kg
Re	Reynoldsov broj	1
$\mathbf{r}$	Vektor položaja	m
$\mathbf{r}_P$	Vektor položaja težišta ćelije	m
$\mathbf{r}_f$	Vektor položaja težišta stranice ćelije	m
$\mathbf{r}_t$	Vektor položaja težišta trokuta	m
$\mathbf{r}_i$	Vektor položaja čvora i kontrolne površine ili desna strana diskretizirane jednadžbe pomaka za čvor i	m
$\mathbf{r}_\tau$	Vektor položaja težišta tetraedra	m
$\mathbf{r}_F$	Vektor položaja ishodišta neinercijalnog koordinatnog sustava	m
R	Opća plinska konstanta	J/(mol K)
r_P	Desna strana diskretizirane transportne jednadžbe za ćeliju	
r_b	Ekvivalentni polumjer mjehurića	
$\mathbf{r}_c$	Vektor položaja težišta mjehurića	
$\{r\}$	Desna strana sustava linearnih algebarskih jednadžbi	
s	Specifična entropija	J/(kg K)
S	Površina	m ²
S_M	Materijalna površina	m ²
S_f	Površina stranice ćelije	m ²
S_t	Površina trokuta	m ²
$\mathbf{S}_i^\tau$	Vektor površine stranice tetraedra	m ²
s_ϕ	Volumenski izvor/ponor svojstva ϕ	
s_ψ	Površinski izvor/ponor svojstva ψ	
s_u	Konstantni dio izvornog člana	
s_p	Linearni dio izvornog člana	
s_Φ	Površinski izvor/ponor surfaktanta na slobodnoj površini	mol/(s m ²)
$\dot{s}_e$	Površinski tok čestica materijalne površine kroz brid kontrolne površine	m ² /s
t	Vrijeme	s
T	Temperatura	K

Oznaka	Opis	Jedinica
$\mathbf{u}$	Pomak	m
U	Gustoća energije deformacije	N/m ²
U_d	Gustoća distorzijske energije deformacije	N/m ²
v_b	Brzina gibanja težišta mjehurića	m/s
V	Volumen	m ³
V_M	Materijalni volumen	m ³
V_P	Volumen ćelije	m ³
V_τ	Volumen tetraedra	m ³
$\mathbf{v}$	Brzina gibanja kontinuuma	m/s
$\mathbf{v}_s$	Brzina točaka proizvoljne površine S	m/s
$\mathbf{v}_F$	Brzina ishodišta neinercijalnog koordinatnog sustava	m/s
$\dot{V}_f$	Volumni tok stranice ćelije	m ³ /s
w_i	Težinska funkcija	1

Grčki znakovi

Oznaka	Opis	Jedinica
α_{ij}	Krutost tlačno – vlačne opruge	N/m
α_ϕ	Podrelaksacijski faktor	1
α_e	Kut neortogonalnosti brida kontrolne površine	rad
α_f	Kut neortogonalnosti stranice ćelije	rad
γ_f	Faktor kombinacije u kombiniranoj shemi diskretizacije	1
γ	Koeficijent difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže	1
Γ_ϕ	Koeficijent difuzije za svojstvo ϕ	
Γ_ψ	Koeficijent difuzije za površinsko svojstvo ψ	
Γ_Φ	Koeficijent difuzije za surfaktant na slobodnoj površini	1/s
Δ_f	Ortogonalni dio jedinične normale na stranicu ćelije	1
Δ_e	Ortogonalni dio jedinične binormale na brid kontrolne površine	1
δV_f	Volumen koji stranica ćelije obuhvati na putu od starog do novog položaja	m ³

Oznaka	Opis	Jedinica
ε	Tenzor deformacije	1
κ	Dvostruka srednja zakrivljenost	1
λ	Laméov koeficijent	N/m ²
μ	Dinamička viskoznost fluida	Ns/m ²
	ili Laméov koeficijent	N/m ²
ν	Poissonov faktor	1
ρ	Gustoća	kg/m ³
σ	Tenzor naprezanja	N/m ²
σ	Površinska napetost	N/m
σ_0	Površinska napetost za čistu slobodnu površinu	N/m
τ	Devijatorski dio tenzora naprezanja	N/m ²
ϕ	Općenito intenzivno fizikalno svojstvo	
$\{\phi\}$	Vektor nepoznanica za diskretiziranu transportnu jednadžbu	
Φ	Koncentracija surfaktanta na slobodnoj površini	mol/m ²
Φ_∞	Koncentracija zasićenja surfaktanta na slobodnoj površini	mol/m ²
ψ	Općenito površinsko fizikalno svojstvo	

Gornji indeksi

Oznaka	Opis
ϕ^{oo}	Vrijednost varijable se odnosi na vremenski trenutak prije starog
ϕ^o	Vrijednost varijable se odnosi na stari vremenski trenutak
ϕ^n	Vrijednost varijable se odnosi na novi vremenski trenutak
ϕ^e	Vrijednost varijable se odnosi na konačni element
ϕ^τ	Vrijednost varijable se odnosi na tetraedar

Donji indeksi

Oznaka	Opis
$\mathbf{v}_n$	Normalna komponenta vektora

Oznaka	Opis
$\mathbf{v}_t$	Tangencijalna komponenta vektora
ϕ_f	Vrijednost na stranici ćelije
ψ_e	Vrijednost na bridu kontrolne površine
ϕ_b	Vrijednost na graničnoj stranici ćelije ili na graničnom bridu kontrolne površine
ϕ_τ	Vrijednost se odnosi na tetraedar
$\rho_A = \rho_1$	Svojstvo fluida na strani A (1) slobodne površine
$\rho_B = \rho_2$	Svojstvo fluida na strani B (2) slobodne površine
$\mathbf{v}_{Af}$	Vrijednost koja se odnosi na graničnu stranicu koja se nalazi na strani A slobodne površine
$\mathbf{v}_{Bf}$	Vrijednost koja se odnosi na graničnu stranicu koja se nalazi na strani B slobodne površine
$\mathbf{r}_{Ai}$	Vrijednost koja se odnosi na čvor na strani A slobodne površine
$\mathbf{r}_{Ac}$	Vrijednost koja se odnosi na kontrolni čvor slobodne površine

Popis slika

1.1	Prostorno-vremenska mreža.	40
2.1	Uz opis uvjeta na slobodnoj površini.	55
3.1	Kontrolni volumen.	63
3.2	Postupci rastavljanja poligonalne stranice na trokute.	64
3.3	Interpolacija na stranicu f kontrolnog volumena.	70
3.4	Gamma shema diskretizacije u NVD dijagramu.	72
3.5	Vektori $\mathbf{d}_f$ i $\mathbf{n}_f$ na neortogonalnoj mreži.	74
3.6	Položaj i oblik kontrolnog volumen u dva uzastupna vremenska trenutka.	78
3.7	Volumen δV_t^n za stranicu f	79
3.8	Parametri granične stranice.	80
3.9	Dekompozicija domene za paralelni postupak rješavanja.	86
3.10	CG postupak s prekondicioniranjem za rješavanje linearnog sustava alge- barskih jednadžbi $A \cdot x = b$	87
4.1	Uz definiciju problema pomicanja mreže.	91
4.2	Usporedba Dirichletovog i kliznog graničnog uvjeta na nepomičnoj granici.	92
4.3	Analogija tlačno – vlačnih opruga.	94
4.4	Oblici narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena.	96
4.5	Trokut s pridruženim torzijskim oprugama.	97
4.6	Analiza utjecaja oblika raspodjele pomaka čvorova na svojstva pomaknute mreže.	105

4.7	Rasčlanjivanje poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre. . . .	110
4.8	Linearni tetraedarski konačni element	113
4.9	Utjecaj oblika tetraedra na svojstva matrice sustava linearnih algebarskih jednadžbi.	115
4.10	Uz objašnjenje primjene graničnih uvjeta za jednadžbu pomaka mreže.	119
4.11	Početna mreža za pomicanje 2-D cilindra u kanalu.	123
4.12	Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra.	124
4.13	Pomaknuta mreže za pomak cilindra $0.15Di$. Boje predstavljaju raspodjelu gustoće distorzijske energije deformacije.	125
4.14	Početna mreža za numeričko modeliranje mjehurića primjenom pomične mreže.	127
4.15	Jedna osmina pomaknute mreže u području mjehurića. Boje definiraju raspodjelu gustoće energije deformacije.	129
4.16	Početna mreža oko oscilirajućeg NACA0012 profila.	130
4.17	Vremenska ovisnost maksimalne neortogonalnosti mreže u prvoj polovini perioda oscilacije NACA0012 profila.	131
4.18	Pomaknuta mreža u području izlaznog brida NACA0012 profila u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi.	133
4.19	Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra uz različite raspodjele koe- ficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže. Boje definiraju raspodjelu odgovarajućeg koeficijenta difuzije.	134
5.1	Glatka zakrivljena površina vremenski promjenjivog oblika.	138
5.2	Odstupanje kontrolne površine od pripadajućeg dijela prostorne domene.	139
5.3	Kontrolne površine P i N.	140
5.4	Lokalni ortogonalni krivocrti koordinatni sustav na bridu kontrolne površine.	143
5.5	Uz definiciju neortogonalnosti površinske mreže.	145
5.6	Uz definiciju geometrijskih parametara graničnog brida mreže. . . .	148

5.7	Nestrukturirana površinska mreža za računanje difuzijskog transporta na površini sfere.	150
5.8	Rješenje osnosimetričnog difuzijskog transporta na površini sfere. .	151
5.9	Strukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.	152
5.10	Nestrukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.	152
5.11	Rješenje osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	153
5.12	Pogreška rješenja osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	154
5.13	Nestrukturirana površinska mreža za računanje nestacionarnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere.	155
5.14	Rješenje nestacionarnog osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	156
6.1	Definicija prostorne domene za numeričko modeliranje strujanje dvofaznog fluida sa slobodnom površinom primjenom pomične mreže.	165
6.2	Definicija slobodne površine pomoću graničnih stranica mreže. . . .	165
6.3	Definicija slobodne površine pomoću kontrolnih točaka.	169
6.4	Kontrolna površina Af	174
6.5	Uz objašnjenje postupka računanja normala u čvorovima slobodne površine.	177
6.6	Površina elipsoida sa rijetkom nestrukturiranom mrežom.	177
6.7	Mjehurić u neinercijalnom koordinatnom sustavu.	182
7.1	Definicija prostorne domene za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.	186
7.2	Početna računaska mreža za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.	187
7.3	Konačna računaska mreža za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.	187

7.4	Definicija prostorne domene za oscilaciju slobodne površine u 2-D spremniku.	189
7.5	Početna računska mreža za oscilaciju slobodne površine s jednim neviskoznim fluidom.	190
7.6	Vremenska ovisnost položaja slobodne površine na lijevom zidu spremnika, za različite metode vremenske diskretizacije.	191
7.7	Vremenska ovisnost amplitude vala za različite pristupe u definiranju graničnog uvjeta na slobodnoj površini.	192
7.8	Vremenska ovisnost amplitude vala kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za različite omjere gustoća fluida s gornje i donje strane slobodne površine.	193
7.9	Vektori brzine kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za omjer gustoća fluida $\rho_B/\rho_A = 0.1$	194
7.10	Vremenska ovisnost amplitude vala kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku pod djelovanjem površinske napetosti.	196
7.11	Početna računska mreža za numeričko modeliranje podizanja 2-D mjehurića u mirujućoj tekućini.	199
7.12	Brzina podizanja 2-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, za čistu slobodnu površinu i uz nazočnost molekula surfaktanta na slobodnoj površini.	200
7.13	Vektori brzine za 2-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, sa i bez nazočnosti molekula surfaktanta na slobodnoj površini, u vremenskom trenutku $t = 0.4$ s.	200
7.14	Deformirana mreža za 2-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, sa i bez nazočnosti molekula surfaktanta na slobodnoj površini, u vremenskom trenutku $t = 0.4$ s.	201
7.15	Putanja 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.	202
7.16	Brzina 3-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.	203

7.17	Koeficijenti otpora i uzgona za 3-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.	204
7.18	Vektori brzine u x - z ravnini koja prolazi kroz težište 3-D mjehurića. Slučaj bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.	205
7.19	Putanje obilježenih čestica iza 3-D mjehurića u trenutku $t = 0.56$ s, kada je $C_{L,x-z} = 0$, za slučaj bez surfaktanta na slobodnoj površini.	206
7.20	Putanja 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slobodnoj površini.	207
7.21	Brzina težišta 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slobodnoj površini.	208
7.22	Koeficijent otpora C_D i uzgona C_L za 3-D mjehurić polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slobodnoj površini.	208
7.23	Vektori brzine u x - z ravnini za 3-D mjehurić sa surfaktantom na slobodnoj površini. Boje definiraju raspodjelu koncentracije surfaktanta (C , mol/m ²) na površini mjehurića.	209
E.1	Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko-difuzijski transport na površini sfere.	228
E.2	”Točno” numeričko rješenje za osnosimetrični nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.	230

Popis tablica

4.1	Granični pomak cilindra i neortogonalnost pomaknute mreže za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.	123
4.2	Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja uz pomak cilindra 0.15Di za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.	124
4.3	Granični pomak cilindra i odgovarajuća neortogonalnost mreže pri pomi- canju u više koraka s pomakom 0.15Di u jednom koraku.	125
4.4	Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja za predložene postupke automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraed- re.	128
4.5	Maksimalna neortogonalnost mreže i proteklo vrijeme rješavanja problema pomicanja mreže u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.	132
4.6	Granični pomak (Δ_{gr}) cilindra za različite raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.	133
5.1	Točnost metode diskretizacije ovisno o vrsti mreže i shemi diskretizacije.	154
6.1	Rezultati proračuna zakrivljenosti na površini elipsoida.	178
7.1	Usporedba izračunate (h_2) i analitičke ($h_{a,2}$) vrijednosti visine slobodne površine na izlazu iz prostorne domene.	188
7.2	Usporedba vremena trajanja pojedinih dijelova postupka rješavanja.	210

Poglavlje 1

Uvod

1.1 Motivacija

Problemi mehanike kontinuuma kod kojih se prostorna domena mijenja s vremenom česti su u inženjerskoj praksi. Cilindri motora s unutrašnjim izgaranjem, regulacijski ventili, kormila na plovilima, pomična krilca na zrakoplovima, karakteristični su primjeri problema kod kojih se granica prostorne domene mijenja prema unaprijed zadanoj zakonitosti. Druga je skupina problema karakteristična po tome, da zakon promjene granice prostorne domene nije unaprijed poznat, nego je dio rješenja. U tu skupinu spadaju strujanje višefaznog fluida sa slobodnom površinom, međudjelovanje između fluida i elastičnog tijela te problemi mehanike elastoplastičnih tijela, kao npr. oblikovanje materijala deformiranjem. Istraživanje na ovom području omogućava pristup širem spektru problema mehanike kontinuuma i proširuje mogućnosti industrijske primjene numeričkog modeliranja.

Općenito gledano, postoje dva osnovna pristupa u numeričkom modeliranju problema s promjenjivom prostornom domenom. Pristup koji je nešto zastupljeniji kod simulacije strujanja višefaznih fluida sa slobodnom površinom, ali koji se može primijeniti i na općenite probleme s promjenjivom prostornom domenom, koristi nepomičnu računsku mrežu koja pokriva maksimalno moguću prostornu domenu, pri čemu je trenutna konfiguracija prostorne domene označena beztežinskim česticama, ili skalarnom indikatorskom funkcijom. Prednost ovakvog pristupa je da teorijski ne postavlja ograničenje na intenzitet deformacije prostorne domene, a glavna poteškoća u njegovom korištenju je očuvanje

oštrine pomične granice prostorne domene.

U ovom je radu odabran drukčiji pristup, koji se temelji na korištenju promjenjive (dinamičke) računske mreže, koja se prilagođava trenutnom obliku prostorne domene. Za razliku od pristupa s nepomičnom računskom mrežom, ovdje je pomična granica prostorne domene definirana granicom računske mreže. Osnovni problem koji se javlja kod ovakvog pristupa je kako očuvati valjanost i kvalitetu računske mreže tijekom simulacije. Jedan od mogućih načina je da se u svakom vremenskom trenutku napravi nova mreža, primjenom automatskog postupka. Automatska izrada mreže je vremenski vrlo zahtijevan postupak, a naročito u slučajevima u kojima se promatrani problem rješava na paralelnim računalima. Programi za automatsku izradu mreže su još uvijek nepouzdana i zahtijevaju intervenciju od strane korisnika. Uz to, izrada nove mreže zahtijeva interpolaciju rješenja sa stare na novu mrežu, čime se u rješenje unosi tzv. pogreška interpolacije. S druge strane, može se pretpostaviti da granica prostorne domene postupno mijenja oblik tijekom simulacije. To navodi na ideju da se mreža može prilagoditi promjeni oblika prostorne domene pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije. Pomicanje mreže se kao samostalni postupak obnove mreže može primijeniti samo za ograničene promjene oblika prostorne domene. U slučajevima kada prostorna domena mijenja svoju globalnu topologiju, ne može se izbjeći da dođe do barem lokalne promjene topologije mreže. Međutim, pomicanje mreže ima primjenu i kod takvih ekstremnih promjena oblika prostorne domene, u kombinaciji s lokalnom promjenom topologije mreže. Obnova mreže pomicanjem u takvim se slučajevima provodi tako dugo dok su valjanost i kvaliteta elemenata mreže na zadovoljavajućoj razini. Kada taj uvjet više nije ispunjen pristupa se globalnoj ili lokalnoj promjeni topologije mreže. Prema tome, od postupka pomicanja mreže zahtijeva se da osigura očuvanje valjanosti i kvalitete mreže, uz što veću dozvoljenu promjenu oblika prostorne domene, sa svrhom da se potreba za promjenom topologije mreže svede na najmanju moguću mjeru.

Problem strujanja sa slobodnom površinom se može formulirati kao problem s vremenski promjenjivom prostornom domenom, tako da se svaka od faza promatra kao posebna subdomena globalne prostorne domene. Na svakoj od subdomena (faza) definiraju se odvojene pomične mreže, koje se dodiruju na slobodnoj površini (engl. interface). Značaj ovakvog pristupa se često umanjuje, uz argument da je ograničen samo na umjerene pro-

mjene oblika slobodne površine. Jasno je da njegovo ograničenje leži u postupku obnove mreže. Prema tome, unapređenjem postupka pomicanja mreže proširuju se mogućnosti primjene jednog od potencijalno najtočnijih pristupa u modeliranju strujanja sa slobodnom površinom.

Kod definiranja numeričkog postupka rješavanja problema s promjenjivom prostornom domenom najprije je potrebno odabrati odgovarajuću formulaciju matematičkog modela, koja u skladu s odabranim pristupom omogućava promjenu oblika i veličine prostorne domene. Najčešće korištene metode diskretizacije matematičkog modela su metoda kontrolnih volumena i metoda konačnih elemenata. Odabir metode diskretizacije je stvar subjektivne procjene, budući da teorijski ne postoji problem koji se može rješavati primjenom metode konačnih elemenata, a koji se ne bi mogao rješavati i primjenom metode kontrolnih volumena. Naravno, vrijedi i obrnuto. U ovom je radu odabrana metoda kontrolnih volumena, koja prevladava kod numeričkog modeliranja strujanja fluida.

U cilju pojednostavljenja izrade računske mreže na geometrijski kompliciranim trodimenzijskim prostornim domenama vrlo su česte takve primjene metode kontrolnih volumena, koje podržavaju nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena (Jasak [46]). Iako su komercijalni računalni programi koji omogućavaju izradu poliedarskih mreža još uvijek rijetkost (STAR-CD [72]), može se očekivati da će u bližoj budućnosti to postati standardna mogućnost komercijalnih predprocesora. Prema tome, postupak pomicanja mreže koji ne podržava nestrukturiranu mrežu, sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena, već danas predstavlja ograničenje u industrijskim primjenama računalne mehanike kontinuuma pri rješavanju problema na vremenski promjenjivim prostornim domenama.

U ovom je radu razvijena automatska metoda pomicanja mreže koja podržava nestrukturiranu mrežu, sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Opisana je metoda kontrolnih volumena koja primjenom pomične nestrukturirane mreže omogućava rješavanje problema s vremenski promjenjivom prostornom domenom. Takva metoda kontrolnih volumena je, u kombinaciji s predloženim postupkom pomicanja mreže, primijenjena na numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom. Postupak praćenja slobodne površine definiran je s ciljem rješavanja problema kod kojih postoji značajan utjecaj površinskih i viskoznih sila na strujanje sa slobodnom površinom.

Nadalje, da bi se omogućila numerička analiza utjecaja surfaktanata¹ na strujanje sa slobodnom površinom, definirana je konzervativna metoda diskretizacije, koja omogućava diskretizaciju površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži. Metoda se temelji na metodi kontrolnih volumena, pa je nazvana metodom kontrolnih površina.

1.2 Pregled postojećih spoznaja

U ovom je odjeljku dan kratki pregled postojećih spoznaja relevantnih za temu ovog rada. Uključena su sljedeća područja: metoda kontrolnih volumena koja podržava pomičnu mrežu, postupak pomicanja mreže, različiti pristupi u numeričkom modeliranju strujanja višefaznih fluida sa slobodnom površinom, te metoda kontrolnih površina koja omogućava diskretizaciju površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj zakrivljenoj površini.

1.2.1 Metoda kontrolnih volumena na pomičnoj mreži

U numeričkom se modeliranju strujanja fluida metoda kontrolnih volumena pojavljuje kao prevladavajuća metoda diskretizacije. Ta je metoda razvijana tijekom posljednjih 30 godina, i danas se standardno primjenjuje u inženjerskoj praksi. Metoda je detaljno opisana u stručnoj literaturi, npr. Ferziger i Perić [28], Demirdžić, Muzaferija i Perić [23].

U metodi kontrolnih volumena polazi se od integralnog oblika zakona održanja, koji se diskretizira za svaki kontrolni volumen u računskoj mreži. Konvektivni i difuzijski transport se u matematičkom modelu definiraju primjenom Gaussovog integralnog teorema u obliku površinskih integrala. Površinski se integrali numerički integriraju po stranicama kontrolnih volumena, tako da tok konzervativne varijable kroz svaku unutrašnju stranicu ima jednaku apsolutnu vrijednost, ali suprotni predznak za dva kontrolna volumena koji dijele tu stranicu. Na ovaj se način osigurava globalna konzervativnost rješenja, što je važno za numeričko modeliranje problema mehanike fluida. Kod nestacionarnih se problema metoda kontrolnih volumena najčešće primjenjuje samo za diskretizaciju prostornih integrala u transportnoj jednadžbi, dok se vremenska diskretizacija provodi primjenom metode konačnih razlika, kao što su npr. implicitna Eulerova, Crank-Nicolsonova ili

¹Surfaktanti su tvari koje se adsorbiraju na slobodnoj površini i modificiraju površinsku napetost.

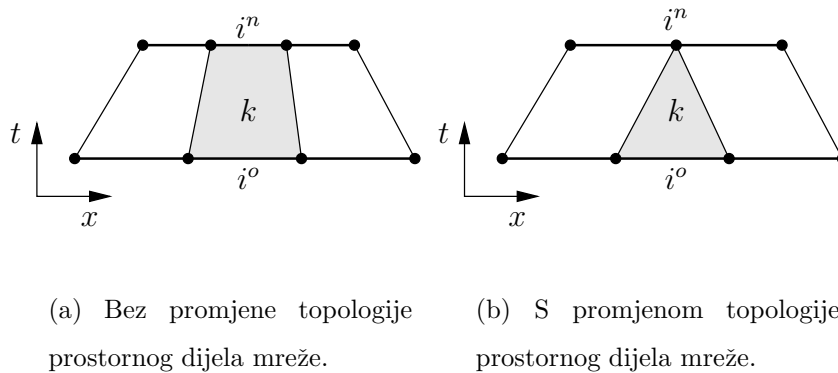
Gearova metoda.

Da bi se omogućila primjena pomične mreže pri numeričkom modeliranju problema s promjenjivom prostornom domenom, potrebno je zakone održanja tako preformulirati, da se dopuste proizvoljne promjene oblika prostorne domene i položaja kontrolnih volumena u mreži. Formulacija matematičkog modela koja to omogućava je tzv. ALE (engl. arbitrary Lagrangian-Eulerian) formulacija, u kojoj su integralni zakoni održanja umjesto za nepomični kontrolni volumen zapisani za proizvoljni volumen. ALE formulaciju su u kontekstu metode konačnih razlika uveli Hirt, Amsden i Cook [41], nakon čega je prihvaćena i kod metode kontrolnih volumena na strukturiranim i nestrukturiranim pomičnim mrežama (Demirdžić i Perić [25], Batina [5], Demirdžić i Muzaferija [22], Perot i Nallapati [63]). ALE formulacija metode kontrolnih volumena podrazumijeva da se računaska mreža prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene pomicanjem čvorova bez promjene topologije.

Da bi se kod ALE formulacije metode kontrolnih volumena očuvalo svojstvo konzervativnosti metode, potrebno je uz zakone održanja mase, količine gibanja i energije, zadovoljiti i zakon održanja prostora (Thomas i Lombard [76], Demirdžić i Perić [24]). Zakon održanja prostora mora biti zadovoljen u diskretiziranom obliku, pri čemu diskretizacija mora biti provedena primjenom istih shema diskretizacije pomoću kojih su diskretizirani ostali zakoni održanja. Demirdžić i Perić [24] predlažu da se brzina stranice kontrolnog volumena, odnosno odgovarajući volumni tok, računa iz poznatog položaja promatrane stranice u starom i novom vremenskom trenutku tako, da zakon održanja prostora bude eksplicitno zadovoljen u diskretiziranom obliku. Na taj način nije potrebno numerički rješavati zakon održanja prostora zajedno s ostalim jednadžbama, kao što su to radili Thomas i Lombard [76].

Zwart, Raithby i Raw [90] uvode pristup u kojem se metoda kontrolnih volumena primjenjuje za diskretizaciju zakona održanja u prostoru i vremenu. Radi se o tzv. prostorno-vremenskoj formulaciji metode kontrolnih volumena, koja je proizašla iz prostorno-vremenske formulacije metode konačnih elemenata (Tezduyar *et al.* [74, 75]). Prostorno-vremenska domena rješavanja diskretizira se u prostorno-vremensku mrežu koja se sastoji od prostorno-vremenskih kontrolnih volumena. Zakoni održanja se integriraju na svakom prostorno-vremenskom kontrolnom volumenu tako, da diskretni tok konzer-

vativne veličine kroz svaku unutrašnju prostorno-vremensku stranicu ima jednaku apsolutnu vrijednost, ali suprotni predznak za dva kontrolna volumena koji dijele promatranu stranicu. Na taj je način implicitno zadovoljen zakon održanja prostora čak i u slučaju kada se topologija prostorne mreže mijenja, ako se ta promjena odvija po određenim zakonitostima. Prostorno-vremenska mreža se u stvari sastoji od prostorne mreže u starom i novom vremenskom trenutku, a ove su dvije mreže međusobno povezane pomoću prostorno-vremenskih stranica. Na slici 1.1(a) prikazana je prostorno-vremenska mreža kod koje ne dolazi do promjene topologije prostornog dijela mreže, nego se samo unutrašnji čvorovi prostornog dijela mreže pomiču sukladno pomaku graničnih čvorova. Kod mreže prikazane na slici 1.1(b) dolazi do promjene topologije prostornog dijela mreže tako, da centralni prostorni kontrolni volumen i^o na staroj prostornoj mreži konvergira u centralni čvor i^n na novoj prostornoj mreži.



Slika 1.1: Prostorno-vremenska mreža (Zwart, Raithby i Raw [90]).

Prostorno-vremenska formulacija metode kontrolnih volumena uvedena je zato da bi se omogućila promjena topologije mreže, a da se pri tom ne izgubi svojstvo konzervativnosti metode. Dobivena fleksibilnost u obnovi mreže komplicira postupak diskretizacije potrebom integracije matematičkog modela na prostorno vremenskom kontrolnom volumenu. S druge strane, ovakvu ograničenu topološku promjenu mreže moguće je ugraditi i u ALE formulaciju metode kontrolnih volumena, a da se pri tom također sačuva svojstvo konzervativnosti metode.

Svaka topološka promjena mreže, pa tako i promjena koja je lokalnog i konzervativnog karaktera, u najmanju će ruku rezultirati smanjenjem efikasnosti postupka rješavanja. Zbog toga je, bez obzira na formulaciju metode kontrolnih volumena, obnovu mreže

potrebno što je moguće više provoditi pomicanjem, bez promjene topologije.

1.2.2 Pomicanje mreže

Zadatak postupka pomicanja mreže je da odredi pomake unutrašnjih čvorova mreže na osnovi zadanih pomaka graničnih čvorova. Pri tome je potrebno očuvati valjanost i zadovoljavajuću geometrijsku kvalitetu mreže.

Najjednostavniji pristup, iako ne i najpouzdaniji, je da se pomaci unutrašnjih čvorova mreže računaju primjenom algebarskog izraza koji povezuje pomake unutrašnjih čvorova s pomakom jednog ili više graničnih čvorova [18, 7, 32]. Glavne zamjerke ovom pristupu su manjak automatizma i ograničenost na jednostavne promjene oblika granice prostorne domene.

Kada je riječ o mreži koja se koristi uz metodu kontrolnih volumena pomicanje mreže se najčešće provodi primjenom tzv. analogije tlačno – vlačnih opruga koju je predložio Batina [5]. Mreža se promatra kao diskretni elastični sustav na način da se bridovi kontrolnih volumena zamjene s tlačno – vlačnim oprugama, kojima je krutost obrnuto proporcionalna duljini brida. Pomaci čvorova mreže slijede iz zahtjeva da sustav nakon pomaka graničnih čvorova mora biti u statičkoj ravnoteži. Ovaj je pristup vrlo jednostavan za primjenu, rezultira s pomacima u čvorovima mreže, a ne postavlja ograničenje na vrstu kontrolnih volumena od koji se mreža sastoji. Upravo je to razlog da se analogija tlačno – vlačnih opruga često koristi, usprkos dokazanoj nepouzdanosti zbog mogućnosti narušavanja valjanosti kontrolnih volumena prolazom čvora kroz nasuprotnu stranicu (Blom [10]).

Farhat *et al.* [27] uočavaju nedostatak analogije tlačno – vlačnih opruga i predlažu poboljšanje u obliku tzv. analogije torzijskih opruga. Uz tlačno – vlačne opruge pridružene stranicama trokuta, svakom čvoru trokuta pridružuje se torzijska opruga čija krutost je vezana uz kut između pripadajućih stranica. Analogijom torzijskih opruga uspješno je riješen problem nepouzdanosti analogije tlačno – vlačnih opruga, međutim, pristup je ograničen samo na dvodimenzijску (2-D) mrežu sastavljenu od trokuta. Degand i Farhat [21] proširuju primjenjivost analogije torzijskih opruga na trodimenzijску (3-D) mrežu sastavljenu od tetraedara, tako da popunjavaju tetraedar s trokutima čijim čvorovima onda pridružuju torzijske opruge. Iako Degand i Farhat ističu da je njihovu 3-D analogiju

torzijskih opruga moguće primijeniti i na druge oblike elemenata mreže, taj pristup nije doživio širu primjenu.

Jednadžba statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela se primjenom odgovarajućih konstitutivnih relacija može izraziti preko pomaka. Uz zadane pomake graničnih točaka elastičnog tijela, rješavanjem jednadžbe ravnoteže dobivaju se pomaci unutrašnjih točaka. Lynch i O'Neill [56] prvi su primijenili koncept elastičnog tijela i pripadajuću jednadžbu statičke ravnoteže na pomicanje računske mreže. Nakon toga ovaj je pristup često korišten u istom ili sličnom obliku (Johnson i Tezduyar [50], Sackinger, Schunk i Rao [70], Cairncross *et al.* [13], Souli i Zolesio [71], Behr i Abraham [6]), ali isključivo u slučajevima u kojima je primarni problem rješavan primjenom metode konačnih elemenata. Ista metoda diskretizacije je onda primijenjena i za diskretizaciju jednadžbe pomaka mreže, te su kao rezultat dobiveni pomaci čvorova mreže.

Kada se s jednadžbom statičke ravnoteže elastičnog tijela koriste izotropna homogena svojstva materijala, mreža će se u pravilu pomicati tako, da se najviše deformiraju elementi uz pomičnu granicu. Chiandussi, Bugada i Onate [15] predlažu minimizaciju elemenata mreže upotrebom prostorno promjenjivih svojstava materijala, koja se određuju na osnovi stanja deformacije elemenata mreže.

Od ostalih pristupa pomicanju mreže treba spomenuti primjenu Laplaceove jednadžbe pomaka. Löhner i Yang [55] provode pomicanje mreže primjenom Laplaceove jednadžbe s promjenjivim koeficijentom difuzije, koji je obrnuto proporcionalan udaljenosti konačnih elemenata od pomične granice. Laplaceovu jednadžbu pomaka koriste i Masud i Huges [57], ali s koeficijentom difuzije, koji je obrnuto proporcionalan volumenu konačnih elemenata. Uočili su da i kod jako velike distorzije mreže ne dolazi do pojave elemenata negativnih volumena. Laplaceova je jednadžba za primjenu puno jednostavnija od jednadžbe statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela, budući da omogućava rješavanje primjenom odvojenog postupka.

Helenbrook [37] uvodi biharmoničku jednadžbu pomaka, s ciljem da se omogući istovremeno zadavanje pomaka i debljine konačnog elementa uz pomičnu granicu.

1.2.3 Numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom

Metode za numeričko modeliranje strujanja fluida sa slobodnom površinom mogu se podijeliti na metode koje koriste deformabilnu ili pomičnu mrežu, i metode koje koriste fiksnu mrežu.

Metode koje koriste fiksnu mrežu često se nazivaju Eulerovskim metodama, a za njih je karakteristično da za cijelu prostornu domenu, odnosno za sve faze koriste jedinstveni skup jednažbi strujanja. Površinske su sile u matematičkom modelu definirane kao singulariteti, a fluid se tretira kao jedan fluid sa svojstvima koja se naglo mijenjaju kroz slobodnu površinu. Kod ovih metoda granica između faza, odnosno slobodna površina može biti definirana eksplicitno ili implicitno.

U skupinu implicitnih Eulerovih metoda pripadaju tzv. volumne metode, kod kojih se pojedine faze fluida označavaju ili bestežinskim česticama (Harlow i Welch [33]), ili skalarnom indikatorskom funkcijom čija se vrijednost kreće između nula i jedan (Hirt i Nicholls [42], Ashgriz i Poo [2], Gueyffier *et al.* [31], Ubbink [80]). Kod primjene skalarne indikatorske funkcije, slobodna je površina implicitno definirana kao mjesto diskontinuiteta odnosno nagle promjene indikatorske funkcije, dok je kretanje slobodne površine rezultat konvektivnog transporta indikatorske funkcije. Glavni problem kod metoda ove vrste je očuvanje oštre granice između dviju faza. Ubbink [80] je za diskretizaciju konvektivskog člana transportne jednažbe indikatorske funkcije razvio specijalnu NVD shemu (Leonard [53]) diskretizacije visoke rezolucije, za diskretizaciju konvektivnog člana transportne jednažbe indikatorske funkcije. Njegova shema osigurava monotoni, odnosno ograničeni profil indikatorske funkcije uz nisku razinu numeričke difuzije. Shema je primjenjiva na proizvoljnoj nestrukturiranoj mreži. Drugi veliki problem kod ove vrste metoda je primjena površinske napetosti. Naime, iz implicitne definicije slobodne površine vrlo je teško odrediti njena geometrijska svojstva, npr. normalu i zakrivljenost, koja su neophodna za primjenu površinske napetosti. Brackbill, Kothe i Zemach [11] su uveli tzv. model neprekinute površinske sile (engl. continuum surface force model) kod kojeg se polje indikatorske funkcije izravna (engl. smoothing) prije računanja normale i zakrivljenosti. Rezultantna površinska sila se pretvara u masenu silu koja djeluje kroz neko-

liko ćelija, odnosno kroz sloj konačne debljine. Ovim modelom se ne predviđa mogućnost promjenjive površinske napetosti, a uvjet da ukupna površinska sila na zatvorenoj slobodnoj površini mora biti jednaka nuli se ne može zadovoljiti. U slučajevima kada postoje jake površinske sile uz nisku viskoznost fluida, kao što je slučaj u sustavu voda-zrak, nekonzistentnost u računanju površinske napetosti i gradijenta tlaka uzrokuje pojavu tzv. parazitskih struja (Lafaurie *et al.* [52]) koje mogu dovesti do nestabilnosti ili čak raspada slobodne površine.

Od ostalih implicitnih Eulerovih metoda treba spomenuti metodu razina (engl. level set method), Osher i Fedkiw [60], i metodu polja faza (engl. phase-field method), Jacqmin [44].

Metoda Eulerovog tipa kod koje je slobodna površina definirana eksplicitno je metoda praćenja fronte (engl. front tracking), koju su razvili Univerdi i Tryggvason [81] (Tryggvason *et al.* [79]). Uvodi se dodatna površinska mreža koja definira slobodnu površinu. Konvekcijski transport površinske mreže se provodi eksplicitno, tj. primjenom polja brzine iz starog vremenskog trenutka. Prednost ove metode je mogućnost puno točnijeg računanja površinskih sila, mogućnost primjene promjenjive površinske napetosti, te mogućnost zadovoljavanja uvjeta nulte rezultantne površinske sile na zatvorenoj slobodnoj površini. Međutim, budući da se za sve faze koristi jedinstveni matematički model, uvođenje površinske sile u jednadžbu količine gibanja se provodi preko izvornog člana, koji djeluje po cijelom volumenu ćelije koja sadrži slobodnu površinu. Do sada je ovaj pristup primjenjivan isključivo na osnovnoj mreži Kartezijevog tipa.

Kod metoda koje koriste pomičnu ili, općenitije, dinamičku mrežu svaka od faza je definirana odvojenom računskom mrežom koje se dodiruju na slobodnoj površini. Granica mreže, koja se poklapa sa slobodnom površinom, pomiče se u skladu s uvjetom da kroz slobodnu površinu nema masenog toka. Strujanje se rješava odvojeno za svaku od faza, a povezivanje se provodi primjenom kinematičkog i dinamičkog uvjeta na slobodnoj površini. Budući da je slobodna površina pridružena unutrašnjoj ili vanjskoj granici prostorne domene, odnosno računске mreže (ne postoje djelomično popunjene ćelije), kinematički i dinamički uvjeti na slobodnoj površini zadovoljavaju se neposredno preko graničnih uvjeta. To je osnovno obilježje ovih metoda, koje ih svrstava u potencijalno najtočnije metode za modeliranje strujanja sa slobodnom površinom.

Postoji veliki broj metoda za simulaciju strujanja sa slobodnom površinom koje koriste pomičnu mrežu u kombinaciji s ALE, ili prostorno-vremenskom formulacijom metode konačnih elemenata (Braess i Wriggers [12], Behr i Braham [6], Rabier i Medale [67]). Peterson, Jimack i Kelmanson [64] su metodu konačnih elemenata koristili na pomičnoj mreži u kombinaciji s automatskim postupkom izrade nestrukturirane mreže, pri simulaciji sudara dvije dvodimenzijske kapljice. Ovo je primjer koji pokazuje da metode koje primjenjuju dinamičku mrežu nisu ograničene samo na slučajeve umjerene deformacije slobodne površine. Zwart, Raithby i Raw [90] su, primjenjujući prostorno-vremensku formulaciju metode kontrolnih volumena, pokazali da se uz postupak topološke modifikacije mreže koji čuva konzervativnost metode mogu računati i velike deformacije slobodne površine, pa čak i preklapanje valova.

Uz očuvanje kvalitete mreže tijekom simulacije, kod primjene pomične mreže pri simulaciji strujanja fluida sa slobodnom površinom ključan je postupak pomicanja čvorova slobodne površine. Muzaferija i Perić [59] su predložili postupak koji je prilagođen korištenju uz metodu kontrolnih volumena na proizvoljnoj nestrukturiranoj mreži. Slobodna je površina definirana pomoću tzv. kontrolnih točaka, koje su pridružene svakoj od graničnih stranica koje se nalaze na slobodnoj površini. Položaj čvorova slobodne površine dobiva se linearnom interpolacijom položaja kontrolnih točaka. Pomicanje slobodne površine je ugrađeno u postupak SIMPLE (Patankar [61]), tako da se na kraju svake vanjske iteracije računaju pomaci kontrolnih točaka u zadanom smjeru, na osnovi uvjeta da resultantni maseni tok kroz slobodnu površinu mora biti jednak nuli. Metoda je testirana na primjerima s jednim fluidom i stacionarnom slobodnom površinom. Apsley i Hu [1] su sličan postupak testirali i na nestacionarnom gibanju slobodne površine.

1.2.4 Metoda kontrolnih površina

U posljednje vrijeme postoji sve veći interes za analizu utjecaja surfaktanata na strujanje sa slobodnom površinom. U praksi se rijetko može naći strujanje sa savršeno čistom slobodnom površinom, a poznato je npr. da prisutnost surfaktanata na površini mjehurića smanjuje njegovu brzinu podizanja, te utječe na oblik i stabilnost slobodne površine.

Numeričko modeliranje utjecaja surfaktanata zahtijeva diskretizaciju površinske transportne jednačbe na zakrivljenoj deformabilnoj površini (slobodnoj površini). Sličan se

problem javlja kod simulacije tankog fluidnog filma, gdje se odgovarajući matematički model rješava na nepomičnoj zakrivljenoj površini u trodimenzionalnom prostoru. Li i Pozrikidis [54] su numerički modelirali 3-D Stokesovo strujanje oko deformabilne kapljice na čijoj se površini nalaze molekule netopivog surfaktanta. Površinsku transportnu jednadžbu diskretizirali su primjenom metode konačnih razlika na globalnoj krivocrtnoj koordinatnoj mreži koja je definirana na slobodnoj površini. Nedostatci takvog pristupa su pojava singularnih koordinatnih točaka, koje uzrokuju nestabilnost računa, i ograničenost samo na jednostavne geometrijske oblike slobodne površine. Yon i Pozrikidis [85] primjenjuju koncept metode kontrolnih volumena za diskretizaciju površinske transportne jednadžbe na nestrukturiranoj površinskoj mreži koja se sastoji od krivocrtnih trokutnih elemenata sa šest čvorova. Koncentracija surfaktanta se računa u težištima trokuta, a vrijednosti koncentracije u čvorovima računaju se kao srednja vrijednost koncentracije u težištima pripadajućih trokuta. Raspodjela koncentracije surfaktanta na površini trokuta je definirana parametarski, u lokalnom koordinatnom sustavu, u ovisnosti o vrijednostima koncentracije u čvorovima trokuta. Da bi se izbjegao diskontinuitet površinskog gradijenta koncentracije na stranici trokuta, vrijednost površinskog gradijenta u čvorovima računa se kao srednja vrijednost površinskih gradijenata pripadajućih trokuta. Testiranje ove metode je pokazalo da očuvanje ukupnog sadržaja netopivih surfaktanta na zatvorenoj slobodnoj površini ovisi o rezoluciji mreže, što znači da metoda nije striktno konzervativna, kao što bi se očekivalo od metode kontrolnih volumena.

Jedan od zadataka ovog rada je proširenje metode kontrolnih površina tako, da podržava poligonalnu i pomičnu površinsku mrežu.

1.3 Hipoteza rada

Potrebno je definirati automatsku metodu pomicanja mreže, koja će osigurati očuvanje valjanosti i kvalitete kontrolnih volumena tijekom promjene oblika prostorne domene. Metoda pomicanja mreže mora biti kompatibilan s metodom kontrolnih volumena, koja ima sljedeća svojstva:

- nepoznate varijable se računaju u težištu kontrolnog volumena (engl. “cell centered finite volume method”),

- mreža je nestrukturirana i sastavljena od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena,
- podržan je postupak rješavanja na paralelnim računalima primjenom metode dekompozicije prostorne domene.

Temeljni preduvjeti o kojima ovisi pouzdanost i učinkovitost metode pomicanja mreže su izbor valjane jednadžbe pomaka mreže i njezina pažljiva diskretizacija. Jednadžba pomaka mora sadržavati mehanizme koji sprečavaju nastajanje negativnih kontrolnih volumena, te mora minimizirati distorziju kontrolnih volumena tijekom deformacije mreže. Prilikom diskretizacije treba voditi računa da se pozitivna svojstva jednadžbe pomaka mreže očuvaju i u diskretiziranom obliku.

Osnovna je pretpostavka ovog rada da će se zahtijevi koji se postavljaju na metodu pomicanja mreže ostvariti primjenom Laplaceove jednadžbe pomaka s promjenjivim koeficijentom difuzije. Za računanje koeficijenta difuzije koristit će se dva kriterija: trenutno stanje deformacije mreže i udaljenost kontrolnog volumena od odabrane pomične granice. Diskretizacija odabrane jednadžbe pomaka provest će se primjenom metode konačnih elemenata na tzv. kompozitnom poliedarskom konačnom elementu. Problem pomicanja mreže rješavat će se odvojenim postupkom, koji omogućava primjenu paralelnih računala, pri čemu će se koristiti ista dekompozicija prostorne domene koja se koristi i kod postupka rješavanja primarnog problema primjenom metode kontrolnih volumena.

Kombinacija metode kontrolnih volumena i automatskog pomicanja mreže može se koristiti u simulaciji strujanja fluida sa slobodnom površinom. Metoda će biti proširena tako da obuhvati sve utjecajne parametre koji su potrebni u direktnoj numeričkoj simulaciji mjehurića plina u tekućini, uključujući utjecaj površinske napetosti i surfaktanata. Numerička analiza utjecaja surfaktanata na strujanje sa slobodnom površinom zahtijeva rješavanje površinske transportne jednadžbe na deformabilnoj površini u prostoru. U tu će svrhu u sklopu rada biti razvijena i primijenjena metoda kontrolnih površina. Stabilnost međusobnog povezivanja i učinkovitost zajedničkog rada triju metodologija bit će ispitani pri numeričkom modeliranju mjehurića.

1.4 Pregled rada

Ostatak ovog rada organiziran je na sljedeći način.

U drugom su poglavlju definirani osnovni zakoni mehanike kontinuuma za proizvoljni volumen, koji su nakon toga konkretizirani za izotermno strujanje nestlačivog newtonovskog fluida. Izvedeni su uvjeti na granici između dva viskozna nestlačiva fluida koji se međusobno ne miješaju, uključujući utjecaj promjenjive površinske napetosti. Opisani su surfaktanti i njihov utjecaj na površinsku napetost, te je izvedena integralna površinska transportna jednadžba surfaktanata na deformabilnoj zakrivljenoj površini.

U trećem je poglavlju opisana metoda kontrolnih volumena na primjeru diskretizacije opće skalarne transportne jednadžbe na pomičnoj nestrukturiranoj mreži. Prostorna i vremenska diskretizacija transportne jednadžbe je provedena tako, da je postignut drugi red točnosti ukupne metode. Također je opisan postupak rješavanja na paralelnim računalima.

U četvrtom je poglavlju opisana nova automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Najprije je definiran problem pomicanja mreže, nakon čega je dan pregled postojećih metoda. Opisana je diskretizacija odabrane jednadžbe pomaka s primjenom metode konačnih elemenata na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu. Opisan je postupak rješavanja na serijskom i paralelnom računalu. Predložena metoda pomicanja mreže testirana je na nekoliko 2-D i 3-D primjera.

U petom je poglavlju definirana metoda kontrolnih površina koja omogućava rješavanje površinske transportne jednadžbe na proizvoljnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži. Točnost metode je provjerena na nekoliko stacionarnih i nestacionarnih problema konvektivnog i difuzijskog transporta skalarne veličine na površini kugle.

U šestom je poglavlju najprije opisana metoda rješavanja sustava Navier-Stokesovih jednadžbi primjenom metode kontrolnih volumena na pomičnoj mreži. Opisana je primjena rubnih uvjeta i postupak rješavanja. Nakon toga je opisana metoda praćenja slobodne površine koja omogućava primjenu pomične mreže za numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom. U sklopu metode praćenja slobodne površine opisan je postupak primjene graničnih uvjeta na slobodnoj površini, te postupak pomicanja čvorova slobodne površine. Posebna je pažnja posvećena primjeni površinske

napetosti i međusobnom povezivanju različitih komponenti metode rješavanja. Na kraju šestog poglavlja opisana je prilagodba metode praćenja slobodne površine za numeričko modeliranje mjehurića koji se podiže kroz mirujuću tekućinu.

U sedmom je poglavlju metodologija koja je opisana u prethodnim poglavljima primijenjena za numeričko modeliranje nekoliko standardnih problema strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom. Postupak rješavanja sastoji se od sljedećih komponenti: rješavanje strujanja fluida na 3-D pomičnoj mreži primjenom metode kontrolnih volumena, pomicanje čvorova slobodne površine i primjena dinamičkog i kinematičkog uvjeta na slobodnoj površini, rješavanje problema pomicanja mreže za zadane pomake slobodne površine primjenom metode konačnih elemenata, rješavanje površinskog transporta surfaktanata primjenom metode kontrolnih površina. Sve su komponente međusobno povezane u efikasan i stabilan postupak rješavanja. Dobiveni rezultati su uspoređeni s dostupnim analitičkim i eksperimentalnim podacima.

U osmom su poglavlju navedeni glavni zaključci rada. Istaknut je originalni doprinos rada u području tehničkih znanosti, te su predložene mogućnosti daljnjeg istraživanja.

Poglavlje 2

Matematički model

2.1 Uvod

Krajnji je cilj ovog rada primjena metode kontrolnih volumena koja podržava vremenski promjenjivu prostornu domenu pri numeričkom modeliranju strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom. U svakoj od faza definira se posebna mreža, koja se pomiče i deformira sukladno promjeni oblika slobodne površine. Matematički se model strujanja fluida rješava na svakoj od pomičnih mreža odvojeno, dok se povezivanje strujanja pojedinih fluidnih faza provodi preko graničnih uvjeta na slobodnoj površini. U sklopu rada promatrat će se strujanje sa slobodnom površinom pri kojem je površinska napetost jedna od dominirajućih sila i gdje se zbog postojanja surfaktanata koji su neravnomjerno raspodijeljeni na slobodnoj površini, pojavljuje gradijent površinske napetosti.

U odjeljku 2.2 su kao polazište metode kontrolnih volumena na vremenski promjenjivoj prostornoj domeni formulirani integralni zakoni održanja za proizvoljni volumen. Zakoni su najprije definirani za općeniti kontinuum, a nakon toga su konkretizirani za nestlačivo izotermno strujanje newtonovskog fluida. Uvjeti koji vrijede na granici između dva fluida opisani su u odjeljku 2.3. Dinamičkim su uvjetom obuhvaćeni promjenjiva površinska napetost i viskozni efekti. U odjeljku 2.4 kratko je opisana površinska napetost i njena ovisnost o sadržaju surfaktanata. Također je definirana površinska transportna jednadžba netopivih surfaktanata za proizvoljnu površinu na slobodnoj površini.

2.2 Jednadžbe mehanike kontinuuma za proizvoljni volumen

Gibanje kontinuuma definirano je osnovnim zakonima klasične fizike:

- Zakon održanja mase,
- Zakon održanja količine gibanja,
- Zakon održanja momenta količine gibanja,
- Zakon održanja energije,
- Zakon brzine promjene entropije.

Budući da su ovi zakoni definirani za sustav materijalnih čestica (materijalni volumen), potrebno ih je prevesti na proizvoljni volumen.

Integralni oblik zakona odražanja intenzivnog fizikalnog svojstva ϕ za materijalni volumen V_M ograničen zatvorenom površinom S_M izražen je jednadžbom:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_M} \rho \phi \, dV = - \oint_{S_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_\phi \, dS + \int_{V_M} s_\phi \, dV, \quad (2.1)$$

gdje je ρ gustoća, $\mathbf{n}$ vanjska jedinična normala na S_M , a $\mathbf{q}_\phi$ i s_ϕ su površinski odnosno volumni izvori/ponori svojstva ϕ .

Primjenom Reynoldsovog transportnog teorema (A.3) na jednadžbu (2.1), dobiva se integralni oblik zakona održanja svojstva ϕ za proizvoljni volumen V , ograničen zatvorenom površinom S :

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS = - \oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_\phi \, dS + \int_V s_\phi \, dV, \quad (2.2)$$

gdje je $\mathbf{v}$ brzina gibanja kontinuuma, a $\mathbf{v}_s$ brzina točaka površine S . Površinski izvor/ponor $\mathbf{q}_\phi$ u transportnoj jednadžbi (2.2) najčešće predstavlja difuzijski tok, koji se može izraziti sljedećom relacijom:

$$\mathbf{q}_\phi = -\Gamma_\phi \nabla \phi, \quad (2.3)$$

gdje je Γ_ϕ koeficijent difuzije. Uvrštavanjem relacije (2.3) u jednadžbu (2.2) dobiva se konačan oblik integralne transportne jednadžbe svojstva ϕ za proizvoljni volumen:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS - \oint_S \mathbf{n} \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS = \int_V s_\phi \, dV. \quad (2.4)$$

Iz jednadžbe (2.2) slijede osnovni zakoni mehanike kontinuuma za proizvoljni volumen:

- Zakon održanja mase,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \, dS = 0, \quad (2.5)$$

- Zakon održanja količine gibanja,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} \, dS = \int_V \rho \mathbf{g} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dS, \quad (2.6)$$

- Zakon održanja momenta količine gibanja,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \, dS = \\ \int_V \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{g}) \, dV + \oint_S \mathbf{r} \times \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Iz jednadžbi (2.6) i (2.7) slijedi da je tenzor naprezanja $\boldsymbol{\sigma}$ simetričan tenzor:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T, \quad (2.8)$$

- Zakon održanja energije,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho e \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) e \, dS = \\ \int_V \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}) \, dS - \oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \, dS + \int_V \rho Q \, dV, \end{aligned} \quad (2.9)$$

- Zakon brzine promjene entropije,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho s \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) s \, dS \geq \oint_S \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) \, dS + \int_V \frac{\rho Q}{T} \, dV, \quad (2.10)$$

gdje je $\mathbf{g}$ gravitacijsko ubrzanje (ili specifična masena sila), $\mathbf{r}$ vektor položaja, e totalna specifična energija, $\mathbf{q}$ toplinski tok, Q izvor/ponor energije, s specifična entropija, a T temperatura.

Kada prostorna domena tijekom vremena mijenja svoj oblik, mora biti zadovoljen i tzv. *zakon održanja prostora*:

$$\frac{d}{dt} \int_V dV - \oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s dS = 0. \quad (2.11)$$

Ovaj zakon izražava odnos između brzine promjene volumena prostorne domene i brzine točaka njene granice.

Izotermno strujanje nestlačivog newtonovskog fluida

U ovom će se radu razmatrati izotermno strujanje nestlačivog newtonovskog fluida. Tenzor naprezanja je za nestlačive newtonovske fluide definiran generaliziranim Newtonovim zakonom viskoznosti:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T], \quad (2.12)$$

gdje je p tlak, μ dinamička viskoznost fluida, a $\mathbf{I}$ jedinični tenzor drugog reda. U slučaju strujanja nestlačivog fluida ($\rho = \text{konst.}$), i uz pretpostavku konstantne dinamičke viskoznosti fluida ($\mu = \text{konst.}$), zakoni održanja mase i količine gibanja, (2.5) i (2.6), mogu se transformirati u sljedeći oblik:

$$\oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) dS + \int_V \rho \mathbf{g} dV - \int_V \nabla p dV. \quad (2.14)$$

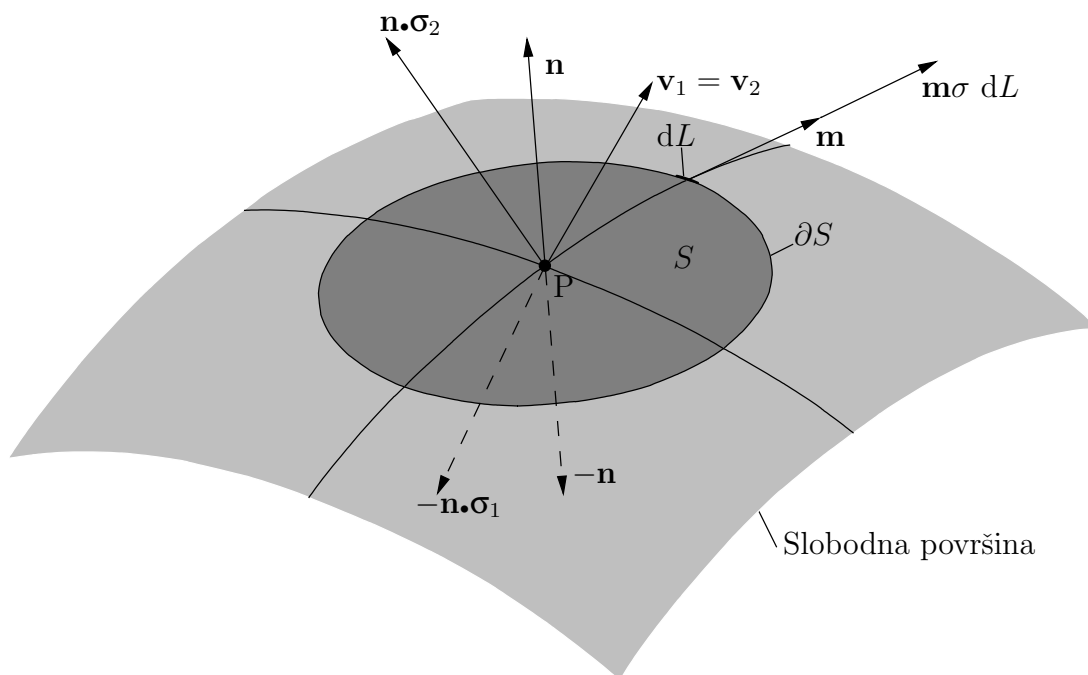
Jednadžba (2.14) predstavlja integralni oblik Navier-Stokesove jednadžbe za izotermno strujanje nestlačivog newtonovskog fluida, koja zajedno s jednadžbom kontinuiteta (2.13) čini zatvoreni sustav jednadžbi.

2.3 Uvjeti na granici između dva fluida

Jednadžbe strujanja fluida (2.13) i (2.14), vrijede pod temeljnom pretpostavkom da je fluid kontinuum. Na granici dvaju fluida fizikalna se svojstva mijenjaju diskontinuirano, što zahtijeva posebnu pažnju. Ako se dva fluida ne miješaju, jednadžbe strujanja se

mogu primijeniti na svaki fluid posebno, dok se na granici između dva fluida primjenjuju odgovarajući granični uvjeti.

Na slici 2.1 prikazana je granica između dva nestlačiva newtonovska fluida koji se međusobno ne miješaju, u daljnjem tekstu nazvana slobodnom površinom. Potrebno je odrediti relacije između brzine $\mathbf{v}$, normalnog gradijenta¹ brzine $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}$ i tlaka p na dvije strane slobodne površine.



Slika 2.1: Uz opis uvjeta na slobodnoj površini.

Odnos između brzina fluida na dvije strane slobodne površine definiran je tzv. *kine-matičkim uvjetom* (Batchelor [4]), prema kojem normalna komponenta brzine mora biti neprekinuta kroz slobodnu površinu²:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_2 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_1 = 0, \quad (2.15)$$

gdje su $\mathbf{v}_1$ i $\mathbf{v}_2$ brzine fluida na dvije strane slobodne površine, a $\mathbf{n}$ je jedinična normala na slobodnu površinu, usmjerena iz fluida 1 u fluid 2, slika 2.1. Dodatno, ako se pretpostavi da je na slobodnoj površini dozvoljen difuzijski transport količine gibanja, tangencijalna

¹Pod pojmom *normalni gradijent* podrazumjeva se usmjerena derivacija u smjeru jediničnog vektora normale na promatranu plohu.

²Ovaj uvjet vrijedi pod pretpostavkom da je slobodna površina materijalna odnosno da kroz nju ne postoji maseni tok.

će komponenta brzine također biti neprekinuta kroz slobodnu površinu:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{v}_2 - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{v}_1 = \mathbf{0}. \quad (2.16)$$

Iz jednadžbi (2.15) i (2.16) slijedi:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2. \quad (2.17)$$

Iz zakona održanja količine gibanja slijedi tzv. *dinamički uvjet*, koji kaže da su sile koje djeluju na fluid na slobodnoj površini u ravnoteži. Jednažba ravnoteže postaviti će se za dio slobodne površine S koji je ograničen zatvorenom krivuljom ∂S , slika 2.1. Integralni oblik jednadžbe ravnoteže izražen je jednadžbom:

$$\int_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \, dS - \int_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \sigma \, dL = \mathbf{0}, \quad (2.18)$$

gdje su $\boldsymbol{\sigma}_1$ i $\boldsymbol{\sigma}_2$ tenzori naprezanja na dvije strane slobodne površine, σ površinska napetosti, $\mathbf{m}$ vanjska jedinična binormala na ∂S , tangencijalna na S , a L duljina luka mjerena uzduž krivulje ∂S . Primjenom Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu (B.8), linijski se integral u jednadžbi (2.18) može pretvoriti u površinske integrale:

$$\int_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \, dS - \int_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 \, dS + \int_S \nabla_s \sigma \, dS + \int_S \kappa \mathbf{n} \sigma \, dS = \mathbf{0}, \quad (2.19)$$

gdje je $\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}$ dvostruka srednja zakrivljenost slobodne površine, a $\nabla_s \sigma$ površinski gradijent površinske napetosti. Ako se dozvoli da površina S teži u točku, dobiva se diferencijalna jednadžba ravnoteže za točku na slobodnoj površini:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 = -\sigma \kappa \mathbf{n} - \nabla_s \sigma, \quad (2.20)$$

Uzimanjem u obzir da se tenzor naprezanja može izraziti kao suma izotropnog i devijatorskog dijela ($\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$), jednadžba (2.20) dobiva sljedeći oblik:

$$(p_2 - p_1) \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) = \sigma \kappa \mathbf{n} + \nabla_s \sigma, \quad (2.21)$$

gdje su p_1 i p_2 tlakovi, a $\boldsymbol{\tau}_1$ i $\boldsymbol{\tau}_2$ devijatorski dijelovi tenzora naprezanja na dvije strane slobodne površine. Skalarnim množenjem jednadžbe (2.21) s jediničnom normalom $\mathbf{n}$ dobiva se jednadžba *ravnoteže normalne komponente sile naprezanja* na slobodnoj površini:

$$p_2 - p_1 - \mathbf{nn} : (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) = \sigma \kappa, \quad (2.22)$$

dok se jednadžba *ravnoteže tangencijalne komponente sile naprezanja* na slobodnoj površini dobiva oduzimanjem jednadžbe (2.22), pomnožene s $\mathbf{n}$, od jednadžbe (2.21):

$$\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) - \mathbf{n} [\mathbf{nn} : (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1)] = -\nabla_s \sigma. \quad (2.23)$$

U jednadžbama (2.22) i (2.23) postoji izraz $\mathbf{nn} : \boldsymbol{\tau}$ koji predstavlja normalnu komponentu sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini. Sila devijatorskog naprezanja $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}$ je u slučaju nestlačivog strujanja tangencijalna na krutu površinu, tj. njena je normalna komponenta jednaka nuli (Batchelor [4]). Chen, Saric i Stone [14] su pokazali da u slučaju nestlačivog strujanja normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini ima konačnu vrijednost, i da se računa prema sljedećoj jednadžbi:

$$\mathbf{nn} : \boldsymbol{\tau} = -2\mu \nabla_s \cdot \mathbf{v}, \quad (2.24)$$

gdje je μ dinamička viskoznost fluida, $\mathbf{v}$ brzina fluida na slobodnoj površini, a $\nabla_s \cdot \mathbf{v}$ površinski divergens vektora brzine. Izvod jednadžbe (2.24) prikazan je u dodatku D.

Uvrštavanjem jednadžbe (2.24) u jednadžbu (2.22) dobiva se konačni izraz za ravnotežu normalnih naprezanja na slobodnoj površini:

$$p_2 - p_1 = \sigma \kappa - 2(\mu_2 - \mu_1) \nabla_s \cdot \mathbf{v}, \quad (2.25)$$

gdje su μ_1 i μ_2 dinamičke viskoznosti fluida na dvije strane slobodne površine. Jednadžba (2.25) predstavlja tzv. *uvjet skoka tlaka* (engl. *pressure jump condition*) kroz slobodnu površinu, iz kojeg se vidi da je skok tlaka uzrokovan površinskom napetošću i viskoznim silama.

Preostaje da se izvede relacija između normalnih gradijenata brzine na dvije strane slobodne površine. U tu će se svrhu jednadžba (2.23) dalje pojednostaviti korištenjem relacije između devijatorskog dijela tenzora naprezanja i gradijenta brzine za strujanje nestlačivog newtonovskog fluida:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] \quad (2.26)$$

i izraza za gradijent brzine na slobodnoj površini:

$$\nabla \mathbf{v} = \nabla_s \mathbf{v} + \mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (2.27)$$

Korištenjem jednažbi (2.26) i (2.27), izraz $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}$ se može izraziti pomoću gradijenta brzine:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} &= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}] \\
 &= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla_s \mathbf{v} + \mathbf{n} \cdot (\mathbf{nn}) \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla_s \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} + \mathbf{nn} \cdot (\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}] \\
 &= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla_s \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} + \mathbf{nn} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})] \\
 &= \mu [(\mathbf{I} + \mathbf{nn}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}) + (\nabla_s \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}],
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

gdje su korištene sljedeće jednakosti:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_s \mathbf{v} = 0, \tag{2.29}$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{nn}) \cdot \nabla \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}, \tag{2.30}$$

$$\mathbf{nn} \cdot (\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{nn} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}). \tag{2.31}$$

Uvrštavanjem jednažbe (2.28) u jednažbu (2.23), dobiva se tražena relacija koja povezuje normalni gradijent brzine na dvije strane slobodne površine:

$$\begin{aligned}
 \mu_2 [\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v})_2] - \mu_1 [\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v})_1] = \\
 - \nabla_s \sigma - \mathbf{n} (\mu_2 - \mu_1) \nabla_s \cdot \mathbf{v} - (\mu_2 - \mu_1) (\nabla_s \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}.
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Iz jednažbe (2.32) se vidi da je skok normalnog gradijenta brzine kroz slobodnu površinu posljedica viskoznih sila i gradijenta površinske napetosti.

2.4 Površinska napetost i surfaktanti

Površinska napetost σ definirana je kao rad koji je potreban da se veličina slobodne površine poveća za jediničnu vrijednost. S druge strane, površinska napetost predstavlja veličinu sile po jedinici duljine (N/m), koja je tangencijalna na slobodnu površinu i okomita na neki linijski element na slobodnoj površini. Površinska napetost za zrak i čistu vodu pri temperaturi 20 °C iznosi 0.0728 N/m.

Prisutnost surfaktanata može znatno utjecati na površinsku napetost. Surfactanti su tvari čije molekule posjeduju bipolarnu strukturu, tj. polarni (hidrofilni) i apolarni (hidrofobni) dio. Takva struktura surfaktanata pogoduje adsorpciji njihovih molekula na granici između polarne i apolarne faze. Prisutnost surfaktanata na slobodnoj površini dovodi do smanjenja površinske napetosti. Na toj se pojavi uglavnom temelji i njihova

primjena u industriji, npr. za stabilizaciju emulzija i pjena, atomizaciju, sprejeve, i destilaciju. Tipični su surfaktanti masne kiseline i alkoholi, ali jednaka svojstva pokazuju i polimerne molekule, proteini i sitne krute čestice.

Ovisnost između površinske napetosti i koncentracije surfaktanata izražava se površinskom jednadžbom stanja. U proračunima se vrlo često koristi nelinearna Frumkin-Langmirova jednadžba stanja (Cuenot, Magnaudet i Spennato [16]):

$$\sigma = \sigma_0 + \mathcal{R}T\Phi_\infty \ln \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_\infty} \right), \quad (2.33)$$

gdje je σ_0 površinska napetost za čistu slobodnu površinu, Φ koncentracija surfaktanata na slobodnoj površini, Φ_∞ maksimalna koncentracija surfaktanata (koncentracija zasićenja), $\mathcal{R}$ opća plinska konstanta, a T temperatura.

Strujanje fluida uz slobodnu površinu uzrokuje površinski transport adsorbiranih surfaktanata i njihovu neravnomjernu raspodjelu. S druge strane, neravnomjerna raspodjela surfaktanata izaziva gradijent površinske napetosti odnosno tangencijalne sile koje djeluju na fluid uz slobodnu površinu na način da se nastoji uspostaviti ravnomjerna raspodjela surfaktanata. Ova pojava je poznata u mehanici fluida kao Marangonijev učinak. Na primjeru mjehurića plina na čijoj površini su adsorbirani surfaktanti, Marangonijev učinak se manifestira na način da se dio površine mjehurića ponaša kao kruta stijenka.

Prema tome, da bi se uzeo u obzir utjecaj surfaktanata na dvofazno strujanje, u matematički model se mora uključiti i zakon održanja surfaktanata na slobodnoj površini. Integralni oblik zakona održanja surfaktanata za materijalnu površinu¹ S_M ograničenu zatvorenim kirvuljom ∂S_M se izražava jednadžbom:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \Phi \, dS = - \oint_{\partial S_M} \mathbf{m} \cdot \mathbf{q}_\Phi \, dL + \int_{S_M} s_\Phi \, dS, \quad (2.34)$$

gdje je $\mathbf{m}$ vanjska jedinična binormala na ∂S_M , L duljina luka mjerena uzduž ∂S_M , $\mathbf{q}_\Phi$ difuzijski tok surfaktanta uzduž površine, a s_Φ izvor surfaktanta po jedinici površine (npr. adsorpcija i desorpcija). Difuzijski tok surfaktanta uzduž slobodne površine može se izraziti Fickovim zakonom:

$$\mathbf{q}_\Phi = -\Gamma_\Phi \nabla_s \Phi, \quad (2.35)$$

¹Pretpostavlja se da nema masenog toka kroz slobodnu površinu pa se ona može smatrati materijalnom površinom.

gdje je Γ_Φ koeficijent difuzije surfaktanta uzduž slobodne površine, a $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$ je operator površinskog gradijenta. Ako se još pretpostavi da se ukupni sadržaj surfaktanta na slobodnoj površini ne mijenja s vremenom ($s_\Phi = 0$), zakon održanja (2.34) poprima sljedeći oblik:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \Phi \, dS = \oint_{\partial S_M} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\Phi \nabla_s \Phi) \, dL. \quad (2.36)$$

Primjenom Reynoldsovog transportnog teorema za deformabilnu površinu (C.7), zakon održanja (2.36) se može primijeniti na proizvoljnu površinu S , ograničenu zatvorenom krivuljom ∂S :

$$\frac{d}{dt} \int_S \Phi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v}_t - \mathbf{b}_t) \Phi \, dL = \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\Phi \nabla_s \Phi) \, dL, \quad (2.37)$$

gdje je $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{v}$ tangencijalna komponenta brzine čestica fluida na slobodnoj površini, a $\mathbf{b}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{b}$ tangencijalna komponenta brzine točaka granice ∂S . Treba napomenuti da je proizvoljna površina vezana uz slobodnu (materijalnu) površinu uvjetom (C.1).

Međusobna povezanost strujanja fluida i transporta surfaktanata uzduž slobodne površine vidljiva je i iz odgovarajućih matematičkih modela. Konvekcijski član u jednadžbi (2.37) sadrži brzinu strujanja fluida na slobodnoj površini, a koncentracija surfaktanata na slobodnoj površini ulazi u jednadžbe strujanja fluida (2.13) i (2.14) preko jednadžbe stanja (2.33) i graničnih uvjeta (2.25) i (2.32).

2.5 Zaključak

Definirane su osnovne jednadžbe mehanike kontinuuma u integralnom obliku za proizvoljni volumen. Jednadžbe su zatim konkretizirane za nestlačivo izotermno strujanje newtonovskog fluida. Ovaj oblik transportnih jednadžbi služi kao polazište za metodu kontrolnih volumena na vremenski promjenjivoj prostornoj domeni. Izvedeni su uvjeti za tlak, brzinu i normalni gradijent brzine na granici između dva fluida koji se međusobno ne miješaju. Opisana je površinska napetost i njena ovisnot o sadržaju surfaktanata na slobodnoj površini. Definiran je matematički model koji opisuje površinski transport surfaktanata, a što je preduvjet za numeričku analizu Marangonijevog učinka uzrokovanog neravnomjernom raspodjelom surfaktantata na slobodnoj površini.

Poglavlje 3

Diskretizacija metodom kontrolnih volumena

3.1 Uvod

Svrha postupka diskretizacije je pretvaranje diferencijalne jednačbe u odgovarajući sustav algebarskih jednačbi. Rješavanjem takvog sustava jednačbi dobiva se skup vrijednosti koje odgovaraju približnom rješenju izvorne jednačbe u prethodno definiranim točkama prostora i vremena. Postupak diskretizacije se može podijeliti u dva dijela: diskretizaciju domene rješavanja i diskretizaciju transportne jednačbe (Jasak [46]).

Diskretizacija domene rješavanja sastoji se od diskretizacije prostorne i vremenske domene. Diskretizacijom prostorne domene prostor se dijeli na konačan broj diskretnih regija koje se nazivaju kontrolnim volumenima. Diskretizacija vremenske domene predstavlja podjelu ukupnog vremena rješavanja na konačan broj vremenskih koraka.

Diskretizacijom transportne jednačbe pretpostavlja se oblik raspodjele zavisnih varijabli na domeni rješavanja i na osnovi toga se pojedini članovi transportne jednačbe pretvaraju u odgovarajuće algebarske izraze.

U ovom poglavlju opisana je metoda kontrolnih volumena za slučaj diskretizacije transportnih jednačbi na vremenski promjenjivim prostornim domenama. Metoda ima sljedeća osnovna svojstva:

- Integralni oblik transportnih jednačbi primjenjuje se na svaki pokretni kontrolni volumen u mreži. Na taj su način konzervativne veličine (npr. masa, količina gibanja, energija itd.) sačuvane na diskretnoj razini.

- Jednadžbe se rješavaju u nepokretnom i pokretnom Kartezijevom koordinatnom sustavu na mreži koja mijenja oblik tijekom vremena. Promjena oblika mreže odvija se bez promjene njezine topologije.
- Kontrolni volumeni mogu imati proizvoljni konveksni poliedarski oblik. Sve zavisne varijable se računaju u težištu kontrolnog volumena, drugim riječima koristi se nepomaknuti ili koncentrirani razmještaj varijabli (Rhie i Chow [68]).
- Sustav vezanih transportnih jednadžbi rješava se odvojenim postupkom rješavanja, pri čemu se diskretizirani članovi koji povezuju pojedinačne jednadžbe u sustavu tretiraju eksplicitno.
- Postupak rješavanja podržava primjenu paralelnih računala. Paralelni postupak rješavanja temelji se na dekompoziciji prostorne domene, a razmjena informacija između procesora se odvija primjenom MPI protokola prosljeđivanja poruka (Gropp *et al.* [30]).

Metoda kontrolnih volumena korištena u ovom radu, implementirana je u C++ biblioteci FOAM (Weller *et al.* [84]).

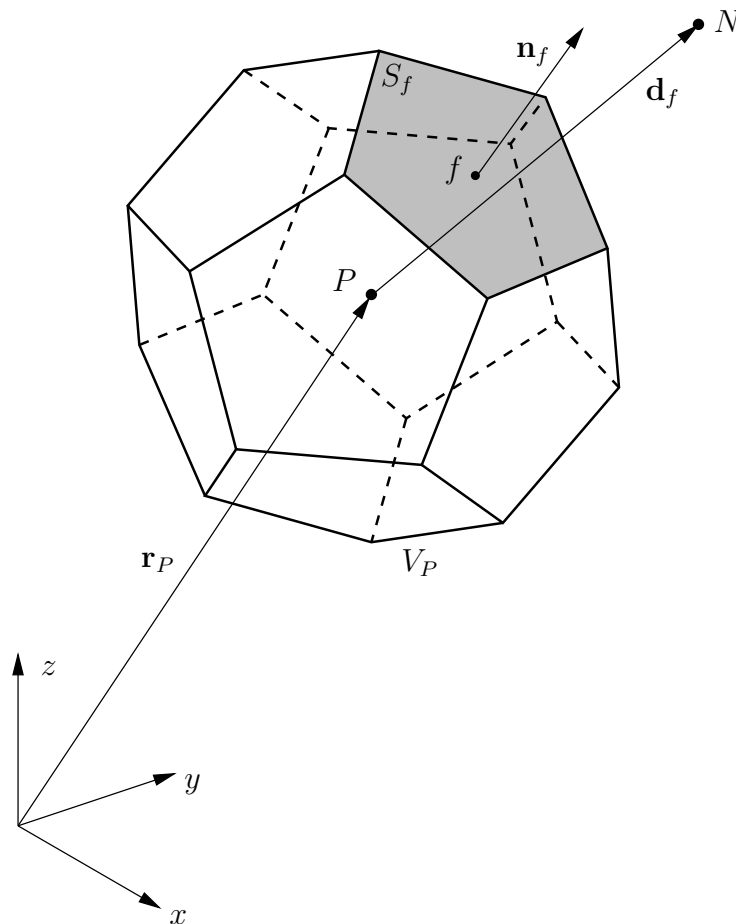
Ostatak poglavlja strukturiran je na sljedeći način. U odjeljku 3.2 opisana je prostorna diskretizacija, uključujući definiciju računske mreže, postupke računanja svojstava mreže, te kriterije provjere valjanosti. U odjeljku 3.3 opisana je diskretizacija opće transportne jednadžbe na pomičnoj nestrukturiranoj mreži. Diskretizacija je podijeljena na diskretizaciju prostornih integrala (odjeljak 3.3.1) i na vremensku diskretizaciju (odjeljak 3.3.2). Odjeljak 3.3.3 posvećen je utjecajima pomicanja mreže na diskretizaciju, a u odjeljku 3.3.4 opisana je primjena graničnih uvjeta. U odjeljku 3.4 prikazana je analiza sustava linearnih algebarskih jednadžbi s obzirom na efikasnost postupka rješavanja i ograničenost rješenja. Paralelni postupak rješavanja opisan je u odjeljku 3.5. Poglavlje završava sa zaključkom u odjeljku 3.6.

3.2 Diskretizacija domene rješavanja

Domena rješavanja se sastoji od prostorne i vremenske domene. Diskretizacija vremenske domene daje podjelu vremenskog perioda rješavanja nestacionarnog problema na konačan

broj jednakih ili promjenjivih vremenskih koraka Δt . Na taj su način definirane *vremenske računske točke* u kojima će se računati vrijednosti zavisnih varijabli. Nestacionarni problemi se rješavaju marševski po vremenu, tako da se kreće od poznatog rješenja u početnom trenutku $t = t^o$, a kao rezultat se dobiva rješenje u novom vremenskom trenutku $t = t^n = t^o + \Delta t$.

Diskretizacija prostorne domene rezultira računskom mrežom koja se sastoji od konačnog skupa kontrolnih volumena, koji potpuno ispunjavaju domenu, a da se pri tom međusobno ne preklapaju.



Slika 3.1: Kontrolni volumen.

Kontrolni volumen (ćelija) je konveksnog poliedarskog oblika, a ograničen je proizvoljnim brojem konveksnih poligonalnih stranica. Mreža koja se sastoji od ovako definiranih kontrolnih volumena naziva se proizvoljnom nestrukturiranom mrežom. Pojam konveksnosti definiran je u sklopu ovog odjeljka.

Primjer jednog kontrolnog volumena prikazan je na slici 3.1, gdje su s P i N označena težišta dva susjedna kontrolna volumena koji dijele osjenčanu stranicu f na kojoj je istom

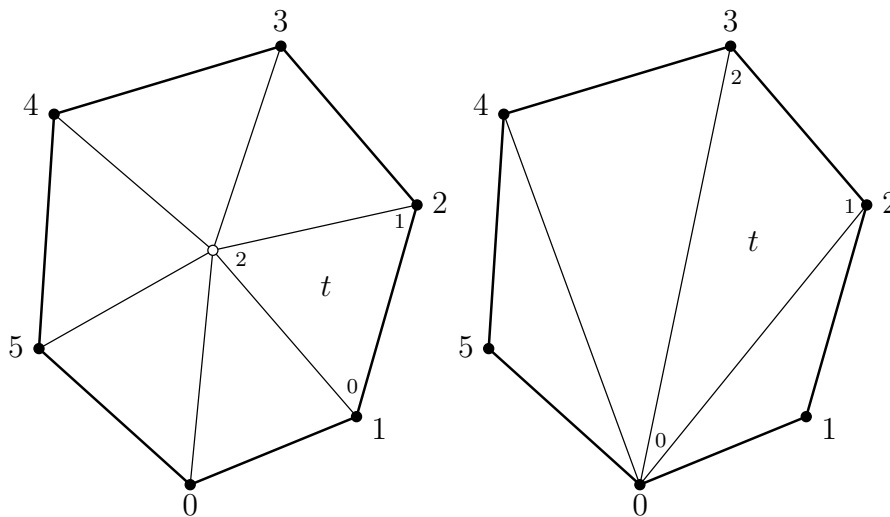
oznakom istaknuto težište. Težište kontrolnog volumena predstavlja *prostornu računsku točku* i zadovoljava sljedeći uvjet:

$$\int_{V_P} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) dV = 0, \quad (3.1)$$

gdje je V_P volumen ćelije P , a $\mathbf{r}_P$ je vektor položaja njenog težišta. Isto vrijedi i za težište stranice ćelije:

$$\int_{S_f} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_f) dS = 0, \quad (3.2)$$

gdje je S_f površina stranice f , a $\mathbf{r}_f$ je vektor položaja njenog težišta.



(a) Pomoću centralnog čvora.

(b) Pomoću postojećih čvorova.

Slika 3.2: Postupci rastavljanja poligonalne stranice na trokute.

Problem koji otežava računanje geometrijskih svojstava kontrolnih volumena i pripadajućih stranica je što stranice općenito nisu ravne. Zbog toga je uveden pristup kod kojeg se stranice jednoznačno definiraju rastavljanjem na trokute. Dva moguća postupka rastavljanja poligonalne stanice na trokute prikazana su na slici 3.2. Slika 3.2(a) prikazuje postupak kod kojeg se svakoj stranici dodaje centralni čvor čiji je vektor položaja jednak srednjoj vrijednosti vektora položaja pripadajućih čvorova, a trokuti se grade tako, da dva susjedna čvora poligona predstavljaju prva dva čvora trokuta, dok centralni čvor poligona čini treći čvor trokuta. Kod postupka prikazanog na slici 3.2(b) trokuti se grade tako, da

je svima prvi čvor jednak prvom čvoru poligona, a preostala dva su dva susjedna čvora poligona. Geometrijska svojstva poligonalnih stranica računaju se na sljedeći način:

- **Površina stranice** računa se kao suma površina pripadajućih trokuta:

$$S_f = \sum_{t=1}^{N_t} S_t, \quad (3.3)$$

gdje je N_t broj trokuta koji čine stranicu;

- **Težište stranice** računa se kao srednja vrijednost težišta pripadajućih trokuta:

$$\mathbf{r}_f = \frac{1}{S_f} \sum_{t=1}^{N_t} S_t \mathbf{r}_t. \quad (3.4)$$

Izraz (3.4) zadovoljava uvjet (3.2);

- **Normala na stranicu** računa se kao suma normala pripadajućih trokuta:

$$\mathbf{n}_f = \sum_{t=1}^{N_t} \mathbf{n}_t. \quad (3.5)$$

Svojstva kontrolnog volumena računaju se iz odgovarajućih svojstava tetraedara koji čine kontrolni volumen. Tetraedri se grade korištenjem centralnog čvora i trokuta nastalih rastavljanjem pripadajućih stranica. Vektor položaja centralnog čvora jednak je srednjoj vrijednosti vektora položaja čvorova kontrolnog volumena. Veličina kontrolnog volumena se računa kao suma volumena pripadajućih tetraedara, dok se težište računa kao srednja vrijednost težišta pripadajućih tetraedara:

$$\mathbf{r}_P = \frac{1}{V_P} \sum_{\tau=1}^{N_\tau} V_\tau \mathbf{r}_\tau. \quad (3.6)$$

gdje je N_τ broj tetraedara koji čine kontrolni volumen, V_τ volumen tetraedra, a $\mathbf{r}_\tau$ vektor položaja težišta tetraedra. Izraz (3.6) zadovoljava uvjet (3.1).

Za definiciju računske mreže koristi se adresiranje po stranicama ćelija. Takva se definicija mreže sastoji iz sljedećih elemenata:

- **Lista čvorova**, gdje je čvor definiran prostornom koordinatom. Oznaka čvora odgovara indeksu čvora u listi;
- **Lista poligonalnih stranica**, gdje je stranica definirana listom oznaka pripadajućih čvorova. Oznaka stranice odgovara indeksu stranice u listi. Stranice se mogu podijeliti na unutarnje, između dva kontrolna volumena, i granične, koje se nalaze na granici prostorne domene;

- **Lista ćelija**, gdje je ćelija definirana listom oznaka pripadajućih stranica. Treba uočiti da je oblik ćelije nepoznat i nebitan za diskretizaciju;
- **Lista graničnih zona**, gdje je granična zona definirana listom oznaka pripadajućih graničnih stranica. Granične stranice su grupirane u granične zone prema graničnim uvjetima.

Poredak stranica u listi je jednoznačno definiran. Za svaku se unutarnju stranicu može definirati ćelija koja je *posjeduje* i ona koja joj je *susjedna*. Ćelija koja posjeduje stranicu se u listi ćelija nalazi prije ćelije koja je susjedna stranici. Orijentacija stranice je definirana pravilom desne ruke, i to tako da je pripadajuća normala usmjerena prema susjednom kontrolnom volumenu. Na slici 3.1, kontrolni volumen P posjeduje stranicu f , a kontrolni volumen N joj je susjedan. Lista stranica najprije sadrži unutarnje stranice, pa onda sve granične stranice, graničnu zonu po zonu, redoslijedom kako su granične zone definirane. Redoslijed unutarnjih stranica u listi rezultat je sljedećeg postupka popunjavanja liste: kreće se od prve ćelije iz koje se uzimaju stranice s rastućim indeksom susjednih ćelija, slijede stranice koje posjeduje druga ćelija itd.

Liste ćelija, stranica i graničnih zona definiraju topologiju mreže, a kada se topologiji dodaju prostorne koordinate čvorova, mreža dobiva geometrijski oblik.

U skladu s činjenicom da se oblik prostorne domene mijenja s vremenom, mora se mijenjati i mreža. Takva se vrsta mreže često u literaturi susreće pod nazivom *dinamička mreža*, i u najširem smislu označava mrežu koja se mijenja i u svojoj topologiji. U ovom radu se pretpostavlja da se promjena mreže odvija uz nepromijenjenu topologiju, tj. mreža se prilagođava obliku prostorne domene isključivo promjenom položaja njenih čvorova¹.

Promjena mreže s vremenom neizbježno vodi do pitanja održanja valjanosti i kvalitete mreže. Mreža u svakom vremenskom koraku nestacionarne simulacije mora zadovoljiti topološke i geometrijske kriterije valjanost.

Valjanost topologije mreže provjerava se prema sljedećim kriterijima:

- Čvor se može pojaviti u stranici samo jednom;
- Stranica se može pojaviti u ćeliji samo jednom. Unutarnju stranicu mogu dijeliti samo dvije ćelije. Granična stranica može pripadati samo jednoj ćeliji i jednoj graničnoj zoni;

¹Ova tema je detaljno obrađena u 4. poglavlju.

- Dvije ćelije mogu dijeliti samo jednu stranicu;
- Kada se sve stranice jedne ćelije rastave u bridove, svaki se brid smije pojaviti u samo dvije stranice promatrane ćelije;
- Kada se sve granične stranice razbiju u bridove, svaki se brid smije pojaviti u samo dvije granične stranice.

Prema prva tri kriterija provjerava se valjanost definicije mreže, dok se prema posljednja dva kriterija provjerava da li su ćelije i plašt domene topološki zatvoreni. Budući da se topologija mreže ne mijenja s vremenom, ovu drugu provjeru je potrebno provesti samo jedanput na početku simulacije.

Prije definiranja geometrijskih kriterija valjanosti mreže treba objasniti pojam konveksnosti stranica i kontrolnih volumena. Stroga definicija konveksnosti n -dimenzionalnog geometrijskog objekta (površina, volumen) je da spojnica dviju točaka koje pripadaju objektu mora ostati unutar granice objekta. Kontrolni volumeni i pripadajuće stranice moraju zadovoljavati tzv. "slabi" uvjet konveksnosti, koji kaže da se njihova težišta moraju nalaziti unutar granica istih.

Geometrijska valjanost mreže provjerava se prema slijedećim kriterijima:

- Sve stranice i ćelije moraju biti konveksne;
- Sve ćelije moraju biti geometrijski zatvorene: suma vanjskih vektora površine svih stranica jedne ćelije mora biti nula do strojne točnosti;
- Granica mora biti geometrijski zatvorena;
- Za sve unutarnje stranice mora skalarni produkt normale $\mathbf{n}_f$ i vektora $\mathbf{d}_f = \overrightarrow{PN}$ biti pozitivan, slika 3.1:

$$\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{n}_f > 0. \quad (3.7)$$

To je tzv. test ortogonalnosti stranice kontrolnog volumena. Ortogonalnost stranica kontrolnih volumena najčešće se izražava pomoću kuta neortogonalnosti koji je definiran sljedećim izrazom:

$$\alpha_f = \arccos \left(\frac{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{n}_f}{|\mathbf{d}_f|} \right). \quad (3.8)$$

3.3 Diskretizacija transportne jednadžbe

Integralni oblik transportne jednadžbe za intenzivno skalarno svojstvo ϕ glasi:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV}_{\text{Vremenski član}} + \underbrace{\oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS}_{\text{Konvekcijski član}} - \underbrace{\oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS}_{\text{Difuzijski član}} = \underbrace{\int_V s_\phi \, dV}_{\text{Izvorski član}}, \quad (3.9)$$

gdje se integracija provodi po proizvoljnom pokretnom volumenu V koji je ograničen zatvorenom površinom ∂V . Na primjeru ove jednadžbe opisać će se diskretizacija pomoću metode kontrolnih volumena na nestrukturiranoj pomičnoj mreži definiranoj u prethodnom odjeljku.

Metoda kontrolnih volumena polazi od zahtijeva da transportna jednadžba mora biti zadovoljena za svaki kontrolni volumen u mreži. Prema tome, prostorne integrale u jednadžbi (3.9) potrebno je integrirati po kontrolnom volumenu V_P :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_P} \rho \phi \, dV + \oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS - \oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS = \int_{V_P} s_\phi \, dV, \quad (3.10)$$

gdje je ∂V_P granica kontrolnog volumena V_P , koja se sastoji od konačnog broja proizvoljnih poligonalnih stranica.

Diskretizacija jednadžbe (3.10) zahtijeva poznavanje prostorne i vremenske raspodjele zavisne varijable ϕ za promatrani kontrolni volumen V_P . Da bi metoda diskretizacije bila drugog reda točnosti, dovoljno je pretpostaviti linearne raspodjele:

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_P + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) \cdot (\nabla \phi)_P, \quad (3.11)$$

$$\phi(t^o + \Delta t) = \phi^o + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^o, \quad (3.12)$$

gdje je $\phi_P = \phi(\mathbf{r}_P)$ vrijednost varijable ϕ u računskoj točki P , koja se nalazi u težištu kontrolnog volumena V_P , a $\phi^o = \phi(t^o)$ vrijednost varijable ϕ u početnom vremenskom trenutku t^o .

Sada se može pristupiti diskretizaciji jednadžbe (3.10). Prvo je provedena diskretizacija prostornih integrala, nakon čega slijedi vremenska diskretizacija.

3.3.1 Diskretizacija prostornih integrala

Jednadžba (3.10) sadrži volumne i površinske integrale. Ako se uzme u obzir da je raspodjela varijable ϕ po kontrolnom volumenu V_P zadana jednadžbom (3.11), te ako vrijedi

izraz (3.1), slijedi pravilo za računanje volumnog integrala po kontrolnom volumenu V_P :

$$\int_{V_P} \phi(\mathbf{r}) dV = \phi_P \int_{V_P} dV + \left[\int_{V_P} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) dV \right] \cdot (\nabla \phi)_P = \phi_P V_P. \quad (3.13)$$

Slično vrijedi i za površinske integrale. Imajući u vidu da je kontrolni volumen ograničen nizom stranica, površinski integral po granici kontrolnog volumena može se zapisati kao suma površinskih integrala po stranicama:

$$\oint_{\partial V_P} \phi(\mathbf{r}) dS = \sum_f \int_{S_f} \phi(\mathbf{r}) dS, \quad (3.14)$$

gdje je S_f površina stranice f . Pretpostavljajući linearnu raspodjelu varijable ϕ , te uzimajući u obzir izraz (3.2), slijedi pravilo za računanje integrala po stranici f :

$$\int_{S_f} \phi(\mathbf{r}) dS = \phi_f \int_{S_f} dS + \left[\int_{S_f} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_f) dS \right] \cdot (\nabla \phi)_f = \phi_f S_f, \quad (3.15)$$

gdje je $\phi_f = \phi(\mathbf{r}_f)$ vrijednost varijable ϕ u težištu stranice, a $\mathbf{r}_f$ je vektor položaja težišta. Pravila numeričke integracije (3.13) i (3.15) su poznata pod nazivom pravilo centralne točke.

Slijedi diskretizacija volumnih i površinskih integrala u pojedinim članovima jednadžbe (3.10).

Konvekcijski član

Diskretizacija konvekcijskog člana provodi se primjenom jednadžbi (3.14) i (3.15):

$$\begin{aligned} \oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi dS &= \sum_f \mathbf{n}_f \cdot [\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)]_f S_f \phi_f \\ &= \sum_f [\rho_f (\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_f) S_f - \rho_f (\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{sf}) S_f] \phi_f \\ &= \sum_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \phi_f, \end{aligned} \quad (3.16)$$

gdje je ϕ_f vrijednost varijable ϕ na stranici f , $\dot{m}_f$ je apsolutni maseni tok kroz stranicu ćelije, koji mora zadovoljiti zakon održanja mase, a $\dot{V}_f$ je tzv. *volumni tok stranice ćelije*, koji mora zadovoljiti zakon održanja prostora (2.11).

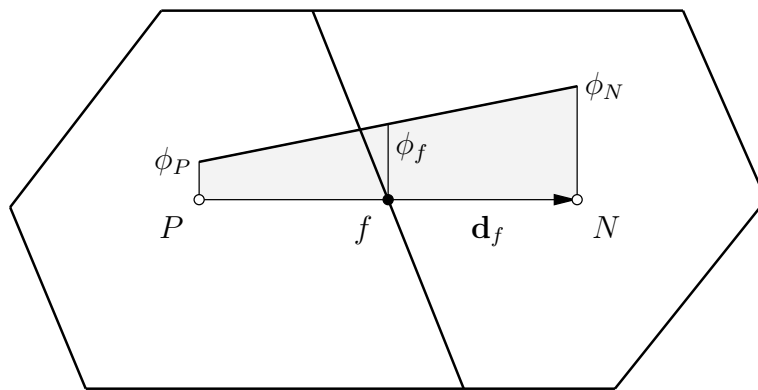
Vrijednost zavisne varijable ϕ na stranicama kontrolnih volumena računa se iz vrijednosti u težištima susjednih kontrolnih volumena primjenom sheme diskretizacije.

Sheme diskretizacije konvekcijskog člana

Zadatak sheme diskretizacije konvektivnog člana je da odredi vrijednost zavisne varijable ϕ na stranicama kontrolnih volumena koristeći vrijednosti u težištu kontrolnih volumena. U skladu s definicijom mreže temeljenom na adresiranju po stranicama kontrolnih volumena (engl. face-addressing), za interpolaciju se koriste samo vrijednosti zavisne varijable u težištima kontrolnih volumena kojima je promatrana stranica zajednička. To znači da shema diskretizacije definira slijedeću funkcijsku ovisnost:

$$\phi_f = \phi_f(\phi_P, \phi_N), \quad (3.17)$$

gdje su ϕ_P i ϕ_N vrijednosti varijable ϕ u težištima ćelija kojima je stranica f zajednička. Uz vrijednosti zavisne varijable u prostornim računskim točkama, pri interpolaciji su potrebni i drugi podaci: gradijenti zavisne varijable, maseni tokovi kroz stranice kontrolnih volumena, interpolacijski faktori itd.



Slika 3.3: Interpolacija na stranicu f kontrolnog volumena.

Ako se pretpostavi linearna raspodjela varijable ϕ između točaka P i N , slika 3.3, vrijednost na stranici f se dobiva linearnom interpolacijom:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N, \quad (3.18)$$

gdje je interpolacijski faktor f_x definiran kao omjer duljina $\overline{fN}$ i $\overline{PN}$:

$$f_x = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}. \quad (3.19)$$

Ovo je *centralna shema diskretizacije* (CD) koja je drugog reda točnosti, ali ne garantira ograničenost rješenja. Naime, kod problema kod kojih prevladava konvekcija mogu se dogoditi nefizikalne oscilacije rješenja (Ferziger i Perić [28]).

Shema koja garantira ograničenost rješenja je *uzvodna* (engl. *upwind*) *shema diskretizacije* (UD). Vrijednost varijable ϕ na stranici f određuje se na osnovi smjera strujanja:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & \text{za } (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \geq 0 \\ \phi_N & \text{za } (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) < 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

Ova shema diskretizacije je prvog reda točnosti, a njenim korištenjem uvodi se u rješenje tzv. numerička ili lažna difuzija (Ferziger i Perić [28]). Lažna difuzija djeluje stabilizirajuće na rješenje, ali s druge strane značajno narušava točnost u području velikih gradijenata zavisne varijable.

Nastojeći zadržati drugi red točnosti i ograničenost rješenja, Perić [62] uvodi *kombiniranu* (engl. *blended*) *shemu diskretizacije*, kao linearnu kombinaciju centralne i uzvodne sheme:

$$\phi_f = \gamma_f (\phi_f)_{CD} + (1 - \gamma_f)(\phi_f)_{UD}, \quad (3.21)$$

ili

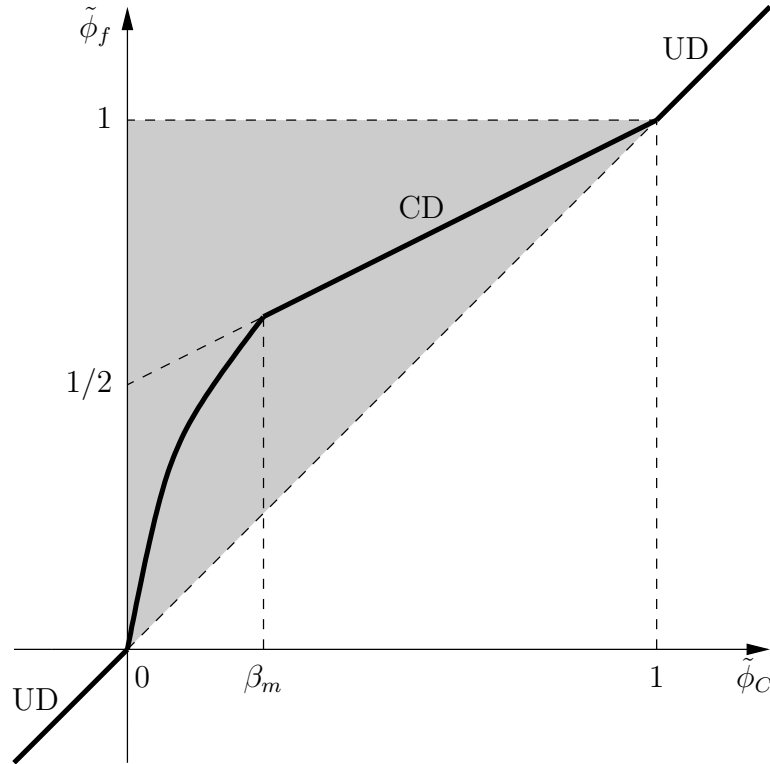
$$\begin{aligned} \phi_f = & [(1 - \gamma_f) \max(\text{sgn}(\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f), 0) + \gamma_f f_x] \phi_P \\ & + [(1 - \gamma_f) \min(\text{sgn}(\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f), 0) + \gamma_f (1 - f_x)] \phi_N, \end{aligned} \quad (3.22)$$

gdje su $(\phi_f)_{UD}$ i $(\phi_f)_{CD}$ vrijednosti zavisne varijable na stranici f kontrolnog volumena, određene prema uzvodnoj i centralnoj shemi diskretizacije. Faktorom kombinacije $0 \leq \gamma_f \leq 1$ određuje se količina numeričke difuzije koja se uvodi u rješenje. Perić [62] predlaže konstantnu vrijednost faktora γ_f za sve stranice u mreži.

Scheme diskretizacije konvekcijskog člana su još uvijek predmet opsežnog istraživanja, s ciljem da se stvori shema drugog reda točnosti koja istovremeno garantira ograničenost rješenja i ne izaziva probleme sa stabilnošću postupka rješavanja. Glavne grupe modernih shema diskretizacije su:

- TVD sheme (engl. total variation diminishing), Harten [34];
- ENO sheme (engl. essentially non-oscillatory), Harten *et al.* [35];
- NVD sheme (engl. normalized variable diagram), Leonard [53], Darwish [17].

U ovom radu je korištena *Gamma shema diskretizacije* koju su uveli Jasak, Weller i Gosman [49]. Radi se o NVD shemi drugog reda točnosti koja garantira ograničenost rješenja na proizvoljnoj nestrukturiranoj mreži.



Slika 3.4: Gamma shema diskretizacije u NVD dijagramu.

Na slici 3.4 je prikazana definicija Gamma sheme diskretizacije u NVD dijagramu, gdje je $\tilde{\phi}_f$ vrijednost normalizirane zavisne varijable¹ na stranici f , a $\tilde{\phi}_C$ vrijednost normalizirane zavisne varijable u težištu uzvodne susjedne ćelije za promatranu stranicu f . Jasak, Weller i Gosman [49] predlažu da se normalizirana varijabla $\tilde{\phi}_C$ računa na sljedeći način:

$$\tilde{\phi}_C = 1 - \frac{\phi_D - \phi_C}{2 \mathbf{d}_f \cdot (\nabla \phi)_C}, \quad (3.23)$$

gdje su ϕ_C i $(\nabla \phi)_C$ vrijednost i gradijent zavisne varijable u težištu uzvodne susjedne ćelije za promatranu stranicu f , ϕ_D vrijednost zavisne varijable u težištu nizvodne susje-

¹Normalizirana zavisna varijabla je definirana sljedećim izrazom [53]:

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U},$$

gdje je ϕ_U vrijednost zavisne varijable u težištu udaljene uzvodne (engl. far upstream) susjedne ćelije, a ϕ_D vrijednost zavisne varijable u težištu nizvodne susjedne ćelije za promatranu stranicu f . Primjenom normalizirane varijable može se definirati kriterij ograničenosti koji kaže da će varijabla ϕ_C biti lokalno ograničena ako je:

$$0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1.$$

dne ćelije za promatranu stranicu f . Vektor $\mathbf{d}_f = \mathbf{r}_D - \mathbf{r}_C$, gdje je $\mathbf{r}_D$ vektor položaja težišta nizvodne susjedne ćelije, a $\mathbf{r}_C$ vektor položaja težišta uzvodne susjedne ćelije za promatranu stranicu f . U izrazu (3.23) nema vrijednosti normalizirane zavisne varijable za udaljenu uzvodnu susjednu ćeliju, što omogućava primjenu Gamma sheme diskretizacije na proizvoljnoj nestrukturiranoj mreži.

Gamma shema diskretizacije se može definirati kao kombinirana shema diskretizacije kod koje faktor kombinacije γ_f ovisi o vrijednosti normalizirane varijable $\tilde{\phi}_C$ na sljedeći način:

$$\gamma_f = \begin{cases} 0 & \text{za } \tilde{\phi}_C \leq 0 \text{ i } \tilde{\phi}_C \geq 1, \\ \frac{\tilde{\phi}_C}{\beta_m} & \text{za } 0 < \tilde{\phi}_C < \beta_m, \\ 1 & \text{za } \beta_m \leq \tilde{\phi}_C < 1. \end{cases} \quad (3.24)$$

Vrijednost normalizirane varijable $\tilde{\phi}_C$ za promatranu stranicu f određuje se primjenom izraza (3.23), korištenjem vrijednosti zavisne varijable iz prethodne vanjske iteracije¹. Predlaže se da vrijednost faktora β_m bude u području:

$$\frac{1}{10} \leq \beta_m \leq \frac{1}{2}. \quad (3.25)$$

S povećanjem vrijednosti faktora β_m povećava se razina numeričke difuzije uvedena u rješenje, dok se smanjenjem faktora β_m povećava točnost sheme diskretizacije.

Difuzijski član

Primjenom jednadžbe (3.14) i (3.15) difuzijski član se može raspisati na sljedeći način:

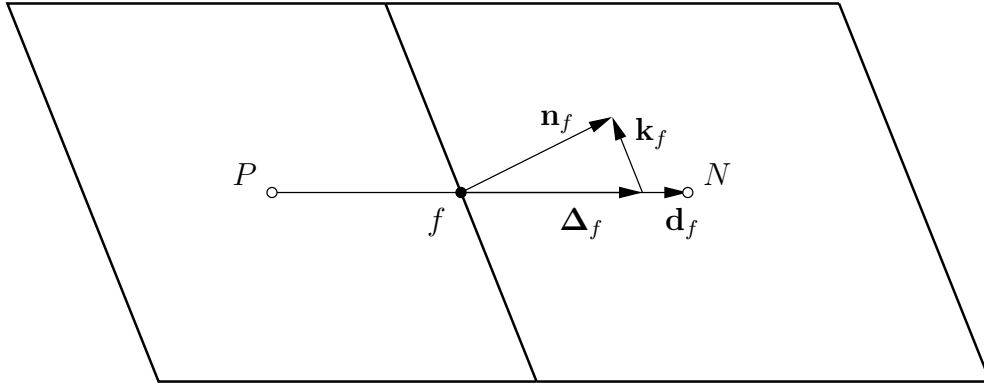
$$\begin{aligned} \oint_{\partial V} \mathbf{n}_f \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS &= \sum_f \mathbf{n}_f \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)_f S_f \\ &= \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f S_f \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f, \end{aligned} \quad (3.26)$$

gdje je $\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f$ normalni gradijent varijable ϕ na stranici f . Ukoliko se radi o ortogonalnoj mreži, gdje je vektor $\mathbf{d}_f$ paralelan s normalom $\mathbf{n}_f$, slika 3.5, normalni gradijent se može izračunati na sljedeći način:

$$\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f = \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}_f|}. \quad (3.27)$$

¹Diskretizacijom transportne jednadžbe na svim kontrolnim volumenima mreže, dobiva se u općem slučaju sustav lineariziranih algebarskih jednadžbi, gdje koeficijenti i desna strana sustava ovise o nepoznicama. Takav sustav jednadžbi je potrebno rješavati tzv. vanjskim iterativnim postupkom, kod kojeg se na početku svake vanjske iteracije računaju koeficijenti i desna strana sustava korištenjem vrijednosti nepoznanica iz prethodne vanjske iteracije.

U slučaju ortogonalne mreže, izraz (3.27) daje vrijednost normalnog gradijenta drugog reda točnosti. Pri tome se koriste samo vrijednosti zavisne varijable u težištima kontrolnih volumena kojima je promatrana stranica zajednička (ϕ_P i ϕ_N). Na taj način se čuva kompaktnost računске molekule.



Slika 3.5: Vektori $\mathbf{d}_f$ i $\mathbf{n}_f$ na neortogonalnoj mreži.

Da bi se na neortogonalnoj mreži zadržao drugi red točnosti i kompaktna računska molekula, uvodi se *neortogonalna korekcija*, na način da se normalni gradijent rastavi u dva dijela:

$$\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f = \Delta_f \cdot (\nabla \phi)_f + \mathbf{k}_f \cdot (\nabla \phi)_f, \quad (3.28)$$

gdje je vektor Δ_f paralelan s vektorom $\mathbf{d}_f$. Vektori Δ_f i $\mathbf{k}_f$ zadovoljavaju sljedeći uvjet:

$$\mathbf{n}_f = \Delta_f + \mathbf{k}_f. \quad (3.29)$$

Sada se prvi član na desnoj strani jednadžbe (3.28) može diskretizirati primjenom jednadžbe (3.27), dok se drugi član, koji predstavlja neortogonalnu korekciju, tretira eksplicitno:

$$\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f = \underbrace{|\Delta_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}_f|}}_{\text{Ortogonalni doprinos}} + \underbrace{\mathbf{k}_f \cdot (\nabla \phi)_f}_{\text{Neortogonalna korekcija}} \quad (3.30)$$

U ovom se radu koristi *nadrelaksacijska neortogonalna korekcija* [46], kod koje se vektor Δ_f određuje prema sljedećem izrazu:

$$\Delta_f = \frac{\mathbf{d}_f}{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{n}_f}. \quad (3.31)$$

U slučaju ortogonalne mreže $\Delta_f = \mathbf{n}_f$ i jednadžba (3.30) prelazi u jednadžbu (3.27).

Gradijent $(\nabla\phi)_f$ koji se u jednadžbi (3.30) koristi za računanje neortogonalne korekcije, određuje se interpolacijom gradijenata u težištima susjednih kontrolnih volumena primjenom centralne sheme diskretizacije:

$$(\nabla\phi)_f = f_x(\nabla\phi)_P + (1 - f_x)(\nabla\phi)_N. \quad (3.32)$$

Gradijenti u težištima kontrolnih volumena računaju se primjenom Gaussovog integralnog teorema:

$$(\nabla\phi)_P = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{n}_f \phi_f S_f, \quad (3.33)$$

gdje je ϕ_f vrijednost varijable ϕ na stranici kontrolnog volumena iz prethodne vanjske iteracije, koja se računa primjenom centralne sheme diskretizacije (3.18).

Izvorski član

Izvorski član sadrži sve ono što se ne može svrstati u konvekcijski, difuzijski i vremenski član. Općenito gledano, izvorski član s_ϕ je nelinearna funkcija zavisne varijable ϕ , pa ga se prije diskretizacije treba linearizirati:

$$s_\phi = s_{\phi u} + s_{\phi p} \phi, \quad (3.34)$$

gdje $s_{\phi u}$ i $s_{\phi p}$ mogu također ovisiti o ϕ . Prilikom linearizacije treba težiti da $s_{\phi p}$ ima vrijednost manju ili jednaku nuli (Patankar [61]).

Primjenjujući jednadžbu (3.13), volumni integral izvorskog člana po kontrolnom volumenu V_P računa se na sljedeći način:

$$\int_{V_P} s_\phi \, dV = s_{\phi u} V_P + s_{\phi p} V_P \phi_P. \quad (3.35)$$

3.3.2 Vremenska diskretizacija

Primjenom izraza (3.13), (3.16), (3.26) i (3.35), jednadžba (3.10) može se zapisati u sljedećem obliku:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho_P \phi_P V_P) = & - \sum_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \phi_f + \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f S_f \mathbf{n}_{f \bullet} (\nabla\phi)_f \\ & + s_{\phi u} V_P + s_{\phi p} V_P \phi_P \end{aligned} \quad (3.36)$$

Ova *poludiskretizirana* transportna jednađžba (Hirsch [40]) je u stvari obična diferencijalna jednađžba po vremenu.

Desna strana jednađžbe (3.36) označit će se zbog jednostavnosti s $F(t)$, gdje je uzeto u obzir da vrijednost zavisne varijable ϕ u računskim točkama i geometrijska svojstva ćelije ovise o vremenu. Jednađžba (3.36) može se dakle zapisati na sljedeći način:

$$\frac{d}{dt}(\rho_P \phi_P V_P) = F(t). \quad (3.37)$$

Vremenska diskretizacija jednađžbe (3.37) provodi se ovisno o odabranoj metodi vremenske diskretizacije na sljedećih načina (vidjeti npr. Hirsch [40]):

- **EksPLICITNA Eulerova metoda.** Derivacija po vremenu u trenutku t^n diskretizira se primjenom konačne razlike prema nazad (engl. backward difference) prvog reda točnosti, a vrijednos funkcije $F(t)$ se računa korištenjem poznatih vrijednosti zavisne varijable i svojstava ćelije u starom vremenskom trenutku:

$$\frac{\rho_P^n \phi_P^n V_P^n - \rho_P^o \phi_P^o V_P^o}{\Delta t} = F(t^o). \quad (3.38)$$

Ova metoda je uvjetno stabilna i prvog reda točnosti.

- **IMPLICITNA Eulerova metoda.** Diskretizacija vremenske derivacije je ista kao u prethodnoj metodi, a funkcija $F(t)$ se izražava u ovisnosti o vrijednostima zavisne varijable i svojstava ćelije u novom vremenskom trenutku:

$$\frac{\rho_P^n \phi_P^n V_P^n - \rho_P^o \phi_P^o V_P^o}{\Delta t} = F(t^n). \quad (3.39)$$

Ova metoda je prvog reda točnosti, bezuvjetno stabilna i ograničena.

- **CRANK–NICOLSONOVA metoda.** Diskretizacija vremenske derivacije je ista kao u prethodne dvije metode, a funkcija $F(t)$ se izražava kao srednja vrijednost funkcije u starom i novom vremenskom trenutku:

$$\frac{\rho_P^n \phi_P^n V_P^n - \rho_P^o \phi_P^o V_P^o}{\Delta t} = \frac{1}{2} [F(t^o) + F(t^n)]. \quad (3.40)$$

Crank–Nicolsonova metoda je drugog reda točnosti i bezuvjetno stabilna, ali ne garantira ograničenost rješenja.

- **Gearova metoda.** Derivacija po vremenu u trenutku t^n diskretizira se primjenom konačne razlike prema nazad drugog reda točnosti, a funkcija $F(t)$ se izražava u

ovisnosti o vrijednostima zavisne varijable i svojstava ćelije u novom vremenskom trenutku:

$$\frac{3\rho_P^n \phi_P^n V_P^n - 4\rho_P^o \phi_P^o V_P^o + \rho_P^{oo} \phi_P^{oo} V_P^{oo}}{2\Delta t} = F(t^n). \quad (3.41)$$

Gearova metoda je drugog reda točnosti, bezuvjetno je stabilna, ali ne garantira ograničenost rješenja.

Ako se npr. u jednadžbu (3.41) umjesto funkcije $F(t^n)$ stavi njeno pravo značenje, slijedi:

$$\begin{aligned} & \frac{3\rho_P^n \phi_P^n V_P^n - 4\rho_P^o \phi_P^o V_P^o + \rho_P^{oo} \phi_P^{oo} V_P^{oo}}{\Delta t} + \sum_f (\dot{m}_f^n - \rho_f^n \dot{V}_f^n) \phi_f^n \\ &= \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f^n S_f^n \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f^n + s_{\phi u}^n V_P^n + s_{\phi p}^n V_P^n \phi_P^n. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Jednadžba (3.42) predstavlja potpuno diskretiziranu opću transportnu jednadžbu za kontrolni volumen V_P .

3.3.3 Utjecaj pomicanja mreže

Transportna jednadžba (3.9) se može analizirati za slučaj kada je

$$\rho = \text{konst}, \quad \phi = 1, \quad \oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dS = 0 \quad \text{i} \quad s_\phi = 0. \quad (3.43)$$

Za ove uvjete transportna jednadžba mora biti egzaktno zadovoljena u integralnom i diskretiziranom obliku.

Ako se u jednadžbu (3.9) uvrste uvjeti (3.43), dobiva se zakon održanja prostora (2.11):

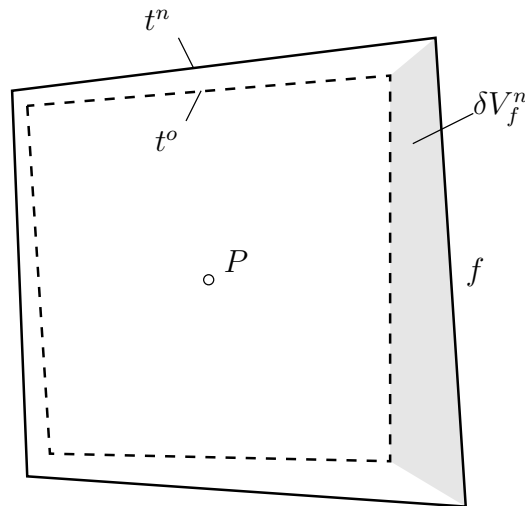
$$\frac{d}{dt} \int_V dV - \oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s \, dS = 0.$$

To znači da će transportna jednadžba biti egzaktno zadovoljena za gore definirane posebne uvjete kada je zadovoljen zakon održanja prostora.

Ako se u diskretiziranu transportnu jednadžbu (3.42) uvrste uvjeti (3.43), dobiva se sljedeći izraz:

$$\frac{3V_P^n - 4V_P^o + V_P^{oo}}{2\Delta t} - \sum_f \dot{V}_f^n = 0. \quad (3.44)$$

Ova jednadžba predstavlja diskretizirani zakon održanja prostora u kojem je metoda vremenske diskretizacije jednaka metodi vremenske diskretizacije transportne jednadžbe (Gearova metoda). Da bi se izbjeglo narušavanje valjanosti rješenja, jednadžba (3.44) mora biti egzaktno zadovoljena na razini svakog pokretnog kontrolnog volumena u mreži.



Slika 3.6: Položaj i oblik kontrolnog volumen u dva uzastupna vremenska trenutka.

Demirdžić i Perić [24] predlažu da se volumni tokovi stranica mreže $\dot{V}_f^n$ računaju eksplicitno na osnovi poznatog položaja kontrolnih volumena u početnom i novom vremenskom trenutku. Pretpostavimo da je poznat položaj promatrane ćelije P u vremenskim trenucima t^o i t^n , slika 3.6. Prirast volumena ćelije tijekom promatranog vremenskog perioda može se izraziti kao suma volumena δV_f^n , koje pripadajuće stranice obuhvate na putu od starog do novog položaja:

$$V_P^n - V_P^o = \sum_f \delta V_f^n. \quad (3.45)$$

Ako se ovaj izraz uvrsti u jednadžbu (3.44), dobiva se:

$$\frac{1}{2\Delta t} \sum_f (3\delta V_f^n - \delta V_f^o) = \sum_f \dot{V}_f^n, \quad (3.46)$$

iz čega slijedi zaključak da se volumni tok stranice f u trenutku t^n treba računati na sljedeći način:

$$\dot{V}_f^n = \frac{3}{2} \frac{\delta V_f^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\delta V_f^o}{\Delta t}, \quad (3.47)$$

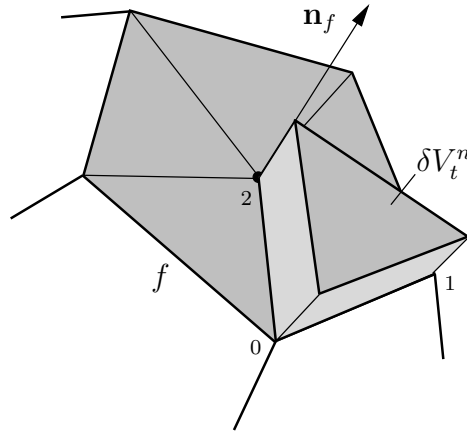
i to garantira egzaktno zadovoljavanje zakona održanja prostora u diskretiziranom obliku. Ukoliko se koristi Crank–Nicolsonova metoda vremenske diskretizacije, volumni tok

stranica mreže računa se prema sljedećem izrazu:

$$\dot{V}_f^n = 2 \frac{\delta V_f^n}{\Delta t} - \dot{V}_f^o, \quad (3.48)$$

gdje je $\dot{V}_f^o$ volumni tok stranica mreže iz prethodnog vremenskog trenutka. U slučaju korištenja implicitne Eulerove metode vremenske diskretizacije, volumni tok stranica mreže mora zadovoljavati sljedeći uvjet:

$$\dot{V}_f^n = \frac{\delta V_f^n}{\Delta t}. \quad (3.49)$$



Slika 3.7: Volumen δV_t^n za stranicu f .

Za poligonalnu konveksnu stranicu f volumen δV_f^n se računa kao suma volumena, koje svaki od trokuta koji čine stranicu obuhvati na putu od starog do novog položaja, slika 3.7:

$$\delta V_f^n = \sum_t \delta V_t^n, \quad (3.50)$$

gdje je δV_t^n volumen prizme kojoj je jedna baza trokut u starom položaju, a druga odgovarajući trokut u novom položaju. Volumen prizme se računa kao suma volumena tetraedara koji čine prizmu:

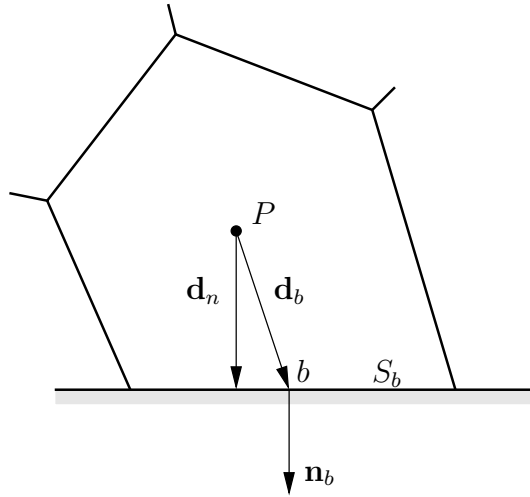
$$\begin{aligned} \delta V_t^n = & \frac{1}{6} (\mathbf{r}_{t0}^n - \mathbf{r}_{t0}^o) \cdot [(\mathbf{r}_{t1}^o - \mathbf{r}_{t0}^o) \times (\mathbf{r}_{t2}^o - \mathbf{r}_{t0}^o)] \\ & + \frac{1}{6} (\mathbf{r}_{t1}^n - \mathbf{r}_{t1}^o) \cdot [(\mathbf{r}_{t2}^o - \mathbf{r}_{t1}^o) \times (\mathbf{r}_{t0}^n - \mathbf{r}_{t1}^o)] \\ & + \frac{1}{6} (\mathbf{r}_{t2}^o - \mathbf{r}_{t2}^n) \cdot [(\mathbf{r}_{t1}^n - \mathbf{r}_{t2}^n) \times (\mathbf{r}_{t0}^n - \mathbf{r}_{t2}^n)]. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Da bi izraz (3.51) dao ispravan predznak volumena δV_t^n orijentacija trokuta koji čine stranicu mora odgovarati orijentaciji stranice.

3.3.4 Primjena graničnih uvjeta

U diskretiziranoj općoj transportnoj jednadžbi (3.42) pojavljuju se veličine ϕ_f i $\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f$ koje predstavljaju vrijednost zavisne varijable ϕ i njenog normalnog gradijenta na stranici f . Određivanje tih veličina objašnjeno je u sklopu diskretizacije prostornih integrala, ali samo za unutarnje stranice mreže. Za stranice koje se nalaze na granici prostorne domene te su vrijednosti definirane graničnim uvjetima.

Postoje dvije osnovne vrste graničnih uvjeta. Dirichletov granični uvjet zadaje vrijednost varijable na granici, a Neumannov granični uvjet zadaje normalni gradijent varijable na granici [40].



Slika 3.8: Parametri granične stranice.

Na slici 3.8 prikazan je kontrolni volumen kojemu se stranica b nalazi na granici prostorne domene. Uz graničnu stranicu vezan je vektor $\mathbf{d}_b = \overline{Pb}$, te vektor $\mathbf{d}_n$ koji je paralelan s normalom $\mathbf{n}_b$, a definiran je sljedećim izrazom:

$$\mathbf{d}_n = (\mathbf{n}_b \cdot \mathbf{d}_b) \mathbf{n}_b. \quad (3.52)$$

Kod primjene graničnih uvjeta pretpostavlja se da je vrijednost koja je zadana na graničnoj stranici konstantna na cijeloj stranici. Na taj se način izbjegava potreba uvođenja neortogonalne korekcije kod izračunavanja normalnog gradijenta.

Slijedi objašnjenje primjene graničnih uvjeta ovisno o tipu graničnog uvjeta i o članu transportne jednadžbe na koji se granični uvjet primjenjuje.

- **Dirichletov granični uvjet**

Na graničnoj stranici b zadaje se vrijednost zavisne varijable $\phi = \phi_b$. Ovo treba na odgovarajući način uzeti u obzir prilikom diskretizacije konvekcijskog i difuzijskog člana na graničnoj stranici.

- **Konvekcijski član.** Prema izrazu (3.16), konvekcijski član se diskretizira na sljedeći način:

$$\oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS = \sum_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \phi_f.$$

Prema tome, konvekcijski član na graničnoj stranici b ima sljedeću vrijednost:

$$(\dot{m}_b - \rho_b \dot{V}_b) \phi_b, \quad (3.53)$$

gdje je $\dot{m}_b$ apsolutni maseni tok kroz graničnu stranicu, a $\dot{V}_b$ je volumni tok granične stranice. Zbog stabilnosti, vrijednost zavisne varijable se može zadati samo u slučaju kada maseni tok ulazi u domenu na promatranoj graničnoj stranici, u suprotnom se mora zadati da je normalni gradijent jednak nuli.

- **Difuzijski član.** Difuzijski član se diskretizira prema izrazu (3.26):

$$\oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f S_f \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f.$$

Normalni gradijent na graničnoj stranici b se računa na sljedeći način:

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \phi)_b = \frac{\phi_b - \phi_P}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (3.54)$$

Prema tome, difuzijski član na graničnoj stranici b ima sljedeći oblik:

$$(\rho \Gamma_\phi)_b S_b \frac{\phi_b - \phi_P}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (3.55)$$

- **Neumannov granični uvjet**

Zadan je normalni gradijent zavisne varijable ϕ na graničnoj stranici b :

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \phi)_b = g_b. \quad (3.56)$$

Primjena ovog uvjeta ovisi o tome da li se radi o konvekcijskom ili difuzijskom članu transportne jednadžbe.

- **Konvekcijski član.** Za konvekcijski član potrebno je izračunati vrijednost zavisne varijable ϕ na graničnoj stranici:

$$\phi_b = \phi_P + |\mathbf{d}_n| g_b, \quad (3.57)$$

što znači da konvekcijski član na graničnoj stranici ima sljedeći oblik:

$$(\dot{m}_b - \rho_b \dot{V}_b) (\phi_P + |\mathbf{d}_n| g_b). \quad (3.58)$$

- **Difuzijski član.** Uzimanjem u obzir izraza (3.56), difuzijski član na graničnoj stranici ima sljedeći oblik:

$$(\rho \Gamma_\phi)_b S_b g_b. \quad (3.59)$$

3.4 Sustav linearnih algebarskih jednadžbi

Budući da ϕ_f^n i $\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f^n$ u jednadžbi (3.42) ovise o vrijednostima varijable ϕ u susjednim kontrolnim volumenima u vremenskom trenutku t^n , jednadžba (3.42) se može zapisati u obliku linearne (linearizirane) algebarske jednadžbe:

$$a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = r_P, \quad (3.60)$$

gdje je a_P dijagonalni (centralni) koeficijent, a_N susjedni koeficijent, a r_P desna strana koja sadrži one članove diskretizirane transportne jednadžbe koji se tretiraju eksplicitno. U slučaju primjene kombinirane sheme diskretizacije konvekcijskog člana i Gearove metode vremenske diskretizacije, koeficijenti a_P i a_N , te desna strana jednadžbe r_P definirani su sljedećim izrazima:

$$\begin{aligned} a_P = & \frac{3\rho_P^n V_P^n}{2\Delta t} + \sum_f (\dot{m}_f^n - \rho_f^n \dot{V}_f^n) [(1 - \gamma_f^n) \max(\text{sgn}(\dot{m}_f^n - \rho_f^n \dot{V}_f^n), 0) + \gamma_f^n f_x^n] \\ & + \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f^n S_f^n \frac{|\Delta_f^n|}{|\mathbf{d}_f^n|} - s_{\phi p}^n V_P^n, \end{aligned} \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} a_N = & (\dot{m}_f^n - \rho_f^n \dot{V}_f^n) [(1 - \gamma_f^n) \min(\text{sgn}(\dot{m}_f^n - \rho_f^n \dot{V}_f^n), 0) + \gamma_f^n (1 - f_x^n)] \\ & - (\rho \Gamma_\phi)_f^n S_f^n \frac{|\Delta_f^n|}{|\mathbf{d}_f^n|}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

$$r_P = \frac{4\rho_P^o V_P^o \phi_P^o - \rho_P^{oo} V_P^{oo} \phi_P^{oo}}{2\Delta t} + (\rho \Gamma_\phi)_f^n S_f^n \mathbf{k}_f \cdot (\nabla \phi)_f^n + s_{\phi u}^n V_P^n. \quad (3.63)$$

Jednadžba (3.60) se dobiva za svaki kontrolni volumen u mreži, što znači da se u konačnici diskretizacijom opće transportne jednadžbe na zadanoj računskoj mreži dobiva sustav linearnih algebarskih jednadžbi:

$$[A] \cdot \{\phi\} = \{r\}, \quad (3.64)$$

gdje je $[A]$ matrica sustava koja na dijagonali ima koeficijente a_P , a ispod i iznad dijagonale koeficijente a_N . Vektor $\{\phi\}$ sadrži vrijednosti zavisne varijable ϕ za sve kontrolne volumene u mreži, a vektor $\{r\}$ predstavlja desnu stranu (izvorski član) sustava, koji za sve kontrolne volumene u mreži sadrži diskretizirane članove transportne jednadžbe koji se tretiraju eksplicitno.

Matrica koeficijenata $[A]$ je tzv. rijetka matrica, u kojoj je većina koeficijenata jednaka nuli. Struktura popunjenosti matrice ovisi o redoslijedu označavanja kontrolnih volumena u mreži. Matematička svojstva matrice $[A]$ ovise o strukturi transportne jednadžbe, načinu diskretizacije i geometriji računске mreže. Diskretizacijom transportne jednadžbe (3.9) dobiva se *nesimetrična* matrica, a ukoliko jednadžba ne sadrži konvekcijski član matrica će biti *simetrična*. Diskretizacija pomoću opisane metode kontrolnih volumena na proizvoljnoj nestukturiranoj mreži garantira da će matrica sustava biti *pozitivno definitna*¹.

U slučaju kada se radi o simetričnoj matrici, linerani sustav će se rješavati pomoću iterativne metode *konjugiranih gradijenata* (CG – engl. conjugate gradient) koju su predložili Hestens i Steifel [38]. Ova metoda garantira da će broj iteracija² koji je potreban da se dobije egzaktno rješenje biti manji ili jednak broju jednadžbi u sustavu. Brzina konvergencije metode je obrnuto proporcionalna kondicionom broju matrice³ i može se poboljšati primjenom prekondicioniranja. U ovom će se radu koristiti ICCG metoda (Jacobs [43]) kod koje se uz CG postupak koristiti prekondicioniranje pomoću *nepotpune faktorizacije Choleskog*. U slučaju nesimetrične matrice, linearni sustav će se rješavati primjenom van der Vorstove [82] Bi-CGSTAB metode.

Svojstvo matrice o kojem ovisi efikasnost iterativnog postupka rješavanja je dijagonalna dominantnost. Matrica je dijagonalno jednaka ako je za svaku jednadžbu u sustavu

¹Za pozitivno definitnu matricu mora vrijediti $\{\phi\} \cdot [A] \cdot \{\phi\} > 0$ za bilo koji vektor $\{\phi\}$ različit od nule (Golub i Van Loan [29]).

²Iteracije koje se odnose na iterativni postupak rješavanja sustava linearnih algebarskih jednadžbi nazivaju se unutrašnjim iteracijama.

³Kondicioni broj matrice je definiran kao omjer između najveće i najmanje vlastite vrijednosti matrice.

zadovoljen uvjet:

$$|a_P| = \sum_N |a_N|. \quad (3.65)$$

Dodatno, ako za barem jednu jednadžbu vrijedi da je

$$|a_P| > \sum_N |a_N|, \quad (3.66)$$

onda je matrica dijagonalno dominantna. Kod strogo dijagonalno dominantne matrice, uvjet (3.66) mora biti zadovoljen za svaku jednadžbu u sustavu.

Poznato je da su dijagonalno dominantne matrice obično bolje uvjetovane (Golub i Van Loan [29]), što pozitivno djeluje na efikasnost njihovog rješavanja pomoću iterativnih metoda. Prema tome, da bi se poboljšala efikasnost iterativnog postupka rješavanja poželjno je da dijagonalna dominantnost bude što veća.

Na osnovi utjecaja pojedinih diskretiziranih članova transportne jednadžbe na dijagonalnu jednakost matrice, može se ocjenjivati ograničenost rješenja. Naime, dovoljan uvjet ograničenosti rješenja kaže da će se ograničenost očuvati kada se diskretizacijom dobiva matrica koja je dijagonalno jednaka, s pozitivnim dijagonalnim koeficijentima i negativnim koeficijentima ispod i iznad dijagonale, ili obrnuto. Budući da ovaj uvjet ne uzima u obzir izvorski član sustava, može ga se koristiti za ocjenu ograničenosti samo kod diskretizacije onih članova jednadžbe koji ne pridonose izvornom članu. Postojanje izvornog člana mijenja smisao uvjeta ograničenosti.

Analizirat će se utjecaj diskretizacije pojedinih članova transportne jednadžbe na dijagonalnu jednakost sustava jednadžbi:

- Vremenski član. Diskretizacija vremenskog člana daje doprinos samo dijagonalnom koeficijentu i izvornom članu sustava, te na taj način povećava dijagonalnu dominantnost. Iz jednadžbe (3.42) se vidi da diskretizacija vremenskog člana dodaje vrijednost $\frac{\rho^n V_P^n}{\Delta t}$ u dijagonalni koeficijent, što znači da se smanjenjem vremenskog koraka povećava dijagonalna dominantnost sustava jednadžbi.
- Konvekcijski član. Diskretizacija konvekcijskog člana daje dijagonalno jednaku matricu samo onda kada se koristi uzvodna shema diskretizacije. U slučaju centralne sheme diskretizacije matrica ne zadovoljava uvjet ograničenosti.
- Difuzijski član. Diskretizacija difuzijskog člana na ortogonalnoj mreži daje dijagonalno jednaku matricu koja zadovoljava uvjet ograničenosti. U slučaju neortogo-

nalne mreže matrica ostaje dijagonalno jednaka, ali, budući da se neortogonalna korekcija dodaje u izvorski član sustava, dijagonalna jednakost više nije dovoljna za očuvanje ograničenosti rješenja.

- Izvorski član. Ako je $s_{\phi p} < 0$, diskretizacija izvorskog člana povećava dijagonalnu dominantnost matrice i izraz $s_{\phi p} V_P$ se stavlja u dijagonalni koeficijent. U slučaju kada je $s_{\phi p} > 0$ cijeli se izvorski član stavlja u izvorski član (desnu stranu) sustava.

Pokazano je da se dijagonalna dominantnost može povećati smanjenjem vremenskog koraka Δt . Isto se može postići i uvođenjem *implicitne podrelaksacije* (Patankar [61]). Dijagonalna dominantnost se povećava dodavanjem umjetnog člana na lijevu i desnu stranu jednadžbe (3.60):

$$a_P \phi_P^n + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = r_P + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_P \phi_P^p, \quad (3.67)$$

odnosno

$$\frac{a_P}{\alpha_\phi} \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = r_P + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_P \phi_P^p, \quad (3.68)$$

gdje je ϕ_P^p vrijednost varijable ϕ iz prethodne vanjske iteracije, a α_ϕ je podrelaksacijski faktor ($0 < \alpha_\phi < 1$). Dodatni članovi ne utječu na konačno rješenje jer se poništavaju kad je postignuto točno rješenje ($\phi_P^p = \phi_P^n$).

3.5 Postupak rješavanja na paralelnim računalima

Paralelni postupak rješavanja temelji se na metodi dekompozicije prostorne domene (Kaluđerčić [51]). Globalna domena tj. mreža kontrolnih volumena, dijeli se na niz subdomena (slika 3.9), tako da granica između pojedinih subdomena prolazi unutrašnjim stranicama kontrolnih volumena. Svaka od subdomena se dodjeljuje jednom procesoru paralelnog računala. Postupak diskretizacije i rješavanja na pojedinim subdomenama je identičan onom, koji se koristi na jedinstvenoj globalnoj domeni. Razlika postoji samo na granicama između subdomena (međuprocorska granica), gdje postupak zahtijeva razmjenu informacija između procesora. Razmjena informacija se odvija korištenjem MPI (engl. message passing interfaces) protokola razmjene (prosljeđivanja) poruka (Gropp *et al.* [30]).

nikaciju) između procesora.

Druga razina paralelizacije odnosi se na rješavanje sustava linearnih algebarskih jednadžbi. Analizom CG postupka (slika 3.10) može se vidjeti da on sadrži nekoliko operacija koje zahtijevaju poseban tretman u slučaju paralelnog rješavanja. To su sljedeće operacije:

- gradnja matrice prekondicioniranja M i njena inverzija (M^{-1}),
- unutrašnji produkt dvaju vektora (npr. $\rho^{i-1} = r^{i-1} \bullet z^{i-1}$),
- unutrašnji produkt matrice i vektora (npr. $q^i = A \bullet p^i$).

```


$$r^0 = b - A \bullet x^0$$

for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{i-1} = M^{-1} \bullet r^{i-1}$ 
   $\rho^{i-1} = r^{i-1} \bullet z^{i-1}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^1 = z^0$ 
  else
     $\beta^{i-1} = \rho^{i-1} / \rho^{i-2}$ 
     $p^i = z^{i-1} + \beta^{i-1} p^{i-1}$ 
  endif
   $q^i = A \bullet p^i$ 
   $\gamma^i = p^i \bullet q^i$ 
   $\alpha^i = \rho^{i-1} / \gamma^i$ 
   $x^i = x^{i-1} + \alpha^i p^i$ 
   $r^i = r^{i-1} + \alpha^i q^i$ 
  provjera konvergencije
end

```

Slika 3.10: CG postupak s prekondicioniranjem za rješavanje linearnog sustava algebarskih jednadžbi $A \bullet x = b$.

Postupak gradnje matrice prekondicioniranja pomoću nepotpune faktorizacije Choleskog prilagođen je paralelnom postupku rješavanja, tako da se zanemaruju tzv. međuprocorski članovi faktora Choleskog. Na taj se način inverzija matrice prekondicioniranja može na svakom procesoru provesti nezavisno o ostalim procesorima. Ova modifikacija uzrokuje određeno smanjenje efikasnosti CG rješavača, ali je konvergencija još uvijek

bolja nego u slučaju kada se koristi dijagonalna matrica prekondicioniranja. Ukoliko se koristi dijagonalno prekondicioniranje, brzine konvergencije rješenja na paralelnom i jednom računalu bit će iste.

Unutrašnji produkt dvaju vektora provodi se nezavisno na svakom procesoru. Nakon toga se parcijalni rezultati šalju prvom (master) procesoru, koji od njih pravi globalni unutrašnji produkt, te ga šalje nazad svakom od procesora. Prema tome ova operacija zahtijeva provedbu globalne sume preko svih procesora.

Unutrašnji produkt matrice i vektora se također provodi nezavisno na svakom procesoru uz uvjet da je prije toga izvršena obnova odgovarajućih međuprocorskih vektora. Međuprocorski koeficijenti matrice $[A]$ čuvaju se u međuprocorskim vektorima.

3.6 Zaključak

Opisana je metoda kontrolnih volumena koja podržava proizvoljnu nestrukturiranu pomičnu mrežu. Mreža se sastoji iz kontrolnih volumena proizvoljnog poliedarskog oblika, ograničenih proizvoljnim brojem konveksnih stranica. Definicija mreže se temelji na adresiranju po stranicama kontrolnih volumena. Objašnjeni su i postupci računanja svojstava mreže koji uzimaju u obzir neravnost stranica, te su navedeni kriteriji prema kojima se provodi kontrola topološke i geometrijske valjanosti mreže.

U odjeljku 3.3, opisana je diskretizacija opće transportne jednažbe. Diskretizacija prostornih integrala je drugog reda točnosti i na neortogonalnoj mreži. Prikazana je vremenska diskretizacija primjenom implicitne Eulerove, Crank–Nicolsonove i Gearove metode. Pomicanje mreže je uključeno u diskretizaciju transportne jednažbe preko volumnih tokova stranica mreže. Opisan je postupak za računanje tokova stranica mreže koji garantira zadovoljavanje diskretiziranog zakona održanja prostora. Postupak diskretizacije je zaključen s primjenom graničnih uvjeta.

U odjeljku 3.4, analizirana su matematička svojstva sustava linearnih algebarskih jednažbi koji se dobiva diskretizacijom transportne jednažbe. Promatran je utjecaj diskretizacije pojedinih članova jednažbe na svojstva matrice sustava.

Na kraju poglavlja ukratko je opisan postupak diskretizacije i rješavanja na paralelnim računalima. Postupak se temelji na dekompoziciji prostorne domene rješavanja.

Poglavlje 4

Automatsko pomicanje mreže

4.1 Uvod

U 3. je poglavlju opisana metoda kontrolnih volumena u obliku koji je prilagođen rješavanju takvih problema mehanike kontinuuma, kod kojih prostorna domena mijenja oblik tijekom vremena. Metoda zahtijeva da se računska mreža tijekom simulacije prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene tako, da topologija mreže ostane nepromijenjena. Zahvaljujući formulaciji zakona održanja za proizvoljni volumen, problem pomicanja mreže (sekundarni problem) se može rješavati odvojeno od problema gibanja kontinuuma (primarni problem). U ovom je poglavlju predložena pouzdana automatska metoda pomicanja mreže, koja je kompatibilna s opisanom metodom kontrolnih volumena i s pripadajućom proizvoljnom nestrukturiranom mrežom.

Zadatak metode pomicanja mreže je da odredi pomake unutrašnjih čvorova mreže na osnovi zadanih pomaka graničnih čvorova uz očuvanje valjanosti i kvalitete kontrolnih volumena u mreži. Metoda pomicanja mreže može se smatrati *pouzdanom* ako postoji garancija da, uz dovoljno malu amplitudu pomaka granice prostorne domene između dva koraka nestacionarne simulacije, neće doći do nastajanja ćelija negativnih volumena. Iako je pouzdanost nužno svojstvo svake metode pomicanja mreže, ono nije i dovoljno. Metoda mora osigurati i zadovoljavajuću razinu *kvalitete* kontrolnih volumena u mreži, budući da o tome ovise efikasnost postupka rješavanja i točnost numeričkog rješenja [46] primarnog problema. Ako je metoda pouzdana, i generira mrežu zadovoljavajuće kvalitete za proizvoljnu promjenu oblika geometrijski komplicirane prostorne domene, uz mini-

malnu intervenciju od strane korisnika, onda se ta metoda može smatrati *automatskom*.

Osnovna su obilježja svake metode pomicanja mreže matematički model koji definira pomak mreže (jednadžba pomaka) i metoda diskretizacije jednadžbe pomaka u slučaju kada se radi o parcijalnoj diferencijalnoj jednadžbi. Sprega ovih dvaju čimbenika određuje svojstva neke metode pomicanja mreže.

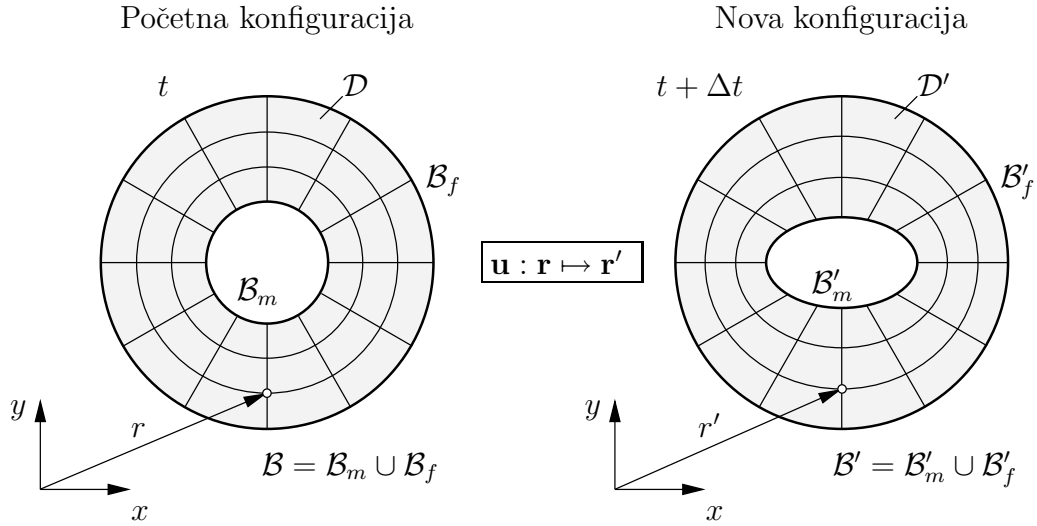
Ostatak poglavlja strukturiran je na sljedeći način. U odjeljku 4.2 definiran je problem pomicanja mreže, a u odjeljku 4.3 dan je pregled postojećih jednadžbi pomaka. Nova automatska metoda pomicanja mreže opisana je u odjeljku 4.4. Testiranje predložene automatske metode pomicanja mreže provedeno je u odjeljku 4.5 na nekoliko jednostavnih 2-D i 3-D primjera. Zaključci ovog poglavlja navedeni su u odjeljku 4.6.

4.2 Definicija problema pomicanja mreže

Kao što je rečeno u uvodu ovog poglavlja, postupak pomicanja mreže služi za određivanje pomaka unutrašnjih čvorova mreže na osnovi zadanih pomaka graničnih čvorova, i to tako, da nova pomaknuta mreža očuva valjanost i zadovoljavajuću geometrijsku kvalitetu. Da bi se moglo pristupiti numeričkom rješavanju ovog problema potrebno ga je matematički definirati.

Neka u vremenskom trenutku t postoji prostorna domena $\mathcal{D}$ s odgovarajućom granicom $\mathcal{B}$ (slika 4.1). Tijekom vremenskog koraka Δt domena $\mathcal{D}$ deformira se u domenu $\mathcal{D}'$ s odgovarajućom granicom $\mathcal{B}'$. Traži se takvo *preslikavanje* s $\mathcal{D}$ na $\mathcal{D}'$ da se valjana mreža na $\mathcal{D}$ preslika u valjanu mrežu na $\mathcal{D}'$ uz minimalnu distorziju kontrolnih volumena.

Najprije je potrebno odabrati zavisnu varijablu pomoću koje će se definirati preslikavanje s početne na konačnu konfiguraciju prostorne domene. Na raspolaganju je ili položaj $\mathbf{r}$ ili pomak $\mathbf{u}$ čvorova mreže. Neka je npr. zadan problem pomicanja mreže za nepokretnu domenu. U takvom će slučaju rješenje problema s pomakom kao zavisnom varijablom biti trivijalno i jednako nuli po cijeloj domeni, što znači da će i mreža ostati nepromijenjena. Ako bi se pak kao zavisna varijabla koristio položaj $\mathbf{r}$, te ako položaj čvorova u početnoj konfiguraciji mreže ne bi zadovoljavao odabranu jednadžbu deformacije, dobili bi se konačni pomaci čvorova. Ova pojava može uzrokovati neželjenu preraspodjelu čvorova, odnosno promjenu rezolucije mreže.



Slika 4.1: Uz definiciju problema pomicanja mreže.

U ovom će se radu za definiranje pomicanja mreže kao zavisna varijabla koristiti pomak $\mathbf{u}$. Položaj čvorova mreže u konačnoj konfiguraciji određuje se na sljedeći način:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{u}, \quad (4.1)$$

gdje je $\mathbf{r} \in \mathcal{D}$, a $\mathbf{r}' \in \mathcal{D}'$. Pomak graničnih čvorova mreže računa se iz trenutnog i željenog položaja čvorova.

Navedeno omogućuje da se problem deformacije mreže može formulirati kao *stacionarni rubni problem* na sljedeći način: treba odrediti takvo polje pomaka $\mathbf{u}$, da je

$$\Phi(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad \text{u} \quad \mathcal{D}, \quad (4.2)$$

$$\Sigma(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad \text{na} \quad \mathcal{B} = \partial\mathcal{D}, \quad (4.3)$$

gdje je jednačba (4.2) matematički model pomaka mreže, a jednačba (4.3) granični uvjet za polje pomaka.

Ovako postavljen problem pomicanja mreže najčešće se rješava tako, da se jednačba pomaka (4.2) diskretizira na mreži početne konfiguracije prostorne domene, Lynch i O'Neill [56]. Sackinger, Schunk i Rao [70] koriste nešto zahtjevniji pristup, gdje se diskretizacija jednačbe pomaka provodi na mreži konačne konfiguracije.

Tipovi graničnih uvjeta koji se mogu koristiti uz jednačbu pomaka ovise o vrsti jednačbe. Najčešće se kao jednačba deformacije koristi eliptična parcijalna diferencijalna jednačba drugog reda, pa će se ovdje razmotriti granični uvjeti koji odgovaraju tom tipu jednačbe, a svojstveni su za problem pomicanja mreže.

Kod eliptične parcijalne diferencijalne jednačbe drugog reda na istoj je granici dozvoljeno koristiti Dirichletov ili Neumannov granični uvjet. Ako se radi o vektorskoj jednačbi moguća je i kombinacija ova dva tipa graničnih uvjeta, i to tako, da na jednu komponentu vektorske varijable djeluje npr. Dirichletov granični uvjet, a na drugu Neumannov. Dekompozicija vektora u komponente je proizvoljna.

Treba razlikovati dio granice $\mathcal{B}_m$ prostorne domene koja se pomiče od dijela granice $\mathcal{B}_f$ koji tijekom simulacije ne mijenja svoj oblik. Na pomičnoj granici $\mathcal{B}_m$ najčešće se zadaje Dirichletov tip graničnog uvjeta:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_m \quad \text{na} \quad \mathcal{B}_m, \quad (4.4)$$

gdje je $\mathbf{u}_m$ pomak pomične granice. Dirichletov granični uvjet može se primijeniti i za nepomičnu granicu $\mathcal{B}_f$:

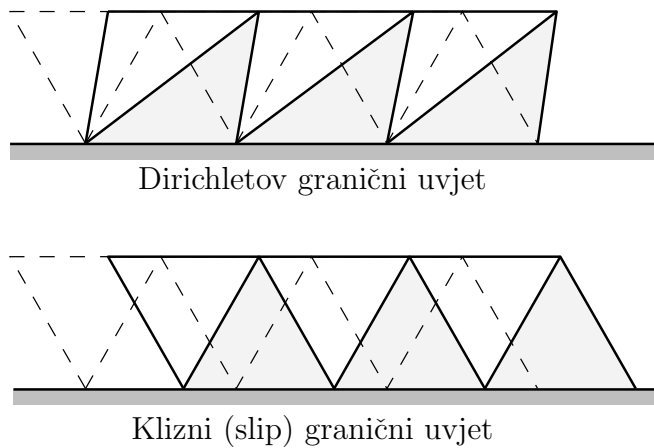
$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{na} \quad \mathcal{B}_f, \quad (4.5)$$

međutim, ako konkretna situacija dozvoljava, najbolje je koristiti tzv. klizni (engl. slip) granični uvjet, gdje se za normalnu komponentu brzine koristi Dirichletov granični uvjet:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{na} \quad \mathcal{B}_f, \quad (4.6)$$

dok se za tangencijalnu komponentu koristi Neumannov granični uvjet:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla [(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{u}] = 0 \quad \text{na} \quad \mathcal{B}_f. \quad (4.7)$$



Slika 4.2: Usporedba Dirichletovog i kliznog graničnog uvjeta na nepomičnoj granici.

Prednost je kliznog graničnog uvjeta, u odnosu na Dirichletov, u znatno manjoj distorziji kontrolnih volumena uz nepomičnu granicu, što je prikazano na slici 4.2. S druge strane, treba voditi računa da zbog primjene kliznog graničnog uvjeta može doći do neželjene promjene rezolucije mreže uzduž granice na kojoj se taj granični uvjet primjenjuje. Nedostatak kliznog graničnog uvjeta je i to, da ga je teško primijeniti na zakrivljenoj granici.

Od ostalih graničnih uvjeta još treba spomenuti granični uvjet na ravnini simetrije, koji je identičan gore opisanom kliznom graničnom uvjetu.

4.3 Pregled matematičkih modela pomaka mreže

Najjednostavniji postupak pomicanja mreže temelji se na primjeni algebarske jednadžbe pomaka koja na eksplicitan način povezuje pomake unutrašnjih čvorova mreže s pomakom jednog ili više graničnih čvorova [18, 7, 32]. Vrsta jednadžbe se ne može općenito definirati, nego ovisi o konkretnom problemu, a primjena ovog pristupa je ograničena na takve probleme kod kojih je promjena oblika prostorne domene relativno jednostavna. Jedina prednost ovakvog pristupa je u efikasnom računanju pomaka čvorova.

Pokušaji razvoja automatske metode pomicanja mreže rezultirali su s nekoliko karakterističnih jednadžbi pomaka. Jedna skupina jednadžbi proizlazi iz fiktivne zamjene mreže s diskretnim elastičnim sustavom, gdje je jednadžba pomaka jednadžba statičke ravnoteže tog sustava. Jednadžbe pomaka koje pripadaju u ovu skupinu temelje se na tzv. *analogiji tlačno – vlačnih opruga* [5] ili na tzv. *analogiji torzijskih opruga* [27].

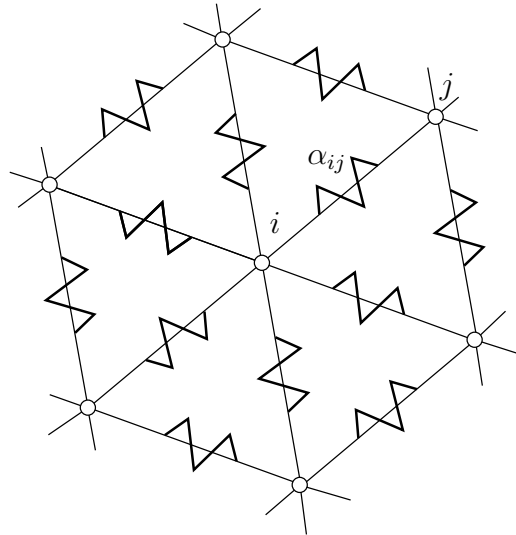
Kao jednadžba pomaka često se koristi i *jednadžba statičke ravnoteže elastičnog tijela* [56], koja proizlazi iz fiktivne zamjene prostorne domene s kontinuiranim elastičnim tijelom. Postoje i primjeri primjene *Laplaceova jednadžba* [55]. Za spomenute jednadžbe pomaka karakteristično je da imaju svojstva eliptične parcijalne diferencijalne jednadžbe drugog reda, u diskretnom ili kontinuiranom obliku. S ciljem ispravljanja nekih nedostataka koji su primijećeni kod eliptičnih jednadžbi zabilježena je primjena *biharmoničke jednadžbe* [37].

Navedeni matematički modeli pomaka mreže detaljnije su opisani u sljedećim odjeljcima.

4.3.1 Analogija tlačno – vlačnih opruga

Metodu deformacije mreže koja se temelji na analogiji tlačno – vlačnih opruga predložio je Batina [5]. On je metodu koristio na 2-D nestrukturiranoj mreži, sastavljenoj od trokutnih kontrolnih volumena, primjenjujući je za rješavanje problema prisilnih vibracija aerodinamičkog profila. Nakon njega mnogi istraživači [65, 36, 88, 63] koriste tu metodu za rješavanje problema s promjenjivom prostornom domenom.

Analogija tlačno – vlačnih opruga temelji se na fiktivnoj zamjeni mreže s diskretnim elastičnim sustavom, tako da se svakoj spojnici dva čvora mreže (engl. edge) pridruži tlačno – vlačna opruga (slika 4.3). Odgovarajuća jednadžba pomaka je jednadžba statičke ravnoteže tog elastičnog sustava.



Slika 4.3: Analogija tlačno – vlačnih opruga.

Postoje dvije osnovne varijante analogije tlačno–vlačnih opruga [10], koje se razlikuju po ravnotežnoj duljini opruga. Kod jedne varijante ta je ravnotežna duljina jednaka nuli, pa je zbog toga sila kojom čvor j djeluje na čvor i jednaka:

$$\mathbf{F}_{ij} = \alpha_{ij} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i), \quad (4.8)$$

gdje je α_{ij} krutost opruge, a $\mathbf{r}_i$ i $\mathbf{r}_j$ su vektori položaja čvorova i i j . Da bi sustav bio u ravnoteži, mora suma svih sila u svakom čvoru i biti jednaka nuli, tj.

$$\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) = \mathbf{0}, \quad i = 1, n, \quad (4.9)$$

gdje je m broj susjednih čvorova za čvor i , a n ukupan broj čvorova mreže. Krutost opruge α_{ij} se kod ove varijante najčešće uzima kao konstantna [10].

Kod ove varijante analogije tlačno – vlačnih opruga treba voditi računa o tome da se mogu dobiti konačni pomaci unutrašnjih čvorova mreže i za nepokretnu granicu prostorne domene.

Druga varijanta analogije tlačno – vlačnih opruga [5] za ravnotežnu duljinu opruge koristi početnu duljinu spojnice između dva čvora, tj. pretpostavlja se da je u početnoj konfiguraciji sustav bio u ravnoteži. U tom se slučaju sila kojom čvor j djeluje na čvor i može izraziti jednadžbom:

$$\mathbf{F}_{ij} = \alpha_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad (4.10)$$

gdje su $\mathbf{u}_i$ i $\mathbf{u}_j$ pomaci čvorova i i j . I u ovom slučaju, da bi cijeli sustav nakon pomaka granice prostorne domene bio u ravnoteži, mora suma svih sila u svakom čvoru i biti jednaka nuli, tj.

$$\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) = \mathbf{0}, \quad i = 1, n. \quad (4.11)$$

Batina [5] predlaže da krutost opruge bude obrnuto proporcionalna početnoj duljini spojnice između dva čvora:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{|\mathbf{r}_i^o - \mathbf{r}_j^o|}, \quad (4.12)$$

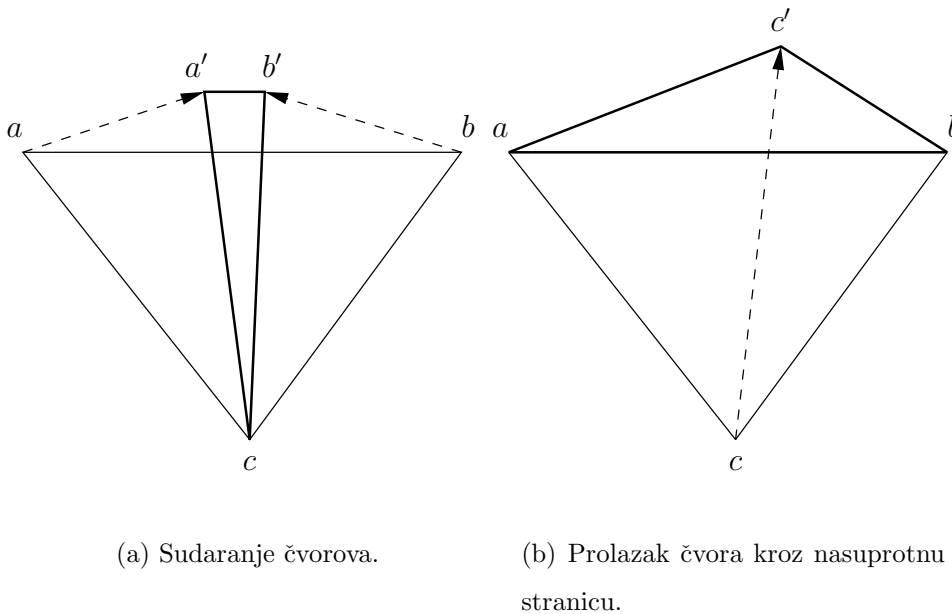
gdje je $\mathbf{r}_i^o$ položaj čvora i u početnoj konfiguraciji mreže.

Budući da je krutost opruge konstantna tijekom pomicanja mreže između dva vremenska trenutka nestacionarne simulacije, sustavi algebarskih jednadžbi (4.9) i (4.11) su linearni.

Analogija tlačno–vlačnih opruga se često koristi za pomicanje mreže, naročito uz metodu kontrolnih volumena [5, 88, 63], zbog nekoliko razloga:

- Računanje koeficijenata sustava linearnih algebarskih jednadžbi je jednostavno i učinkovito. Dovoljno je poznavati samo vektore položaja čvorova i susjedne čvorove svakog čvora. To ujedno znači da teorijski nema ograničenja s obzirom na vrstu kontrolnog volumena koji se smije koristiti;
- Pomaci se dobivaju upravo u čvorovima mreže;

- Ne postoji zavisnost (engl. coupling) između komponenata pomaka, što znači da se sustav jednačbi može rješavati odvojeno, komponentu po komponentu. Matrica sustava linearnih algebarskih jednačbi jednaka je za sve tri komponente pomaka;
- Matrica sustava linearnih algebarskih jednačbi je simetrična i dijagonalno dominantna, što znači da se sustav može efikasno riješiti pomoću iterativnog rješavača za simetrične matrice.



Slika 4.4: Oblici narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena.

Iz jednačbe (4.12) se vidi da s međusobnim približavanjem susjednih čvorova mreže krutost opruge teži u beskonačnost, te se odgovarajuća opruga pomiče bez deformacije. Ovakva definicija krutosti opruge ima za cilj sprečavanje međusobnog sudaranja čvorova. Sudaranje čvorova je jedan od potencijalnih načina narušavanja valjanosti geometrije kontrolnih volumena, slika 4.4(a). Bitno je naglasiti da je ovaj način sprečavanja međusobnog sudaranja čvorova mreže učinkovit samo pri dovoljno malom vremenskom koraku, odnosno uz dovoljno malu amplitudu pomicanja graničnih čvorova u jednom vremenskom koraku nestacionarne simulacije. Ovo ograničenje je posljedica eksplicitnog tretiranja izraza za računanje krutosti opruge (4.12).

Može se pokazati da analogija tlačno – vlačnih opruga s krutošću koja je definirana izrazom (4.12) ne može spriječiti narušavanje valjanosti kontrolnog volumena do kojeg

dolazi prolazom čvora kroz nasuprotnu stranicu, slika 4.4(b). Razlog je u tome, što krutost opruge neće težiti u beskonačnost s približavanjem čvora c stranici ab , jer u takvoj situaciji duljine stranica ac i bc ne teže nužno nuli. To znači da se takav način inverzije kontrolnih volumena ne može spriječiti niti smanjenjem vremenskog koraka nestacionarne simulacije.

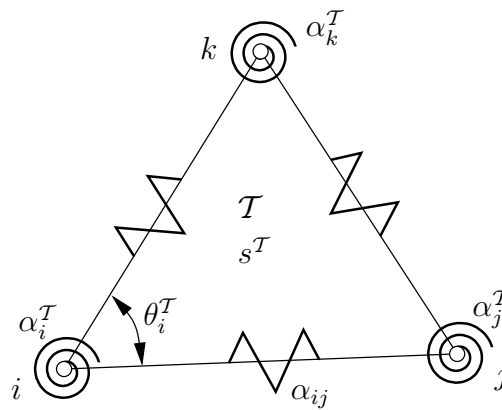
4.3.2 Analogija torzijskih opruga

Farhat *et al.* [27] predložu analogiju torzijskih opruga, kao poboljšanje analogije tlačno – vlačnih opruga za nestrukturiranu 2-D mrežu sastavljenu od trokutnih kontrolnih volumena. Oni kao glavnu slabost analogije tlačno – vlačnih opruga navode to, što krutost opruge nije vezana niti uz površinu, niti uz kuteve trokuta, pa ne postoji prepreka prolazu čvora kroz nasuprotnu stranicu. Kao rješenje predlažu da se, uz tlačno – vlačne opruge, koje su pridružene svakoj spojnici dva čvora, u svakom čvoru i , za svaki trokut $\mathcal{T}$ povezan s i , dodaju torzijske opruge, kojima je krutost definirana na sljedeći način:

$$\alpha_i^{\mathcal{T}} = \frac{1}{(1 + \cos \theta_i^{\mathcal{T}})(1 - \cos \theta_i^{\mathcal{T}})} = \frac{1}{\sin^2 \theta_i^{\mathcal{T}}}, \quad (4.13)$$

gdje je $\theta_i^{\mathcal{T}}$ kut između spojnica $i-j$ i $i-k$ (slika 4.5). Svakom čvoru i je pridruženo onoliko torzijskih opruga, koliko mu pripada trokuta.

Budući da $\alpha_i^{\mathcal{T}} \rightarrow \infty$ kada $\theta_i^{\mathcal{T}} \rightarrow \pi$ ili $\theta_i^{\mathcal{T}} \rightarrow 0$, torzijska opruga koja je pridružena čvoru i sprečava sve čvorove odgovarajućeg trokuta da prođu kroz njima nasuprotne stranice.



Slika 4.5: Trokut s pridruženim torzijskim oprugama.

Matematička formulacija analogije torzijskih opruga izvedena je pod pretpostavkom malih deformacija mreže. To omogućava korištenje linearne ovisnosti promjene kuteva

između stranica trokuta $\Delta\theta^T$ o pomaku čvorova trokuta $\mathbf{u}^T$:

$$\Delta\theta^T = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{u}^T, \quad (4.14)$$

gdje je

$$\Delta\theta^T = \begin{bmatrix} \Delta\theta_i^T \\ \Delta\theta_j^T \\ \Delta\theta_k^T \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{R}^T = \begin{bmatrix} y_{ik} - y_{ij} & x_{ij} - x_{ik} & y_{ij} & -x_{ij} & -y_{ik} & x_{ik} \\ -y_{ji} & x_{ji} & y_{ji} - y_{jk} & x_{jk} - x_{ji} & y_{jk} & -x_{jk} \\ y_{ki} & -x_{ki} & -y_{kj} & x_{kj} & y_{kj} - y_{ki} & x_{ki} - x_{kj} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{u}^T = \begin{bmatrix} (\mathbf{u}_i)_x \\ (\mathbf{u}_i)_y \\ (\mathbf{u}_j)_x \\ (\mathbf{u}_j)_y \\ (\mathbf{u}_k)_x \\ (\mathbf{u}_k)_y \end{bmatrix},$$

$$x_{ij} = \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)_x}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2}, \quad y_{ij} = \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)_y}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2}.$$

Nadalje, pretpostavlja se da je sustav u početnoj konfiguraciji u stanju statičke ravnoteže, pa se momenti $\mathbf{M}^T$ torzijskih opruga koje su pridružene čvorovima trokuta $\mathcal{T}$ mogu izraziti na sljedeći način:

$$\mathbf{M}^T = \boldsymbol{\alpha}^T \cdot \Delta\theta^T = [\boldsymbol{\alpha}^T \cdot \mathbf{R}^T] \cdot \mathbf{u}^T, \quad (4.15)$$

gdje je

$$\mathbf{M}^T = \begin{bmatrix} M_i^T \\ M_j^T \\ M_k^T \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\alpha}^T = \begin{bmatrix} \alpha_i^T & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_j^T & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_k^T \end{bmatrix}.$$

Na kraju, da bi se omogućilo superponiranje tlačno – vlačnih i torzijskih opruga, provedena je transformacija momenata u ekvivalentne sile, na način da rad ekvivalentnih sila bude jednak radu momenata. Prema tome, ekvivalentne sile $\mathbf{F}^T$ torzijskih opruga koje su pridružene čvorovima trokuta $\mathcal{T}$ se mogu izraziti na sljedeći način:

$$\mathbf{F}^T = \left[(\mathbf{R}^T)^T \cdot \boldsymbol{\alpha}^T \cdot \mathbf{R}^T \right] \cdot \mathbf{u}^T, \quad (4.16)$$

gdje je

$$\mathbf{F}^T = \begin{bmatrix} (\mathbf{F}_i)_x \\ (\mathbf{F}_i)_y \\ (\mathbf{F}_j)_x \\ (\mathbf{F}_j)_y \\ (\mathbf{F}_k)_x \\ (\mathbf{F}_k)_y \end{bmatrix}.$$

Iz izraza (4.16) može se uočiti da npr. komponenta x sile u čvoru i ovisi o svim komponentama pomaka. Prema tome, jednadžba statičke ravnoteže, odnosno jednadžba deformacije mreže koja proizlazi iz analogije torzijskih opruga, uvodi zavisnost između komponenta pomaka, značajno komplicirajući postupak rješavanja u odnosu na analogiju tlačno – vlačnih opruga.

Farhat *et al.* [27] na nekoliko primjera pokazuju da kombinacija aksijalnih i torzijskih opruga uspješno sprečava sve oblike narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena (slika 4.4). Treba voditi računa da se izraz (4.13) za računanje krutosti torzijskih opruga tretira eksplicitno, jer koristi kuteve između stranica trokuta u početnoj konfiguraciji mreže. To znači da se ovakvim pristupom narušavanje valjanosti trokutnih kontrolnih volumena može spriječiti samo uz dovoljno mali vremenski korak nestacionarne simulacije.

Opisana analogija torzijskih opruga u originalnom je obliku primjenjiva samo na dvodimenzijisku mrežu sastavljenu od trokutnih elemenata. Degand i Farhat [21] proširuju analogiju torzijskih opruga na nestrukturiranu 3-D mrežu sastavljenu od tetraedara. Da bi se kontrolirali svi mogući mehanizmi narušavanja valjanosti tetraedarskog elementa predlaže se takav pristup, u kojem se torzijske opruge pridružuju čvorovima svih trokuta koji se postavljaju u tetraedar. Predlaže se konfiguracija od 4 ili 12 trokuta po tetraedru.

4.3.3 Jednadžba ravnoteže elastičnog tijela

Prostorna se domena u početnoj konfiguraciji može fiktivno zamijeniti s elastičnim tijelom koje je u stanju statičke ravnoteže. Ako se to elastično tijelo "optereti" sa zadanim pomacima granice prostorne domene, mogu se pomaci unutrašnjih točaka dobiti rješavanjem odgovarajuće jednadžbe statičke ravnoteže. Ovu su ideju prvi puta primijenili Lynch i O'Neill [56], a kasnije je u sličnim oblicima često korištena u drugim radovima [50, 70, 6, 13].

Jednadžba statičke ravnoteže za deformabilno kruto tijelo može se napisati u obliku:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (4.17)$$

gdje je $\boldsymbol{\sigma}$ tenzor naprezanja. Za izotropni linearno elastični materijal i male deformacije ovisnost naprezanja o deformaciji se izražava s poopćenim Hookovim zakonom:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} + \lambda \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I}, \quad (4.18)$$

gdje je $\mathbf{I}$ jedinični tenzor drugog reda, a μ i λ su Laméovi koeficijenti. Tenzor deformacije $\boldsymbol{\varepsilon}$ se uz pretpostavku malih deformacija može definirati pomoću vektora pomaka $\mathbf{u}$ na sljedeći način:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right]. \quad (4.19)$$

Uvrštavanjem izraza (4.18) i (4.19) u jednadžbu (4.17) dobiva se konačan oblik jednadžbe statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela koja se koristi kao jednadžba pomaka mreže:

$$\nabla \cdot \left[\mu \nabla \mathbf{u} + \mu (\nabla \mathbf{u})^T + \lambda \operatorname{tr}(\nabla \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] = \mathbf{0}. \quad (4.20)$$

Laméovi koeficijenti predstavljaju svojstva materijala. Preko njihove vrijednosti, koja može biti konstantna ili prostorno promjenjiva, može se utjecati na kvalitetu pomaknute mreže. Laméovi koeficijenti su međusobno povezani pomoću Poissonovog omjera:

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}. \quad (4.21)$$

Sackinger, Schunk i Rao [70] koriste konstantnu vrijednost Laméovih koeficijenata $\mu = \lambda = 1$, koja odgovara Poissonovom omjeru $\nu = 0.25$.

Chiandussi, Bugada i Onate [15] pokušavaju pomoću prostorno promjenjivog modula elastičnosti postići jednoliku distorziju elemenata mreže. Oni deformaciju mreže provode

u dva koraka. U prvom se koraku rješava jednačba (4.20) s konstantnim modulom elastičnosti. Na osnovi dobivenog tenzora deformacije, izračunava se novi prostorno promjenjivi modul elastičnosti, s kojim se u drugom koraku još jedamput rješava jednačba (4.20), te se dobiva konačni pomak mreže, u kojoj bi elementi trebali biti jednoliko deformirani. Ovakav pristup minimizaciji distorzije elemenata mreže pokazao je jako dobre rezultate. Međutim, veliki mu je nedostatak što se jednačba deformacije mora rješavati dva puta u jednom koraku nestacionarne simulacije.

Konstitutivna relacija (4.18) i definicija tenzora deformacije (4.19) temelje se na pretpostavci malih deformacija. Ta pretpostavka često nije opravdana, jer se kod deformacije mreže mogu pojaviti značajne promjene oblika prostorne domene u jednom vremenskom koraku nestacionarne simulacije. Cairncross *et al.* [13] pokazuju da se u takvim slučajevima može korištenjem nelinearne konstitutivne relacije dobiti značajno kvalitativnija pomaknuta mreža nego kada se koristi linearna konstitutivna relacija.

Iz jednačbe (4.20) se vidi da između komponenata pomaka postoji ovisnost, što znači da tu vektorsku jednačbu nije moguće rješavati odvojeno, komponentu po komponentu, nego treba koristiti vezani (engl. coupled) postupak rješavanja. Da bi se jednačba (4.20) mogla rješavati odvojenim postupkom rješavanja, Jasak i Weller [48] kao najpovoljniji pristup predlažu njeno preoblikovanje na sljedeći način:

$$\nabla \cdot [(2\mu + \lambda) \nabla \mathbf{u}] + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u})^T + \lambda \operatorname{tr}(\nabla \mathbf{u}) \mathbf{I} - (\mu + \lambda) \nabla \mathbf{u} \right] = \mathbf{0}. \quad (4.22)$$

Prvi pribrojnik u jednačbi (4.22) ne uvodi ovisnost između komponenata pomaka, pa ga se nakon diskretizacije može tretirati implicitno, a drugi pribrojnik, koji tu vezu uvodi, nakon diskretizacije se tretira eksplicitno. Iako ovaj pristup u većini slučajeva daje dobre rezultate, postoje situacije kada on izaziva probleme s konvergencijom. O čemu se u stvari radi najbolje se vidi ako se jednačba (4.22), odnosno njezin drugi pribrojnik, preoblikuje na sljedeći način:

$$\nabla \cdot [(2\mu + \lambda) \nabla \mathbf{u}] - \nabla \cdot \left\{ (\mu + \lambda) \left[\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} - \nabla \lambda \cdot \left[(\nabla \mathbf{u})^T - \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I} \right] = \mathbf{0}. \quad (4.23)$$

Može se uočiti da drugi pribrojnik jednačbe (4.22) između ostalog sadrži antisimetrični dio tenzora gradijenta pomaka, tj. tenzor zakreta $\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T]$. To znači da će u slučajevima u kojima tenzor zakreta dominira u ukupnom tenzoru gradijenta pomaka (rotacija prostorne domene) drugi dio jednačbe (4.22), koji se nakon diskretizacije

tretira eksplicitno, nositi značajan dio informacije, te na taj način izazivati probleme s konvergencijom rješenja.

4.3.4 Laplaceova jednađžba

Ako se u jednađžbi (4.23) ukine rotacija i pretpostavi da je Laméov koeficijenti λ konstantan dobiva se Laplaceova jednađžba:

$$\nabla \cdot (\gamma \nabla \mathbf{u}) = 0, \quad (4.24)$$

gdje je $\mathbf{u}$ vektor pomaka, a γ je koeficijent difuzije. Prema tome, jednađžba ravnoteže linearno elastičnog tijela na Laplaceovu jednađžbu dodaje rotaciju.

Laplaceova jednađžba (4.24) karakteristična je po tome, da ne uvodi ovisnost između komponenta pomaka, kao što je slučaj kod jednađžbe ravnoteže linearno elastičnog tijela, a to znači da se može rješavati odvojeno, komponentu po komponentu.

Masud i Hughes [57] uz Laplaceovu jednađžbu koriste i prostorno promjenjivi koeficijent difuzije koji je vezan uz volumen elemenata mreže:

$$\gamma(V) = 1 + \frac{1 - \frac{V_{min}}{V_{max}}}{\frac{V}{V_{max}}}, \quad (4.25)$$

gdje je V volumen promatranog elementa mreže, a V_{min} i V_{max} su volumeni najmanjeg i najvećeg elementa mreže. Iz izraza (4.25) se vidi da kada $V \rightarrow 0$ onda $\gamma \rightarrow \infty$, a $\nabla \mathbf{u} \rightarrow 0$, što znači da će se odgovarajući element mreže pomaknuti bez deformacije (distorzije). Prema tome, elementi koji su na granici inverzije ($V \rightarrow 0$) pomicat će se bez deformacije, tj. inverzija tih elemenata je spriječena. Ovakav način definiranja koeficijenta difuzije pozitivno djeluje na pouzdanost odgovarajuće metode deformacije mreže, jer će spriječiti daljnju distorziju elemenata koji su na granici inverzije, ali neće bitno utjecati na minimiziranje distorzije elemenata mreže.

Löhner i Yang [55] koriste prostorno promjenjivi koeficijent difuzije koji je ovisan o udaljenosti elementa mreže od pokretne granice. Pri tom se ta udaljenost dobiva rješavanjem dodatne Laplaceova jednađžbe, a koeficijent difuzije je obrnuto proporcionalan toj udaljenosti.

4.3.5 Biharmonička jednađžba

Svojstvo rubnog problema definiranog parcijalnom diferencijalnom jednađžbom drugog reda je da se na granici domene može zadati ili Dirichletov, ili Neumanov granični uvjet. Na primjeru problema pomicanja mreže to znači da se na pokretnoj granici može zadati ili položaj/pomak čvorova mreže, ili dimenzija mreže u okomitom smjeru na pokretnu granicu, odnosno nije moguće zadati i pomak i rezoluciju mreže uz istu granicu.

U nekim bi situacijama bilo poželjno pomoću graničnog uvjeta kontrolirati polazaj granice i rezoluciju mreže uz tu granicu. Da bi se to postiglo, Helenbrook [37] predlaže upotrebu parcijalne diferencijalne jednađžbe četvrtog reda, konkretno biharmoničku jednađžbu:

$$\nabla^4 \mathbf{r} = \mathbf{0}, \quad (4.26)$$

gdje je $\mathbf{r}$ vektor položaja. Budući da se radi o parcijalnoj diferencijalnoj jednađžbi četvrtog reda, dva tipa graničnog uvjeta se mogu zadati na istoj granici: položaj granice $\mathbf{r}$ i promjena dimenzije elemenata u smjeru okomitom na granicu $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{r}$.

Helenbrook [37] uspoređuje biharmoničku jednađžbu s Laplaceovom jednađžbom s konstantnim koeficijentom difuzije ($\nabla^2 \mathbf{r} = 0$). Biharmonička jednađžba daje značajno kvalitetniju mrežu od Laplaceove jednađžbe, i omogućava veće amplitude deformacije granice prostorne domene. Međutim, rješavanje Laplaceove jednađžbe je četiri puta učinkovitije od rješavanja biharmoničke jednađžbe.

4.4 Nova automatska metoda pomicanja mreže

U ovom je odjeljku opisana ovim radom predložena automatska metoda pomicanja mreže, koja treba zadovoljiti sljedeće zahtjeve:

1. Mora podržavati nestrukturiranu 3-D mrežu, sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena;
2. Mora rezultirati pomacima u čvorovima mreže;
3. Mora garantirati očuvanje valjanosti mreže za proizvoljnu promjenu oblika prostorne domene, uz uvjet da domena tijekom simulacije ne mijenja topologiju;
4. Mora osigurati prihvatljivu razinu kvalitete mreže tijekom simulacije;
5. Učinkovitost postupka pomicanja mreže mora biti usporediva s učinkovitošću postupka rješavanja primarnog problema;
6. Mora podržavati postupak rješavanja na paralelnim računalima.

Opis metode počinje s odabirom matematičkog modela pomicanja mreže, nakon čega slijedi opis diskretizacije jednadžbe pomaka mreže, te opis postupka rješavanja.

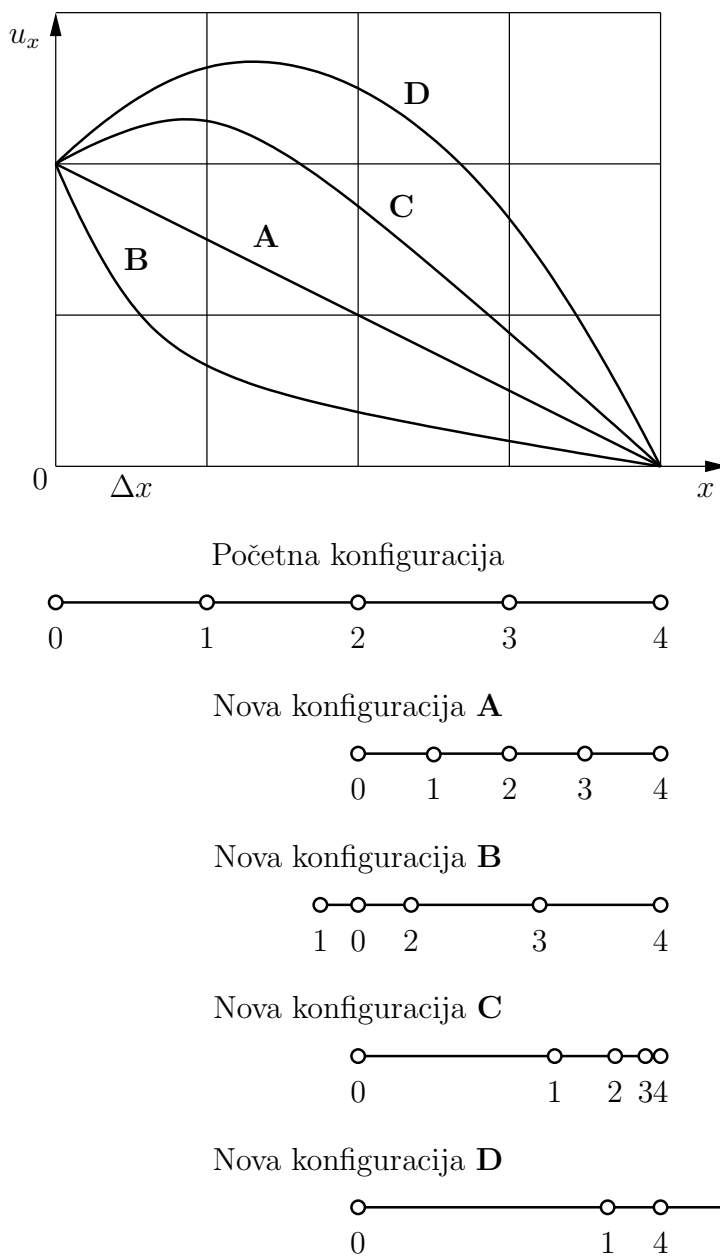
4.4.1 Odabir jednadžbe pomaka mreže

Jednadžba pomaka definira ovisnost pomaka unutarnjih čvorova mreže o pomaku graničnih čvorova. O njoj će u najvećoj mjeri ovisiti očuvanje valjanosti i geometrijske kvalitete mreže tijekom nestacionarne simulacije.

Očito je da će distorzija kontrolnih volumena tijekom pomaka mreže biti minimalna ako se pomak graničnih čvorova jednoliko raspodijeli po čitavoj mreži. Na slici 4.6 prikazana je 1-D mreža s četiri elementa duljine Δx . Analizirat će se utjecaj četiri različite prostorne raspodjele polja pomaka $u_x = u_x(x)$ na svojstva deformirane mreže. Raspodjele **A** i **B** su ograničene¹ (engl. bounded), dok su raspodjele **C** i **D** neograničene (engl. unbounded). Kod raspodjela **A** i **C** na svakom je elementu zadovoljen uvjet $1 + \frac{\Delta u_x}{\Delta x} > 0$, dok to ne vrijedi za raspodjele **B** i **D**. Za svaku raspodjelu prikazana je i odgovarajuća nova

¹Ako je vrijednost polja u bilo kojoj točki unutar prostorne domene ograničeno vrijednostima polja u neposrednoj blizini promatrane točke, onda se to polje naziva ograničenim.

(pomaknuta) konfiguracija. Može se uočiti da samo raspodjele **A** i **C** rezultiraju s valjanom mrežom, dok se kod raspodjela **B** i **D** događa inverzija elemenata mreže. Raspodjela **A** rezultira s jednolikom deformacijom elemenata mreže, za razliku od raspodjele **C** gdje je deformacija izrazito nejednolika.



Slika 4.6: Analiza utjecaja oblika raspodjele pomaka čvorova na svojstva pomaknute mreže.

Iz ove se jednostavne analize mogu izvesti sljedeći zaključci:

1. Polje pomaka mreže $\mathbf{u}$, bilo ono po komponentama ograničeno ili neograničeno,

rezultirat će s valjanom mrežom ako je za svaki element mreže determinanta tenzora gradijenta deformacije veća od nule:

$$|\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}| > 0, \quad (4.27)$$

gdje je $\mathbf{I}$ jedinični tenzor drugog reda. Ovim uvjetom se garantira da će za preslikavanje s početne na pomaknutu konfiguraciju mreže postojati inverzno preslikavanje.

2. Polje pomaka koje je ograničeno po komponentama, uvijek će rezultirati s jednoličnijom distorzijom elemenata mreže u odnosu na neograničeno polje pomaka.

Prema tome, prilikom definiranja metode pomicanja mreže treba težiti odabiru takve jednadžbe pomaka, koja će garantirati preslikavanje za koje postoji odgovarajuće inverzno preslikavanje, te koja će rezultirati s ograničenim poljem pomaka.

Jednadžba statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela (4.22) je bezuvjetno ograničena i garantira postojanje inverznog preslikavanja pod pretpostavkom malih deformacija. Ista svojstva ima i Laplaceova jednadžba. Zanimljivo je da polje pomaka koje je na slici 4.6 definirano raspodjelom $\mathbf{A}$ (linearna raspodjela) egzaktno zadovoljava ove dvije jednadžbe pomaka. Za novu automatsku metodu pomicanja mreže odabrana je Laplaceova jednadžba pomaka, jer zbog neovisnosti između komponenata pomaka, dozvoljava rješavanje primjenom odvojenog postupka. Odvojeni postupak rješavanja je učinkovitiji i zahtijeva manje memorijskog prostora u usporedbi s vezanim postupkom.

Uz metodu pomicanja mreže s Laplaceovom jednadžbom pomaka, paralelno je razvijena i metoda u kojoj je pomak mreže definiran jednadžbom ravnoteže linearno elastičnog tijela. Osnovna razlika između ove dvije jednadžbe je u članu koji sadrži tenzor zakreta. Kako ta razlika utječe na kvalitetu pomaknute mreže pokazat će usporedba ove dvije metode.

Primjenom Laplaceove jednadžbe pomaka s konstantnim koeficijentom difuzije kod pomicanja 2-D i 3-D nestrukturiranih mreža, najviše se deformiraju elementi uz pomičnu granicu. To često dovodi do ekstremne distorzije mreže, te u konačnici do inverzije elemenata mreže. Da bi se pomak granice prostorne domene jednoliko raspodijelio po cijeloj mreži, u Laplaceovoj se jednadžbi može primijeniti prostorno promjenjiv koeficijent difuzije. Vodeći se činjenicom da se s povećanjem koeficijenta difuzije povećava otpornost

na deformaciju, definirana su dva osnovna postupaka računanja prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije.

4.4.2 Prostorno promjenjivi koeficijent difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže

Predložene su dvije osnovne grupe zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka. U prvoj grupi zakonitosti koeficijent difuzije je ovisan o udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, dok je u drugoj grupi zakonitosti koeficijent difuzije ovisan o gustoći energije deformacije kontrolnih volumena.

Ovisnost koeficijenta difuzije o udaljenosti od pomične granice

Kao što je ranije rečeno, problem koji se javlja upotrebom Laplaceove jednadžbe pomaka mreže je u tom, što se pomicanje graničnih čvorova mreže najvećim dijelom apsorbira uz samu granicu. U tom se smislu nameće logično rješenje da koeficijent difuzije bude obrnuto proporcionalan udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice.

Löhner i Yang [55] predlažu funkcijsku ovisnost koeficijenta difuzije o udaljenosti od pomične granice, koja se sastoji od konstantne i linearne funkcije. U ovom će se radu razmotrit sljedeće tri jednostavne funkcijske ovisnosti:

- inverzna linearna ovisnost:

$$\gamma(l) = l^{-1}, \quad (4.28)$$

- inverzna kvadratična ovisnost:

$$\gamma(l) = l^{-2}, \quad (4.29)$$

- eksponencijalna ovisnost:

$$\gamma(l) = e^{-l}, \quad (4.30)$$

gdje je l minimalna udaljenost promatranog kontrolnog volumena od pomične granice.

Ovisnost koeficijenta difuzije o gustoći energije deformacije

Pomak mreže koji se dobije primjenom Laplaceove jednadžbe koristi se za računanje gustoće energije deformacije fiktivnog linearno elastičnog tijela. Dobivena energija je pokazatelj neravnomjernosti deformacije mreže i može se koristiti za definiranje koeficijenta difuzije. Uz ukupnu gustoću energije deformacije,

$$U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.31)$$

koristi se i gustoća distorzijske energije deformacije,

$$U_d = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\cdot} \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}), \quad (4.32)$$

gdje je $\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})$ devijacijski dio tenzora naprezanja $\boldsymbol{\sigma}$, a $\boldsymbol{\varepsilon}$ je tenzor deformacije. Tenzori naprezanja i deformacije računaju se iz ukupnog pomaka mreže $\mathbf{u}_{tot}$ primjenom izraza (4.18) i (4.19). Laméov koeficijent μ i Poissonov omjer ν imaju konstantnu vrijednost: $\mu = 1$, $\nu = 0.25$.

Predložena je proporcionalna ovisnost koeficijentom difuzije o gustoći ukupne i distorzijske energije deformacije:

$$\gamma(U) = U^m + \epsilon, \quad (4.33)$$

$$\gamma(U_d) = U_d^m + \epsilon, \quad (4.34)$$

gdje je ϵ mali broj koji se dodaje da bi se izbjegao koeficijent difuzije jednak nuli, a eksponent m je cijeli broj u području od 1 do 3.

4.4.3 Diskretizacija jednadžbe pomaka mreže

Odabranu jednadžbu pomaka mreže treba diskretizirati na zadanoj nestrukturiranoj poliedarskoj mreži koja se nalazi u početnoj konfiguraciji. Prilikom odabira metode diskretizacije treba voditi računa da diskretizirana jednadžba pomaka ostane lokalno ograničena, te da se vrijednosti polja pomaka računaju u čvorovima mreže.

Diskretizacijom jednadžbe pomaka dobit će se sustav linearnih algebarskih jednadžbi,

$$a_i \mathbf{u}_i - \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} = \mathbf{r}_i, \quad i = 1, n, \quad (4.35)$$

gdje je n broj čvorova mreže, a_i dijagonalni (centralni) koeficijent, a a_{nb} susjedni koeficijenti. Vektor $\mathbf{r}_i$ sadrži eksplicitne članove diskretizirane jednadžbe pomaka za čvor i . Ovdje je pretpostavljeno da je matrica sustava jednaka za sve tri komponente pomaka. Ograničena jednadžba pomaka ostat će ograničena i u svom diskretiziranom obliku ako je matrica sustava linearnih algebarskih jednadžbi dijagonalno jednaka [40]. Treba reći da je to *dovoljan* ali ne i *nužan* uvjet. Matrica sustava linearnih algebarskih jednadžbi je dijagonalno jednaka ako je modul dijagonalnog koeficijenta jednak sumi modula susjednih koeficijenata. Prema tome, dovoljan uvjet očuvanja ograničenosti rješenja sustava linearnih algebarskih jednadžbi može se zapisati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} |a_i| &= \sum_{nb} |a_{nb}|, \\ \text{sgn}(a_i) &= \text{sgn}(a_{nb}). \end{aligned} \tag{4.36}$$

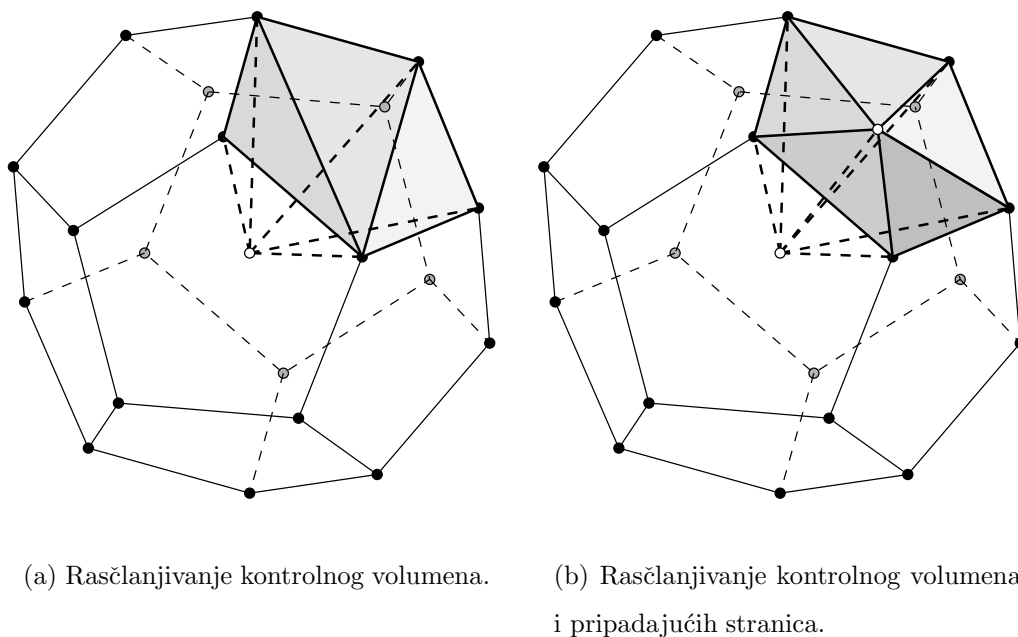
Primjena postojeće metode kontrolnih volumena koja je opisana u 3. poglavlju nije prihvatljiva za diskretizaciju jednadžbe pomaka jer se pomaci računaju u težištima kontrolnih volumena, a diskretizirana Laplaceova jednadžba je bezuvjetno ograničena samo u slučaju ortogonalne mreže. Na neortogonalnoj mreži mora se žrtvovati ili drugi red točnosti, ili ograničenost, i to zbog eksplicitne prirode neortogonalne korekcije [47]. Dodatno, postoje i problemi interpolacije pomaka u čvorove, koji se ne mogu zadovoljavajuće riješiti.

Korištenje klasične metode konačnih elemenata također nije moguće, budući da ne postoji automatska definicija funkcije oblika za proizvoljni poliedar, a nije praktično kategorizirati sve "dovoljene" oblike kontrolnih volumena kada se adresiranje mreže temelji na stranicama kontrolnih volumena. Također je upitno da li bi takve funkcije oblika očuvale lokalnu ograničenost rješenja Laplaceove jednadžbe i dozvolile korištenje iterativnih rješavača. S druge strane, diskretizacija Laplaceove jednadžbe pomoću metode konačnih elemenata na mreži koja sadrži tetraedarske konačne elemente je drugog reda točnosti i rezultira s pozitivno definitnom matricom, a rješenje je bezuvjetno ograničeno.

4.4.3.1 Kompozitni poliedarski konačni element

Da bi se omogućila primjena klasične metode konačnih elemenata za diskretizaciju jednadžbe pomaka na poliedarskoj mreži, definiran je tzv. *kompozitni poliedarski konačni element* koji nastaje rasčlanjivanjem poliedarskog na tetraedarske elemente.

Rasčlanjivanje proizvoljnog poliedra na tetraedre se u slučaju adresiranja po stranica-
ma kontrolnih volumena može jednostavno automatizirati. Primijenjena su dva postupka
automatskog rasčlanjivanja (slika 4.7): *rasčlanjivanje kontrolnog volumena* i *rasčlanji-
vanje kontrolnog volumena i pripadajućih stranica*. Na ovim postupcima rasčlanjivanja
temelji se računanje volumena poliedarskih ćelija, te površine pripadajućih poligonalnih
stranica.



Slika 4.7: Rasčlanjivanje poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre.

Kod *rasčlanjivanje kontrolnog volumena*, slika 4.7(a), uvodi se dodatni čvor u centru poliedarskog kontrolnog volumena, a pripadajuće poligonalne stranice dijele se na trokute. Tetraedri se grade tako, da su im posljednji čvorovi jednaki čvoru u težištu poliedarskog kontrolnog volumena, a posljednje stranice¹ su trokuti nastali rastavljanjem poligonalnih stranica.

Kod *rasčlanjivanja kontrolnog volumena i pripadajućih stranica*, slika 4.7(b), se uz čvor u centru poliedra uvode dodatni čvorovi u centru svake poligonalne stranice. Stranica se dijeli na trokute, tako da čvor u težištu stranice bude zajednički svim trokutima.

Diskretizacijom jednadžbe deformacije na dobivenoj tetraedarskoj mreži dobiva se

¹Ako se čvorovi tetraedra označe s 1, 2, 3 i 4, onda je posljednji čvor tetraedra čvor broj četiri, a posljednja stranica je stranica nasuprot posljednjem čvoru.

sustav jednadžbi s proširenim brojem nepoznanica, koje odgovaraju dodanim čvorovima. Iako pomaci dodanih čvorova nisu nužni za pomicanje mreže, ipak ih se mora riješiti. Na taj se način narušava učinkovitost čitavog postupka pomicanja mreže.

Iako u sklopu ovog rada to nije provedeno, moguće je eliminirati jednadžbu koja odgovara čvoru u težištu poliedarskog konačnog elementa, pri čemu se mijenja povezanost čvorova elementa: svaki je čvor povezan sa svim preostalim čvorovima promatranog elementa. U ovom trenutku nije jasno da li bi eliminacija dodatnih jednadžbi rezultirala s učinkovitijim postupkom rješavanja, budući da se ne zna kako bi eliminacija utjecala na uvjetovanost matrice modificiranog sustava linearnih algebarskih jednadžbi.

4.4.3.2 Diskretizacija Laplaceove jednadžbe

Nakon uvođenja kompozitnog poliedarskog konačnog elementa, diskretizacija Laplaceove jednadžbe može se provesti pomoću metode konačnih elemenata na tetraedarskoj mreži. Koristit će se Galerkinova metoda težinskih reziduala [89].

Traži se približno numeričko rješenje Laplaceove parcijalne diferencijalne jednadžbe (4.24):

$$\nabla \cdot (\gamma \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0},$$

na nepokretnom volumenu V , ograničenom s površinom S , na kojoj moraju biti zadovoljeni zadani granični uvjeti.

Neka je pretpostavljeno rješenje jednadžbe (4.24) na cijeloj prostornoj domeni definirano u obliku konačne sume:

$$\bar{\mathbf{u}} = \sum_{j=1}^n N_j \mathbf{a}_j, \quad (4.37)$$

gdje su N_j funkcije oblika (engl. shape functions) koje moraju zadovoljavati zadane granične uvjete, a $\mathbf{a}_j$ su nepoznati parametri koje treba odrediti. Uvrštavanjem približnog rješenja (4.37) u jednadžbu (4.24) ona neće biti jednaka nuli nego nekom ostatku, tj. rezidualu $\mathbf{R}$:

$$\nabla \cdot (\gamma \nabla \bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \left[\gamma \nabla \left(\sum_{j=1}^n N_j \mathbf{a}_j \right) \right] = \mathbf{R} \neq \mathbf{0}. \quad (4.38)$$

Najbolje rješenje je ono koje minimizira rezidual $\mathbf{R}$ po cijeloj prostornoj domeni. Ako je $\mathbf{R}$ po cijeloj prostornoj domeni jednak nuli, onda je

$$\int_V w \mathbf{R} \, dV = \mathbf{0}, \quad (4.39)$$

gdje je w neka funkcija prostornih koordinata. Ako je broj nepoznatih parametara $\mathbf{a}_j$ jednak n , onda je potrebno odabrati n linearno nezavisnih funkcija w_i da bi se dobio sustav od n jednačbi:

$$\int_V w_i \nabla \cdot (\gamma \nabla \bar{\mathbf{u}}) \, dV = \int_V w_i \nabla \cdot \left[\gamma \nabla \left(\sum_{j=1}^n N_j \mathbf{a}_j \right) \right] \, dV = \mathbf{0}, \quad i = 1, n, \quad (4.40)$$

čijim se rješavanjem dobivaju nepoznati parametri $\mathbf{a}_j$. Ovaj je postupak poznat kao *metoda težinskih reziduala* [89], pri čemu je funkcija w_i težinska funkcija koja je prema Galerkinovoj metodi jednaka funkciji oblika.

U ovom će se radu za diskretizaciju Laplaceove jednačbe koristiti metoda konačnih elemenata koja se zasniva na gore opisanoj metodi težinskih reziduala. Za razliku od pretpostavljenog rješenja (4.37), koje je bilo definirano na cijeloj domeni, kod metode konačnih elemenata uvodi se podjela domene na subdomene (konačne elemente), te se na svakom konačnom elementu e definira posebno pretpostavljeno rješenje,

$$\bar{\mathbf{u}}^e = \sum_{j=1}^{n^e} N_j^e \mathbf{u}_j^e, \quad (4.41)$$

gdje su N_j^e poznate funkcije oblika, koje ovise o tipu konačnog elementa, a $\mathbf{u}_j^e$ su nepoznate vrijednosti varijabli u čvorovima konačnog elementa. U sustavu integralnih jednačbi (4.40) granica integracije se može reducirati na konačni element volumena V^e ,

$$\int_{V^e} w_i^e \nabla \cdot (\gamma \nabla \bar{\mathbf{u}}^e) \, dV = \int_{V^e} w_i^e \nabla \cdot \left[\gamma \nabla \left(\sum_{j=1}^{n^e} N_j^e \mathbf{u}_j^e \right) \right] \, dV = \mathbf{0}, \quad i = 1, n^e, \quad (4.42)$$

gdje je n^e broj čvorova promatranog konačnog elementa. Sustav integralnih jednačbi (4.42) sastoji se od n^e pojedinačnih jednačbi, tj. svakom čvoru $i = 1, n^e$ odgovara po jedna jednačba. Ovakav se sustav jednačbi dobiva za svaki konačni element u mreži.

Da bi se sustav jednačbi (4.42) mogao integrirati (analitički ili numerički) potrebno je definirati funkcije oblika N_j^e . Njihov matematički oblik ovisi o tipu konačnog elementa. Budući da se u ovom radu koristi kompozitni poliedarski konačni element koji je sastavljen

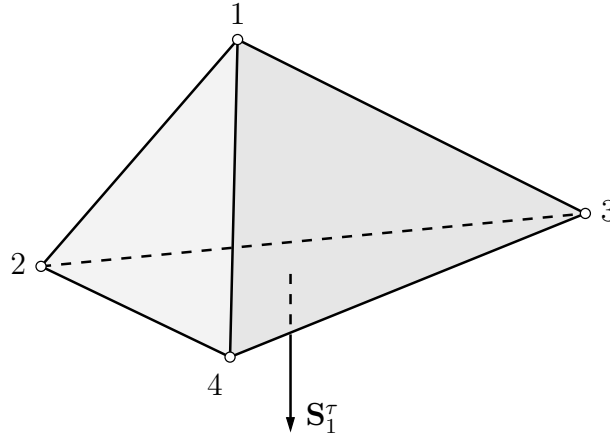
od tetraedarskih konačnih elemenata, razmotrit će se samo funkcije oblika za tetraedarski element. Funkcija oblika za prvi čvor tetraedarskog konačnog element (slika 4.8) ima sljedeći oblik [89]:

$$N_1^\tau = \frac{1}{6V_\tau} (a_1 + b_1x + c_1y + d_1z), \quad (4.43)$$

gdje je V_τ volumen tetraedra, a koeficijenti a_1 , b_1 , c_1 i d_1 se određuju po sljedećim izrazima:

$$a_1 = \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}, \quad b_1 = - \begin{vmatrix} 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \quad (4.44)$$

$$c_1 = \begin{vmatrix} x_2 & 1 & z_2 \\ x_3 & 1 & z_3 \\ x_4 & 1 & z_4 \end{vmatrix}, \quad d_1 = - \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \\ x_4 & y_4 & 1 \end{vmatrix}.$$



Slika 4.8: Linearni tetraedarski konačni element

Funkcije oblika tetraedarskog konačnog elementa N_j^τ su linearne funkcije prostornih koordinata. Budući da je zbog toga $\nabla \cdot (\nabla N_j^\tau) = 0$, sustav integralnih jednadžbi (4.42) je zadovoljen bez obzira na vrijednost nepoznatih varijabli u čvorovima. Ovaj se problem može zaobići tako, da se sustav jednadžbi (4.42) transformira u tzv. oslabljeni (engl. weak) oblik:

$$\int_{V^e} \gamma \nabla w_i^e \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}^e \, dV - \oint_{S^e} w_i^e \mathbf{n} \cdot (\gamma \nabla \bar{\mathbf{u}}^e) \, dS = \mathbf{0}, \quad i = 1, n^e. \quad (4.45)$$

Površinski integral u jednadžbi (4.45) mora se uzeti u obzir samo na onim stranicama konačnih elemenata koje se nalaze na granici prostorne domene, i na kojima je zadan Neumannov granični uvjet. Na unutrašnjim stranicama taj se integral poništava između dva elementa, ili je jednak nuli. Uvrštavanjem pretpostavljenog rješenja (4.41), i izostavljanjem člana s površinskim integralom, jednadžba (4.45) dobiva sljedeći oblik:

$$\sum_{j=1}^{n^e} \mathbf{u}_j^e \int_{V^e} \gamma \nabla w_i^e \cdot \nabla N_j^e dV = \mathbf{0}, \quad i = 1, n^e. \quad (4.46)$$

U jednadžbi (4.46) javlja se gradijent funkcije oblika ∇N_j^e , koji za linearnu funkciju ima konačnu vrijednost različitu od nule. Zahtijev na težinsku funkciju je da ona bude najmanje linearna, što je zadovoljeno, jer se koristi Galerkinova metoda gdje je

$$w_i^e = N_i^e. \quad (4.47)$$

Uvrštavanjem izraza (4.47) u sustav jednadžbi (4.46) dobiva se konačni oblik diskretizirane Laplaceove jednadžbe za konačni element e :

$$\sum_{j=1}^{n^e} \mathbf{u}_j^e \int_{V^e} \gamma \nabla N_i^e \cdot \nabla N_j^e dV = \mathbf{0} \quad i = 1, n^e. \quad (4.48)$$

Da bi se jednadžba (4.48) mogla integrirati za tetraedarski konačni elementi τ , potrebno je odrediti gradijent funkcije oblika ∇N_i^τ . Gradijent funkcije oblika koja odgovara prvom čvoru tetraedarskog konačnog elementa je

$$\nabla N_1^\tau = \frac{1}{6V_\tau} (b_1 \mathbf{i} + c_1 \mathbf{j} + d_1 \mathbf{k}). \quad (4.49)$$

Može se pokazati da vrijedi sljedeći identitet:

$$(b_1 \mathbf{i} + c_1 \mathbf{j} + d_1 \mathbf{k}) = -(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3) = -2\mathbf{S}_1^\tau, \quad (4.50)$$

gdje je $\mathbf{S}_1^\tau$ vektor površine stranice tetraedra koja se nalazi nasuprot prvom čvoru (slika 4.8). Prema tome, konačni izraz za računanje gradijenta funkcije oblika tetraedarskog konačnog elementa glasi:

$$\nabla N_i^\tau = -\frac{\mathbf{S}_i^\tau}{3V_\tau}. \quad (4.51)$$

Uvrštavanjem izraza (4.51) u jednadžbu (4.48), nakon integracije se dobiva diskretizirana Laplaceova jednadžba za tetraedarski konačni element τ :

$$\frac{\gamma_\tau}{9V_\tau} \sum_{j=1}^4 \mathbf{S}_i^\tau \cdot \mathbf{S}_j^\tau \mathbf{u}_j^\tau = \mathbf{0}, \quad i = 1, 4, \quad (4.52)$$

gdje se pretpostavlja da je $\int_{V_\tau} \gamma \, dV = \gamma_\tau V_\tau$, pri čemu je γ_τ vrijednost koeficijenta difuzije u težištu tetraedra. Iz sustava (4.52) može se izdvojiti jednačba koja odgovara čvoru $i = 1$,

$$\frac{\gamma_\tau}{9V_\tau} [(\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_1^\tau) \mathbf{u}_1^\tau + (\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_2^\tau) \mathbf{u}_2^\tau + (\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_3^\tau) \mathbf{u}_3^\tau + (\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_4^\tau) \mathbf{u}_4^\tau] = \mathbf{0}. \quad (4.53)$$

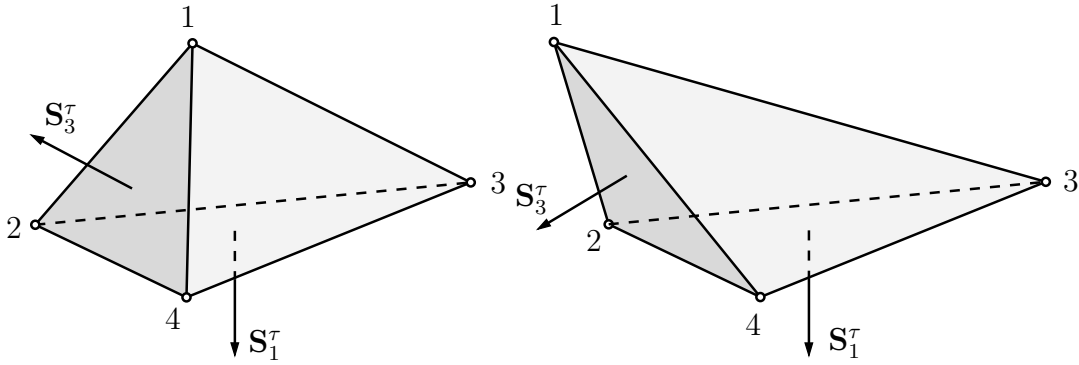
Budući da za tetraedar vrijedi identitet

$$(\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_1^\tau) = -[(\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_2^\tau) + (\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_3^\tau) + (\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_4^\tau)], \quad (4.54)$$

može se zaključiti da će sustav linearnih algebarskih jednačbi (4.52) biti pozitivno definitan za bilo koji oblik tetraedra uz uvjet da se nije dogodila inverzija. Ovo svojstvo vrijedit će i za globalni sustav jednačbi. S druge strane, zadovoljenje dovoljnog uvjeta očuvanja ograničenosti rješenja (4.36), ovisi o obliku tetraedra. Uvjet (4.36) bit će zadovoljen ako vektori površine stranica tetraedra zadovoljavaju sljedeći uvjet:

$$\mathbf{S}_i^\tau \cdot \mathbf{S}_j^\tau \leq 0 \quad \text{za} \quad i \neq j. \quad (4.55)$$

Tako je za oblik tetraedra prikazan na slici 4.9(a) taj uvjet zadovoljen ($\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_3^\tau < 0$), a za oblik prikazan na slici 4.9(b) nije ($\mathbf{S}_1^\tau \cdot \mathbf{S}_3^\tau > 0$).



(a) Oblik tetraedra za koji je zadovoljen uvjet (4.36).

(b) Oblik tetraedra za koji nije zadovoljen uvjet (4.36).

Slika 4.9: Utjecaj oblika tetraedra na svojstva matrice sustava linearnih algebarskih jednačbi.

Iz sustava jednačbi (4.52) vidljivo je da se smanjenjem volumena tetraedra V_τ postiže isti učinak kao i povećanjem koeficijenta difuzije γ_τ . Prema tome, tetraedri koji se nalaze blizu stanja inverzije ($V_\tau \rightarrow 0$), pomicat će se bez deformacije.

4.4.3.3 Diskretizacija jednadžbe ravnoteže elastičnog tijela

Radi usporedbe s Laplaceovom jednadžbom provest će se diskretizacija jednadžbe ravnoteže elastičnog tijela primjenom iste metodologije.

Traži se približno numeričko rješenje jednadžbe statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela (4.20):

$$\nabla \cdot [\mu \nabla \mathbf{u} + \mu (\nabla \mathbf{u})^T + \lambda \operatorname{tr}(\nabla \mathbf{u}) \mathbf{I}] = 0,$$

na nepokretnom volumenu V , ograničenom s površinom S , na kojoj moraju biti zadovoljeni zadani granični uvjeti.

Polazi se od odgovarajuće integralne jednadžbe težinskih reziduala na konačnom elementu e :

$$\int_{V^e} w_i^e \nabla \cdot [\mu \nabla \bar{\mathbf{u}}^e + \mu (\nabla \bar{\mathbf{u}}^e)^T + \lambda \operatorname{tr}(\nabla \bar{\mathbf{u}}^e) \mathbf{I}] dV = 0, \quad i = 1, n^e, \quad (4.56)$$

gdje je $\bar{\mathbf{u}}^e$ pretpostavljeno rješenje, a n^e je broj čvorova elementa e . Oslabljeni oblik jednadžbe (4.56) glasi:

$$\begin{aligned} & \int_{V^e} \mu \nabla w_i^e \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}^e dV + \int_{V^e} \mu \nabla w_i^e \cdot (\nabla \bar{\mathbf{u}}^e)^T dV + \int_{V^e} \lambda \nabla w_i^e \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}^e dV - \\ & \oint_{s^e} \mathbf{n} \cdot [\mu \nabla \bar{\mathbf{u}}^e + \mu (\nabla \bar{\mathbf{u}}^e)^T + \lambda \operatorname{tr}(\nabla \bar{\mathbf{u}}^e)] w_i^e dS = 0, \quad i = 1, n^e, \end{aligned} \quad (4.57)$$

odnosno, uvažavajući izraz (4.18), dobiva se:

$$\begin{aligned} & \int_{V^e} \mu \nabla w_i^e \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}^e dV + \int_{V^e} \mu \nabla w_i^e \cdot (\nabla \bar{\mathbf{u}}^e)^T dV + \int_{V^e} \lambda \nabla w_i^e \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}^e dV - \\ & \oint_{s^e} w_i^e \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS = 0, \quad i = 1, n^e, \end{aligned} \quad (4.58)$$

gdje je $\boldsymbol{\sigma}$ tenzor naprezanja na granici konačnog elementa. Površinski integral u jednadžbi (4.58) potrebno je uzeti u obzir samo na onoj granici elementa, koja se poklapa s granicom prostorne domene na kojoj je zadan Neumannov granični uvjet. U daljnjem će se tekstu taj član ispustiti iz razmatranja. Uvrštavanjem izraza (4.41) i (4.47) u jednadžbu (4.58) dobiva se konačni oblik diskretizirane jednadžbe (4.20):

$$\sum_{j=1}^{n^e} \left[\int_{V^e} (\mu \nabla N_i^e \cdot \nabla N_j^e \mathbf{I} + \mu \nabla N_j^e \nabla N_i^e + \lambda \nabla N_i^e \nabla N_j^e) dV \right] \cdot \mathbf{u}_j^e = 0, \quad i = 1, n^e. \quad (4.59)$$

Uzimajući u obzir izraz (4.51) jednađžba (4.59) se može integrirati, nakon čega se dobiva diskretizirana jednađžba statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela za tetraedarski konačni element τ :

$$\frac{1}{9V_\tau} \sum_{j=1}^4 (\mu_\tau \mathbf{S}_i^\tau \cdot \mathbf{S}_j^\tau \mathbf{I} + \mu_\tau \mathbf{S}_j^\tau \mathbf{S}_i^\tau + \lambda_\tau \mathbf{S}_i^\tau \mathbf{S}_j^\tau) \cdot \mathbf{u}_j^\tau = \mathbf{0}, \quad i = 1, 4, \quad (4.60)$$

gdje su μ_τ i λ_τ vrijednosti Laméovih koeficijenata u težištu tetraedra. Prvi pribrojnik pod sumom u jednađžbi (4.60) je tenzor kod kojeg su samo dijagonalne komponente različite od nule što znači da za razliku od preostala dva ne uvodi ovisnost između komponenta pomaka. Vezani sustav jednađžbi (4.60) rješavat će se odvojenim postupkom rješavanja, prema pristupu koji su uz metodu kontrolnih volumena predložili Jasak i Weller [48]. Ako se uzme u obzir da vrijedi identitet $\text{tr}(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, onda se sustav jednađžbi (4.60) može zapisati u sljedećem obliku:

$$\underbrace{\frac{1}{9V_\tau} \sum_{j=1}^4 [(2\mu_\tau + \lambda_\tau) \mathbf{S}_i^\tau \cdot \mathbf{S}_j^\tau \mathbf{I}] \cdot \mathbf{u}_j^\tau}_{\text{implicitni dio}} = \underbrace{-\frac{1}{9V_\tau} \sum_{j=1}^4 \{ \mu_\tau [\mathbf{S}_j^\tau \mathbf{S}_i^\tau - \text{tr}(\mathbf{S}_j^\tau \mathbf{S}_i^\tau) \mathbf{I}] + \lambda_\tau [\mathbf{S}_i^\tau \mathbf{S}_j^\tau - \text{tr}(\mathbf{S}_i^\tau \mathbf{S}_j^\tau) \mathbf{I}] \} \cdot \mathbf{u}_j^\tau}_{\text{eksplicitni dio}} \quad i = 1, 4. \quad (4.61)$$

Lijeva strana sustava jednađžbi (4.61) tretira se implicitno, dok se desna tretira eksplicitno. Ovaj sustav linearnih algebarskih jednađžbi ima jednaka svojstva kao i onaj u slučaju diskretizirane Laplaceove jednađžbe.

4.4.3.4 Sastavljanje globalnog sustava jednađžbi

U prethodnom je odjeljku provedena diskretizacija Laplaceove jednađžbe i jednađžbe statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela pomoću metode konačnih elemenata na tetraedarskom konačnom elementu. Kao rezultat dobiven je "lokalni" sustav linearnih algebarskih jednađžbi¹, koji se može zapisati u sljedećem obliku:

$$[A]^\tau \cdot \{\mathbf{u}\}_k^\tau = \{\mathbf{r}\}_k^\tau, \quad k = 1, 3, \quad (4.62)$$

¹Sustav koji proizlazi iz diskretizacije jednađžbe ravnoteže linearno elastičnog tijela je kvazi-linearan budući da desna strana sustava ovisi o nepoznanicama.

gdje je $[A]^\tau$ matrica koeficijenata 4×4 , koja je identična za sve tri komponente pomaka, a njezin član $[A]_{ij}^\tau$ je u slučaju diskretizirane Laplaceove jednadžbe jednak $\frac{\gamma\tau}{9V_\tau} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$. Vektor nepoznanica $\{\mathbf{u}\}_k^\tau$ sadrži k -komponente vektora pomaka čvorova tetraedra. Desna strana $\{\mathbf{r}\}_k^\tau$ sustava je u slučaju diskretizirane Laplaceove jednadžbe jednaka nuli.

Kao konačni rezultat diskretizacije potrebno je dobiti globalni sustav jednadžbi,

$$[A] \cdot \{\mathbf{u}\}_k = \{\mathbf{r}\}_k, \quad k = 1, 3, \quad (4.63)$$

gdje je $[A]$ globalna matrica koeficijenata $n \times n$, $\{\mathbf{u}\}_k$ je vektor nepoznanica (k komponente pomaka čvorova mreže), $\{\mathbf{r}\}_k$ je desna strana sustava, a n je ukupni broj čvorova mreže. Globalna jednadžba za globalni čvor mreže dobiva se zbrajanjem odgovarajućih lokalnih jednadžbi svih tetraedara koji sadrže promatrani čvor. Sastavljanje globalnog sustava jednadžbi može biti vremenski vrlo zahtjevno pa je potrebno posebnu pažnju posvetiti definiranju odgovarajućeg postupka. U ovom radu se koristi dvostepeni postupak kod kojeg se ne provodi pretraživanje adresnog polja kod akumulacije koeficijenata.

4.4.3.5 Primjena graničnih uvjeta

Globalni sustav algebarskih jednadžbi se za sve čvorove mreže sastavlja na identičan način, tj. ne vodi se računa da li je čvor unutrašnji ili granični. Granični se uvjeti uvode korekcijom već sastavljenog globalnog sustava.

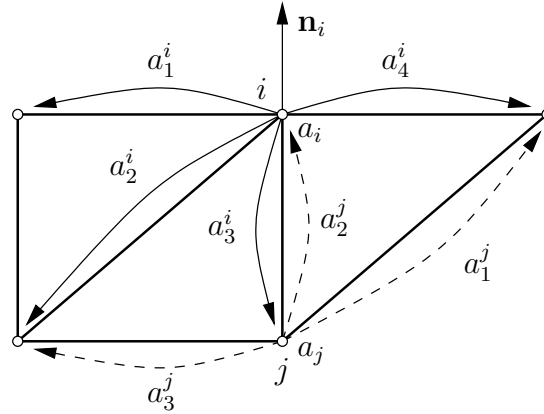
Globalni sustav jednadžbi (4.63) se može zapisati u sljedećem obliku:

$$a_i \mathbf{u}_i - \sum_{nb} a_{nb}^i \mathbf{u}_{nb}^i = \mathbf{r}_i, \quad i = 1, n, \quad (4.64)$$

gdje je a_i dijagonalni koeficijent, a_{nb}^i susjedni koeficijenti, $\mathbf{r}_i$ desna strana jednadžbe za globalni čvor i , a n ukupan broj čvorova u mreži.

Neumannov granični uvjet uvodi se preko površinskih integrala u jednadžbama (4.45) i (4.58). Ako je na granici zadan nulti gradijent pomaka ($\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{0}$), onda u odgovarajućim graničnim čvorovima nije potrebna nikakva korekcija globalnog sustava. Ako je zadan gradijent pomaka različit od nule, odgovarajući se granični uvjet uvodi integriranjem površinskih integrala u jednadžbama (4.45) i (4.58) te dodavanjem rezultata u desnu stranu globalnog sustava.

Kod **Dirichletovog graničnog uvjeta** zadani su pomaci u graničnim čvorovima. Neka je u graničnom čvoru i zadan pomak $\mathbf{u}_b$. Ovaj se granični uvjet uvodi eliminacijom



Slika 4.10: Uz objašnjenje primjene graničnih uvjeta za jednadžbu pomaka mreže.

jednadžbe koja odgovara promatranom čvoru i . Eliminacija jednadžbe provodi se tako, da se svi susjedni koeficijenti a_{nb}^i izjednače s nulom, a desna strana $\mathbf{r}_i$ se izjednači s $a_i \mathbf{u}_b$. Potrebno je korigirati i jednadžbe čvorova koji su povezani s promatranim graničnim čvorom i . Razmotrit će se jednadžba koja odgovara čvoru j , slika 4.10. U toj se jednadžbi, susjedni koeficijent a_2^j izjednačava s nulom, a vrijednost $a_2^j \mathbf{u}_b$ se dodaje u desnu stranu jednadžbe.

Kod **kliznog** graničnog uvjeta i graničnog uvjeta na **ravnini simetrije** potrebno je spriječiti pomak u smjeru normale, dok se na tangencijalnu komponentu pomaka primjenjuje granični uvjet nultog normalnog gradijenta. Neka je u graničnom čvoru i s normalom $\mathbf{n}$, slika 4.10, zadan klizni granični uvjet. Globalnu jednadžbu koja odgovara čvoru i potrebno je korigirati tako, da ona uvijek daje nulti pomak u smjeru normale bez obzir na pomake susjednih čvorova. To se postiže tako da se u jednadžbi (4.64) dozvoli utjecaj pomaka susjednih čvorova i desne strane samo u tangencijalnom smjeru. Prema tome, jednadžba (4.64) nakon korekcije poprima sljedeći oblik:

$$a_i \mathbf{u}_i - \sum_{nb} a_{nb}^i (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{u}_{nb}^i = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{r}_i. \quad (4.65)$$

Iz jednadžbe (4.65) se vidi da u slučaju kada su dvije ili tri komponente normale različite od nule dolazi do uvođenja ovisnosti između komponenata pomaka, a to znači da se sustav više ne može rješavati odvojenim postupkom. Da bi se to izbjeglo, član pod sumom u

jednadžbi (4.65) dijeli se u dva dijela:

$$\begin{aligned}
 a_i \mathbf{u}_i - \sum_{nb} a_{nb}^i \begin{bmatrix} 1 - \mathbf{n}_x \mathbf{n}_x & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \mathbf{n}_y \mathbf{n}_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \mathbf{n}_z \mathbf{n}_z \end{bmatrix} \cdot \mathbf{u}_{nb}^i = \\
 \sum_{nb} a_{nb}^i \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{n}_x \mathbf{n}_y & \mathbf{n}_x \mathbf{n}_z \\ \mathbf{n}_y \mathbf{n}_x & 0 & \mathbf{n}_y \mathbf{n}_z \\ \mathbf{n}_z \mathbf{n}_x & \mathbf{n}_z \mathbf{n}_y & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{u}_{nb}^i + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{r}_i.
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

Prvi dio, koji je ostao na lijevoj strani, tretira se implicitno, jer sadrži samo dijagonalu tenzora $(\mathbf{I} - \mathbf{nn})$, pa ne uvodi ovisnost između komponenti pomaka. Ostatak, u kojem je sadržana ovisnost između komponentenata pomaka, tretira se eksplicitno. Treba primijetiti da u ovom slučaju dolazi do modifikacije susjednih koeficijenata (a_{nb}^i) na način da oni sada više nisu jednaki za sve tri komponente pomaka. O tome treba voditi računa kod odvojenog rješavanja globalnog sustava jednadžbi.

4.4.4 Postupak rješavanja

Diskretizacijom Laplaceove jednadžbe dobiva se sustav linearnih algebarskih jednadžbi kod kojeg matrica sustava $[A]$ i vektor $\{\mathbf{r}\}$ ne ovise o vektoru nepoznanica $\{\mathbf{u}\}$ ¹. To znači da postupak rješavanja ne sadrži tzv. petlju vanjskih iteracija², tj. linearni sustav je potrebno riješiti samo jedamput. Odgovarajući postupak rješavanja sastoji se iz sljedećih koraka:

1. Izračunati koeficijente difuzije γ za svaki poliedarski kontrolni volumen u mreži;
2. Pretpostaviti vektor nepoznanica $\{\mathbf{u}\}$;
3. Sastaviti globalni sustav linearnih algebarskih jednadžbi zbrajanjem lokalnih jednadžbi elemenata;
4. U globalni sustav jednadžbi uvesti granične uvjete;

¹Izuzetak je slučaj kada postoji granični uvjet na ravnini simetrije ili klizni granični uvjet na ravninama koje se ne poklapaju s nekom od koordinatnih ravnina.

²Petlja unutarnjih iteracija je dio iterativnog rješavača sustava linearnih algebarskih jednadžbi.

5. Riješiti dobiveni sustav linearnih algebarskih jednadžbi odvojeno, komponentu po komponentu, primjenom ICCG postupka.

Diskretizacijom jednadžbe ravnoteže linearno elastičnog tijela dobiva se globalni sustav algebarskih jednadžbi koji je kvazi-linear, budući da vektor $\{\mathbf{r}\}$ ovisi o vektoru nepoznanica $\{\mathbf{u}\}$. Zbog toga postupak rješavanja mora sadržavati petlju vanjskih iteracija:

1. Izračunati koeficijente difuzije γ za svaki poliedarski kontrolni volumen u mreži;
2. Pretpostaviti vektor nepoznanica $\{\mathbf{u}\}$;
3. Sastaviti globalni sustav linearnih algebarskih jednadžbi u kojem vektor $\{\mathbf{r}\}$ ovisi o pretpostavljenom vektoru nepoznanica $\{\mathbf{u}\}$.
4. U globalni sustav jednadžbi uvesti granične uvjete;
5. Riješiti dobiveni sustav jednadžbi odvojeno, komponentu po komponentu, primjenom ICCG postupka;
6. Provjeriti konvergenciju. Ako rješenje nije konvergiralo vratiti se na korak 2 s dobivenim rješenjem kao pretpostavljenim.

4.4.5 Postupak rješavanja na paralelnim računalima

Postupak rješavanja pomicanja mreže na paralelnim računalima uvjetovan je postupkom paralelnog rješavanja primarnog problema, koji je opisan u odjeljku 3.5. Budući da se mora koristiti postojeća dekompozicija globalne domene, neki čvorovi mreže nalaze se upravo na međuprocessorskoj granici (slika 3.9). To znači da se parcijalna globalna jednadžba takvog međuprocessorskog čvora sastavlja na dva ili više procesora.

Sastavljanje globalnog sustava jednadžbi odvija se na pojedinim procesorima nezavisno od ostalih procesora. Nakon toga se, u fazi uvođenja graničnih uvjeta, korigiraju parcijalne globalne jednadžbe međuprocessorskih čvorova na pojedinim procesorima, tako da im se dodaju odgovarajuće parcijalne globalne jednadžbe s drugih procesora.

4.5 Testiranje predložene metode pomicanja mreže

U ovom odjeljku provedeno je testiranje predložene automatske metode pomicanja mreže na nekoliko jednostavnih 2-D i 3-D primjera. Budući da C++ biblioteka FOAM podržava samo 3-D mrežu, 2-D mreža je definirana kao 3-D mreža s jednim slojem kontrolnih volumena. Tako je u FOAM-u 2-D nestrukturirana mreža s trokutima definirana kao 3-D mreža s jednim slojem kontrolnih volumena prizmatičnog oblika.

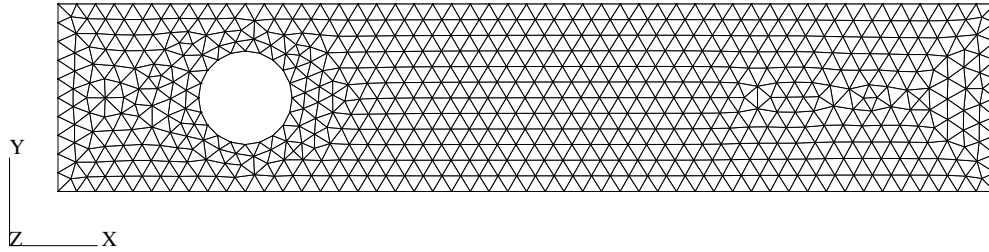
Najprije je provedena usporedba Laplaceove jednadžbe pomaka s jednadžbom ravnoteže linearno elastičnog tijela na primjeru pomicanja 2-D mreže za cilindar koji se pomiče u kanalu. Nakon toga slijedi usporedba pomicanja mreže za predložene postupke rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre na primjeru pomicanja 3-D mreže, koja će se koristiti za numeričko modeliranje podizanja mjehurića kroz mirujuću tekućinu. Na kraju je testirana učinkovitosti minimizacije distorzije kontrolnih volumena tijekom pomicanja mreže primjenom prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka. Testiranje učinkovitosti je provedeno na primjeru pomicanja 2-D mreže oko oscilirajućeg NACA0012 profila.

4.5.1 Usporedba Laplaceove jednadžbe pomaka s jednadžbom ravnoteže elastičnog tijela

Pri odabiru jednadžbe pomaka za novu metodu pomicanja mreže izbor je sužen na Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela (u daljnjem tekstu jednadžba elastičnosti). Iako se od jednadžbe elastičnosti očekuje kvalitativna deformirana mreža, odabrana je Laplaceova jednadžba, zbog učinkovitijeg postupka rješavanja.

U ovom je odjeljku provedena usporedba tih dviju jednadžbi na primjeru pomicanja mreže oko 2-D cilindra koji se pomiče uzduž kanala. Ovaj je problem Baker [3] koristio za testiranje jednadžbe elastičnosti, a Helenbrook [37] za testiranje biharmoničke jednadžbe pomaka. Slika 4.11 prikazuje mrežu u početnom stanju. Promjer cilindra je D , visina kanala $2D$, a prosječna dimezija kontrolnog volumena $0.15D$ (obod cilindra podijeljen je na 20 segmenata).

Najprije je za obje metode (jednadžbe) određen granični pomak cilindra, koji se može



Slika 4.11: Početna mreža za pomicanje 2-D cilindra u kanalu.

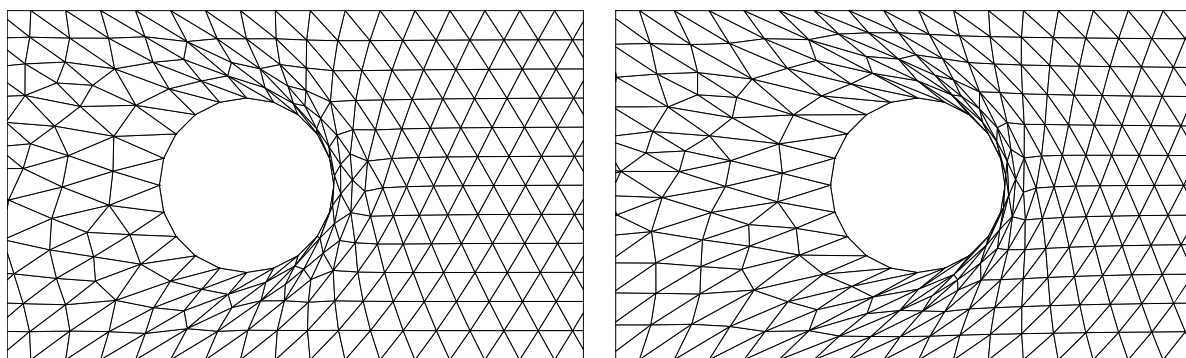
ostvariti u jednom koraku, a da ne dođe do inverzije elemenata mreže. Koeficijent difuzije u Laplaceovoj jednadžbi i Laméovi koeficijenti u jednadžbi elastičnosti su konstantni, a Poissonov omjer je $\nu = 0.25$. Na svim granicama kanala mreža je fiksirana, a za čvorove na površini cilindra zadaje se pomak $\Delta_{gr}\mathbf{i}$ kojeg treba odrediti metodom pokušaja. Kvaliteta mreže ocjenjuje se pomoću kuta neortogonalnosti stranica kontrolnih volumena α_f koji je definiran izrazom (3.8). Maksimalna ($\alpha_{f,max}$) i srednja ($\alpha_{f,sr}$) neortogonalnost početne mreže su jednake 18.26° i 1.02° .

U tablici 4.1 prikazani su rezultati proračuna. Uz granične pomake, prikazane su i maksimalna i srednja neortogonalnost mreže. Pomoću jednadžbe elastičnosti je u jednom koraku simulacije moguće pomaknuti cilindar za $\Delta_{gr} = 0.995D$, dok je uz primjenu Laplaceove jednadžbe maksimalni pomak $\Delta_{gr} = 0.636D$. Ovi se rezultati poklapaju s rezultatima objavljenim u [3]. Na slici 4.12 prikazana je pomaknuta mreža za granični pomak cilindra: na slici 4.12(a) za Laplaceovu jednadžbu, a na slici 4.12(b) za jednadžbu elastičnosti.

Tablica 4.1: Granični pomak cilindra i neortogonalnost pomaknute mreže za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.

Jednadžba	Δ_{gr}	$\alpha_{f,max}$	$\alpha_{f,sr}$
Laplaceova jednadžba	$0.636D$	85.86°	4.02°
Jednadžba elastičnosti	$0.995D$	89.79°	6.62°

Kod numeričkog modeliranja nestacionarnih problema u kojima se zahtijeva vremenska točnost, pomak granice u jednom koraku simulacije neće biti značajnije veći od dimenzije kontrolnih volumena uz granicu. Zbog toga je provedena usporedba dvije jednadžbe pomaka mreže za pomak cilindra $0.15D\mathbf{i}$. Uspoređuje se kvaliteta mreže, definirana



(a) Laplaceova jednadžba.

(b) Jednadžba elastičnosti.

Slika 4.12: Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra.

pomoću neortogonalnosti mreže, i učinkovitost postupka rješavanja, definirana pomoću proteklog vremena rješavanja problema pomicanja mreže¹.

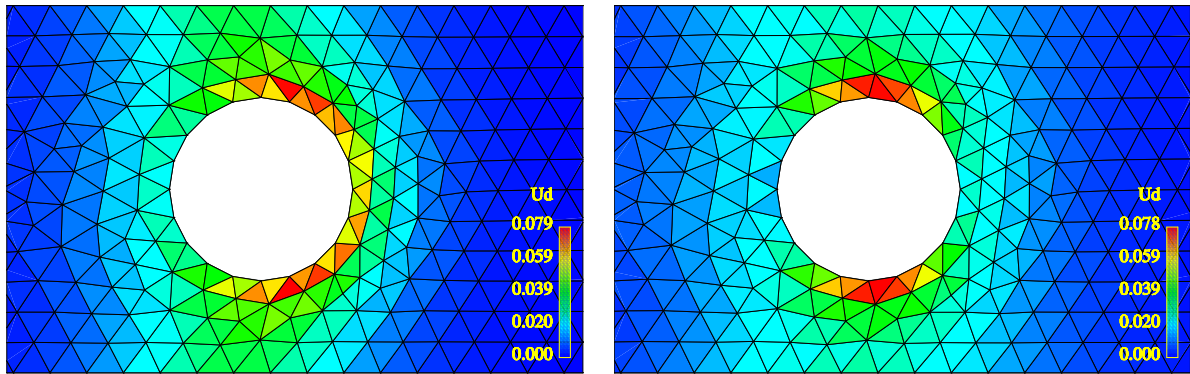
Rezultati proračuna prikazani su u tablici 4.2. Rješavanje jednadžbe elastičnosti provedeno je s tri vanjske iteracije, pri čemu se u svakoj vanjskoj iteraciji reziduali reduciraju za dva reda veličine. Veći broj vanjskih iteracija ne doprinosi značajnije kvaliteti pomaknute mreže. Može se vidjeti da obje jednadžbe daju približno jednaku kvalitetu mreže, ali je vrijeme rješavanja Laplaceove jednadžbe puno kraće od vremena rješavanja jednadžbe elastičnosti. Na slici 4.13 prikazana je pomaknuta mreža s odgovarajućom gustoćom distorzijske energije deformacije, definiranom izrazom (4.32). Kod obje je jednadžbe najveća gustoća distorzijske energije deformacije uz samu pomičnu granicu.

Tablica 4.2: Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja uz pomak cilindra 0.15Di za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.

Jednadžba	$\alpha_{f,max}$	$\alpha_{f,sr}$	T, s
Laplaceova jednadžba	29.38°	1.46°	0.22
Jednadžba elastičnosti	28.10°	1.54°	1.25

Na kraju, određeni su maksimalno dozvoljeni pomak cilindra prije inverzije kontrolnih volumena i odgovarajuća kvaliteta mreže, za slučaj kada se pomicanje provodi u više

¹Proteklo vrijeme rješavanja sastoji se od vremena potrebnog da se sastavi globalni sustav jednadžbi i od vremena potrebnog da se riješi sustav jednadžbi za svaku relevantnu komponentu pomaka.



(a) Laplaceova jednadžba.

(b) Jednadžba elastičnosti.

Slika 4.13: Pomaknuta mreže za pomak cilindra $0.15D\mathbf{i}$. Boje predstavljaju raspodjelu gustoće distorzijske energije deformacije.

koraka s pomakom $0.15D\mathbf{i}$ po koraku. U tablici 4.3 prikazani su rezultati proračuna. Zanimljivo je da na ovaj način Laplaceova jednadžba daje čak nešto veći granični pomak nego jednadžba elastičnosti.

Tablica 4.3: Granični pomak cilindra i odgovarajuća neortogonalnost mreže pri pomicanju u više koraka s pomakom $0.15D\mathbf{i}$ u jednom koraku.

Jednadžba	Δ_{gr}	$\alpha_{f,max}$	$\alpha_{f,sr}$
Laplaceova jednadžba	$1.50D$	89.77°	7.82°
Jednadžba elastičnosti	$1.35D$	88.85°	8.48°

Iz provedene usporedbe može se zaključiti da Laplaceova jednadžba daje jednako kvalitetnu deformiranu mrežu kao i jednadžba elastičnosti, uz značajno veću učinkovitost postupka rješavanja. Smanjenjem pomaka po koraku simulacije, kod obje je jednadžbe moguće povećati ukupni dozvoljeni pomak granice, odnosno spriječiti inverziju elemenata mreže.

4.5.2 Usporedba postupaka automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena

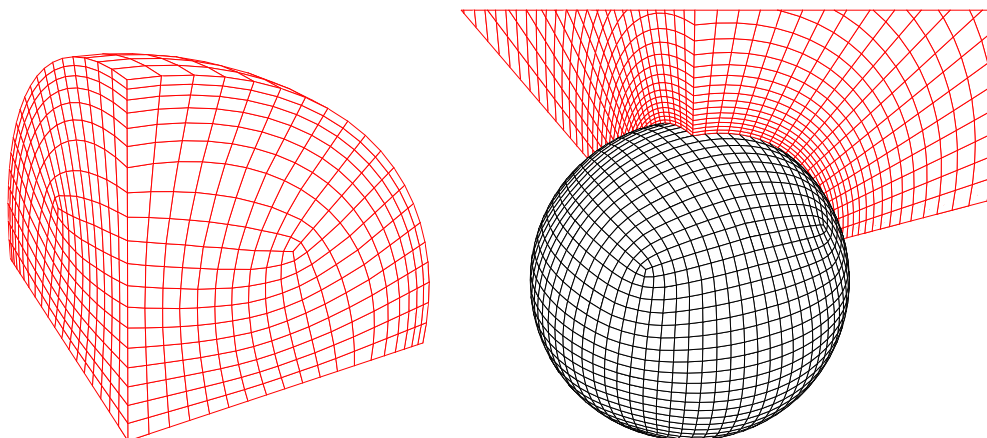
Da bi se omogućila primjena metode konačnih elemenata za diskretizaciju jednadžbe pomaka na poliedarskoj mreži, uveden je tzv. kompozitni poliedarski konačni element, koji nastaje rasčlanjivanjem proizvoljnog poliedra na tetraedre. Predložena su dva postupka automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre:

1. Rasčlanjivanje kontrolnog volumena (Postupak 1), slika 4.7(a);
2. Rasčlanjivanje kontrolnog volumena i pripadajućih stranica (Postupak 2), slika 4.7(b).

Kod rasčlanjivanja kontrolnog volumena dodaje se jedan čvor u težištu kontrolnog volumena, a kod rasčlanjivanja kontrolnog volumena i pripadajućih stranica dodaje se još po jedan čvor u težištu svake stranice kontrolnog volumena.

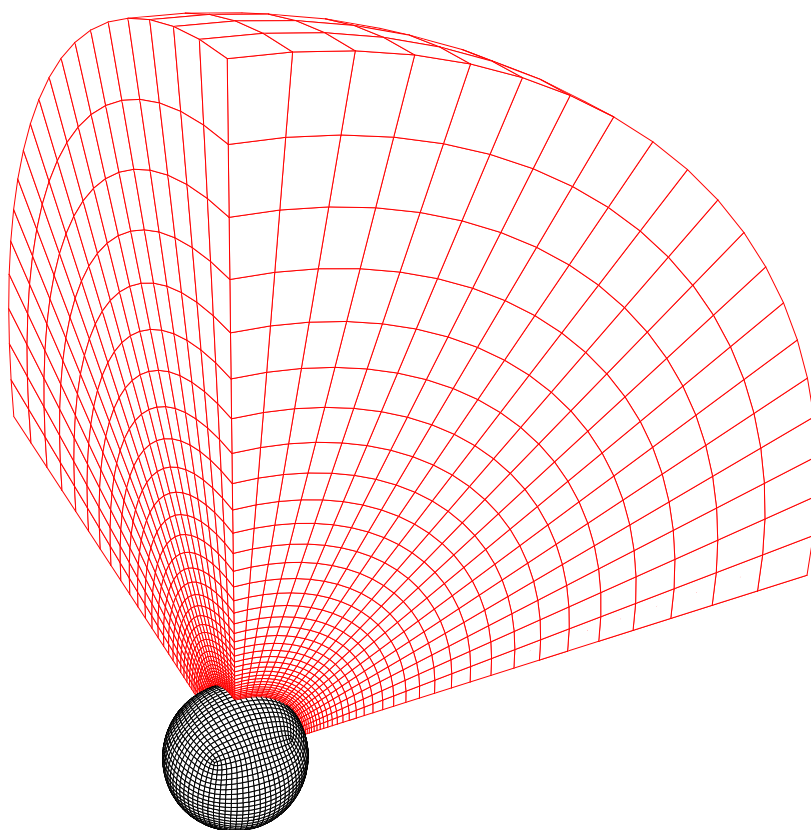
U ovom je odjeljku provedena usporedba takva dva postupka rasčlanjivanja s obzirom na efikasnost metode pomicanja mreže i kvalitetu pomaknute mreže. Usporedba je provedena na problemu pomicanje 3-D mreže koja se koristi kod numeričkog modeliranja mjehurića primjenom pomične mreže. Mreža se sastoji iz dva dijela, slika 4.14. Prvi dio predstavlja mjehurić koji je ograničen površinom sfere polumjera $r_b = 1$ mm, slika 4.14(a). Drugi dio predstavlja tekućinu, slika 4.14(c), koja je s jedne strane ograničena površinom mjehurića, slika 4.14(b), a s druge (vanjske) strane površinom sfere polumjera $r = 10$ mm. Dimenzija kontrolnih volumena uz površinu mjehurića je 2.0×10^{-2} mm u smjeru normale na granicu mjehurića i 8.0×10^{-2} mm uzduž granice mjehurića. Mreža se sastoji od 117 351 čvora, 344 400 stranica kontrolnih volumena i 113 600 kontrolnih volumena. Maksimalna neortogonalnost mreže u početnoj konfiguraciji je 25.53° , a srednja 2.78° .

U slučaju prvog postupka rasčlanjivanja poliedra na tetraedre, sustav linearnih algebarskih jednadžbi koji proizlazi iz diskretizacije Laplaceove jednadžbe pomaka ima 230 951 nepoznanicu. U slučaju drugog postupka rasčlanjivanja sustav jednadžbi ima 575 351 nepoznanicu.



(a) Osmina mreže u mjehuriću
plina.

(b) Granica mjehurića plina.



(c) Osmina mreže u tekućini.

Slika 4.14: Početna mreža za numeričko modeliranje mjehurića primjenom pomične mreže.

Pomicanje mreže posljedica je promjene oblika mjehurića, od sfernog ($r_b = 1$ mm) prema obliku spljoštenog rotacionog elipsoida:

$$\begin{aligned}\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} &= 1, \\ c &= r_b - 0.2 \text{ mm}, \\ a &= \sqrt{\frac{4V_b}{\pi c}}, \quad b = a, \\ V_b &= \frac{4}{3}\pi r_b^3.\end{aligned}$$

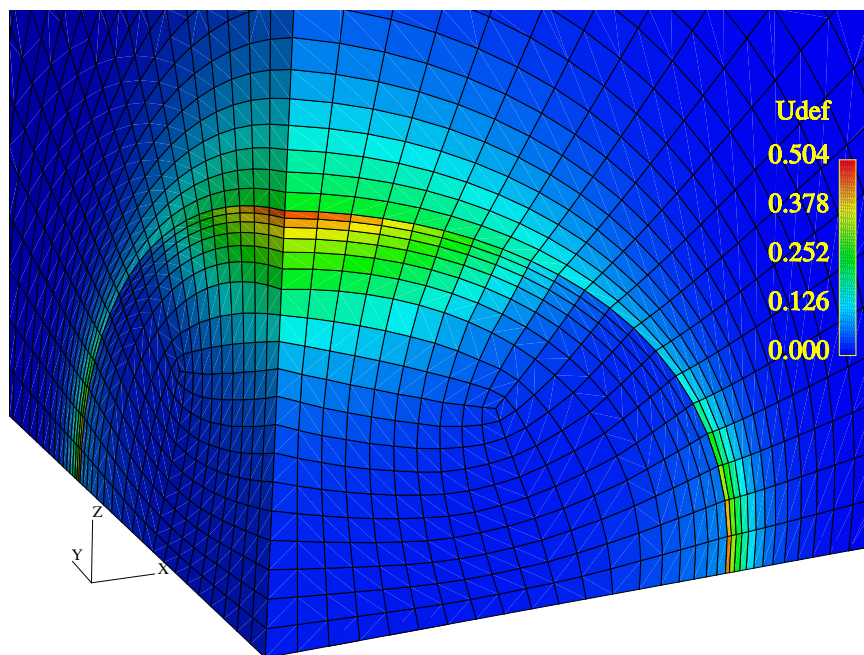
Kao jednadžba pomaka koristi se Laplaceova jednadžba s konstantnim koeficijentom difuzije. Čvorovi na vanjskoj granici domene su nepomični. Početno polje pomaka čvorova jednako je nuli, a sustav linearnih algebarskih jednadžbi rješava se dok suma reziduala za svaku komponentu pomaka ne padne ispod 1.0×10^{-6} .

Tablica 4.4: Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja za predložene postupke automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre.

	$\alpha_{f,max}$	$\alpha_{f,sr}$	$T, \text{ s}$
Postupak 1	26.45°	3.69°	57.73
Postupak 2	26.45°	3.69°	154.71

U tablici 4.4 prikazani su rezultati proračuna. Kvaliteta pomaknute mreže kod oba je postupka rasčlanjivanja ista, ali je učinkovitost postupka pomicanja mreže 2.7 puta veća kod primjene prvog postupka rasčlanjivanja. Ovo je posljedica znatno većeg broja jednadžbi u globalnom sustavu kada se koristi drugi postupak rasčlanjivanja. Iskustvo pokazuje da je prvi postupak znatno efikasniji za kvalitetne mreže; kako kvaliteta mreže pada, uvjetovanost matrice se također smanjuje, a potreban broj iteracija rješavača sustava linearnih algebarskih jednadžbi se povećava. U takvim uvjetima, drugi postupak proizvodi znatno bolje uvjetovanu matricu i usprkos većem broju jednadžbi, rješavanje sustava je efikasnije. U ekstremnim slučajevima distorzije mreže, omjer broja iteracija između prvog i drugog postupka može doseći vrijednost 10.

Na slici 4.15 prikazana je pomaknuta mreža s odgovarajućom gustoćom energije deformacije, definiranom izrazom (4.31). I na ovom se primjeru može uočiti dominantna deformacija elemenata mreže uz samu pomičnu granicu.



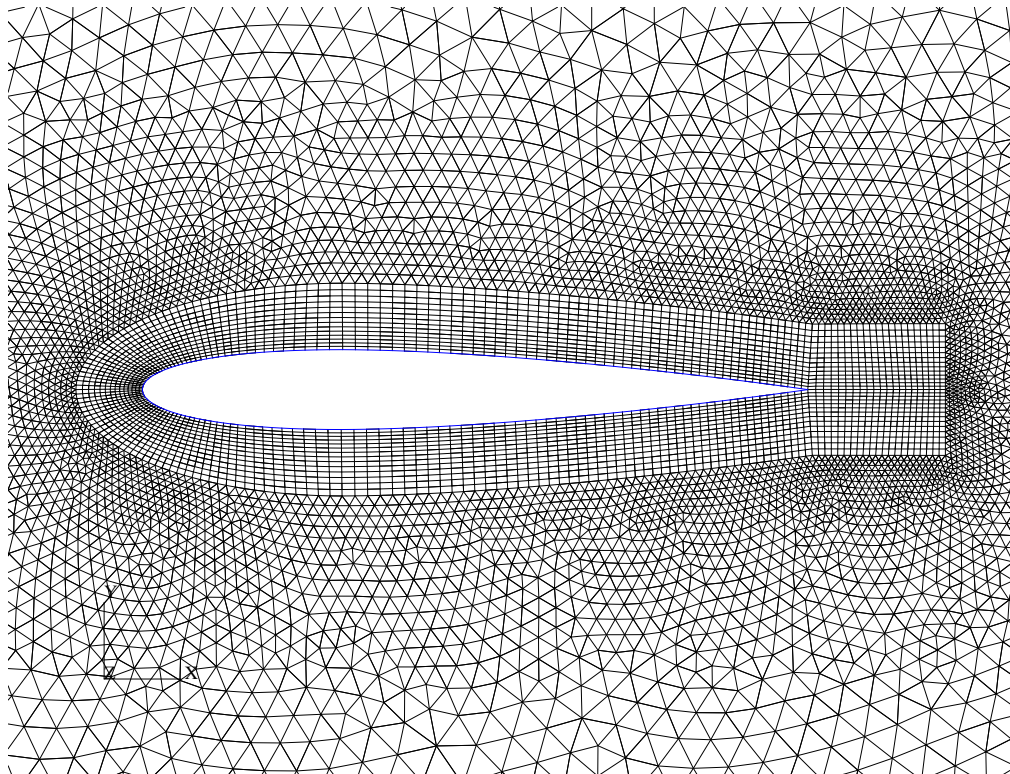
Slika 4.15: Jedna osmina pomaknute mreže u području mjehurića. Boje definiraju raspodjelu gustoće energije deformacije.

4.5.3 Testiranje učinkovitosti minimizacije distorzije mreže primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije

U prethodna dva primjera pomicanja mreže može se uočiti da kontrolni volumeni uz pomičnu granicu doživljavaju najveću deformaciju, tj. da deformacija nije jednoliko raspodijeljena po mreži. Jednolikost deformacije kontrolnih volumena se može postići primjenom prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka. S tim su ciljem u odjeljku 4.4.2 predložena dva osnovna pristupa za definiranje prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije. Kod jednog je koeficijent difuzije obrnuto proporcionalan udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, a kod drugog je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći ukupne i distorzijske energije deformacije. U ovom je odjeljku testirana učinkovitost predloženih zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u minimizaciji distorzije kontrolnih volumena tijekom pomicanja mreže.

Testiranje je provedeno na primjeru pomicanja 2-D mreže oko oscilirajućeg NACA0012 profila. Profil duljine tetive c , oscilira translacijski u smjeru y osi i rotacijski oko točke na tetivi udaljene $0.3c$ od napadnog brida. Amplituda translacijske oscilacije je $0.5c$, a amplituda rotacijske oscilacije 10° . Frekvencija obje oscilacije je 0.5 s^{-1} .

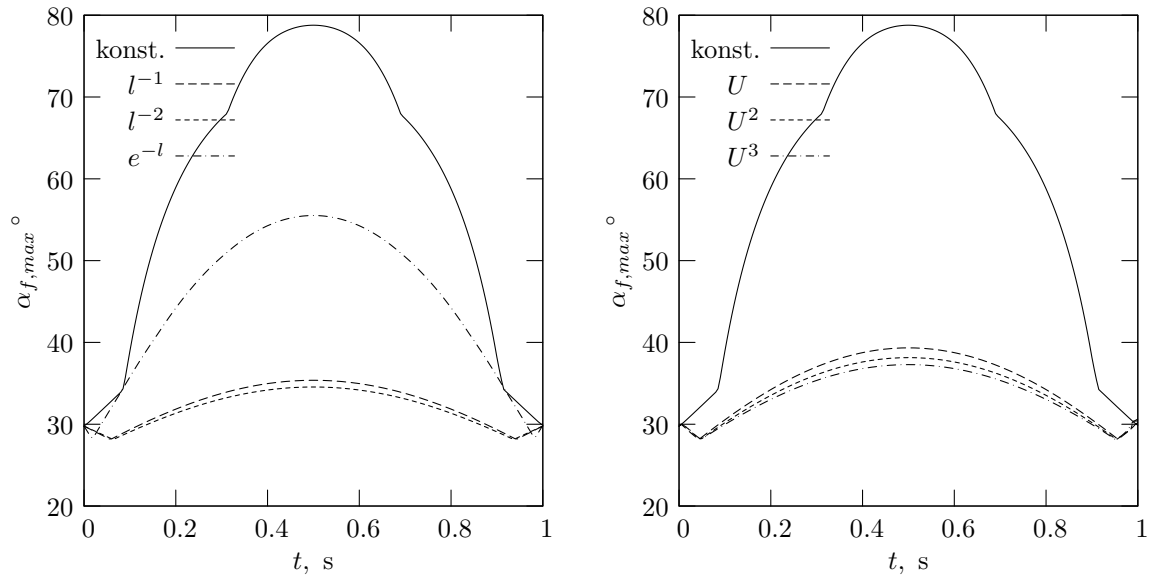
Početna konfiguracija dijela mreže oko profila prikazana je na slici 4.16. Mreža je nestrukturirana i sastoji se od kvadratnih i trokutnih, tj. u FOAM-u heksaedarskih i prizmatičnih kontrolnih volumena.



Slika 4.16: Početna mreža oko oscilirajućeg NACA0012 profila.

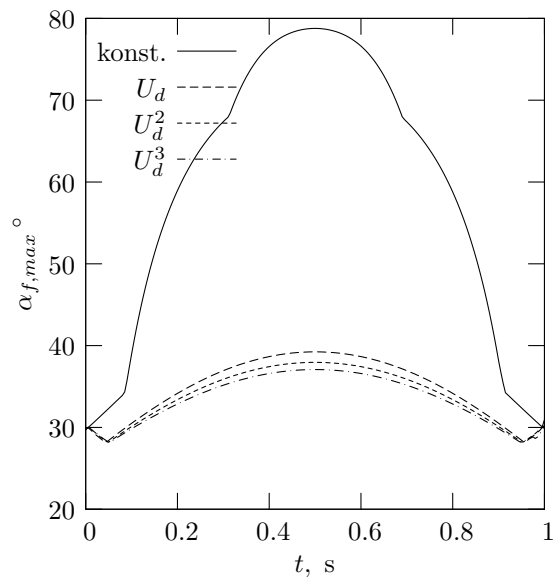
Mreža se pomiče postupno, s vremenskim korakom $\Delta t = 0.005$ s. Dijagrami na slici 4.17 prikazuju vremensku ovisnost maksimalne neortogonalnosti ($\alpha_{f,max}$) mreže u prvoj polovini perioda oscilacije za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi. Treba primijetiti da je, uz konstantni koeficijent difuzije, maksimalna neortogonalnost mreže u trenutku $t = 0.5$ s na granici dozvoljene. Koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan kvadratu udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, u usporedbi sa svim ostalim zakonitostima, daje najmanju maksimalnu neortogonalnost mreže. Međutim, gotovo jednako dobre rezultate daje i koeficijent difuzije proporcionalan trećoj potenciji gustoće ukupne i distorzijske energije deformacije.

Na slici 4.18 prikazane su pomaknute mreže u području izlaznog brida profila u trenutku $t = 0.5$ s, a vrijednosti maksimalne neortogonalnosti za iste mreže prikazane su u tablici 4.5. Na slici 4.18(a) prikazana je mreža za konstantni koeficijent difuzije. Iako



(a) Koeficijent difuzije ovisan o udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice.

(b) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći energije deformacije.



(c) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći distorzijske energije deformacije.

Slika 4.17: Vremenska ovisnost maksimalne neortogonalnosti mreže u prvoj polovini perioda oscilacije NACA0012 profila.

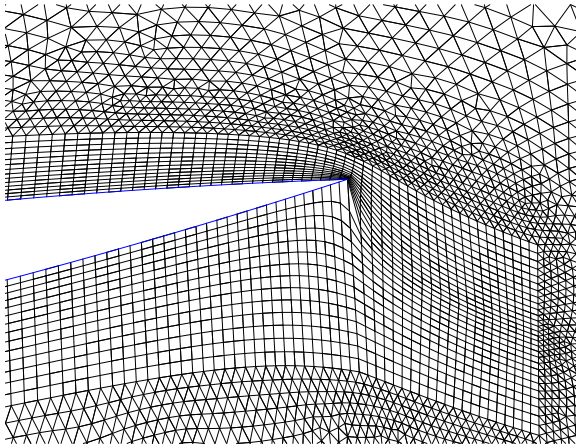
je u tom slučaju nastupila ekstremna distorzija mreže, nije došlo do inverzije kontrolnih volumena. Na slikama 4.18(b), 4.18(c) i 4.18(d) prikazane su mreže za najpovoljnije zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u pojedinim grupama. Mreže su u sva tri slučaja gotovo identične. Neznatno veća distorzija kontrolnih volumena u odnosu na slučaj s koeficijentom difuzije koji obrnuto proporcionalan udaljenosti od pomične granice, javlja se u slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije, jer u tom slučaju najprije mora doći do deformacije mreže da bi se mogla prepoznati mjesta povećane deformacije.

U tablici 4.5 prikazano je i proteklo vrijeme rješavanja problema pomicanja mreže u trenutku $t = 0.5$ s za konstantni koeficijent difuzije i tri najpovoljnije zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije. Najučinkovitiji postupak rješavanja pomicanja mreže je za koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan kvadratu udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice. Učinkovitost postupka rješavanja u slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije nešto je lošija, ali je još uvijek bolja nego u slučaju konstantnog koeficijenta difuzije. Iz prikazanih se podataka vidi kako očuvanje kvalitete mreže znatno utječe na efikasnost postupka pomicanja mreže.

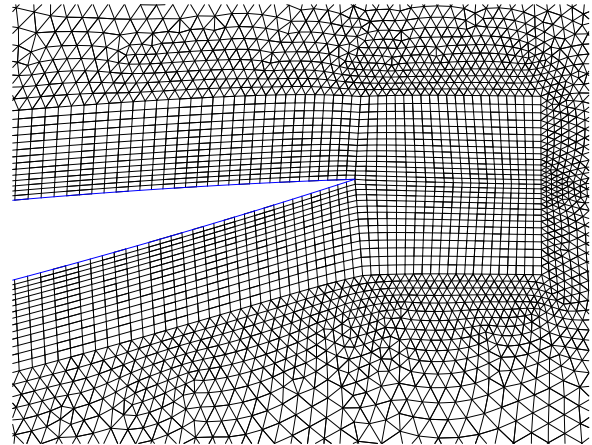
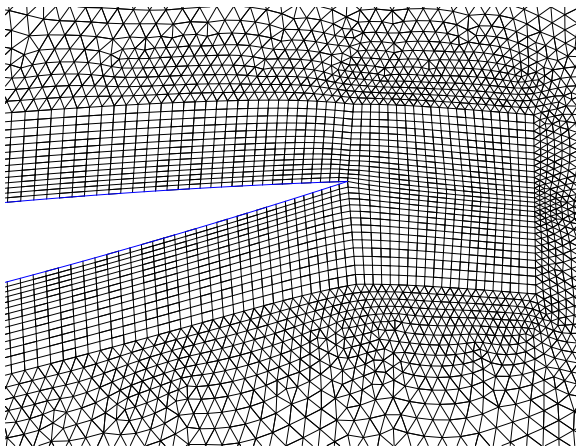
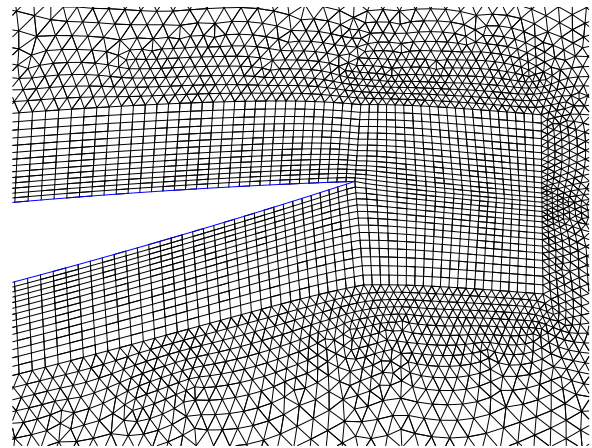
Tablica 4.5: Maksimalna neortogonalnost mreže i proteklo vrijeme rješavanja problema pomicanja mreže u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.

	$\gamma = \text{konst.}$	$\gamma(l) = l^{-2}$	$\gamma(U) = U^3$	$\gamma(U_d) = U_d^3$
$\alpha_{f,max}$	78.78°	34.55°	37.29°	37.07°
$T, \text{ s}$	36.95	17.4	31.18	27.06

Na kraju su različite raspodjele koeficijenta difuzije uspoređene na primjeru pomicanja 2-D cilindra koji je korišten u odjeljku 4.5.1. Određeni su granični pomaci cilindra po jednom koraku pomicanja. U slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći distorzijske energije deformacije, Laplaceova jednadžba pomaka je riješena dva puta. U tablici 4.6 su prikazani dobiveni granični pomaci, a na slici 4.19 su prikazane odgovarajuće pomaknute mreže. U odnosu na konstantni koeficijent difuzije, sve predložene zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije daju značajno veći dozvoljeni pomak cilindra.



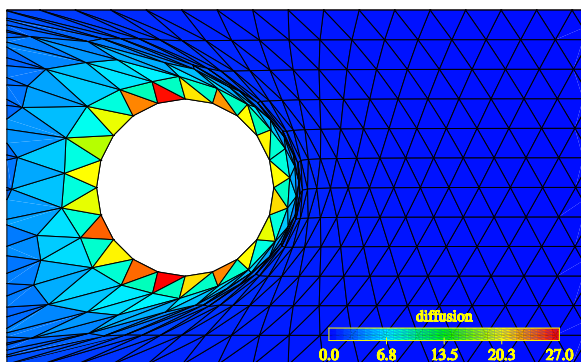
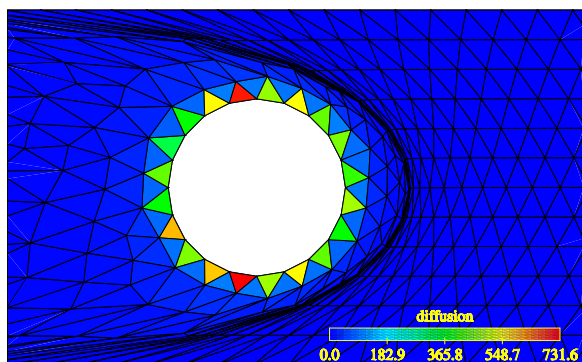
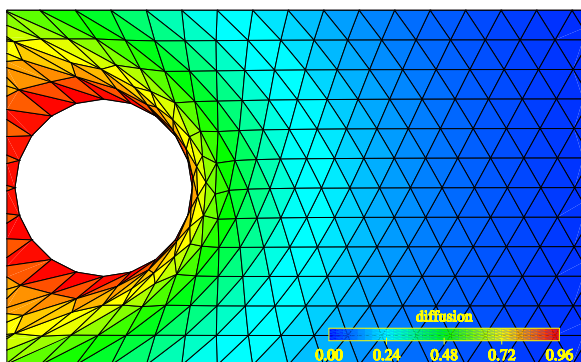
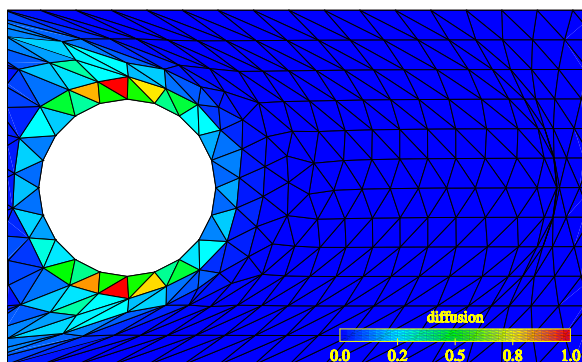
(a) Konstantan koeficijent difuzije.

(b) Koeficijent difuzije ovisan o udaljenosti od pomične granice, $\gamma(l) = l^{-2}$.(c) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći energije deformacije, $\gamma(U) = U^3$.(d) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći distorzijske energije deformacije, $\gamma(U_d) = U_d^3$.

Slika 4.18: Pomaknuta mreža u području izlaznog brida NACA0012 profila u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi.

Tablica 4.6: Granični pomak (Δ_{gr}) cilindra za različite raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.

	$\gamma(l) = l^{-1}$	$\gamma(l) = l^{-2}$	$\gamma(l) = e^{-l}$	$\gamma(U_d) = U_d^3$
Δ_{gr}	$1.42D$	$1.82D$	$0.96D$	$1.09D$

(a) $\gamma(l) = l^{-1}$ (b) $\gamma(l) = l^{-2}$ (c) $\gamma(l) = e^{-l}$ (d) $\gamma(U_d) = U_d^3$.

Slika 4.19: Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra uz različite raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže. Boje definiraju raspodjelu odgovarajućeg koeficijenta difuzije.

4.6 Zaključak

Definirana je pouzdana automatska metoda pomicanja mreže koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Metoda koristi Laplaceovu jednadžbu pomaka s prostorno promjenjivim koeficijentom difuzije. Da bi se jednadžba pomaka mogla diskretizirati pomoću metode konačnih elemenata uveden je tzv. kompozitni poliedarski konačni element koji nastaje rasčlanjivanjem poliedra na tetraedre. Diskretizirana jednadžba pomaka rješava se odvojenim postupkom rješavanja.

Testiranje predložene metode pokazalo je da Laplaceova jednadžba pomaka s konstantnim koeficijentom difuzije garantira očuvanje valjanosti mreže ako se koristi dovoljno mali pomak u jednom koraku simulacije. Ako se želi održati zadovoljavajuća razina kvalitete mreže mora se uvesti prostorno promjenjivi koeficijent difuzije. Predložene zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije pokazale su se vrlo učinkovite u minimizaciji distorzije elemenata mreže.

Formulacija metode diskretizacije jednadžbe pomaka mreže je takva da omogućava korištenje iterativnih rješavača i paralelnih računala. Paralelni postupak rješavanja koristi istu dekompoziciju mreže koja se koristi za metodu kontrolnih volumena koja je opisana u 3. poglavlju.

Poglavlje 5

Metoda kontrolnih površina

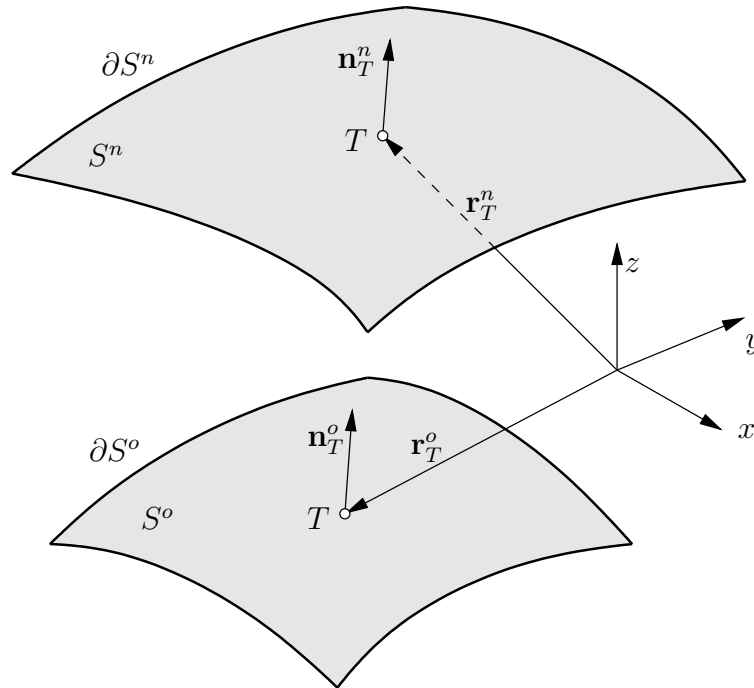
5.1 Uvod

U ovom je poglavlju opisana metoda diskretizacije koja omogućuje numeričko rješavanje transportnih jednadžbi na zakrivljenoj deformabilnoj površini. Računska mreža koja se dobiva diskretizacijom prostorne domene sastoji se od kontrolnih površina proizvoljnog poligonalnog oblika u čijim su težištima smještene prostorne računske točke. Integralna transportna jednadžba se diskretizira na svakoj kontrolnoj površini u mreži u skladu s principima klasične metode kontrolnih volumena. Time je na eksplicitan način osigurano očuvanje konzervativnih svojstava na diskretnoj i globalnoj razini. U graničnom slučaju, kada je prostorna domena rješavanja ravna površina, predložena metoda diskretizacije svodi se na 2-D varijantu metode kontrolnih volumena, koja je opisana u 3. poglavlju.

U odjeljku koji slijedi, opisana je diskretizacija prostorne domene rješavanja. Diskretizacija skalarne transportne jednadžbe na površinskoj nestrukturiranoj mreži prikazana je u odjeljku 5.3. Predložena metoda kontrolnih površina provjerena je u odjeljku 5.4 na tri numerička primjera: difuzijski transport, konvekcijsko-difuzijski transport i nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere. Zaključci ovog poglavlja navedeni su u odjeljku 5.5.

5.2 Diskretizacija prostorne domene rješavanja

Prostorna domena rješavanja je glatka zakrivljena površina čiji se oblik mijenja s vremenom, slika 5.1.



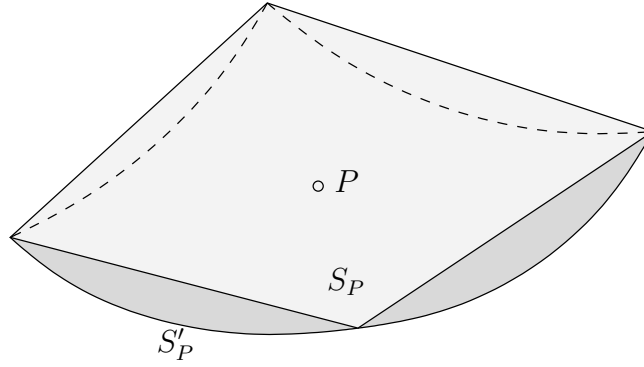
Slika 5.1: Glatka zakrivljena površina vremenski promjenjivog oblika.

Diskretizacija prostorne domene rezultira s površinskom računskom mrežom, koja se sastoji od konačnog broja kontrolnih površina koje se međusobno ne preklapaju. Kontrolna površina može biti konveksni poligon koji je ograničen proizvoljnim brojem ravnih bridova. Težište kontrolne površine predstavlja prostornu računsku točku.

Budući da su bridovi kontrolnih površina ravni, samo se čvorovi kontrolnih površina nalaze na površini koja predstavlja prostornu domenu, a bridovi se podudaraju s tetivama geodetskih linija¹ koje spajaju odgovarajuće čvorove, slika 5.2. Veličina zakrivljene kontrolne površine P je manja od veličine pripadajućeg dijela površine prostorne domene ($S_P \leq S'_P$). Prema tome, suma veličina svih kontrolnih površina u mreži bit će manja od ukupne površine prostorne domene. Razlika će ovisi o odnosu između zakrivljenosti površine prostorne domene i rezolucije površinske mreže.

Na slici 5.3 prikazane su kontrolne površine P i N i njima zajednički brid e . Kontrolna

¹Geodetska linija je najkraća krivulja na zakrivljenoj površini koja spaja dvije točke na toj površini.



Slika 5.2: Odstupanje kontrolne površine od pripadajućeg dijela prostorne domene.

površina P ima veličinu S_P i jediničnu normalu $\mathbf{n}_P$ u težištu, a brid e ima duljinu L_e i jediničnu normalu $\mathbf{n}_e$ u svojem težištu. Jedinična normala $\mathbf{n}_e$ računa se kao srednja vrijednost jediničnih normala u početnoj i krajnjoj točki brida e :

$$\mathbf{n}_e = \frac{\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j}{|\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j|}. \quad (5.1)$$

Postupak određivanja normale u čvorovima površinske nestrukturirane mreže detaljno je opisan u 6. poglavlju. Uz svaki brid e vezana je i jedinična binormala $\mathbf{m}_e$, koja je okomita na promatrani brid i njegovu normalu $\mathbf{n}_e$, a usmjerena prema susjednoj kontrolnoj površini N :

$$\mathbf{m}_e = \hat{\mathbf{e}} \times \mathbf{n}_e, \quad (5.2)$$

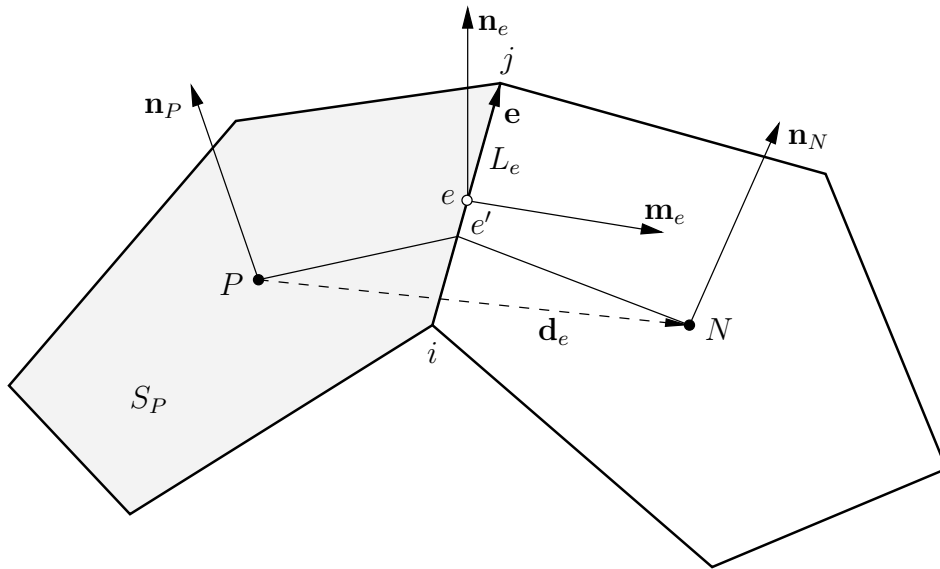
gdje je $\hat{\mathbf{e}}$ jedinični vektor paralelan s bridom e .

Linija $Pe'N$ na slici 5.3 je geodetska linija koja spaja težišta susjednih kontrolnih površina P i N . Ova linija siječe brid e u točki e' , čiji položaj se određuje primjenom sljedećeg izraza:

$$\mathbf{r}'_e = \mathbf{r}_i + \beta_e \mathbf{e}, \quad (5.3)$$

gdje su $\mathbf{r}_i$ i $\mathbf{r}_j$ vektori položaja početne i krajnje točke brida e , a $\mathbf{e} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ vektor s modulom L_e , paralelan s bridom e . Koeficijent β_e određuje se tako, da trokut koji određuju vektori $\mathbf{d}_e$ i $\overline{Pe'}$ ima minimalnu površinu:

$$\beta_e = \frac{[\mathbf{d}_e \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_P)] \cdot (\mathbf{d}_e \times \mathbf{e})}{|\mathbf{d}_e \times \mathbf{e}|^2}, \quad (5.4)$$



Slika 5.3: Kontrolne površine P i N.

gdje je $\mathbf{d}_e = \overline{PN}$, a $\mathbf{r}_P$ je vektor položaja težišta kontrolne površine P . U slučaju kada ne postoji distorzija (engl. skewness) mreže na stranici e , točka e' nalazi se u težištu brida, tj. $\beta_e = 0.5$.

Geometrijska svojstva kontrolnih površina (težište, normala, itd.) računaju se na isti način kao i geometrijska svojstva stranica kontrolnih volumena. Za definiciju površinske mreže koristi se adresiranje po bridovima kontrolnih površina, a definicija sadrži iste komponente kao i definicija mreže kontrolnih volumena: lista čvorova, lista bridova, lista kontrolnih površina i lista graničnih zona. Kriteriji provjere topološke i geometrijske valjanosti mreže isti su kao i kod mreže kontrolnih volumena.

5.3 Diskretizacija transportne jednadžbe

Transport površinskog skalarnog svojstva ψ uzduž zakrivljene deformabilne površine može se opisati sljedećom integralnom transportnom jednadžbom (npr. jednadžba (2.37)):

$$\frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v}_t - \mathbf{b}_t) \psi \, dL = \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) \, dL + \int_S s_\psi \, dS, \quad (5.5)$$

gdje je S proizvoljna pokretna površina ograničena krivuljom ∂S . Brzina $\mathbf{v}_t$ je tangencijalna komponenta brzine točaka materijalne površine, a $\mathbf{b}_t$ tangencijalna komponenta brzine točaka proizvoljne površine S . Kretanje materijalne i proizvoljne površine

ograničeno je uvjetom (C.1):

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}.$$

U ovom je odjeljku opisana diskretizacija jednadžbe (5.5) pomoću metode kontrolnih površina na nestrukturiranoj pomičnoj površinskoj mreži, koja je definirana u odjeljku 5.2. Postupak diskretizacije proveden je uz pretpostavku da se mreža kontrolnih površina pomiče u smjeru normale na površinu, tj. $\mathbf{b}_t = \mathbf{0}$. U tom slučaju transportna jednadžba (5.5) dobiva sljedeći oblik:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS}_{\text{Vremenski član}} + \underbrace{\oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_t \psi \, dL}_{\text{Konvekcijski član}} = \underbrace{\oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) \, dL}_{\text{Difuzijski član}} + \underbrace{\int_S s_\psi \, dS}_{\text{Izvorski član}}. \quad (5.6)$$

Jednako kao i kod metode kontrolnih volumena, polazi se od zahtjeva da transportna jednadžba mora biti zadovoljena za svaku kontrolnu površinu u mreži. Prema tome, prostorne integrale u jednadžbi (5.6) treba integrirati po kontrolnoj površini S_P :

$$\frac{d}{dt} \int_{S_P} \psi \, dS + \oint_{\partial S_P} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_t \psi \, dL = \oint_{\partial S_P} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) \, dL + \int_{S_P} s_\psi \, dS, \quad (5.7)$$

gdje je ∂S_P granica kontrolne površine S_P , koja se sastoji od konačnog broja ravnih linija.

Diskretizacija prostornih integrala u jednadžbi (5.7) provedena je uz pretpostavku linearne raspodjele varijable ψ po kontrolnoj površini P :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_P + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) \cdot (\nabla_s \psi)_P, \quad (5.8)$$

gdje je $(\nabla_s \psi)_P$ površinski gradijent varijable ψ u težištu kontrolne površine P , a $\mathbf{r}_P$ vektor položaja težišta promatrane kontrolne površine. Vremenska raspodjela varijable ψ na intervalu $[t^o, t^n]$ također je linearna i definirana je izrazom (3.12). Pretpostavka linearne raspodjele zavisne varijable u prostoru i vremenu dovoljna je za postizanje drugog reda točnosti metode diskretizacije.

Prilikom diskretizacije prostornih integrala polazi se od pretpostavke da su sve tenzorske veličine u prostornim računskim točkama mreže definirane u globalnom Kartezijevom koordinatnom sustavu.

5.3.1 Diskretizacija prostornih integrala

Potrebno je diskretizirati površinske i linijske integrale u jednadžbi (5.7). Diskretizacija površinskih integrala provodi se primjenom izraza (3.15), tj. pravila centralne točke:

$$\int_{S_P} \psi(\mathbf{r}) \, dS = \psi_P S_P. \quad (5.9)$$

Uzimajući u obzir da je kontrolna površina ograničena konačnim brojem ravnih bridova, linijski integral po granici kontrolne površine može se zapisati kao suma linijskih integrala po bridovima,

$$\oint_{\partial S_P} \psi(\mathbf{r}) \, dL = \sum_e \int_{L_e} \psi(\mathbf{r}) \, dL, \quad (5.10)$$

pri čemu se integrali po bridovima računaju primjenom pravila centralne točke,

$$\int_{L_e} \psi(\mathbf{r}) \, dL = \psi_e L_e, \quad (5.11)$$

gdje je $\psi_e = \psi(\mathbf{r}_e)$ vrijednost varijable ψ u težištu brida e , a L_e duljina promatranog brida.

Konvekcijski član

Diskretizacija konvekcijskog člana provodi se primjenom izraza (5.10) i (5.11), na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial S_P} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_t \psi \, dL &= \sum_e \mathbf{m}_e \cdot (\mathbf{v}_t)_e L_e \psi_e \\ &= \sum_e \dot{s}_e \psi_e, \end{aligned} \quad (5.12)$$

gdje je $\dot{s}_e = \mathbf{m}_e \cdot (\mathbf{v}_t)_e L_e$ površinski tok točaka materijalne površine.

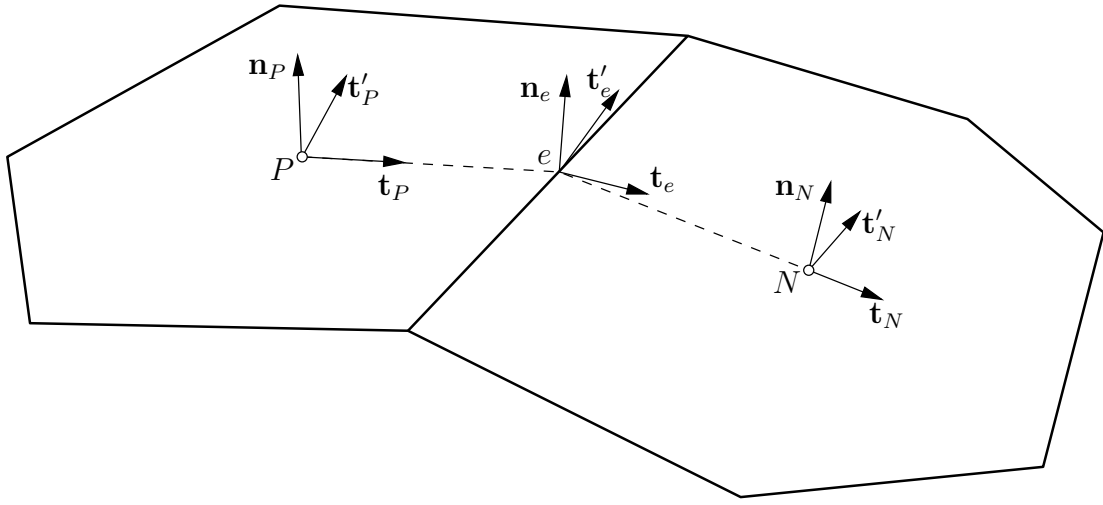
Vrijednost varijable ψ na bridu e računa se iz vrijednosti varijable u težištima susjednih kontrolnih površina primjenom sheme diskretizacije konvekcijskog člana. U slučaju kada se interpolira skalarna varijabla mogu se primijeniti sheme diskretizacije opisane u odjeljku 3.3.1 uz uvjet da se umjesto Euklidske udaljenosti između težišta susjednih kontrolnih površina koristi geodetska udaljenost. Tako se primjenom centralne sheme diskretizacije, vrijednost varijable ψ na bridu e računa na sljedeći način:

$$\psi_e = e_x \psi_P + (1 - e_x) \psi_N, \quad (5.13)$$

gdje je interpolacijski faktor e_x definiran kao omjer geodetskih udaljenosti $\overline{eN}$ i $\overline{PN}$:

$$e_x = \frac{\overline{eN}}{\overline{PN}}. \quad (5.14)$$

U slučaju interpolacije tenzorske varijable postupak je nešto kompliciraniji. Na slici 5.4 prikazane su kontrolne površine P i N koje imaju zajednički brid e . Potrebno je odrediti vrijednost tenzorske varijable $\mathbf{T}$ na sjecištu geodetske linije PeN i brida e , korištenjem vrijednosti promatrane varijable u težištima susjednih kontrolnih površina, $\mathbf{T}_P$ i $\mathbf{T}_N$. Tenzorske varijable $\mathbf{T}_P$ i $\mathbf{T}_N$ definirane su u globalnom Kartezijevom koordinatnom sustavu, a isto se zahtijeva i za interpoliranu vrijednost $\mathbf{T}_e$.



Slika 5.4: Lokalni ortogonalni krivocrtni koordinatni sustav na bridu kontrolne površine.

Da bi se interpolacija smjela provesti po komponentama, tenzore $\mathbf{T}_P$, $\mathbf{T}_N$ i $\mathbf{T}_e$ treba transformirati u lokalni krivocrtni koordinatni sustav. Za tu svrhu je za svaki brid e definiran lokalni ortogonalni krivocrtni koordinatni sustav $tt'n$, kojemu se koordinatna površina $n = 0$ poklapa s kontrolnim površinama P i N , a koordinatna površina $t' = 0$ prolazi geodetskom linijom PeN . Na slici 5.4 prikazani su jedinični vektori lokalnog ortogonalnog krivocrtnog koordinatnog sustava u točkama P , e i N . Jedinični vektor $\mathbf{t}$ računa se u točkama P , e i N na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_P &= \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot (\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_P)}{|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot (\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_P)|}, \\ \mathbf{t}_e &= \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_e \mathbf{n}_e) \cdot (\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_P)}{|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_e \mathbf{n}_e) \cdot (\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_P)|}, \\ \mathbf{t}_N &= \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_N \mathbf{n}_N) \cdot (\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_e)}{|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_N \mathbf{n}_N) \cdot (\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_e)|}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

a jedinični vektor $\mathbf{t}'$ računa se u istim točkama na sljedeći način:

$$\mathbf{t}'_P = \mathbf{n}_P \times \mathbf{t}_P, \quad \mathbf{t}'_e = \mathbf{n}_e \times \mathbf{t}_e, \quad \mathbf{t}'_N = \mathbf{n}_N \times \mathbf{t}_N. \quad (5.16)$$

Transformacija tenzora $\mathbf{T}_P$, $\mathbf{T}_N$ i $\mathbf{T}_e$ iz globalnog Kartezijevog u lokalni ortogonalni krivocrtni koordinatni sustav provodi se primjenom odgovarajućih tenzora transformacije $\mathbf{C}_P$, $\mathbf{C}_N$ i $\mathbf{C}_e$. Tenzor transformacije $\mathbf{C}$ u bilo kojoj točki na geodetskoj liniji PeN definiran je sljedećim izrazom:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{t}^T \\ (\mathbf{t}')^T \\ \mathbf{n}^T \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

Vrijednost vektorske varijable $\mathbf{V}$, izražene u globalnom Kartezijevom koordinatnom sustavu, računa se primjenom centralne sheme diskretizacije na sljedeći način:

$$\mathbf{V}_e = (\mathbf{C}_e)^T \cdot [e_x \mathbf{C}_P \cdot \mathbf{V}_P + (1 - e_x) \mathbf{C}_N \cdot \mathbf{V}_N]. \quad (5.18)$$

U slučaju tenzorske varijable $\mathbf{T}_e$ (tenzor 2. reda), interpolacija se provodi primjenom sljedećeg izraza:

$$\mathbf{T}_e = (\mathbf{C}_e)^T \cdot [e_x \mathbf{C}_P \cdot \mathbf{T}_P \cdot (\mathbf{C}_P)^T + (1 - e_x) \mathbf{C}_N \cdot \mathbf{T}_N \cdot (\mathbf{C}_N)^T] \cdot \mathbf{C}_e. \quad (5.19)$$

Kada je prostorna domena ravna površina tenzori transformacije $\mathbf{C}_P$, $\mathbf{C}_N$ i $\mathbf{C}_e$ međusobno su jednaki i izrazi (5.18) i (5.19) postaju analogni s izrazom (5.13).

Iz opisanog postupka interpolacije tenzorskih varijabli na zakrivljenoj površini vidi se da komponente tenzora, izražene u Kartezijevom koordinatnom sustavu, nakon interpolacije postaju međusobno zavisne. Prema tome, rješavanje tenzorske transportne jednadžbe na zakrivljenoj površini zahtijevalo bi vezani postupak rješavanja. Teorijski je moguće koristiti i odvojeni postupak rješavanja u kombinaciji s vanjskim iteracijama. Međutim, upitna je konvergencija takvog postupka, budući da intenzitet povezanosti među komponentama ovisi o zakrivljenosti prostorne domene.

Difuzijski član

Primjenom izraza (5.10) i (5.11) difuzijski član diskretizira se na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) \, dL &= \sum_e \mathbf{m}_e \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi)_e L_e \\ &= \sum_e (\Gamma_\psi)_e L_e \mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e, \end{aligned} \quad (5.20)$$

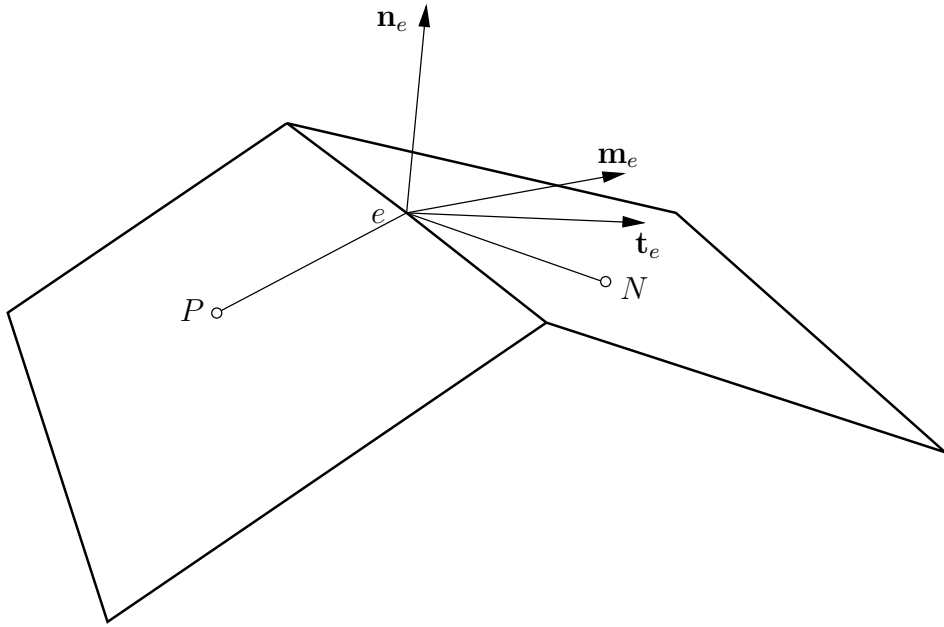
gdje je $\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e$ normalni površinski gradijent varijable ψ na bridu e .

Diskretizacija normalnog površinskog gradijenta ovisi o ortogonalnosti mreže. Ortogonalnost površinske nestrukturirane mreže na zakrivljenoj površini definirana je pomoću jediničnog vektora $\mathbf{t}_e$, koji je tangencijalan na liniju PeN u točki e , slika 5.5. Uz svaki brid e definiran je kut neortogonalnosti α_e na sljedeći način:

$$\alpha_e = \arccos(\mathbf{t}_e \cdot \mathbf{m}_e). \quad (5.21)$$

Prema tome, mreža je na bridu e ortogonalna kada je zadovoljen sljedeći uvjet:

$$\mathbf{t}_e \cdot \mathbf{m}_e = 1. \quad (5.22)$$



Slika 5.5: Uz definiciju neortogonalnosti površinske mreže.

Normalni površinski gradijent skalarne varijable ψ na bridu e se u slučaju ortogonalne površinske mreže računa primjenom sljedećeg izraza:

$$\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e = \frac{\psi_N - \psi_P}{L_{PN}}, \quad (5.23)$$

gdje je L_{PN} geodetska udaljenost između težišta susjednih kontrolnih površina. Na neortogonalnoj mreži se uvodi neortogonalna korekcija:

$$\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e = \underbrace{|\Delta_e| \frac{\psi_N - \psi_P}{L_{PN}}}_{\text{Ortogonalni doprinos}} + \underbrace{\mathbf{k}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e}_{\text{Neortogonalna korekcija}}, \quad (5.24)$$

gdje se vektori $\mathbf{k}_e$ i Δ_e računaju u skladu s nadrelaksacijskom ortogonalnom korekcijom [46], na sljedeći način:

$$\mathbf{k}_e = \mathbf{m}_e - \Delta_e, \quad (5.25)$$

$$\Delta_e = \frac{\mathbf{t}_e}{\mathbf{t}_e \cdot \mathbf{m}_e}. \quad (5.26)$$

Neortogonalna korekcija u jednadžbi (5.24) tretira se eksplicitno. Površinski gradijent $(\nabla_s \psi)_e$ računa se interpolacijom gradijenata u težištima susjednih kontrolnih površina primjenom centralne sheme diskretizacije, tj. jednadžbe (5.18). Površinski gradijent u težištu kontrolne površine računa se primjenom Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu (jednadžba (B.8) u dodatku B):

$$(\nabla_s \psi)_P = \frac{1}{S_P} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \sum_e \mathbf{m}_e \psi_e L_e, \quad (5.27)$$

gdje je ψ_e vrijednost varijable ψ na bridu kontrolne površine iz prethodne vanjske iteracije, koja se računa pomoću jednadžbe (5.13), (5.18) ili (5.19).

Zbog primjene kontrolnih površina čija se granica sastoji od ravnih linija, geodetska udaljenost između težišta kontrolnih površina manja je od geodetske udaljenosti odgovarajućih točaka na stvarnoj površini prostorne domene. Za očekivati je da će se zbog toga narušiti točnost računanja normalnog gradijenta pomoću izraza (5.23) i (5.24). Da bi se to smanjenje točnosti poništilo, na desnu stranu jednadžbe (5.24) dodaje se sljedeća eksplicitna korekcija:

$$D_k = \frac{1}{15} \left[|\Delta_e| \frac{\psi_N - \psi_P}{L_{NP}} - \Delta_e \cdot (\nabla_s \psi)_e \right], \quad (5.28)$$

Ovu je korekciju za metodu kontrolnih volumena izveo Jasak [45], s ciljem postizanja diskretizacije difuzijskog člana 4. reda točnosti.

5.3.2 Vremenska diskretizacija

Nakon diskretizacije prostornih integrala transportna jednadžba (5.7) dobiva sljedeći poludiskretizirani oblik:

$$\frac{d}{dt}(\psi_P S_P) = - \sum_e \dot{s}_e \psi_e + \sum_e (\Gamma_\psi)_e L_e \mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e + s_{\psi u} S_P + s_{\psi p} S_P \psi_P. \quad (5.29)$$

Ovisno o primijenjenoj metodi vremenske diskretizacije, potpuno diskretizirana transportna jednadžba za kontrolnu površinu S_P ima sljedeći oblik:

- Implicitna Eulerova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_P^n S_P^n - \psi_P^o S_P^o}{\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n \\ &= \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n, \end{aligned} \quad (5.30)$$

- Gearova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{3\psi_P^n S_P^n - 4\psi_P^o S_P^o + \psi_P^{oo} S_P^{oo}}{2\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n \\ &= \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n, \end{aligned} \quad (5.31)$$

- Crank-Nicolsonova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_P^n S_P^n - \psi_P^o S_P^o}{\Delta t} + \frac{1}{2} \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n + \frac{1}{2} \sum_e \dot{s}_e^o \psi_e^o \\ &= \frac{1}{2} \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + \frac{1}{2} \sum_e (\Gamma_\psi)_e^o L_e^o \mathbf{m}_e^o \cdot (\nabla_s \psi)_e^o \\ &+ \frac{1}{2} (s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n) + \frac{1}{2} (s_{\psi u}^o S_P^o + s_{\psi p}^o S_P^o \psi_P^o). \end{aligned} \quad (5.32)$$

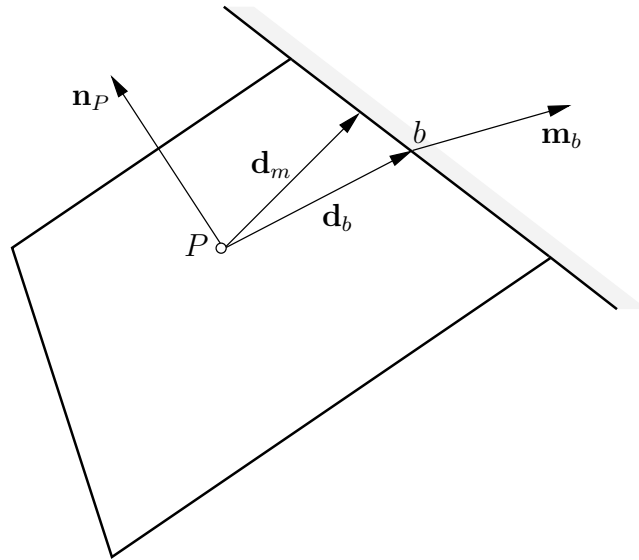
Pri vremenskoj diskretizaciji transportne jednadžbe uzeto je u obzir pomicanje mreže, tj. uvaženo je da se kontrolna površina S_P , binormala $\mathbf{m}_e$ i duljina brida L_e mijenjaju s vremenom. Treba napomenuti da je ovako jednostavno i eksplicitno obuhvaćanje pomicanja površinske mreže kod diskretizacije transportne jednadžbe posljedica pretpostavke da se čvorovi mreže pomiču u smjeru normale na površinu.

5.3.3 Primjena graničnih uvjeta

Na slici 5.6 prikazana je kontrolna površina P , kojoj se brid b nalazi na granici prostorne domene. Vektor $\mathbf{d}_b$ definiran je na isti način kao u odjeljku 3.3.4, tj. njegova početna točka je u težištu kontrolne površine P , a krajnja u težištu graničnog brida b . Duljina vektora $\mathbf{d}_m$, koji odgovara vektoru $\mathbf{d}_n$ u odjeljku 3.3.4, računa se na sljedeći način:

$$|\mathbf{d}_m| = \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \mathbf{m}_b}{|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \mathbf{m}_b|} \cdot \mathbf{d}_b. \quad (5.33)$$

Uz ovako definirane geometrijske parametre graničnih bridova mreže, veličine ψ_e i $\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e$ na graničnim bridovima određuju se na isti način kako je to opisano u odjeljku 3.3.4 za metodu kontrolnih volumena.



Slika 5.6: Uz definiciju geometrijskih parametara graničnog brida mreže.

5.3.4 Sustav linearnih algebarskih jednadžbi

Uzimajući u obzir da ψ_e^n i $\mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n$ ovise o vrijednostima varijable ψ u težištima susjednih kontrolnih površina u trenutku t^n , jednadžbe (5.30), (5.31) i (5.32) u konačnici se svode na linearnu (ili lineariziranu) algebarsku jednadžbu:

$$a_P \psi_P^n + \sum_N a_N \psi_N^n = r_P, \quad (5.34)$$

gdje je a_P dijagonalni (centralni) koeficijent, a_N susjedni koeficijent, a r_P desna strana jednadžbe koja sadrži one članove diskretizirane transportne jednadžbe koji se tretiraju eksplicitno. U slučaju primjene kombinirane sheme diskretizacije konvekcijskog člana i Gearove metode vremenske diskretizacije, koeficijenti a_P i a_N , te desna strana jednadžbe r_P definirani su sljedećim izrazima:

$$a_P = \frac{3S_P^n}{2\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n [(1 - \gamma_f^n) \max(\text{sgn}(\dot{s}_e^n), 0) + \gamma_e^n e_x^n] + \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \frac{|\Delta_e^n|}{|\mathbf{d}_e^n|} - s_{\psi p}^n S_P^n, \quad (5.35)$$

$$a_N = \dot{s}_e^n [(1 - \gamma_e^n) \min(\text{sgn}(\dot{s}_e^n), 0) + \gamma_e^n (1 - e_x^n)] - (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \frac{|\Delta_e^n|}{|\mathbf{d}_e^n|}, \quad (5.36)$$

$$r_P = \frac{4S_P^o \psi_P^o - S_P^{oo} \psi_P^{oo}}{2\Delta t} + \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{k}_e^n \cdot (\nabla \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n, \quad (5.37)$$

gdje je γ_e^n faktor kombinacije centralne i uzvodne skeme diskretizacije konvekcijskog člana.

Budući da se jednačba (5.34) dobiva za svaku kontrolnu površinu u mreži, konačni rezultat diskretizacije transportne jednačbe je sustav linearnih (lineariziranih) jednačbi. Matrica sustava je rijetka, a struktura popunjenosti kao i kod metode kontrolnih volumena ovisi o redoslijedu označavanja kontrolnih površina u mreži.

Matrica sustava jednačbi je kao i kod metode kontrolnih volumena sigurno pozitivno definitna. Da li će matrica biti i dijagonalno dominantna ovisit će o korištenoj shemi interpolacije i kvaliteti površinske mreže. Sustav jednačbi rješava se ICCG iterativnim postupkom ako se radi o simetričnoj matrici sustava, odnosno Bi-CGSTAB postupkom ako se radi o nesimetričnoj matrici sustava.

5.4 Provjera numeričkog modela

Slijedi provjera predložene metode diskretizacije na tri numerička primjera. Najprije se provjerava točnost rješavanja difuzijskog člana na neortogonalnoj površinskoj mreži. Nakon tog slijedi provjera točnosti rješenja konveksijsko-difuzijske jednačbe, te provjera točnosti nestacionarne konveksijsko-difuzijske jednačbe. U sva je tri primjera prostorna domena rješavanja površina sfere, na kojoj je definirana strukturirana ili nestrukturirana površinska mreža. U prva su dva primjera odabrani takvi granični uvjeti, koji odgovaraju osnosimetričnom transportu skalarnog svojstva na površini sfere, za koji je izvedeno analitičko rješenje. U trećem se primjeru numeričko rješenje uspoređuje s numeričkim rješenjem parcijalne diferencijalne jednačbe koja definira osnosimetrični nestacionarni konveksijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.

Testiranje predložene metode diskretizacije na površinskoj mreži koja se mijenja s vremenom bit će provedeno u sklopu 7. poglavlja, na primjeru transporta surfaktanata na površini mjehurića.

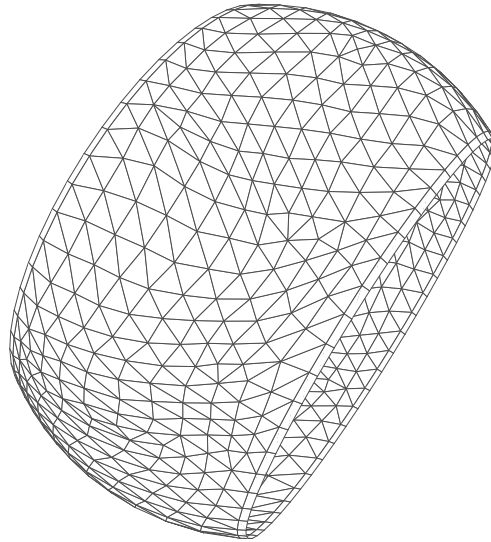
5.4.1 Difuzijski transport

Potrebno je riješiti difuzijski transport skalarnog svojstva ψ na površini sfere radijusa $R = 1$ u području polarnog kuta $60^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$. Zadani su sljedeći granični uvjeti: $\psi_0 = 0$ za $\theta_0 = 60^\circ$ i $\psi_1 = 1$ za $\theta_1 = 120^\circ$. Koeficijent difuzije jednak je jedinici, $\Gamma_\psi = 1$.

U dodatku E izvedeno je analitičko rješenje ovog problema. Raspodjela svojstva ψ po

površini sfere je osnosimetrična, a definirana je jednačbom (E.6).

Na zadanoj prostornoj domeni definirana je nestrukturirana površinska mreža, koja se sastoji od trokutnih i četverokutnih kontrolnih površina, slika 5.4.1. Mreža sadrži 1408 kontrolnih površina (KP) prosječne dimenzije¹ $L = 0.062$. Maksimalni kut neortogonalnosti² mreže je 50° , a prosječni 15° .



Slika 5.7: Nestrukturirana površinska mreža za računanje difuzijskog transporta na površini sfere.

Dijagram na slici 5.8 prikazuje numeričko rješenje gore definiranog problema koje je dobiveno primjenom predložene metode kontrolnih površina. Vrijednosti varijable ψ , koje su izračunate za težišta kontrolnih površina, prikazane su kao funkcija polarnog kuta θ . Unatoč nejednolikoj rezoluciji i povećanoj neortogonalnosti mreže, numeričko se rješenje vrlo dobro slaže s analitičkim. Prosječna apsolutna pogreška³ je $E = 0.001$.

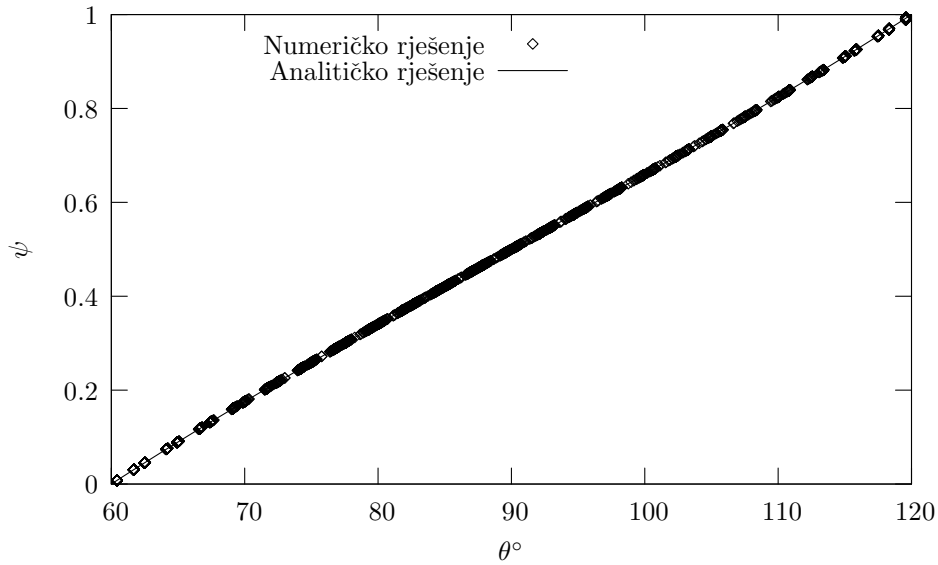
¹Prosječna dimenzija kontrolnih površina izračunata je kao prosječna vrijednost geodetskih udaljenosti težišta susjednih kontrolnih površina.

²Kut neortogonalnosti bridova kontrolnih površina definira je jednačbom (5.21).

³Prosječna apsolutna pogreška računa se prema sljedećem izrazu:

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\psi_{ai} - \psi_i|, \quad (5.38)$$

gdje je ψ_i numeričko rješenje u težištu kontrolne površine i , ψ_{ai} analitičko rješenje na istom mjestu, a N broj kontrolnih površina u mreži.



Slika 5.8: Rješenje osnosimetričnog difuzijskog transporta na površini sfere.

5.4.2 Konvekcijsko-difuzijski transport

Na prostornoj domeni iz prethodnog problema je, uz iste rubne uvjete, potrebno riješiti konvektivno-difuzijski transport skalarnog svojstva ψ . Polje brzine definirano je sljedećim izrazom:

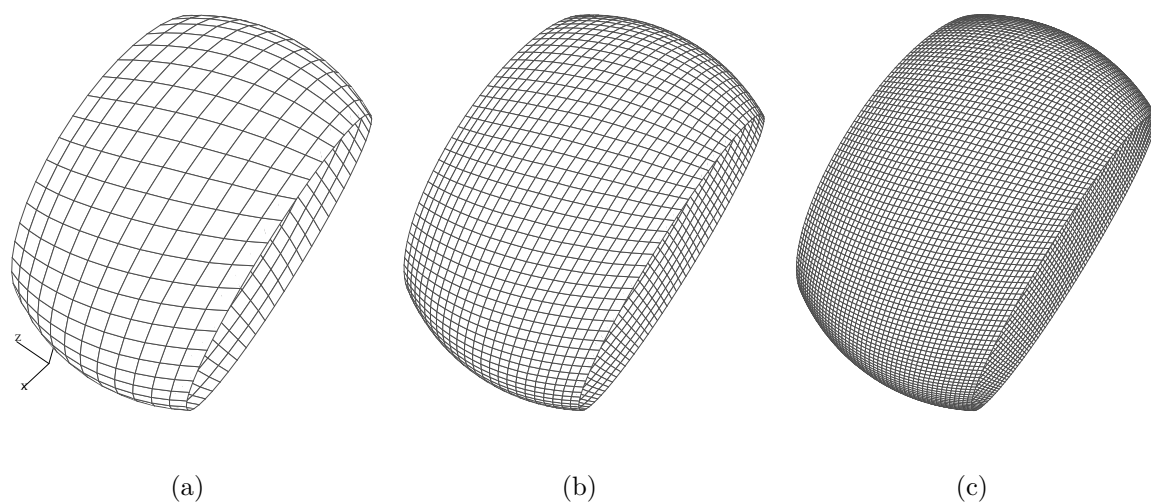
$$\mathbf{v}_t = \frac{v_0}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta, \quad (5.39)$$

gdje je $\mathbf{e}_\theta$ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava, θ polarni kut, a v_0 veličina vektora brzine za polarni kut $\theta = \pi/2$. Površinski divergens ovog osnosimetričnog polja brzine jednak je nuli.

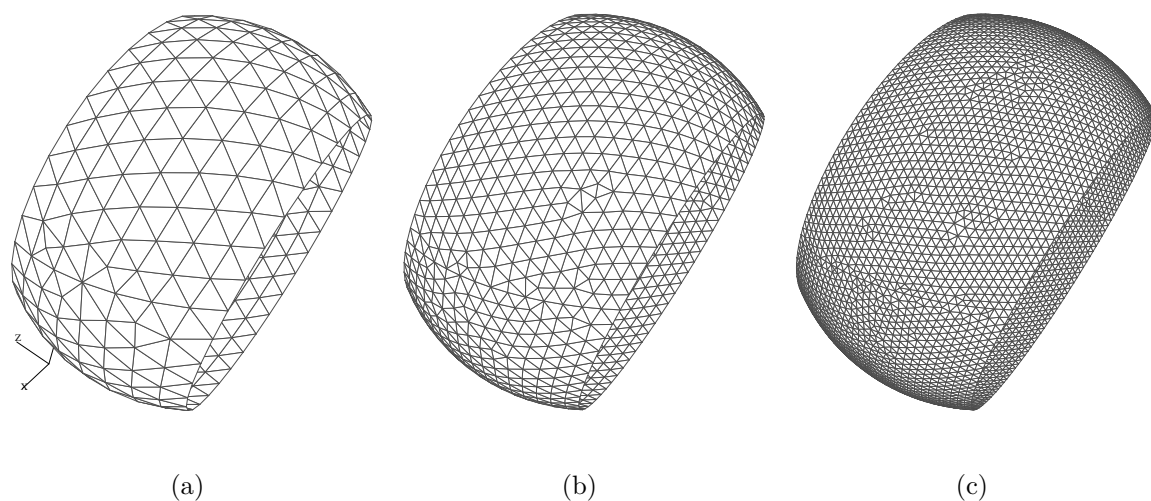
Funkcija (E.5) u dodatku E predstavlja analitičko rješenje ovog problema. Raspodjela varijable ψ je osnosimetrična i ovisi o Pecletovom broju, koji je definiran jednadžbom (E.4).

Za rješavanje ovog problema definirane su dvije vrste površinske mreže: strukturirana mreža, slika 5.9, i nestrukturirana mreža, slika 5.10. Svaka od ovih mreža izvedena je u tri rezolucije: 600 KP, 2400 KP i 9600 KP. Maksimalna i prosječna neortogonalnost strukturirane mreže je 30° i 17° , a nestrukturirane mreže 30° i 3° .

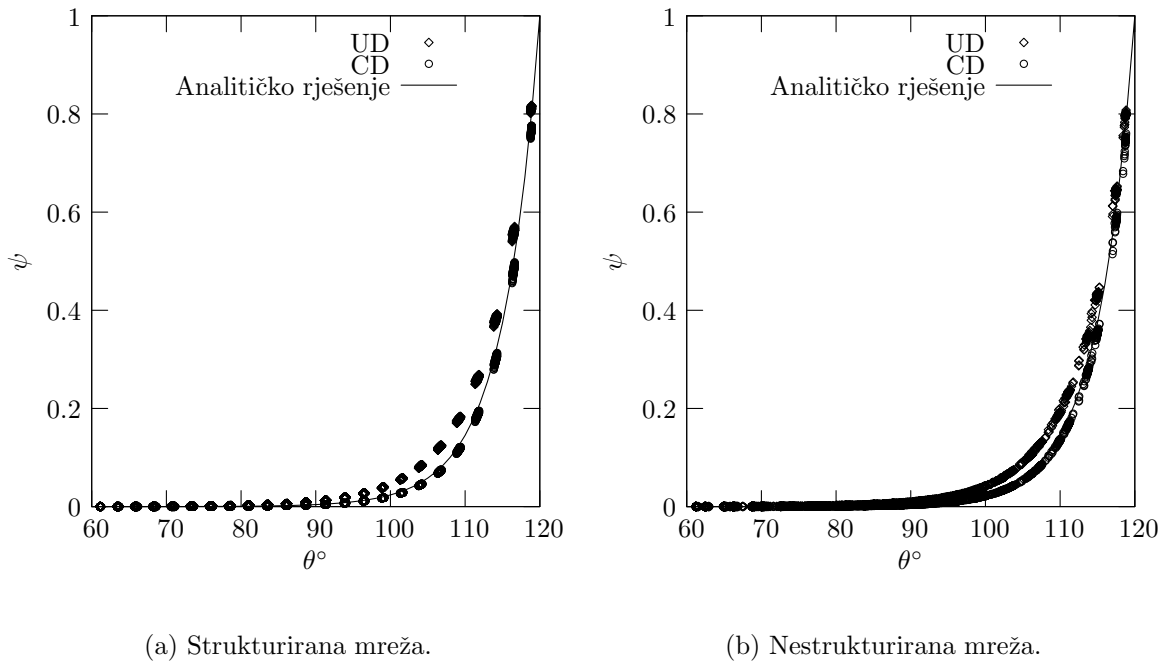
Površinski tok kroz bridove kontrolnih površina, tj. varijabla $\dot{s}_e$ u izrazu (5.12), računa se numeričkim rješavanjem integrala $\int_{L_e} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_t dL$ primjenom Simpsonovog pravila. Vrijednost zavisne varijable na bridovima kontrolnih površina računa se primjenom uzvodne



Slika 5.9: Strukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.



Slika 5.10: Nestrukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.



Slika 5.11: Rješenje osnosimetričnog konveksijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$.

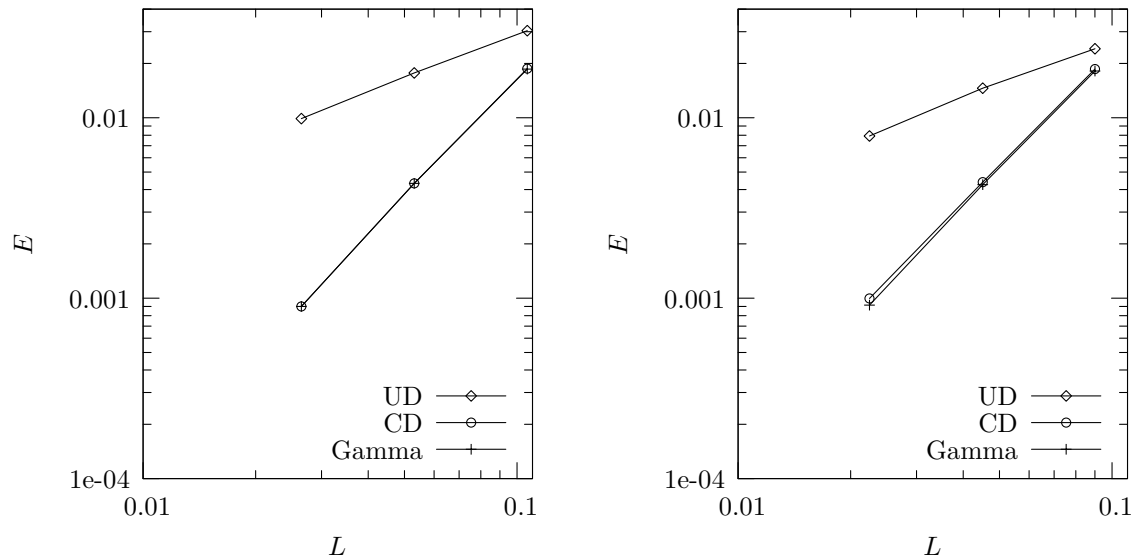
(UD), centralne (CD) i Gamma sheme interpolacije.

Slika 5.11 prikazuje numeričko rješenje osnosimetričnog konveksijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$. Dijagram na slici 5.11(a) prikazuje rješenje na strukturiranoj mreži za uzvodnu i centralnu shemu diskretizacije, dok dijagram na slici 5.11(b) prikazuje isto na nestrukturiranoj mreži.

Dijagrami na slici 5.12 prikazuju prosječnu apsolutnu pogrešku rješenja konveksijsko-difuzijskog transporta za $Pe = 10$ u ovisnosti o prosječnoj dimenziji kontrolnih površina. Iz ovih podataka moguće je odrediti red točnosti primijenjene numeričke metode pomoću sljedećeg izraza (vidjeti npr. Ferziger i Perić [28]):

$$p = \frac{\log \frac{E_1}{E_2}}{\log \frac{L_1}{L_2}}, \quad (5.40)$$

gdje su E_1 i E_2 prosječne apsolutne pogreške na mrežama s prosječnim dimenzijama kontrolnih površina L_1 i L_2 . U tablici 5.1 prikazani su rezultati izračuna reda točnosti za strukturiranu i nestrukturiranu mrežu, ovisno o primijenjenoj shemi interpolacije. Predložena metoda diskretizacije daje rješenje 2. reda točnosti i na strukturiranoj i na nestrukturiranoj mreži, za slučaj kada se kod diskretizacije konveksijskog člana koristi



(a) Strukturirana mreža.

(b) Nestrukturirana mreža.

Slika 5.12: Pogreška rješenja osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$.

centralna shema diskretizacije. Primjenom uzvodne sheme diskretizacije rješenje je ispod 1. reda točnosti. Primjenom Gamma sheme diskretizacije dobiva se rješenje čija je točnost jednaka točnosti rješenja dobivenog uz primjenu centralne sheme diskretizacije.

Tablica 5.1: Točnost metode diskretizacije ovisno o vrsti mreže i shemi diskretizacije.

	UD	CD	Gamma
Strukturirana mreža	0.839	2.261	2.261
Nestrukturirana mreža	0.875	2.128	2.204

5.4.3 Nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport

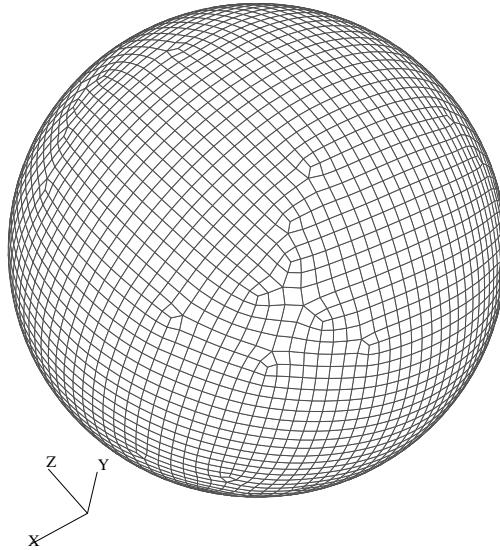
Svrha ovog numeričkog primjera je provjera točnosti rješavanja nestacionarnog površinskog transporta pomoću predložene metode kontrolnih površina. Potrebno je riješiti nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva ψ na površini sfere polumjera $R = 1$. U početnom je trenutku raspodjela zavisne varijable jednolika, $\psi = 1$. Koeficijent difuzije jednak je jedinici, $\Gamma_\psi = 1$, a površinsko polje brzine je osnosimetrično

i definirano sljedećim izrazom,

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_\infty}{4} \sin \theta \mathbf{e}_\theta, \quad (5.41)$$

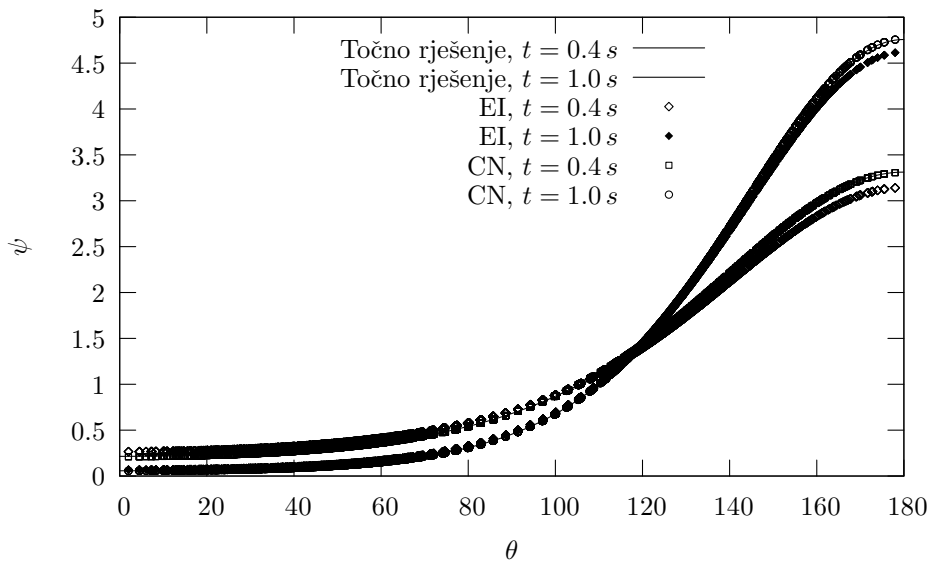
gdje je θ polarni kut, a $\mathbf{e}_\theta$ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Prema [86] izraz (5.41) definira polje brzine na površini kapljice sfernog oblika koja pada u smjeru z koordinatne osi kroz fluid jednake viskoznosti, brzinom v_∞ . Ovaj je nestacionarni osnosimetrični problem u dodatku E riješen numeričkim putem, primjenom metode konačnih razlika. Primijenjena prostorna i vremenska diskretizacija je 2. reda točnosti. Rješenje koje se u ovom primjeru koristi za usporedbu kao “točno” rješenje dobiveno je uz sljedeću diskretizaciju prostora i vremena: $\Delta\theta = (1/8)^\circ$, $\Delta t = 1 \times 10^{-4} s$.

Na površini sfere definirana je nestrukturirana površinska mreža koja se sastoji od četverokutnih kontrolnih površina, slika 5.4.3. Mreža sadrži 10600 kontrolnih površina prosječne dimenzije $L = 0.049$. Maksimalna neortogonalnost mreže je 16° , a prosječna 2° .



Slika 5.13: Nestrukturirana površinska mreža za računanje nestacionarnog konveksijsko-difuzijskog transporta na površini sfere.

Kod numeričkog rješavanja ovog problema pomoću metode kontrolnih površina za diskretizaciju konveksijskog člana je korištena centralna shema diskretizacije, a vremenska diskretizacija je provedena primjenom implicitne Eulerove metode (EI) i Crank-Nicolsonove metode (CN). Na slici 5.14 prikazano je rješenje za $Pe = 10$ u dva vremenska trenutka: 0.4 s i 1.0 s. Korišteni vremenski korak je u svim slučajevima bio



Slika 5.14: Rješenje nestacionarnog osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$.

$\Delta t = 0.1$ s. Primjenom Crank-Nicolsonove metode i uz prilično veliki vremenski korak dobiva se izvrsno poklapanje s “točnim” rješenjem. Prema očekivanjima, implicitna Eulerova metoda daje nešto lošije rješenje. Ukupni sadržaj svojstva ψ se tijekom simulacije ne mijenja što znači da je primijenjena metoda diskretizacije konzervativna.

5.5 Zaključak

Predložena je metoda kontrolnih površina koja omogućava numeričko rješavanje površinske transportne jednadžbe na pomičnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži. Prostorna domena je diskretizirana kontrolnim površinama, koje mogu biti proizvoljnog poligonalnog oblika. Definicija nestrukturirane površinske mreže temelji se na adresiranju po bridovima kontrolnih površina. Diskretizacija difuzijskog člana je 2. reda točnosti na neortogonalnoj mreži. Isto vrijedi i za konvekcijski član ako se primjenjuje centralna ili Gamma shema diskretizacije. Vremenska diskretizacija transporte jednadžbe provedena je primjenom implicitne metode 2. reda točnosti.

Poglavlje 6

Numeričko modeliranje strujanja fluida sa slobodnom površinom

6.1 Uvod

U poglavlju 3 opisana je metoda kontrolnih volumena koja omogućava rješavanje transportnih jednažbi na 3-D domenama promjenjivog oblika primjenom pomične nestrukturirane mreže. Postupak pomicanja mreže koji je opisan u poglavlju 4 podržava proizvoljnu nestrukturiranu mrežu i omogućava značajnu deformaciju oblika prostorne domene, uz očuvanje valjanosti i kvalitete mreže.

U ovom je poglavlju prikazana primjena prije navedene metodologije na rješavanje strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom.

Kao cilj postavlja se definiranje postupka, koji će omogućiti točno rješavanje trodimenzijskog strujanja sa slobodnom površinom u kojem je utjecaj površinskih sila dominantan, npr. kada uz malu viskoznost postoje velike površinske sile. Amplituda deformacije slobodne površine ograničena je samo postupkom pomicanja mreže. Unapređenje postupka obnove mreže treba omogućiti računanje većih amplituda deformacije kao i promjenu topologije slobodne površine.

U odjeljku 6.2 najprije je opisan postupak diskretizacije i rješavanja sustava Navier-Stokesovih jednažbi na pomičnoj mreži. Prikazana je diskretizacija jednažbe količine gibanja, te izvod jednažbe tlaka. Sustav vezanih jednažbi rješava se odvojenim postupkom, gdje se povezanost između brzine i tlaka ostvaruje primjenom postupka SIMPLE.

Postupak rješavanja definiran je za slučaj kada je oblik prostorne domene unaprijed zadan u svakom vremenskom trenutku.

U odjeljku 6.3 opisana je metoda praćenja slobodne površine primjenom pomične mreže. Metoda se temelji na postupku koji su predložili Muzaferija i Perić [59]. Slobodna površina definirana je granicom računске mreže koja se tijekom postupka SIMPLE tako pomiče, da kroz nju rezultantni maseni tok na kraju svakog vremenskog koraka bude jednak nuli. Metoda je proširena tako, da omogućava rješavanje strujanja u obje faze oko slobodne površine, pri čemu primjena dinamičkog uvjeta na slobodnoj površini uključuje promjenjivu površinsku napetost i utjecaj viskoznih sila. Posebna je pozornost posvećena točnom i učinkovitom računanju površinskih sila.

Primjer strujanja fluida sa slobodnom površinom u kojem površinske sile imaju dominantan utjecaj predstavlja podizanje mjehurića u sustavu voda-zrak, Tomiyama [77]. Radi se o vrlo zahtjevnom problemu, u kojem postoji jaka veza između oblika slobodne površine i strujanja. U odjeljku 6.4 opisana je primjena metode praćenja slobodne površine i pomične mreže za numeričko modeliranje mjehurića. U odjeljku 6.5 dan je zaključak poglavlja.

6.2 Diskretizacija sustava Navier-Stokesovih jednažbi na pomičnoj mreži

Promatra se strujanje nestlačivog newtonovskog fluida konstantne viskoznosti na prostornoj domeni promjenjivog oblika. Ovaj je problem definiran sustavom Navier-Stokesovih jednažbi, koji čine jednažba održanja mase (2.13) i jednažba održanja količine gibanja (2.14):

$$\oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dS = 0,$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} \, dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) \, dS + \int_V \rho \mathbf{g} \, dV - \int_V \nabla p \, dV.$$

Budući da je brzina $\mathbf{v}$ u obje jednažbe dominantna zavisna varijabla, kod odvojenog postupka rješavanja potrebno je izvesti jednažbu za tlak. Prije toga treba diskretizirati jednažbu količine gibanja (2.14).

Diskretizacija jednadžbe (2.14) može se provesti primjenom postupka koji je opisan u odjeljku 3.3. Poseban je pristup potreban samo u odnosu na konvekcijski član, u kojem se pojavljuje kvadrat brzine, što znači da bi direktna diskretizacija rezultirala sustavom nelinearnih algebarskih jednadžbi. Da bi se to izbjeglo, provodi se linearizacija.

Primjenom jednadžbe (3.16) konvekcijski se član u jednadžbi (2.14) diskretizira na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
 \oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} \, dS &= \sum_f \mathbf{n}_f \cdot [\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)]_f S_f \mathbf{v}_f \\
 &= \sum_f [\rho_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_f) S_f - \rho_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{sf}) S_f] \mathbf{v}_f \\
 &= \sum_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \mathbf{v}_f,
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

gdje apsolutni maseni tok $\dot{m}_f$ ovisi o polju brzine $\mathbf{v}$. Jednadžba (6.1) linearizira se primjenom Pikardove metode (vidjeti npr. Ferziger i Perić [28]), tako da se apsolutni maseni tok kroz stranice kontrolnih volumena koristi iz prethodne vanjske iteracije.

Prostornom i vremenskom diskretizacijom jednadžbe (2.14) na kontrolnom volumenu V_P , dobiva se sljedeća linearizirana algebarska jednadžba:

$$a_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f a_N \mathbf{v}_N^n = r_P - (\nabla p)_P^n V_P^n, \tag{6.2}$$

u kojoj koeficijenti a_P i a_N ovise o polju brzine $\mathbf{v}$. Jednadžba (6.2) predstavlja tzv. poludiskretizirani oblik jednadžbe količine gibanja, u kojoj gradijent tlaka $(\nabla p)_P^n$ nije diskretiziran. Potpuno diskretizirana jednadžba količine gibanja (2.14) ima sljedeći oblik:

$$a_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f a_N \mathbf{v}_N^n = r_P - \sum_f \mathbf{n}_f^n p_f^n S_f^n, \tag{6.3}$$

gdje je p_f^n tlak na stranici f , koji se dobiva interpolacijom tlakova u težištima susjednih kontrolnih volumena primjenom centralne sheme diskretizacije.

6.2.1 Izvod jednadžbe tlaka

Nakon dijeljenja jednadžbe (6.2) s volumenom V_P^n , dobiva se sljedeći izraz:

$$A_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f A_N \mathbf{v}_N^n = R_P - (\nabla p)_P^n, \tag{6.4}$$

u kojem je $A_P = a_P/V_P^n$, $A_N = a_N/V_P^n$, $R_P = r_P/V_P^n$. Dijeljenjem koeficijenata i izvornog člana s volumenom promatrane ćelije omogućena je njihova interpolacija na stranice ćelije. Ako se definira funkcija

$$\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n) = - \sum_f A_N \mathbf{v}_N^n + R_P, \quad (6.5)$$

jednadžba (6.4) dobiva sljedeći oblik:

$$A_P \mathbf{v}_P^n = \mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n) - (\nabla p)_P^n. \quad (6.6)$$

Diskretizacijom jednadžbe (2.13) na kontrolnom volumenu P dobiva se diskretizirana jednadžba održanja mase:

$$\sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \mathbf{v}_f^n S_f^n = 0. \quad (6.7)$$

Iz jednadžbe (6.6) može se izraziti brzina u kontrolnom volumenu P :

$$\mathbf{v}_P^n = \frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} - \frac{1}{A_P} (\nabla p)_P^n. \quad (6.8)$$

Primjenom postupka koji su predložili Rhie i Chow [68] se brzina na stranici f kontrolnog volumena P određuje interpolacijom članova na desnoj strani jednadžbe (6.8) i odgovarajućih članova iste jednadžbe napisane za susjedni kontrolni volumen N :

$$\mathbf{v}_f^n = \left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f - \left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n. \quad (6.9)$$

Uvrštavanjem jednadžbe (6.9) u jednadžbu (6.7) dobiva se diskretizirana jednadžba tlaka:

$$\sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left[\left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n \right] S_f^n = \sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f S_f^n. \quad (6.10)$$

Apsolutni maseni tok $\dot{m}_f^n$ kroz stranice kontrolnih volumena računa se primjenom jednadžbe (6.9) na sljedeći način:

$$\dot{m}_f^n = \rho_f (\mathbf{n}_f^n \cdot \mathbf{v}_f^n) S_f^n = \rho_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f - \left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n \right] S_f^n. \quad (6.11)$$

Ovako izračunati maseni tok će zadovoljavati jednadžbu održanja mase ako tlak zadovoljava jednadžbu tlaka (6.10).

6.2.2 Granični uvjeti

Primjena graničnih uvjeta koja je opisana u odjeljku 3.3.4 vrijedi i za sustav Navier-Stokesovih jednadžbi. Ovdje su opisani granični uvjeti koji su karakteristični za nestlačivo strujanje fluida.

- **Ulazni granični uvjet.** Na ulazu fluida u prostornu domenu zadaje se brzina $\mathbf{v}_b$, odnosno maseni tok $\dot{m}_b = \rho_b \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b S_b$. Da bi korekcija masenog toka bila jednaka nuli, na ulaznoj se granici zadaje nulti normalni gradijent tlaka¹, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla p)_b = 0$.
- **Izlazni granični uvjet.** Prilikom definiranja graničnih uvjeta na izlaznoj granici, treba osigurati održanje mase na globalnoj razini. To se može postići na dva načina:
 - Na izlaznoj granici zadaje se vrijednost tlaka p_b i nulti normalni gradijent brzine, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = 0$. Da bi jednadžba održanja mase bila zadovoljena na globalnoj razini, dovoljno je zadovoljiti jednadžbu tlaka;
 - Na izlaznoj se granici zadaje nulti normalni gradijent tlaka, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla p)_b = 0$, i brzine, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = 0$. Brzina na izlaznim stranicama računa se ekstrapolacijom iz unutrašnjosti domene, te se nakon toga korigira (skalira), tako da ukupni maseni tok kroz izlaznu granicu bude jednak ukupnom masenom toku kroz ulaznu granicu. Na taj je način osigurano održanje mase na globalnoj razini. Posebnu pažnju treba posvetiti slučaju kada maseni tok ulazi u domenu kroz izlaznu granicu, budući da to može uzrokovati nestabilnost.
- **Nepropusni pomični zid.** Na nepropusnom pomičnom zidu je tangencijalna komponenta brzine fluida jednaka tangencijalnoj komponenti brzine zida, $(\mathbf{v}_t)_b = (\mathbf{v}_t)_w$, a normalna se komponenta brzine fluida računa tako, da odgovarajući resultantni maseni tok bude jednak nuli, tj.

$$(\mathbf{v}_n)_b = \mathbf{n}_b \frac{\dot{V}_b}{S_b}. \quad (6.12)$$

Konvekcijski član i normalni gradijent tlaka jednaki su nuli. Normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja jednaka je nuli², a tangencijalna je različita od nule i

¹U slučaju kada postoji gravitacijska sila, nulti normalni gradijent tlaka se zadaje za modificirani tlak. Uvođenje modificiranog tlaka objašnjeno je u odjeljku 6.3.1.

²Normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja može se odrediti primjenom izraza (D.6) i (B.7): $\mathbf{nn} : \boldsymbol{\tau} = -2\mu \nabla_s \cdot \mathbf{v}_t = -2\mu \frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt} = 0$.

računa se na graničnoj stranici b prema sljedećem izrazu:

$$[(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau})]_b = \mu \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.13)$$

Sila devijatorskog naprezanja na zidu se primjenom izraza (2.28) i (6.13) može zapisati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau})_b &= \mu (\mathbf{I} + \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot [\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b] + \mu (\nabla_s \mathbf{v})_b \cdot \mathbf{n}_b \\ &= \mu \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}, \end{aligned} \quad (6.14)$$

U slučaju gibanja krutog zida bez deformacije, član $(\nabla_s \mathbf{v})_b \cdot \mathbf{n}_b$ jednak je nuli. Iz jednadžbe (6.14) slijedi izraz za računanje normalnog gradijenta brzine za granične stranice koje se nalaze na nepropusnom pomičnom zidu:

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.15)$$

- **Ravnina simetrije.** Na ravnini simetrije normalni gradijenti svih skalarnih veličina (tlak, temperatura itd.) su jednaki nuli. Normalna komponenta brzine $\mathbf{v}_n = \mathbf{nn} \cdot \mathbf{v}$ jednaka je nuli, što znači da je konvekcijski član također jednak nuli. Tangencijalna komponenta sile devijatorskog naprezanja jednaka je nuli, a normalna je različita od nule i računa se primjenom izraza (D.6) na sljedeći način:

$$(\mathbf{nn} \cdot \boldsymbol{\tau})_b = -2\mu (\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t)_b. \quad (6.16)$$

Sila devijatorskog naprezanja na ravnini simetrije se primjenom izraza (2.28) i (6.16) može zapisati na sljedeći način:

$$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau})_b = \mu (\mathbf{I} + \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot [\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b] = -2\mu (\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t)_b \mathbf{n}_b, \quad (6.17)$$

Iz jednadžbe (6.17) slijedi izraz za računanje normalnog gradijenta brzine za granične stranice koje leže u ravnini simetrije:

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = -(\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t)_b \mathbf{n}_b, \quad (6.18)$$

odnosno, na drugi način:

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = \frac{(\mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|} = -\frac{(\mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \cdot \mathbf{v}_P}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.19)$$

6.2.3 Postupak rješavanja

Brzina i tlak su povezani jednadžbama (6.3) i (6.10). Ova dva vezana sustava jednadžbi se rješava odvojenim postupkom, tj. jednadžba količine gibanja se rješava nezavisno od jednadžbe tlaka. Povezanost između brzine i tlaka se ostvaruje primjenom postupka SIMPLE (Patankar [61]).

Slijedi opis postupka rješavanja nestacionarnog problema u kojem je oblik prostorne domene vremenski promjenjiv, ali unaprijed poznat. Uz uvjet da su zadane početne vrijednosti svih zavisnih varijabli, postupak rješavanja nestacionarnog problema se može definirati na sljedeći način:

1. Prijelaz u novi vremenski trenutak $t = t^n$, pri čemu se sve zavisne varijable inicijaliziraju s odgovarajućim vrijednostima iz prethodnog vremenskog trenutka $t = t^o$;
2. Na osnovi novog položaja granice prostorne domene računaju se pomaci graničnih čvorova mreže, koji se koriste kao granični uvjet za problem pomicanja mreže. Primjenom postupka opisanog u odjeljku 4.4.4 rješava se problem pomicanja mreže, te se čvorovi mreže pomiču u novi položaj, koji odgovara novom obliku prostorne domene. Nakon pomaka mreže volumni se tokovi stranica kontrolnih volumena računaju primjenom postupka opisanog u odjeljku 3.3.3;
3. Započinje postupak SIMPLE, koji se sastoji od sljedećih koraka:
 - (a) Sastavljanje sustava lineariziranih algebarskih jednadžbi koji odgovara diskretiziranoj jednadžbi količine gibanja (6.3), pri čemu se polje tlaka i maseni tok kroz stranice kontrolnih volumena koriste iz prethodne iteracije. Na dobiveni sustav lineariziranih algebarskih jednadžbi primjenjuje se implicitna podrelaksacija s faktorom podrelaksacije α_v .
 - (b) Približno polje brzine, koje je dobiveno u prethodnom koraku, koristi se za sastavljanje sustava linearnih algebarskih jednadžbi koji odgovara diskretiziranoj jednadžbi tlaka (6.10). Po potrebi jednadžba tlaka se može riješiti dva ili više puta, da bi se ostvarila eksplicitna neortogonalna korekcija (3.30). Rješavanjem jednadžbe tlaka dobiva se novo približno polje tlaka p , koje se koristi za računanje masenog toka kroz stranice kontrolnih volumena primjenom izraza (6.11), te za korekciju polja brzine primjenom izraza (6.8). Prije

upotrebe u točki (a), na polje tlaka se primjenjuje eksplicitna podrelaksacija¹:

$$p^n = p^p + \alpha_p(p - p^p), \quad (6.20)$$

gdje je p^p polje tlaka iz prethodne vanjske iteracije, p rješenje jednadžbe tlaka, a α_p faktor podrelaksacije ($0 \leq \alpha_p \leq 1$);

- (c) Ovime završava jedna *vanjska iteracija*. Provjerava se konvergencija rješenja i ako se razina reziduala nije spustila ispod željene, postupak se vraća na točku (a), tj. na početak sljedeće vanjske iteracije;

4. Ako nije dostignut zadnji vremenski trenutak, postupak se vraća na točku 1.

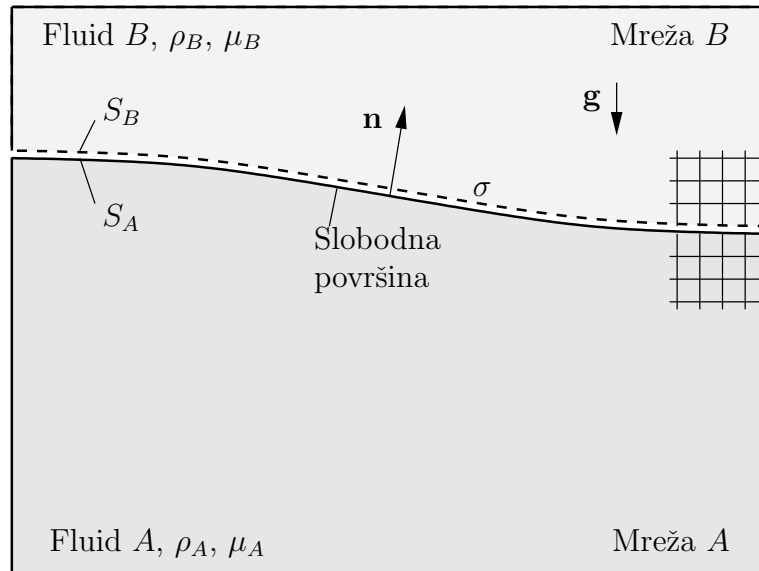
6.3 Metoda praćenja slobodne površine

Postupak rješavanja sustava Navier-Stokesovih jednadžbi na pomičnoj mreži koji je opisan u prethodnom odjeljku primjenjuje se za rješavanje strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom. Računska mreža se sastoji od dvije odvojene mreže, od kojih svaka sadrži samo jedan od dva promatrana fluida, slika 6.1. Dvije mreže se dodiruju preko dvije geometrijski jednake površine, S_A i S_B , na granici između dva fluida, tj. slobodnoj površini. Površina S_A predstavlja stranu A slobodne površine, koja pripada fluidu A , a površina S_B predstavlja stranu B slobodne površine, koja pripada fluidu B . Svaka od ovih površina definirana je skupom graničnih stranica mreže, slika 6.2, gdje svakoj stranici Af na površini S_A odgovara geometrijski identična stranica Bf na površini S_B . Poklapanje dviju mreža na slobodnoj površini nije uvjet, nego je pretpostavljeno, zbog lakšeg objašnjenja metode praćenja slobodne površine. Ako se mreže ne poklapaju, potrebno je koristiti interpolaciju.

Granične stranice koje čine stranu A slobodne površine sastavni su dio mreže kontrolnih površina koja služi za računanje površinskih derivacija i rješavanje transportne jednadžbe surfaktanata uzduž slobodne površine primjenom metode kontrolnih površina koja je opisana u 5. poglavlju.

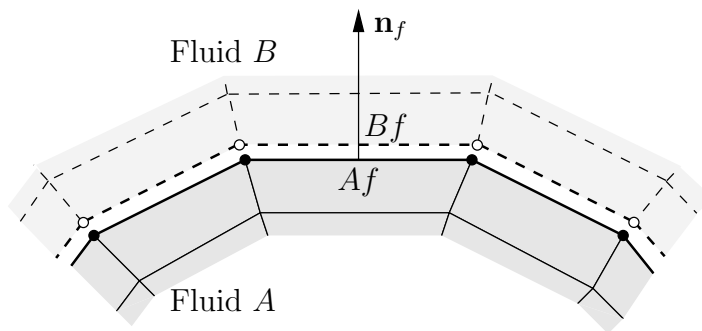
Uz ovako postavljen problem, rješavanje strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom svodi se na rješavanje strujanja jednofaznog fluida u dvije prostorne domene

¹Za jednadžbu tlaka ne može se koristiti implicitna podrelaksacija jer bi to imalo učinak uvođenja vremenskog člana, što bi promijenilo prirodu jednadžbe.



Slika 6.1: Definicija prostorne domene za numeričko modeliranje strujanje dvofaznog fluida sa slobodnom površinom primjenom pomične mreže.

promjenjivog oblika. Međusobno povezivanje ovih strujanja provodi se preko graničnih uvjeta na slobodnoj površini, što će biti detaljno opisano u odjeljku 6.3.2.



Slika 6.2: Definicija slobodne površine pomoću graničnih stranica mreže.

6.3.1 Uvođenje modificiranog tlaka

Kod strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom sila gravitacije najčešće ima prevladavajući utjecaj. U tom slučaju apsolutni tlak p uvijek sadrži komponentu $\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}$, koja je u ravnoteži sa silom gravitacije. Prema tome, apsolutni se tlak može zapisati na sljedeći način:

$$p = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + p_m, \quad (6.21)$$

gdje je $\mathbf{r}$ vektor položaja, a p_m ostatni ili *modificirani tlak* koji postoji samo u slučaju strujanja fluida (Batchelor [4]).

Uz pretpostavku konstantne gustoće, gradijent apsolutnog tlaka se primjenom izraza (6.21) može izraziti na sljedeći način:

$$\nabla p = \rho \mathbf{g} + \nabla p_m, \quad (6.22)$$

jer je $\nabla \mathbf{r} = \mathbf{I}$. Ako se izraz (6.22) uvrsti u jednadžbu količine gibanja (2.14), ukida se član koji sadrži gravitacijsko ubrzanje, a umjesto apsolutnog tlaka stoji modificirani tlak:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) dS - \int_V \nabla p_m dV. \quad (6.23)$$

U tom se slučaju jednadžba tlaka (6.10) rješava za modificirani tlak.

Na onim granicama prostorne domene na kojima je inače zadan apsolutni tlak (npr. slobodna površina) može se koristiti modificirani tlak, uz uvjet da je usklađen s izrazom (6.21). Naime, ako je na granici zadan apsolutni tlak p , onda će odgovarajući modificirani tlak p_m biti:

$$p_m = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}, \quad (6.24)$$

gdje je $\mathbf{r}$ vektor položaja točaka promatrane granice.

6.3.2 Primjena graničnih uvjeta na slobodnoj površini

Da bi problem bio potpuno definiran, na graničnim stranicama mreže koje definiraju stranu A i B slobodne površine, potrebno je zadati odgovarajuće granične uvjete. Na strani A zadaje se tlak p_A i normalni gradijent brzine $\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v})_A$, a na strani B zadaje se vrijednost vektora brzine $\mathbf{v}_B$ i nulti normalni gradijent modificiranog tlaka $\mathbf{n} \cdot (\nabla p_m)_B = 0$. Ovi se granični uvjeti računaju primjenom uvjeta koji su opisani u odjeljku 2.3, na sljedeći način:

1. Modificirani tlak koji se zadaje na stranici Af računa se iz modificiranog tlaka na stranici Bf primjenom uvjeta (2.25), na sljedeći način:

$$(p_m)_{Af} = (p_m)_{Bf} - (\rho_A - \rho_B) \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_{Af} - (\sigma \kappa)_{Af} - 2(\mu_A - \mu_B) (\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af}, \quad (6.25)$$

gdje je $(p_m)_{Bf}$ modificirani tlak na stranici Bf , koji se računa ekstrapolacijom iz unutrašnjosti domene, a $\mathbf{r}_{Af}$ je vektor položaja težišta stranice Af odnosno stranice Bf . Površinski divergens vektora brzine $(\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af}$ na stranici Af ili Bf računa se primjenom izraza (B.5). Računanje površinske sile $(\sigma\kappa)_{Af}$ opisano je u odjeljku 6.3.4.

2. Normalni gradijent brzine koji se zadaje na stranici Af računa se iz normalnog gradijenta brzine na stranici Bf primjenom uvjeta (2.32), na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Af} &= \frac{\mu_B}{\mu_A} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_f \mathbf{n}_f) \cdot [\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Bf}] \\ &+ \left[\frac{1}{\mu_A} (\nabla_s \sigma)_{Af} - \mathbf{n}_f (\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af} + \frac{(\mu_B - \mu_A)}{\mu_A} (\nabla_s \mathbf{v})_{Af} \cdot \mathbf{n}_f \right], \end{aligned} \quad (6.26)$$

gdje je $\mathbf{n}_f = \mathbf{n}_{Af} = -\mathbf{n}_{Bf}$ normala na stranicu Af . Kod definiranja izraza (6.26) primijenjen je identitet $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \mathbf{n} (\nabla_s \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})$. Površinski gradijent vektora brzine $(\nabla_s \mathbf{v})_{Af}$ na stranici Af ili Bf računa se primjenom Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu, jednadžba (5.27). Računanje tangencijalne površinske sile $(\nabla_s \sigma)_{Af}$ opisano je u odjeljku 6.3.4.

3. U skladu s kinematičkim uvjetom (2.16), tangencijalna komponenta brzine koja se zadaje na stranici Bf , prenosi se sa stranice Af :

$$(\mathbf{v}_t)_{Bf} = (\mathbf{v}_t)_{Af}. \quad (6.27)$$

Normalna komponenta brzine računa se tako, da resultantni maseni tok kroz stranicu Bf bude jednak nuli, $(\dot{m}_{Bf} - \rho_B \dot{V}_{Bf}) = 0$, tj.

$$(\mathbf{v}_n)_{Bf} = -\frac{\dot{V}_{Bf}}{S_{Bf}} \mathbf{n}_f, \quad (6.28)$$

gdje je $\dot{V}_{Bf}$ volumni tok stranice Bf . Budući da su pomaci čvorova na strani B slobodne površine jednaki pomacima čvorova na strani A , $\mathbf{u}_{Bi} = \mathbf{u}_{Ai}$, isto vrijedi i za volumne tokove stranica Af i Bf :

$$\dot{V}_{Bf} = \dot{V}_{Af}. \quad (6.29)$$

Uz uvjet da je gustoća fluida A veća od gustoće fluida B opisana kombinacija graničnih uvjeta na slobodnoj površini, garantira stabilnost postupka povezivanja strujanja dva fluida oko slobodne površine.

Opisani postupak računanja graničnih uvjeta na slobodnoj površini primjenjuje se na početku svake vanjske iteracije. Kada se na kraju vanjske iteracije provede korekcija masenog toka, rezultatni maseni tok kroz granične stranice na strani A slobodne površine različit je od nule, tj.

$$(\dot{m}_{Af}^p - \rho_A \dot{V}_{Af}^p) \neq 0, \quad (6.30)$$

gdje je $\dot{m}_{Af}^p$ maseni tok kroz stranicu Af koji je dobiven na kraju promatrane vanjske iteracije, a $\dot{V}_{Af}^p$ je volumni tok stranice Af koji je korišten tijekom promatrane vanjske iteracije. Da bi se dobiveni rezultatni maseni tok poništio, čvorovi slobodne površine se pomiču, tako da se volumni tok stranica slobodne površine korigira u iznosu:

$$\dot{V}'_{Af} = (\dot{V}_{Af}^n - \dot{V}_{Af}^p) = \frac{\dot{m}_{Af}^p}{\rho_A} - \dot{V}_{Af}^p. \quad (6.31)$$

Na osnovi izračunatih pomaka čvorova slobodne površine provodi se pomicanje unutrašnjih čvorova mreže, koja se tako prilagođava novom obliku slobodne površine. Novi se volumni tokovi stranica mreže $\dot{V}_f^n$ određuju pomoću trenutnog položaja čvorova mreže i položaja čvorova iz prethodnog vremenskog trenutka, na način kako je to opisano u odjeljku 3.3.3.

Postupak SIMPLE se zaustavlja kada se rezultatni maseni tok kroz stranice slobodne površine spusti ispod željene razine. Tada je zadovoljen kinematički i dinamički uvjet na slobodnoj površini.

6.3.3 Pomicanje čvorova slobodne površine

Na kraju svake vanjske iteracije potrebno je pomaknuti čvorove slobodne površine, tako da se poništi dobiveni rezultatni maseni tok. Postupak koji se u ovom radu koristi za pomicanje čvorova slobodne površine temelji se na postupku koji su predložili Muzaferija i Perić [59], a koji su u sličnom obliku koristili Apsley i Hu [1]. Svakoj graničnoj stranici Af na slobodnoj površini pridružuje se kontrolna točka Ac , koja se nalazi iznad težišta stranice gledano u smjeru jediničnog vektora $\mathbf{f}_{Ac}$, slika 6.3. Na kraju svake vanjske iteracije se primjenom kinematičkog uvjeta računaju pomaci kontrolnih točaka, a novi se položaj čvorova slobodne površine određuje linearnom interpolacijom novog položaja susjednih kontrolnih točaka.

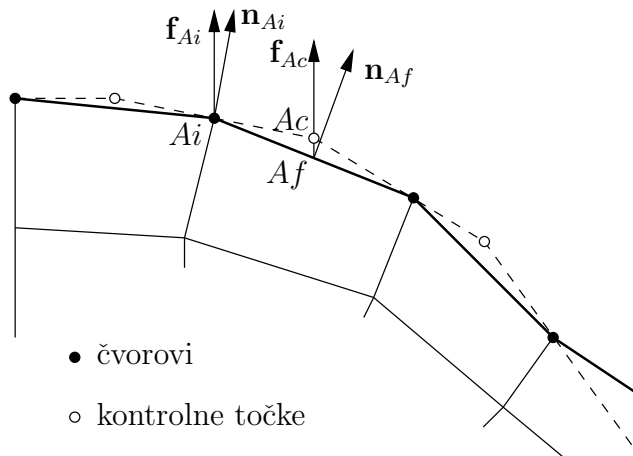
Postupak zahtijeva da se u svakom vremenskom trenutku unaprijed definira smjer pomicanja kontrolnih točaka i čvorova slobodne površine. Smjer pomicanja kontrolnih točaka definiran je jediničnim vektorom $\mathbf{f}_{Ac}$, a smjer pomicanja čvorova slobodne površine jediničnim vektorom $\mathbf{f}_{Ai}$. U ovom se radu koriste dvije varijante smjera pomicanja kontrolnih točaka i čvorova slobodne površine:

- Kontrolne točke i čvorovi se pomiču u smjeru gravitacijskog ubrzanja:

$$\mathbf{f}_{Ac} = \mathbf{f}_{Ai} = \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|}; \quad (6.32)$$

- Kontrolne točke i čvorovi se pomiču u smjeru normale na slobodnu površinu iz prethodnog vremenskog trenutka:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{Ac} &= \mathbf{n}_{Af}^o, \\ \mathbf{f}_{Ai} &= \mathbf{n}_{Af}^o. \end{aligned} \quad (6.33)$$



Slika 6.3: Definicija slobodne površine pomoću kontrolnih točaka, Muzaferija i Perić [59].

Postupak određivanja novog položaja čvorova slobodne površine na kraju svake vanjske iteracije sastoji se od sljedećih koraka:

1. Za svaku stranicu Af slobodne površine računa se volumen $\delta V'_{Af}$, koji stranica treba obuhvatiti na putu od trenutnog do korigiranog položaja, da bi se poništio resultantni maseni tok dobiven u promatranoj iteraciji. Ovisno o primijenjenoj metodi vremenske diskretizacije matematičkog modela, ovaj se volumen računa na sljedeći način:

- Implicitna Eulerova metoda:

$$\delta V'_{Af} = \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.34)$$

- Gearova metoda:

$$\delta V'_{Af} = \frac{2}{3} \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.35)$$

- Crank-Nicolsonova metoda:

$$\delta V'_{Af} = \frac{1}{2} \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.36)$$

gdje je $\dot{V}'_{Af}$ korekcija volumnog toka stranice Af , koja se računa iz jednačbe (6.31).

2. Na osnovi gore određenog volumena $\delta V'_{Af}$ računaju se pomaci kontrolnih točaka u smjeru vektora $\mathbf{f}_{Ac}$:

$$h'_{Ac} = \frac{\delta V'_{Af}}{S^p_{Af} \mathbf{n}^p_{Af} \cdot \mathbf{f}_{Ac}}, \quad (6.37)$$

gdje su S^p_{Af} i $\mathbf{n}^p_{Af}$ površina i jedinična normala stranice Af u promatranoj iteraciji. Novi se položaj kontrolnih točaka računa prema sljedećem izrazu:

$$\mathbf{r}^n_{Ac} = \mathbf{r}^p_{Ac} + h'_{Ac} \mathbf{f}_{Ac}, \quad (6.38)$$

gdje je $\mathbf{r}^p_{Ac}$ vektor položaja kontrolne točke Ac prije korekcije.

3. Novi se položaj čvorova slobodne površine računa na osnovi novog položaja kontrolnih točaka primjenom linearne interpolacije koju su predložili Muzaferija i Perić [59]:

$$\mathbf{r}^n_{Ai} = \mathbf{r}^p_{Ai} - \mathbf{f}_{Ai} \mathbf{f}_{Ai} \cdot \left(\mathbf{r}^p_{Ai} - \sum_{Af} w_{Af} \mathbf{r}^n_{Ac} \right), \quad (6.39)$$

gdje je $\mathbf{r}^p_{Ai}$ vektor položaja čvora Ai prije korekcije, a w_{Af} težinski faktor, koji se računa prema sljedećem izrazu:

$$w_{Af} = \frac{\frac{1}{|\mathbf{r}^p_{Ai} - \mathbf{r}^n_{Ac}|}}{\sum_{Af} \frac{1}{|\mathbf{r}^p_{Ai} - \mathbf{r}^n_{Ac}|}}. \quad (6.40)$$

Sumiranje u izrazima (6.39) i (6.40) se provodi po onim stranicama slobodne površine, kojima je promatrani čvor Ai zajednički.

Uz opisani postupak određivanja novog položaja čvorova slobodne površine, u ovom je radu predložen i postupak koji u slučaju kada je slobodna površina definirana nestrukturiranom površinskom mrežom daje nešto bolje rezultate. Čvor slobodne površine se pomiče do ravnine koja se kroz pripadajuće kontrolne točke polaže korištenjem uvjeta najmanjih kvadratnih odstupanja. Novi se položaj čvorova računa prema sljedećem izrazu:

$$\mathbf{r}_{Ai}^n = \mathbf{r}_{Ai}^p + \frac{\mathbf{N}_{Ai} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{r}_{Ai}^p)}{\mathbf{N}_{Ai} \cdot \mathbf{f}_{Ai}} \mathbf{f}_{Ai}, \quad (6.41)$$

gdje je $\mathbf{N}_{Ai}$ jedinična normala na ravninu,

$$\mathbf{N}_{Ai} = \frac{\mathbf{G}^{-1} \cdot \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}}{|\mathbf{G}^{-1} \cdot \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}|}, \quad (6.42)$$

a $\mathbf{p}$ vektor položaja točke na ravnini,

$$\mathbf{p} = \frac{\sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}}{\sum_{Af} w_{Af}^2}. \quad (6.43)$$

Tenzor $\mathbf{G}$ je definiran sljedećim izrazom:

$$\mathbf{G} = \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac} \mathbf{r}_{Ac}. \quad (6.44)$$

Posebnu pozornost treba posvetiti pomicanju onih čvorova slobodne površine, koji se nalaze u dodiru s ostalim granicama prostorne domene, npr. sa zidovima, ravninama simetrije, ulazom, ili izlazom. Na zidu i ravnini simetrije koristi se pojednostavljeni pristup, u kojem se čvorovi pomiču brzinom susjednih kontrolnih točaka. Vektori položaja tih čvorova se računaju ekstrapolacijom vektora položaja susjednih kontrolnih točaka primjenom izraza (6.39). Na ulaznoj i izlaznoj granici nije moguće primijeniti jedinstveni pristup, jer će postupak pomicanja čvorova slobodne površine ovisiti o uvjetima strujanja.

6.3.3.1 Očuvanje glatkoće slobodne površine

Definicija slobodne površine pomoću kontrolnih točaka, presudna je za očuvanje glatkoće slobodne površine tijekom simulacije. Zwart, Raithby i Raw [90] se umjesto pomicanja kontrolnih točaka služe neposrednim pomicanjem čvorova slobodne površine, rješavanjem

sustava linearnih algebarskih jednadžbi za pomake tih čvorova. Tijekom simulacije nastaju oscilacije slobodne površine, čija je frekvencija proporcionalna frekvenciji mreže na slobodnoj površini. Da bi se račun mogao provoditi, kod svakog je pomicanja slobodne površine potrebno izvršiti njeno izravnavanje.

Primjena opisane metodologije pomicanja čvorova slobodne površine na 2-D problemu je pokazala da se tijekom simulacije ne javljaju oscilacije slobodne površine. Međutim, kod 3-D problema, kod kojih je slobodna površina definirana nestrukturiranom površinom mrežom sastavljenom od četverokuta, pokazalo se da nakon većeg broja vremenskih koraka ipak nastaju oscilacije slobodne površine, koje u konačnici dovode do prekida računa. Analiza je pokazala da oscilacije nastaju zbog toga, što dolazi do savijanja četverokutnih stranica po dijagonalama. Problem se sastoji u tom, što je postupak pomicanja čvorova slobodne površine lokalna, i ne garantira očuvanje "ravnosti" stranica slobodne površine.

Problem oscilacija slobodne površine u ovom je radu riješen tako, da se na početku vremenskog koraka u kojem su oscilacije uočene provede izravnavanje slobodne površine primjenom sljedećeg postupka:

- pomaknuti kontrolne točke u težišta odgovarajućih stranica;
- pomaknuti čvorove slobodne površine tako, da odgovaraju novom položaju kontrolnih točaka;
- izračunati volumen koji su stranice slobodne površine obuhvatile na putu od starog do novog položaja u prethodnoj točki;
- pomaknuti kontrolne točke i čvorove tako da se poništi volumen koji je izračunat u prethodnoj točki.

6.3.3.2 Analiza točnosti i stabilnosti

Prijašnja su istraživanja (Sung, Choi i Yoo [73], Apsley i Hu [1]) pokazala da se prihvatljiva vremenska točnost metode praćenja slobodne površine može postići samo uz uvjet da se jednadžbe strujanja fluida i jednadžba gibanja slobodne površine diskretiziraju u vremenu i prostoru najmanje s drugim redom točnosti.

Točnost opisanog postupka pomicanja čvorova slobodne površine teorijski ovisi samo o broju provedenih vanjskih iteracija. Naime, iz iteracije u iteraciju pomaci kontrolnih točaka koji su definirani izrazom (6.37) teže nuli, tj. čvorovi slobodne površine teže svom točnom položaju. Prema tome, točnost cijelog postupka simulacije strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom, korištenog u ovom radu, ovisi samo o točnosti metode prostorne i vremenske diskretizacije matematičkog modela strujanja fluida.

Ako je pomak točaka slobodne površine u jednom vremenskom koraku prevelik, opisani postupak pomicanja čvorova slobodne površine može uzrokovati nestabilnost slobodne površine. Muzaferija i Perić [59] problem nestabilnosti ublažavaju podrelaksacijom izraza (6.37):

$$h'_{Ac} = \alpha_h \frac{\delta V'_{Af}}{S_{Af}^p \mathbf{n}_{Af}^p \cdot \mathbf{f}_{Ac}}, \quad (6.45)$$

gdje je α_h podrelaksacijski faktor ($0 < \alpha_h < 1$).

Uzrok moguće nestabilnosti opisanog postupka pomicanja čvorova slobodne površine je u tome, što se u jednadžbi (6.37) površina S_{Af} i normala $\mathbf{n}_{Af}$ tretiraju eksplicitno, tj. koriste se njihove vrijednosti iz prethodne iteracije. Može se pokazati da korekcija površine $S' = S^n - S^p$ i korekcija normale $\mathbf{n}' = \mathbf{n}^n - \mathbf{n}^p$ ovise o pomaku h' , na sljedeći način:

$$S' = S^p [(\nabla_s h') \cdot \mathbf{f} + h' \nabla_s \cdot \mathbf{f}], \quad (6.46)$$

$$\mathbf{n}' = -(\nabla_s h') (\mathbf{n}^p \cdot \mathbf{f}) - h' (\nabla_s \mathbf{n}^p) \cdot \mathbf{f}, \quad (6.47)$$

gdje jedinični vektor $\mathbf{f}$ predstavlja smjer pomicanja točaka slobodne površine. Prema tome, implicitnim tretiranjem površine S_{Af} i normale $\mathbf{n}_{Af}$ u jednadžbi pomaka kontrolnih točaka na slobodnoj površini, dobio bi se sustav nelinearnih algebarskih jednadžbi. To bi vjerojatno riješilo problem nestabilnosti i omogućilo korištenje većeg vremenskog koraka, ali bi značajno zakompliciralo postupak.

6.3.4 Primjena površinske napetosti

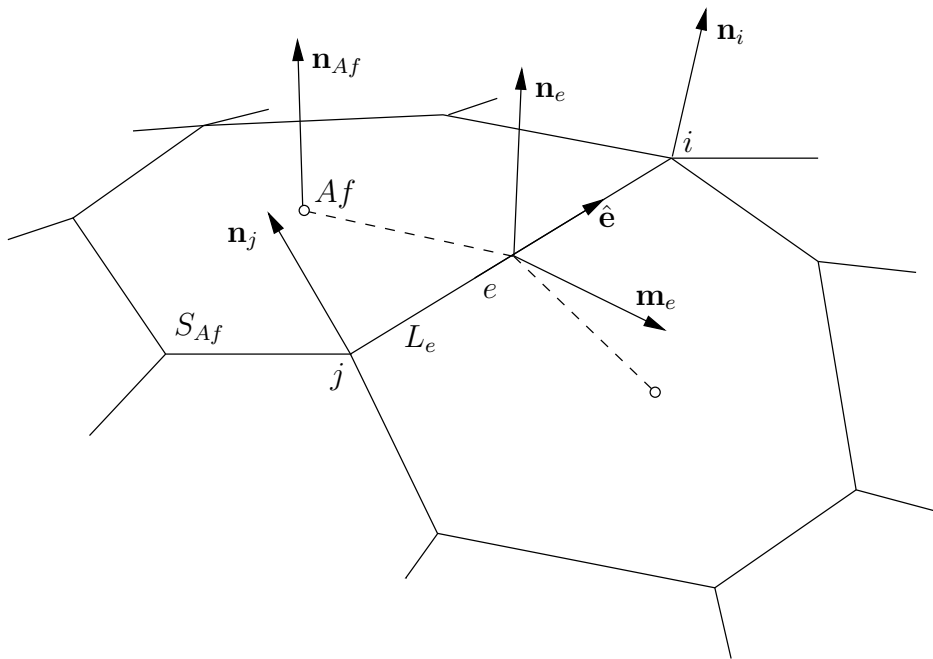
Točno računanje i primjena površinskih sila spadaju u najteže zadatke svake metode praćenja granice između dva fluida. Kao posljedica netočnosti računanja površinskih sila javlja se nefizikalno strujanje fluida uz slobodnu površinu poznatije pod nazivom

”parazitske struje”. Parazitske struje mogu uzrokovati jake oscilacije slobodne površine, koje mogu dovesti do prekida računa.

Osnovni uvjet koji bi trebalo zadovoljiti kod primjene površinske napetosti je da rezultirajuća površinska sila na zatvorenoj površini bude jednaka nuli. Ukupna površinska sila na kontrolnoj površini Af koja je prikazana na slici 6.4 može se izraziti na sljedeći način:

$$\mathbf{F}_{Af}^\sigma = \oint_{\partial S_{Af}} \mathbf{m} \sigma \, dL = \sum_e \int_{L_e} \mathbf{m} \sigma \, dL = \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.48)$$

gdje je S_{Af} kontrolna površina Af , σ_e površinska napetost u težištu brida e , a L_e duljina brida e . Ako se površinska sila na svim kontrolnim površinama u mreži računa pomoću jednadžbe (6.48), rezultirajuća površinska sila na zatvorenoj površini bit će jednaka nuli uz uvjet da su jedinične binormale $\mathbf{m}_e$ za dvije kontrolne površine koje dijele promatrani brid e međusobno paralelne i suprotnog smjera.



Slika 6.4: Kontrolna površina Af .

Preostaje da se ukupna površinska sila $\mathbf{F}_{Af}^\sigma$ raspodjeli na tangencijalnu komponentu $(\nabla_s \sigma)_{Af}$, koja se koristi u izrazu (6.26), i normalnu komponentu $(\kappa \sigma)_{Af}$, koja se koristi u izrazu (6.25). Primjenom jednadžbe (B.8), ukupna se površinska sila na kontrolnoj površini Af može izraziti na sljedeći način:

$$\mathbf{F}_{Af}^\sigma = \int_{S_{Af}} \nabla_s \sigma \, dS + \int_{S_{Af}} \kappa \sigma \mathbf{n} \, dS. \quad (6.49)$$

Nakon diskretizacije jednadžbe (6.49) i njezinog izjednačavanja s jednadžbom (6.48) dobiva se sljedeći izraz:

$$(\nabla_s \sigma)_{Af} + (\kappa \sigma)_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e. \quad (6.50)$$

Prema tome, tangencijalna je komponenta površinske sile jednaka tangencijalnoj komponenti desne strane jednadžbe (6.50):

$$(\nabla_s \sigma)_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{Af} \mathbf{n}_{Af}) \cdot \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.51)$$

a normalna je komponenta jednaka normalnoj komponenti iste jednadžbe:

$$(\kappa \sigma)_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} (\mathbf{n}_{Af} \mathbf{n}_{Af}) \cdot \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e. \quad (6.52)$$

U slučaju kada je površinska napetost konstantna, izraz (6.51) daje nultu tangencijalnu površinsku silu uz uvjet da normala $\mathbf{n}_{Af}$ zadovoljava sljedeću jednadžbu:

$$\kappa_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} \sum_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.53)$$

odnosno,

$$\mathbf{n}_{Af} = \frac{\sum_e \mathbf{m}_e L_e}{|\sum_e \mathbf{m}_e L_e|}, \quad (6.54)$$

uz uvjet da je $\kappa_{Af} \neq 0$.

Jednadžbe (6.51) i (6.52) definiraju postupak računanja tangencijalne i normalne komponente površinske sile, tako da resultantna površinska sila na zatvorenoj površini bude jednaka nuli. Ispunjavanje ovog zahtjeva nije dovoljno za uspješnu primjenu površinske napetosti u proračunu. Naime, nefizikalno strujanje fluida u blizini slobodne površine posljedica je lokalnih (a ne globalnih) netočnosti računanja površinske sile.

Iz jednadžbe (6.48) se vidi da točnost računanja površinske sile na kontrolnoj površini Af ovisi o točnosti računanja jedinične binormale $\mathbf{m}_e$, odnosno jedinične normale $\mathbf{n}_e$ [vidjeti jednadžbu (5.2)]. U prvom je pokušaju normala $\mathbf{n}_e$ računana interpolacijom normala u težištima susjednih kontrolnih površina. Rezultirajuće su površinske sile sadržavale oscilacije takvog intenziteta da nije bilo moguće započeti račun. Zbog toga je odabran pristup gdje se binormala $\mathbf{m}_e$ računa na sljedeći način:

$$\mathbf{m}_e = \hat{\mathbf{e}} \times \frac{\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j}{2}.$$

Primjenom ovog izraza i jednačbe (6.53) dobiva se egzaktna vrijednost zakrivljenosti ako se čvorovi kontrolne površine A_f nalaze na površini sfere, a jedinične normale $\mathbf{n}_i$ i $\mathbf{n}_j$ predstavljaju normale na površinu sfere u početnom (i) i krajnjem (j) čvoru brida e .

6.3.4.1 Računanje normale u čvorovima slobodne površine

U ovom je radu predložen sljedeći postupak određivanja jedinične normale u čvorovima slobodne površine:

1. Sve kontrolne površine koje dijele promatrani čvor i rastavljaju se na trokute tako, da je svakom trokutu početni čvor promatrani čvor i , slika 6.5;
2. Za svaki trokut t jedinične se normale $\mathbf{n}_t$ računaju prema sljedećem egzaktnom izrazu:

$$\mathbf{n}_t = \frac{(\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0) \times (\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^1)}{|(\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0) \times (\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^1)|}; \quad (6.55)$$

3. Jedinična normala $\mathbf{n}_i$ u čvoru i računa se kao srednja vrijednost jediničnih normala pripadajućih trokuta:

$$\mathbf{n}_i = \frac{\sum_t w_t \mathbf{n}_t}{|\sum_t w_t \mathbf{n}_t|}, \quad (6.56)$$

pri čemu se koeficijent w_t za svaki trokut t prema prijedlogu Maxa [58] računa na sljedeći način:

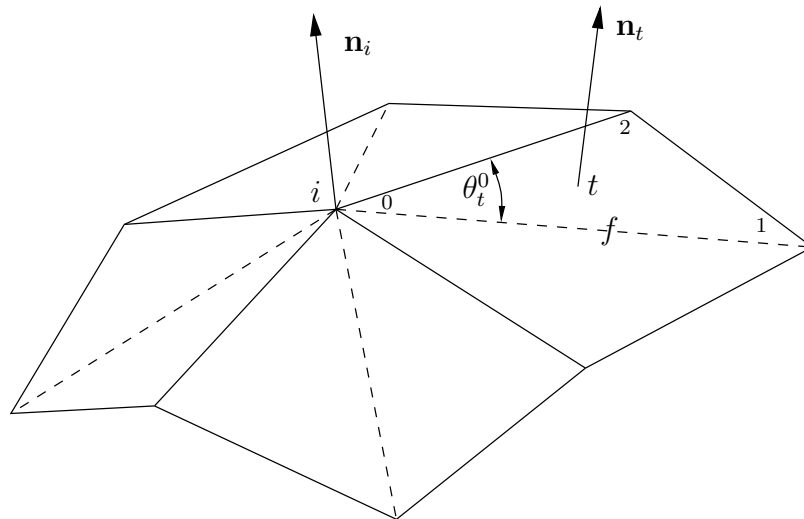
$$w_t = \frac{\sin \theta_t^0}{|\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0| |\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^0|}, \quad (6.57)$$

gdje je θ_t^0 kut između stranica trokuta t , koji odgovara čvoru 0.

U slučaju kada se čvorovi mreže kontrolnih površina nalaze na površini sfere opisani postupak daje egzaktnu vrijednost normale bez obzira na rezoluciju mreže.

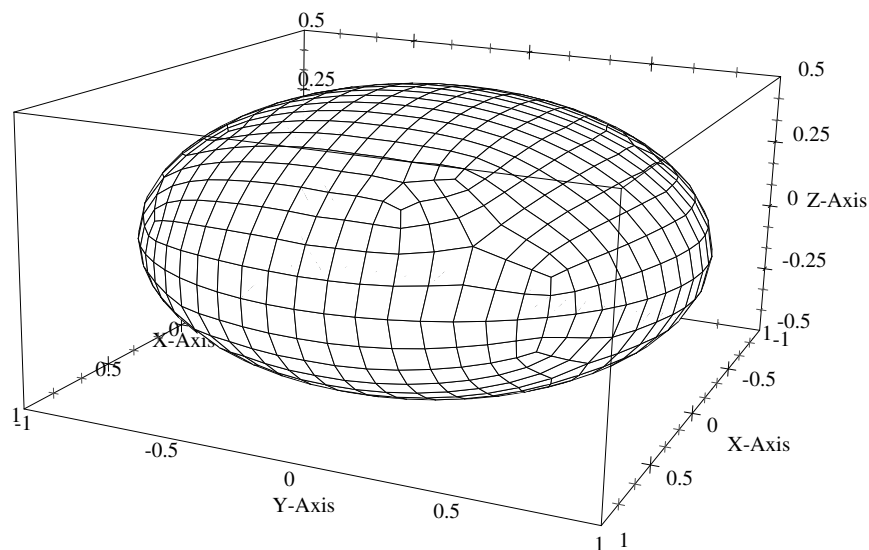
6.3.4.2 Točnost računanja površinskih sila

Kao pokazatelj točnosti postupka računanja površinskih sila može se koristiti točnost računanja zakrivljenosti κ primjenom jednačbe (6.53). Točnost računanja zakrivljenosti provjerena je na površini osnosimetričnog elipsoida, prikazanog na slici 6.6. Elipsoid ima poluosi duljine 1, 1 i 0.5. Površina elipsoida definirana je nestrukturiranom površinskom



Slika 6.5: Uz objašnjenje postupka računanja normala u čvorovima slobodne površine.

mrežom koja se sastoji od četverokutnih kontrolnih površina. Točnost računanja zakrivljenosti uspoređena je na tri različite rezolucije mreže s prosječnim dimenzijama kontrolnih površina $\Delta = 0.1$, 0.05 i 0.025 . Na slici 6.6 prikazana je površina elipsoida s najmanjom rezolucijom mreže ($\Delta = 0.1$).



Slika 6.6: Površina elipsoida sa rijetkom nestrukturiranom mrežom.

Rezultati proračuna se uspoređuju s obzirom na relativnu pogrešku zakrivljenosti,

$$\frac{\delta\kappa}{\kappa_a} = \frac{\kappa - \kappa_a}{\kappa_a}, \quad (6.58)$$

gdje je $\delta\kappa$ apsolutna pogreška zakrivljenosti, a κ_a analitička vrijednost zakrivljenosti. U tablici 6.1 prikazane su vrijednosti maksimalne i srednje relativne pogreške zakrivljenosti za tri različite rezolucije mreže. Može se uočiti da je srednja relativna pogreška i kod najmanje rezolucije niska, a s povećanjem rezolucije mreže pogreška brzo opada.

Tablica 6.1: Rezultati proračuna zakrivljenosti na površini elipsoida.

Δ	$(\delta\kappa/\kappa_a)_{max}$	$(\delta\kappa/\kappa_a)_{sr}$
0.1	0.0622	0.0217
0.05	0.0175	0.0067
0.025	0.0067	0.0026

Lafaurie *et al.* [52] i Ubbink [80] pokazuju na primjeru simulacije 2-D mjehurića kružnog oblika bez djelovanja gravitacijske sile, kako je amplituda parazitskih struja proporcionalna omjeru površinske napetosti i dinamičke viskoznosti:

$$v_{max} = \frac{\sigma}{\mu}. \quad (6.59)$$

Utjecaj viskoznosti se jednostavno može objasniti činjenicom da viskozne sile prigušuju nastalo nefizikalno strujanje. Međutim, utjecaj površinske napetosti može zbuniti, budući da proces nastanka parazitskih struja nema fizikalni uzrok, nego je posljedica pogreške pri računanju površinskih sila odnosno zakrivljenosti.

Pogreška pri računanju zakrivljenosti slobodne površine ima oscilatorni karakter, a frekvencija oscilacija ovisi o rezoluciji mreže koja definira slobodnu površinu. Neka pogreška zakrivljenosti ima amplitudu $\delta\kappa$. Onda je amplituda oscilatorne sile tlaka uzrokovane pogreškom zakrivljenosti $\delta p = \delta\kappa \sigma$. Upravo ova sila tlaka uzrokuje nastajanje parazitskih struja. Na osnovi ove analize može se predložiti izraz koji povezuje intenzitet parazitskih struja s pogreškom računanja zakrivljenosti:

$$v_{max} = \frac{\delta\kappa \sigma}{\mu}. \quad (6.60)$$

Ovaj se izraz kvalitativno slaže s rezultatima objavljenim u [52] i [80].

Utjecaj parazitskih struja na realno strujanje s djelovanjem gravitacijske sile ovisit će o odnosu površinske sile, koja uzrokuje parazitsko strujanje, i ukupne uzgonske sile. Taj

utjecaj može se izraziti sljedećom bezdimenzijskom veličinom:

$$\frac{\delta\kappa\sigma}{\mu\sqrt{D|\mathbf{g}|}}, \quad (6.61)$$

gdje je D promjer mjehurića ili kapljice. S povećanjem promjera mjehurića smanjuje se utjecaj pogreške računanja zakrivljenosti na strujanje, tj. taj je utjecaj najveći za male mjehuriće.

6.3.5 Postupak rješavanja

Na osnovi opisane metode praćenja slobodne površine može se definirati postupak rješavanja sustava Navier-Stokesovih jednadžbi na pomičnoj mreži koji je namijenjen rješavanju strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom. Postupak se sastoji iz sljedećih koraka:

1. Prelaz u novi vremenski trenutak $t = t^n$ i inicijalizacija zavisnih varijabli s vrijednostima iz prethodnog vremenskog trenutka;
2. Definiranje smjera pomicanja čvorova i kontrolnih točaka u novom vremenskom koraku. Položaj kontrolnih točaka korigira se tako da odgovara novom smjeru pomicanja;
3. Započinje postupak SIMPLE:
 - (a) Obnova graničnih uvjeta za tlak i brzinu na onim graničnim stranicama mreže, koje predstavljaju slobodnu površinu;
 - (b) Sastavljanje i rješavanje diskretizirane jednadžbe količine gibanja (6.3) na mreži koja je definirana trenutnim oblikom slobodne površine. Polje tlaka, maseni tokovi kroz stranice mreže i volumni tokovi stranica mreže koriste se iz prethodne iteracije;
 - (c) Polje brzine koje je dobiveno u prethodnom koraku koristi se za sastavljanje diskretizirane jednadžbe tlaka (6.10). Nakon rješavanja jednadžbe tlaka dobivaju se novi maseni tokovi kroz stranice mreže. Rezultantni maseni tok kroz stranice na slobodnoj površini različit je od nule;

- (d) Računaju se pomaci čvorova slobodne površine, tako da volumen definiran pomaknutim i prethodnim položajem slobodne površine poništi rezultatni maseni tok dobiven u prethodnom koraku;
- (e) Pomaci čvorova slobodne površine koriste se kao granični uvjet za rješavanje problema pomicanja mreže. Nakon pomaka mreže, računaju se novi volumni tokovi stranica mreže primjenom trenutnog položaja čvorova i položaja čvorova iz prethodnog vremenskog trenutka;
- (f) Provjerava se konvergencija rješenja i, ako se razina reziduala i rezultatni maseni tok kroz slobodnu površinu nisu spustili ispod željene razine, postupak se ponavlja od točke (a).

4. Ako nije dostignut zadnji vremenski trenutak, postupak se vraća na točku 1.

Učinkovitost gore opisanog postupka u većini se slučajeva može značajno povećati tako, da se u točki (e) pomiču samo čvorovi slobodne površine, a ne i cijela mreža. Tada se pomicanje mreže, koje odgovara ukupnom pomaku slobodne površine tijekom promatranog vremenskog koraka, u sljedećem vremenskom koraku provodi prije početka postupka SIMPLE. Na taj se način pomicanje mreže u svakom vremenskom koraku provodi samo jedanput, a cijelokupni je postupak nešto stabilniji, jer su tijekom postupka SIMPLE volumni tokovi onih stranica mreže koje nisu u kontaktu sa slobodnom površinom konstantni. Ovaj je pristup moguć u slučaju kada su pomaci čvorova slobodne površine u jednom vremenskom koraku puno manji od poprečne dimenzije kontrolnog volumena uz slobodnu površinu. Ovaj je uvjet često ispunjen kada se zahtijeva vremenska točnost rezultata numeričkog modela.

6.3.6 Održanje volumena

Održanje volumena pojedinih fluidnih faza ovisi o zadovoljavanju kinematičkog rubnog uvjeta na slobodnoj površini. Prevedeno na postupak koji se u ovom radu koristi za modeliranje slobodne površine, održanje volumena ovisi o veličini rezultirajućeg masenog toka kroz granične stranice koje definiraju slobodnu površinu. Rezultirajući maseni tok kroz slobodnu površinu se može smanjiti na željenu razinu s dovoljnim brojem vanjskih iteracija u postupku SIMPLE.

Postupno smanjenje razine rezultirajućeg masenog toka kroz slobodnu površinu tijekom iterativnog postupka rješavanja može izazvati probleme u rješavanju jednadžbe tlaka, u slučaju kada se fluid B nalazi u zatvorenoj domeni konstantnog volumena. Naime, na strani slobodne površine koja pripada fluidu B zadaje se nulti normalni gradijent modificiranog tlaka, a brzina i maseni tok se zadaju tako, da rezultirajući maseni tok bude jednak nuli, tj.

$$\dot{m}_{Bf} = \rho_B \dot{V}_{Bf}, \quad (6.62)$$

gdje je $\dot{V}_{Bf}$ volumni tok stranice Bf slobodne površine. Budući da je fluid B nestlačiv, ukupni maseni tok kroz granicu mjehurića $\sum_{Bf} \dot{m}_{Bf}$ mora biti točno nula da bi jednadžba tlaka imala rješenje. Ovaj maseni tok će tijekom iterativnog postupka SIMPLE težiti nuli, ali nikada neće biti točno nula. Zbog toga se u jednadžbi tlaka (6.10) koristi korigirani maseni tok na površini mjehurića:

$$\dot{m}_{Bf}^c = \dot{m}_{Bf}^p - w_{Bf} \sum_{Bf} \dot{m}_{Bf}^p, \quad (6.63)$$

gdje je $\dot{m}_{Bf}^p$ maseni tok kroz stranicu Bf , koji je dobiven u prethodnoj vanjskoj iteraciji, a w_{Bf} težinski faktor pomoću kojeg se korekcija masenog toka raspodjeljuje proporcionalno masenom toku kroz stranice slobodne površine, tj.

$$w_{Bf} = \frac{|\dot{m}_{Bf}^p|}{\sum_{Bf} |\dot{m}_{Bf}^p|}. \quad (6.64)$$

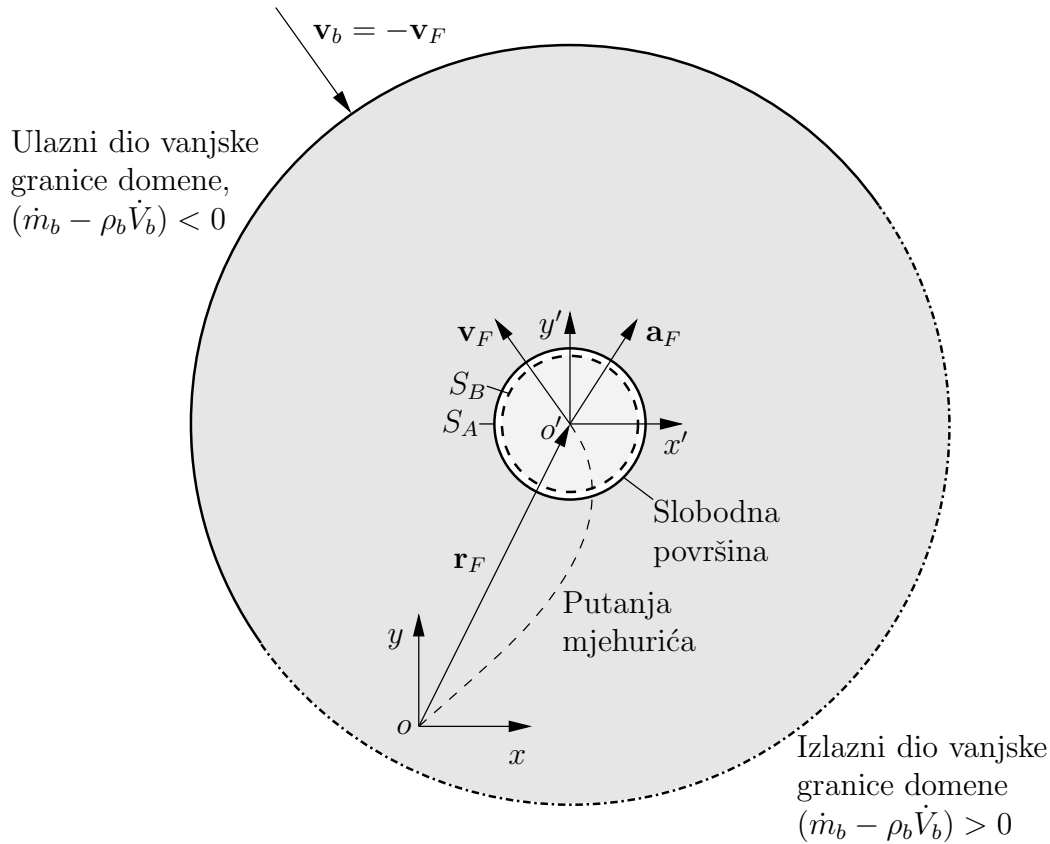
Kako postupak SIMPLE napreduje, korekcija masenog toka postaje sve manja, i ne utječe na konačno rješenje.

6.4 Numeričko modeliranje mjehurića

Opisana metoda numeričkog modeliranja strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom definirana je s krajnjim ciljem da se omogući simulacija podizanja mjehurića promjera 1.3 do 6 mm u sustavu voda-zrak. Radi se o režimu strujanja u kojem površinske sile imaju prevladavajući utjecaj, Tomiyama [77]. Mjehurić se kreće po cik-cak i/ili helikoidnoj putanji, uz vremensku promjenu oblika.

Definirana metoda praćenja slobodne površine ograničena je na umjerenu promjenu oblika slobodne površine koja ne zahtijeva promjenu topologije mreže. To znači da mjehurić tijekom simulacije mora ostati približno u centru prostorne domene. Da bi se to

postiglo korišten je pristup koji je predložio Rusche [69], u kojem se račun provodi u pokretnom neinercijalnom koordinatnom sustavu vezanom uz težište mjehurića.



Slika 6.7: Mjehurić u neinercijalnom koordinatnom sustavu.

Na slici 6.7 prikazana je prostorna domena koja se sastoji od volumena mjehurića i volumena tekućine oko mjehurića. Ishodište neinercijalnog koordinatnog sustava označeno je s o' i nalazi se u težištu mjehurića. Položaj ishodišta neinercijalnog koordinatnog sustava u odnosu na ishodište o inercijalnog koordinatnog sustava definiran je vektorom $\mathbf{r}_F$. Brzina i ubrzanje neinercijalnog koordinatnog sustava (mjehurića) u odnosu na inercijalni koordinatni sustav, definirani su sljedećim izrazima:

$$\mathbf{v}_F = \frac{d\mathbf{r}_F}{dt}, \quad (6.65)$$

$$\mathbf{a}_F = \frac{d\mathbf{v}_F}{dt}. \quad (6.66)$$

Prebacivanje računa s nepokretnog na pokretni koordinatni sustav zahtijeva korekciju jednačbe količine gibanja i graničnih uvjeta. U jednačbu količine gibanja (6.23) mora

se dodati član koji sadrži ubrzanje neinercijalnog koordinatnog sustava (Batchelor [4]):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) \mathbf{v} dS + \int_V \rho \mathbf{a}_F dV = \\ \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) dS - \int_V \nabla p_m dV, \end{aligned} \quad (6.67)$$

gdje je $\mathbf{v}$ brzina fluida u odnosu na neinercijalni koordinatni sustav.

Ako se mjehurić podiže kroz mirujuću tekućinu, na vanjskoj se granici prostorne domene zadaje brzina koja je jednaka negativnoj vrijednosti brzine pokretnog koordinatnog sustava, $\mathbf{v}_b = -\mathbf{v}_F$. Brzina se zadaje samo na dijelu vanjske granice na kojem fluid ulazi u domen, a na izlaznom se dijelu zadaje nulti normalni gradijent brzine i tlaka. To znači da se očuvanje mase na globalnoj razini mora osigurati na način kako je to objašnjeno u odjeljku 6.2.2 za izlazni granični uvjet, na kojem je bio zadan nulti normalni gradijent tlaka i brzine.

Održavanje ishodišta pokretnog koordinatnog sustava u težištu mjehurića ovisi o načinu računanju brzine i ubrzanja pokretnog koordinatnog sustava. U ovom se radu koristi postupak koji je predložio Rusche [69], u kojem se brzina pokretnog koordinatnog sustava na početku svakog vremenskog koraka korigira primjenom sljedeće korekcije:

$$\Delta \mathbf{v}_F^n = (\mathbf{v}_F^n - \mathbf{v}_F^o) = \lambda_{Ff} \frac{\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_c^f}{\Delta t} + \lambda_{Fo} \frac{\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_c^o}{\Delta t}, \quad (6.68)$$

gdje je $\mathbf{r}_c$ trenutni vektor položaja težišta mjehurića, $\mathbf{r}_c^f$ vektor položaja težišta mjehurića na početku simulacije, $\mathbf{r}_c^o$ vektor položaja težišta mjehurića u prethodnom vremenskom koraku, a λ_{Ff} i λ_{Fo} su podrelaksacijski faktori ($\lambda_{Ff} = \lambda_{Fo} = 0.1$, Rusche [69]). Primjenom izraza (6.68) se novo ubrzanje i položaj pokretnog koordinatnog sustava računaju prema sljedećim izrazima:

$$\mathbf{a}_F^n = \frac{\Delta \mathbf{v}_F^n}{\Delta t}, \quad (6.69)$$

$$\mathbf{r}_F^n = \mathbf{r}_F^o + \left(\mathbf{v}_F^o + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{v}_F^n \right) \Delta t. \quad (6.70)$$

Izrazi (6.68) i (6.70) se ujedno koriste za računanje brzine i putanje mjehurića.

Simulacija mjehurića u sustavu voda-zrak provodi se uz pretpostavku nestlačivog strujanja. Budući da je zrak stlačiv, postavlja se pitanje korektnosti takvog proračuna. Može se pokazati da mjehurić koji se pri atmosferskom tlaku nalazi na dubini 1 m, povećava

svoj volumen za 1 % podizanjem za 0.1 m. Ako se uzme u obzir da se promatra samo "stacionarno" kretanje mjehurića, podizanje za 0.1 m je više nego dovoljno da se odrede putanja i brzina mjehurića, te sile koje djeluju na mjehurić. S druge strane, modifikacija postupka rješavanja za stlačivo strujanje ne predstavlja problem.

U slučaju kada se promatra utjecaj surfaktanata, transportna se jednadžba za koncentraciju surfaktanta (2.37) rješava na početku svake vanjske iteracije. Na osnovi dobivene nove raspodjele koncentracije surfaktanata, nova se raspodjela površinske napetosti računa primjenom jednadžbe stanja (2.33).

6.5 Zaključak

U ovom je poglavlju opisana metodologija za rješavanje strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom, primjenom metode kontrolnih volumena i pomične nestrukturirane mreže. Rješavanje nestlačivog strujanja na pomičnoj mreži provodi se primjenom postupka SIMPLE, odvojenim rješavanjem jednadžbe količine gibanja i jednadžbe tlaka. Zadovoljavanje kinematičkog i dinamičkog uvjeta na slobodnoj površini provodi se tijekom postupka SIMPLE. Dinamičkim su uvjetom obuhvaćeni promjenjivost površinske napetosti uzduž slobodne površine i utjecaj viskoznih sila. Dinamički uvjet se primjenjuje neposredno, preko graničnih uvjeta na onim stranicama mreže, koje predstavljaju slobodnu površinu. Prilikom primjene površinske napetosti osigurano je da rezultirajuća površinska slika na zatvorenoj površini bude jednaka nuli. Kinematički se uvjet primjenjuje pomicanjem čvorova slobodne površine, tako da se održava nulti rezultatni maseni tok kroz stranice slobodne površine. Uz uvjet da su na kraju postupka SIMPLE zadovoljeni kinematički i dinamički uvjet, točnost cjelokupnog postupka ovisi samo o točnosti vremenske i prostorne diskretizacije matematičkog modela koji opisuje strujanje fluida.

U odjeljku 6.4 je postupak rješavanja strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom prilagođen numeričkom modeliranju mjehurića. Da bi se mjehurić tijekom simulacije održao u centru prostorne domene, račun se provodi u pokretnom koordinatnom sustavu čije ishodište prati težište mjehurića.

Poglavlje 7

Rezultati

7.1 Uvod

Metodologija koja je opisana u prethodnim poglavljima omogućava numeričko modeliranje strujanja dvofaznog fluida sa slobodnom površinom. Ta metodologija je u ovom poglavlju provjerena na nekoliko 2-D i 3-D primjera.

U prvom je primjeru ispitana točnost računanja oblika slobodne površine za stacionarno strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe. Problem je riješen kako za podkritične tako i za nadkritične uvjete strujanja, a numeričko je rješenje uspoređeno s analitičkim.

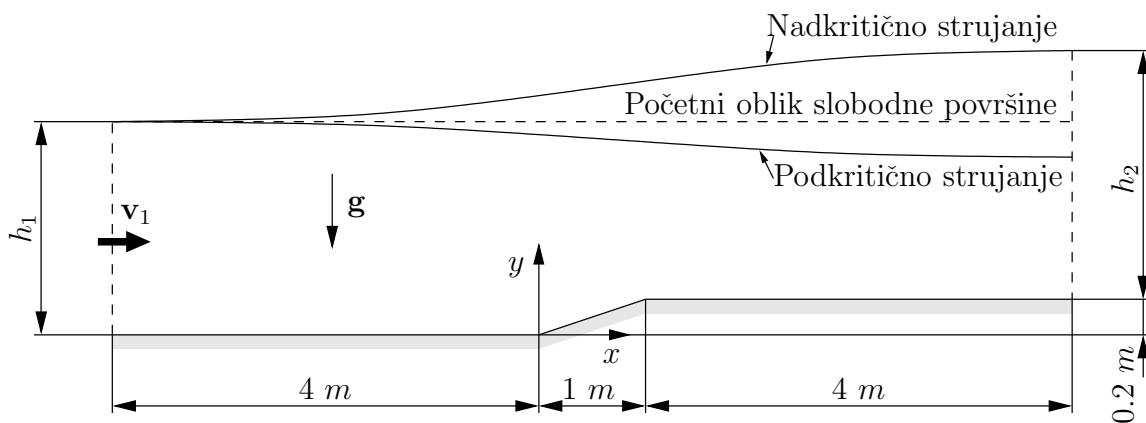
Točnost rješavanja nestacionarnog problema ispitana je na primjeru oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku. Razmatran je slučaj neviskoznog i viskozno strujanja, s jednim ili s dva fluida, pod djelovanjem gravitacijske sile ili površinske sile. Numeričko je rješenje i u ovom primjeru uspoređeno s analitičkim.

Na kraju je provedeno numeričko modeliranje podizanja mjehurića u mirujućoj tekućini, sa i bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini. Najprije je razmatran slučaj 2-D mjehurića. Za ovaj slučaj ne postoje eksperimentalni podaci, ali je provedena analiza utjecaja rezolucije mreže, tako da je dobiveno rješenje bilo neovisno o daljnjem progušćenju mreže. Rezultati simulacije 3-D mjehurića, bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini, uspoređeni su s najnovijim mjerenjem mjehurića u pročišćenoj vodi, koje je proveo de Vries [19]. Za slučaj sa surfaktantima odgovarajući eksperimentalni rezultati ne postoje u objavljenoj literaturi, ali je utjecaj surfaktanta moguće vrednovati uspored-

bom sa slučajem u kojem je slobodna površina čista. Udjeli vremena trajanja pojedinih dijelova postupka rješavanja uspoređeni su na primjeru simulacije 3-D mjehurića.

7.2 Strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe

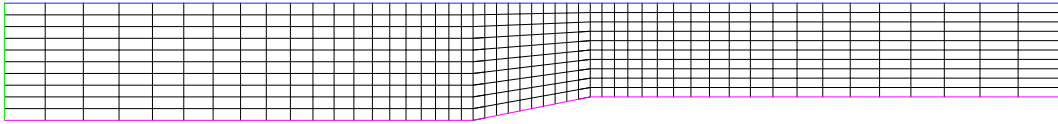
Stacionarno strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe je standardni problem koji služi za testiranje strujanja sa slobodnom površinom. Definicija prostorne domene prikazana je na slici 7.1. Moguća su dva osnovna režima strujanja: podkritični, kod kojeg je Froudeov broj ($Fr = |\mathbf{v}_1|/\sqrt{|\mathbf{g}|h_1}$) manji od jedan; i nadkritični, kod kojeg je $Fr > 1$. Primjenom Bernoullijeve jednadžbe i jednadžbe održanja mase moguće je visinu slobodne površine h_2 u izlaznom presjeku odrediti analitički, ako su zadani brzina strujanja $\mathbf{v}_1$ i visina slobodne površine h_1 na ulaznom presjeku.



Slika 7.1: Definicija prostorne domene za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.

Problem je riješen za iste početne i rubne uvjete koji su korišteni u [59]: $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$, $\mathbf{g} = [0, -9.81, 0] \text{ m/s}^2$, $h_1 = 1 \text{ m}$, brzina strujanja za podkritični režim strujanja je $\mathbf{v}_1 = [1, 0, 0] \text{ m/s}$, što odgovara Froudeovom broju $Fr = 0.32$, a za nadkritični režim $\mathbf{v}_1 = [6, 0, 0] \text{ m/s}$, što odgovara Froudeovom broju $Fr = 1.92$. Početna je brzina jednaka brzini koja je zadana na ulazu u prostornu domenu rješavanja.

Početna računaska mreža prikazana je na slici 7.2. Mreža je strukturirana i sastoji se od 50×10 četverokutnih kontrolnih volumena. Analiza utjecaja rezolucije mreže na rješenje nije provedena. Broj podjela u smjeru strujanja dvostruko je veći od onog koji je korišten u [59]. Treba primijetiti da se mreža ustvari sastoji od jednog sloja 3-D elemenata. U

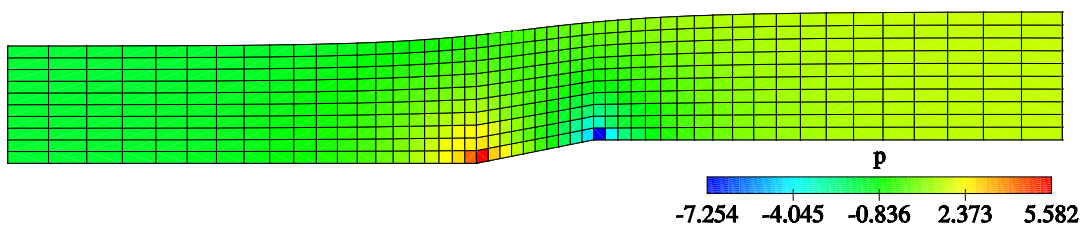


Slika 7.2: Početna računaska mreža za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.

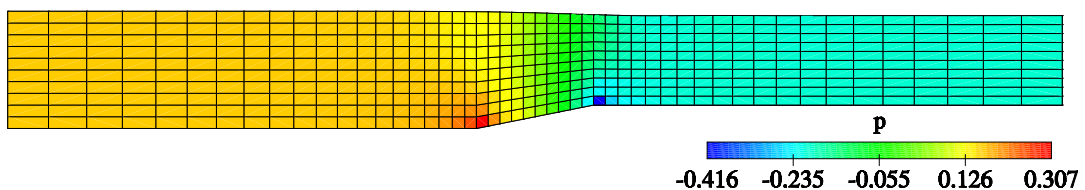
podkritičnom režimu strujanja korišten je vremenski korak $\Delta t = 0.05$ s, a u nadkritičnom $\Delta t = 0.01$ s.

Na izlaznoj granici prostorne domene korišten je granični uvjet nultog normalnog gradijenta brzine i tlaka. U nadkritičnom su režimu strujanja točke slobodne površine na ulaznom presjeku fiksirane. U podkritičnom se režimu strujanja ulazni čvorovi slobodne površine pomiču u skladu s nereflektirajućim graničnim uvjetom. S ciljem održanja konstantne visine fluida na ulazu, slobodna se površina jednoliko pomiče na kraju svakog vremenskog koraka, da bi se poništio pomak zbog nereflektirajućeg graničnog uvjeta.

U nadkritičnom je režimu strujanja korištena Gamma shema diskretizacije konvektivskog člana, s faktorom $\beta_m = 0.25$ [49]. U podkritičnom režimu strujanja stacionarno je stanje postignuto s kombiniranom shemom diskretizacije, s udjelom centralne sheme diskretizacije $\gamma = 0.7$.



(a) Nadkritični režim strujanja.



(b) Podkritični režim strujanja.

Slika 7.3: Konačna računaska mreža za strujanje neviskoznog fluida preko 2-D rampe.

Konačan oblik slobodne površine odnosno mreže za nadkritično je strujanje prikazan na slici 7.3(a), a za podkritično na slici 7.3(b). Ujedno je prikazana i raspodjela modificiranog tlaka po prostornoj domeni. U tablici 7.1 prikazana je usporedba izračunate i analitičke vrijednosti visine slobodne površine u izlaznom presjeku. Slaganje između analitičkog i numeričkog rješenja je zadovoljavajuće. Nešto bolji rezultati u odnosu na one iz [59] posljedica su veće rezolucije mreže u smjeru strujanja.

Tablica 7.1: Usporedba izračunate (h_2) i analitičke ($h_{a,2}$) vrijednosti visine slobodne površine na izlazu iz prostorne domene.

Uvjeti strujanja	$h_{a,2}$	h_2	Razlika
Nadkritično strujanje	1.08973 m	1.09019 m	0.04 %
Podkritično strujanje	0.76354 m	0.76284 m	0.09 %

7.3 Oscilacija slobodne površine u 2-D spremniku

Ovo je također jedan od standardnih problema za testiranje nestacionarnog strujanja sa slobodnom površinom. Definicija prostorne domene prikazana je na slici 7.4. Početni je oblik slobodne površine definiran sljedećim izrazom:

$$y(x) = 1 + a_0 \sin[\pi(0.5 - x)], \quad (7.1)$$

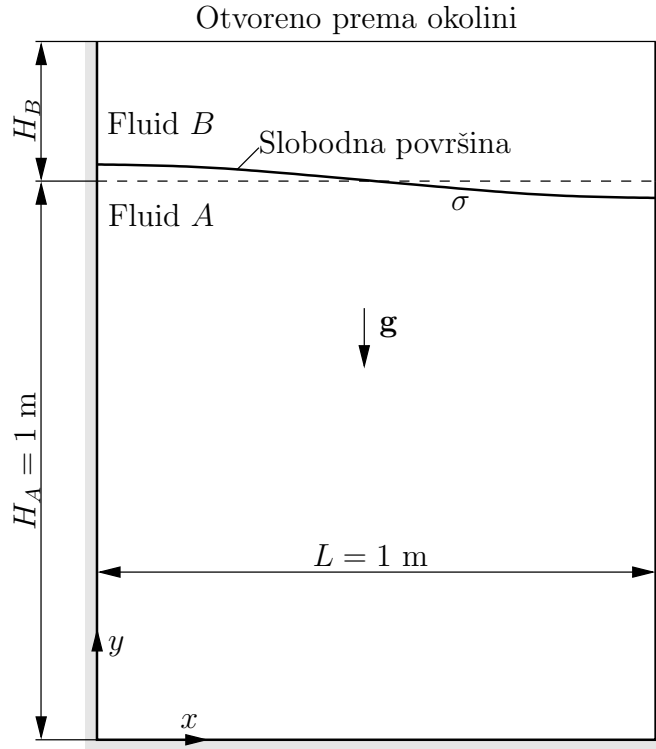
gdje je a_0 amplituda oscilacija, koja je jednaka 0.01 m. Budući da se radi o oscilacijama male amplitude, u određenim će specijalnim slučajevima linearna teorija dati egzaktno rješenje.

Problem oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku razmatran je za tri osnovna oblika strujanja:

- Jedan neviskozni fluid pod djelovanjem gravitacijske sile. U ovom slučaju linearna teorija daje osnovni period oscilacije

$$T = \sqrt{\frac{4\pi^2}{|\mathbf{g}|k \tanh(kH)}}, \quad (7.2)$$

gdje je $k = \frac{2\pi}{2L}$ valni broj.



Slika 7.4: Definicija prostorne domene za oscilaciju slobodne površine u 2-D spremniku.

- Dva viskozna fluida pod djelovanjem gravitacijske sile. Za slučaj kada je kinematička viskoznost dva fluida jednaka ($\nu = \nu_A = \nu_B$) Prosperetti [66] je izveo analitički izraz koji definira ovisnost amplitude vala o vremenu:

$$a(t) = \frac{4(1 - 4\beta)\nu^2 k^4}{8(1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\sqrt{\nu k^2 t}) + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \exp[(z_i^2 - \nu k^2)t] \operatorname{erfc}(z_i \sqrt{t}), \quad (7.3)$$

gdje su z_i četiri korjena sljedeće algebarske jednačbe:

$$z^4 - 4\beta\sqrt{k^2\nu}z^3 + 2(1 - 6\beta)k^2\nu z^2 + 4(1 - 3\beta)\sqrt{(k^2\nu)^3}z + (1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0, \quad (7.4)$$

$Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$, a Z_2, Z_3 i Z_4 dobivaju se cirkularnom permutacijom indeksa. Bezdimenzijski faktor β definiran je izrazom $\beta = \frac{\rho_A \rho_B}{(\rho_A + \rho_B)^2}$, a vlastita kutna brzina oscilacija za neviskozni fluid definirana je sljedećim izrazom:

$$\omega_0^2 = \left[\frac{\rho_A - \rho_B}{\rho_A + \rho_B} |\mathbf{g}| k + \frac{\sigma}{\rho_A + \rho_B} k^3 \right] \tanh(kH). \quad (7.5)$$

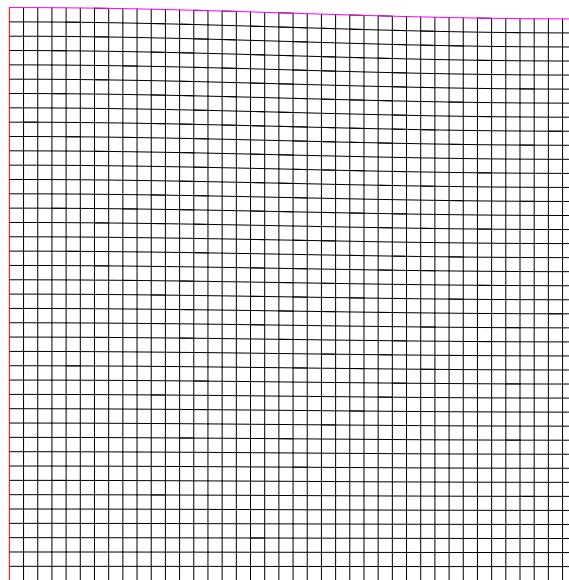
- Dva viskozna fluida pod djelovanjem samo površinske napetosti. Ovdje također vrijedi gore spomenuti Prosperettijev analitički izraz za amplitudu vala u slučaju kada su kinematičke viskoznosti dvaju fluida jednake.

U svim se slučajevima na zidovima spremnika koristi rubni uvjet glatkog zida, a pomicanje mreže se provodi primjenom Laplaceove jednadžbe pomaka s konstantnim koeficijentom difuzije.

7.3.1 Neviskozni fluid pod djelovanjem gravitacijske sile

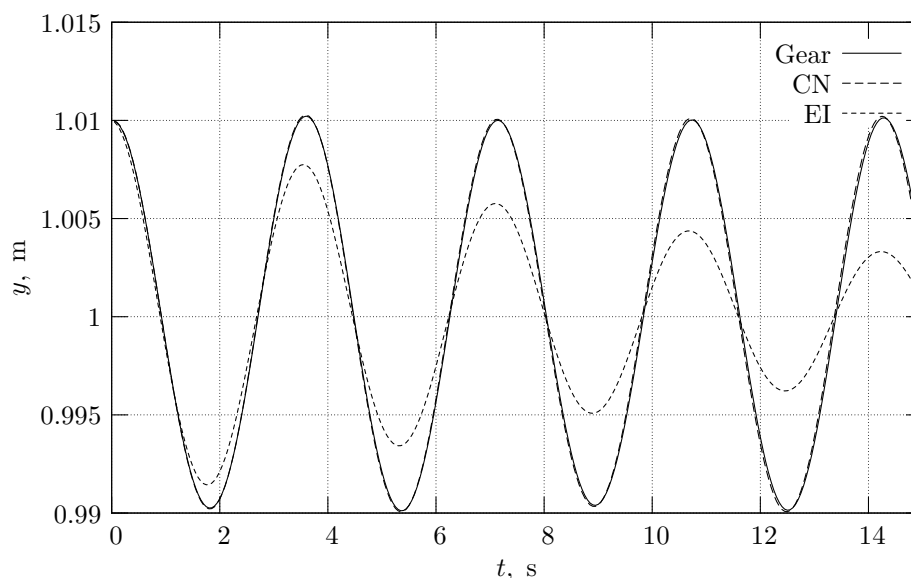
Budući da je fluid neviskozan, maksimalna amplituda vala mora tijekom vremena ostati konstantna. Zbog toga je ovaj problem koristan za vrednovanje numeričke metode s obzirom na razinu numeričke difuzije, koja se uvodi u rješenje zbog netočnosti prostorne i vremenske diskretizacije.

Problem je riješen za gravitacijsko ubrzanje $\mathbf{g} = [0, -1, 0]$ m/s², čemu odgovara period oscilacije 3.55 s prema izrazu (7.2). Konvekcijski je član diskretiziran primjenom Gamma sheme diskretizacije, s faktorom $\beta_m = 0.25$ [49]. Vremenska diskretizacija je provedena primjenom Crank-Nicolsonove (CN), Gearove i implicitne Eulerove (EI) metode.



Slika 7.5: Početna računska mreža za oscilaciju slobodne površine s jednim neviskoznim fluidom.

Na slici 7.5 prikazana je početna računska mreža, koja sadrži 40×40 četverokutnih kontrolnih volumena. Uz ovu rezoluciju mreže dobiva se rješenje koje ne ovisi o daljnjem



Slika 7.6: Vremenska ovisnost položaja slobodne površine na lijevom zidu spremnika, za različite metode vremenske diskretizacije.

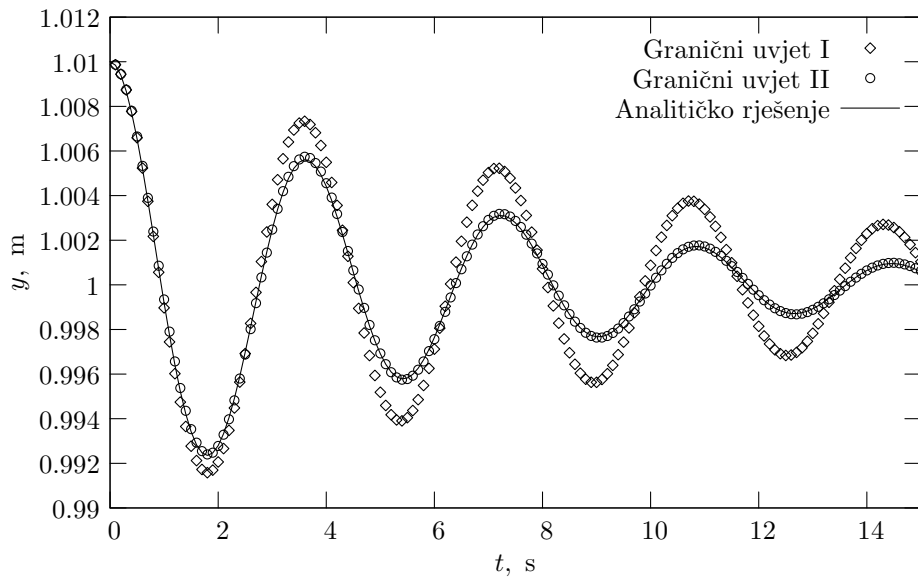
progušćavanju. Za različite metode vremenske diskretizacije račun je proveden s vremenskim korakom $\Delta t = 0.05$ s, čemu odgovara 71 vremenski korak po periodu oscilacije.

Dijagram na slici 7.6 prikazuje vremensku ovisnost visine slobodne površine na lijevom zidu spremnika za različite metode vremenske diskretizacije. Primjenom implicitne Eulerove metode događa se značajno prigušenje amplitude oscilacija. Jedino uz primjenu metode drugog reda točnosti kao što je Gearova ili Crank-Nicolsonova metoda, nema prigušenja amplitude oscilacija. Crank-Nicolsonova metoda daje gotovo identičan rezultat kao Gearova metoda. Period oscilacija je u sva tri slučaja 3.56 s, što odgovara pogreški od 0.3 %.

7.3.2 Viskozni fluid pod djelovanjem gravitacijske sile

Najprije je analiziran slučaj s jednim viskoznom fluidom, za dvije vrste graničnih uvjeta na slobodnoj površini. U prvoj varijanti graničnog uvjeta (I) na slobodnoj se površini zadaje konstantni tlak i nulti normalni gradijent brzine, dok se u drugoj varijanti (II) modificirani tlak i normalni gradijent brzine računaju prema izrazima (6.25) i (6.26). Računska mreža i diskretizacija konvektivskog člana su isti kao u prethodnom primjeru, dok je za vremensku diskretizaciju korištena Gearova metoda s vremenskim korakom $\Delta t = 0.02$ s. Kinematička viskoznost fluida je $\nu_A = 0.01$ m²/s, a gravitacijsko ubrzanje je

$$\mathbf{g} = [0, -1, 0] \text{ m/s}^2.$$

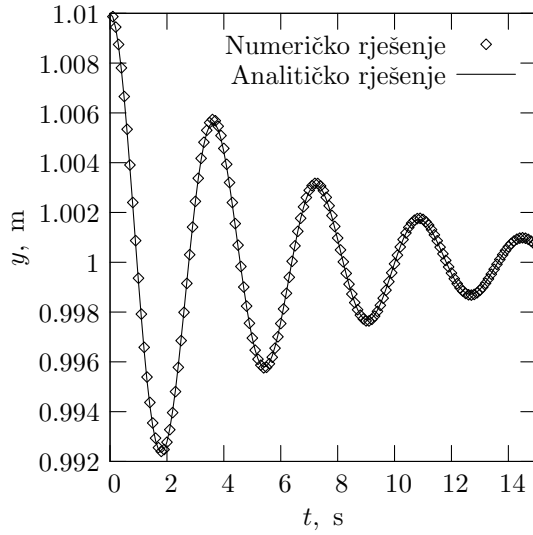
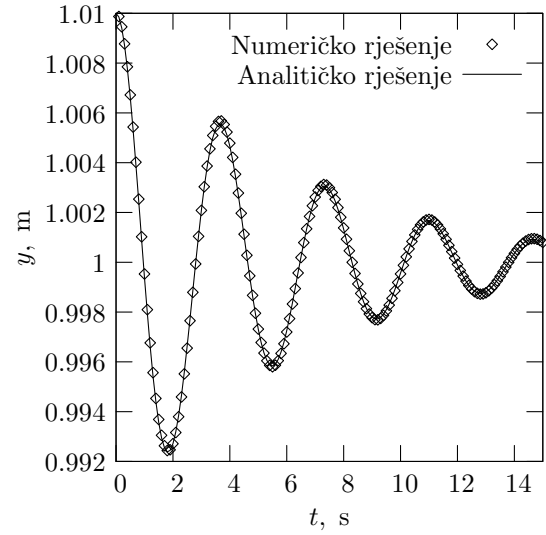
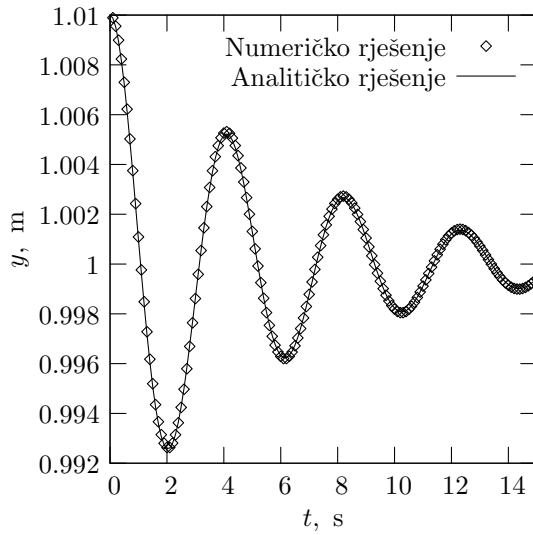
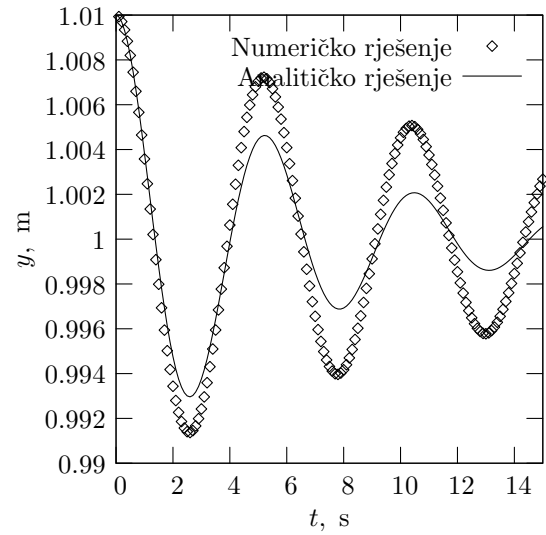


Slika 7.7: Vremenska ovisnost amplitude vala za različite pristupe u definiranju graničnog uvjeta na slobodnoj površini.

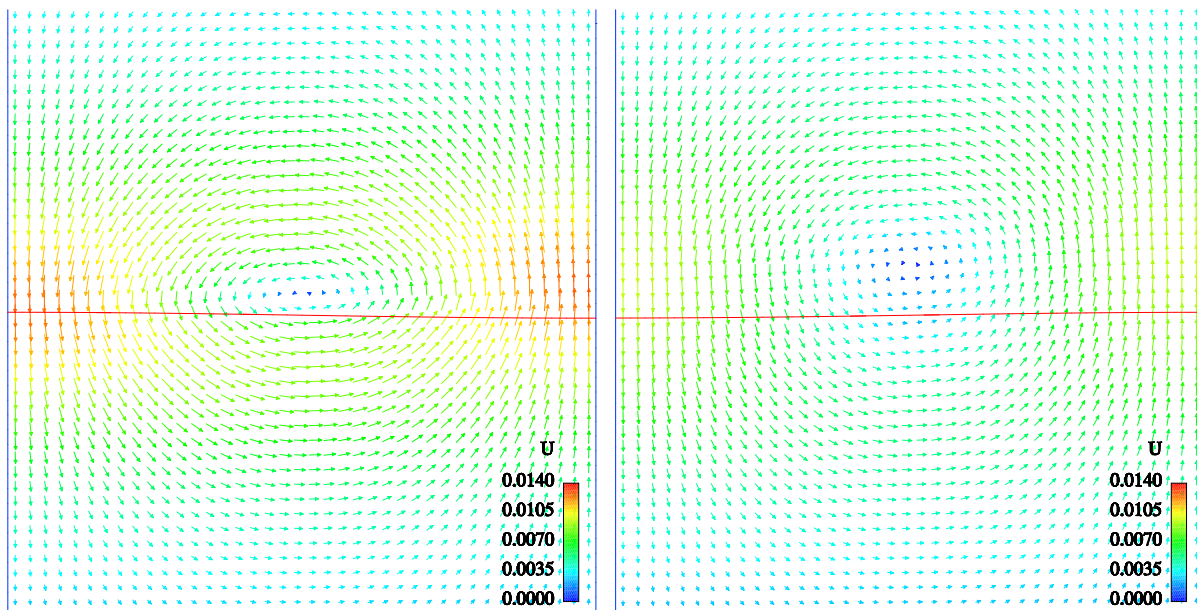
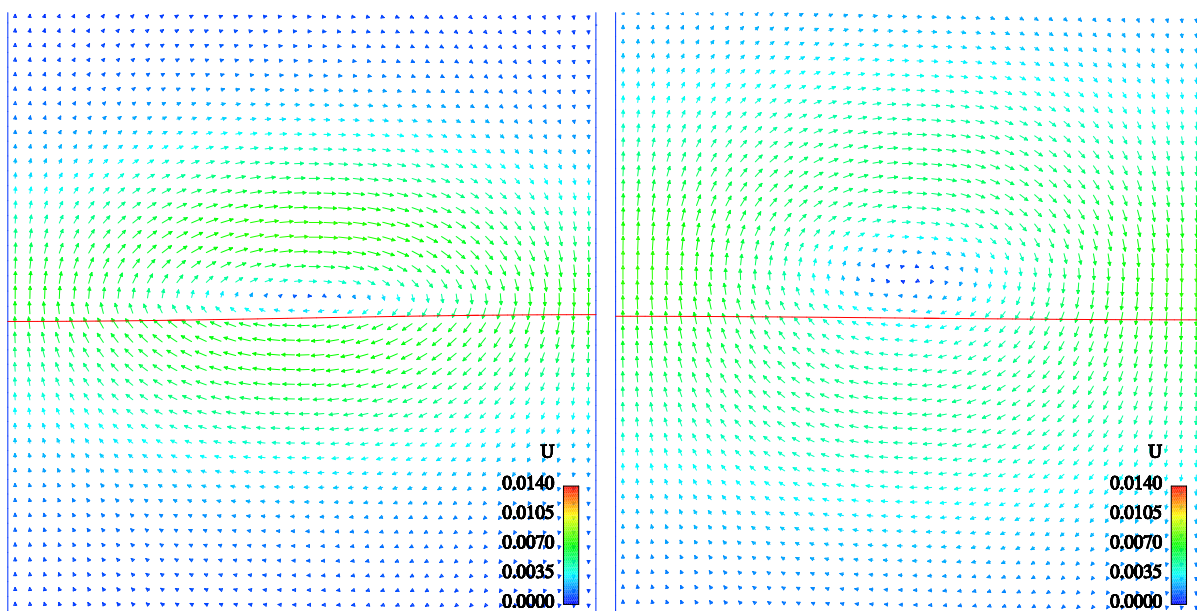
Dijagram na slici 7.7 prikazuje usporedbu izračunate vrijednosti amplitude vala i amplitude koja se dobiva prema Prosperettijevom [66] analitičkom izrazu. U slučaju kada se pri definiranju graničnog uvjeta na slobodnoj površini ne uzima u obzir utjecaj viskoznosti izračunata vrijednost amplitude vala značajno odstupa od analitičke vrijednosti. Utjecaj na frekvenciju oscilacija je nešto manji.

Slijedi analiza oscilacije slobodne površine između dva viskozna fluida jednake kinematičke viskoznosti ($\nu_A = \nu_B = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$), za različite omjere gustoća ρ_B/ρ_A . Visina fluida B jednaka je visini fluida A . Računska mreža u području fluida B sadrži 40×40 četverokutnih kontrolnih volumena, jednako kao i mreža u području fluida A , koja je prikazana na slici 7.5.

Dijagrami na slici 7.8 prikazuju usporedbu izračunatih i analitičkih [66] vrijednosti amplitude vala za različite omjere gustoća fluida s gornje i donje strane slobodne površine. Iz ovih se rezultata može zaključiti da primijenjeni eksplicitni postupak povezivanja strujanja fluida s jedne i druge strane slobodne površine daje dobre rezultate za omjere gustoća fluida $\rho_B/\rho_A \leq 0.1$. Na slici 7.9 su prikazani vektori brzina u području oko slobodne površine za omjer gustoća $\rho_B/\rho_A = 0.1$, za nekoliko vremenskih trenutaka u prvoj periodi oscilacije.

(a) $\rho_B/\rho_A = 0.001$ (b) $\rho_B/\rho_A = 0.01$ (c) $\rho_B/\rho_A = 0.1$ (d) $\rho_B/\rho_A = 0.3$

Slika 7.8: Vremenska ovisnost amplitude vala kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za različite omjere gustoća fluida s gornje i donje strane slobodne površine.

(a) $t = 0.7$ s(b) $t = 1.5$ s(c) $t = 2.5$ s(d) $t = 3.5$ s

Slika 7.9: Vektori brzine kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za omjer gustoća fluida $\rho_B/\rho_A = 0.1$.

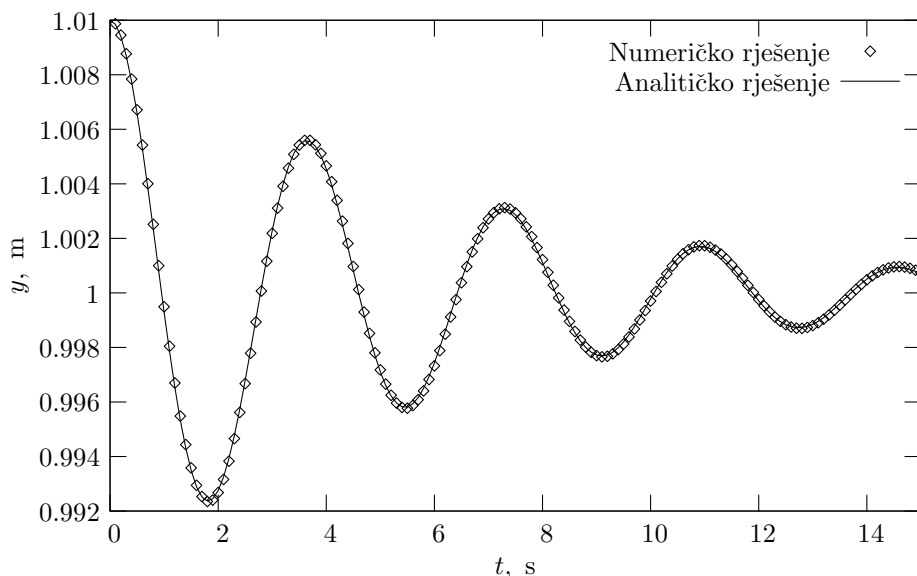
Kao što se može vidjeti iz dijagrama na slici 7.8(d), kada je omjer gustoća $\rho_B/\rho_A = 0.3$ numeričko rješenje znatno odstupa od analitičkog. Razlog za to naravno treba tražiti u primijenjenom postupku povezivanja strujanja gornjeg i donjeg fluida. Naime, modificirani tlak koji se zadaje na strani A slobodne površine prenosi se sa strane B , pri čemu se tlak na strani B računa iz uvjeta da je normalni gradijent tlaka na strani B slobodne površine jednak nuli. Kada omjer gustoća teži jedinici, normalni gradijent tlaka s jedne i druge strane slobodne površine teži istoj vrijednosti, koja je različita od nule. Prema tome, loši rezultati koji su dobiveni za povećane omjere gustoća posljedica su netočne pretpostavke da je normalni gradijent tlaka na strani B slobodne površine jednak nuli. Iz rezultata dobivenih za manje omjere gustoća može se zaključiti da je pretpostavka nultog normalnog gradijenta tlaka na strani B slobodne površine opravdana. Kod većih omjera gustoća također se javlja problem konvergencije rješenja. Naime, s porastom omjera gustoća, fluid B ima sve veći dinamički utjecaj, što uzrokuje problem konvergencije kada se dva strujanja povezuju na eksplicitan način. Prema tome, rješenje je u primjeni implicitnog povezivanja strujanja u pojedinim fazama fluida.

7.3.3 Viskozni fluid pod djelovanjem površinske napetosti

U ovom se odjeljku promatra oscilacija slobodne površine u 2-D spremniku s jednim viskoznom fluidom pod djelovanjem samo površinske napetosti. Računska mreža i diskretizacija konvektivnog člana su isti kao u slučaju s neviskoznim fluidom, dok je za vremensku diskretizaciju korištena Gearova metoda s vremenskim korakom $\Delta t = 0.02$ s. Kinematička viskoznost fluida je $\nu_A = 0.01$ m²/s, a površinska napetost $\sigma = 0.1$ N/m.

Na slici 7.10 je prikazana usporedba izračunate i analitičke (Prosperetti [66]) vrijednosti amplitude vala u vremenskoj domeni. Slaganje numeričkog i analitičkog rješenja je zadovoljavajuće.

Rabier i Medale [67] primjenu površinske napetosti temelje na zakrivljenosti, koju računaju koristeći lokalnu kvadratnu interpolaciju u čvorovima slobodne površine. Testiranje na istom problemu pokazalo je da njihov način primjene površinske napetosti zahtijeva mnogo finiju mrežu uzduž slobodne površine, u odnosu na pristup korišten u ovom radu. Razlog je u tome, što postupak koji je definiran u ovom radu daje glatku površinsku silu bez oscilacija, i to neovisno o rezoluciji mreže uzduž slobodne površine.



Slika 7.10: Vremenska ovisnost amplitude vala kod oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku pod djelovanjem površinske napetosti.

Na taj su način izbjegnuti problemi nestabilnosti slobodne površine zbog nastajanja tzv. parazitskih struja, uzrokovanih nefizikalnim oscilacijama površinske sile.

7.4 Podizanje mjehurića u mirujućoj tekućini

Provedena je direktna numerička simulacija podizanja 2-D i 3-D mjehurića zraka kroz mirujuću vodu, primjenom metodologije koja je opisana u 6. poglavlju. Promatrana su dva osnovna slučaja:

- Površina mjehurića je čista;
- Na površini mjehurića se na početku simulacije nalaze jednoliko raspodijeljene molekule surfaktanta, čiji se ukupni sadržaj na slobodnoj površini tijekom vremena ne mijenja.

U stvarnosti, sadržaj molekula surfaktanta na slobodnoj površini nije konstantan. Naime, surfaktanti se adsorbiraju na slobodnoj površini prelazeći iz okolnog fluida na slobodnu površinu, ili se desorbiraju prelazeći sa slobodne površine na okolni fluid. Proces adsorpcije i desorpcije često se opisuje Langmuirovim kinetičkim zakonom (Cuenot, Magnaudet i Spennato [16]). Da bi se cijelokupni proces mogao uzeti u obzir potrebno

je rješavati i transportnu jednadžbu koncentracije surfaktanta u volumenu fluida. Adsorbirana ili desorbirana količina surfaktanta se u površinsku transportnu jednadžbu unosi preko površinskog izvornog člana, dok se u volumnoj transportnoj jednadžbi priljev i odljev surfaktanta definira preko graničnog uvjeta. Moguće je zamisliti situaciju u kojoj postoji ravnoteža izvora i ponora surfaktanta u površinskoj transportnoj jednadžbi, pa je u takvim uvjetima opravdano promatrati konstantnu količinu surfaktanta na slobodnoj površini.

Svojstva vode i zraka uzeta su pri temperaturu 20 °C. Gravitacijsko je ubrzanje u 2-D slučaju $\mathbf{g} = [0, -9.81, 0]$ m/s², a u 3-D slučaju $\mathbf{g} = [0, 0, -9.81]$ m/s², zbog promjene orijentacije koordinatnog sustava. Korišteni surfaktant ima sljedeća svojstva: koncentracija zasićenja $\Phi_\infty = 5 \times 10^{-6}$ mol/m², koeficijent difuzije $\Gamma_\Phi = 1 \times 10^{-9}$ m²/s, temperatura $T = 293$ K. Koncentracija surfaktanta na početku simulacije je $\Phi = 1 \times 10^{-7}$ mol/m². Svojstva surfaktanta odgovaraju onima koja su koristili u svom numeričkom eksperimentu Cuenot, Magnaudet i Spennato [16]. Površinska se napetost računa na osnovi koncentracije surfaktanta prema izrazu (2.33).

Transport surfaktanta na površini mjehurića računa se primjenom metode kontrolnih površina, koja je opisana u 5. poglavlju. Konvekcijski član u površinskoj transportnoj jednadžbi diskretiziran je primjenom Gamma sheme diskretizacije s faktorom $\beta_m = 0.25$ [49], a vremenski su integrali diskretizirani primjenom Gearove metode.

U odjeljku 6.4 opisana je prilagodba matematičkog modela i postupka rješavanja za numeričko modeliranje mjehurića. Prostorna domena je prikazana na slici 6.7. U svim modeliranim slučajevima je polumjer vanjske granice prostorne domene deset puta veći od polumjera mjehurića. Ovako odabran polumjer vanjske granice je kompromis između njegovog utjecaja na rješenje i veličine računske mreže. Početni je oblik mjehurića kružni u 2-D slučaju, odnosno sferični u 3-D slučaju.

Čvorovi slobodne površine se pomiču u smjeru normale iz prethodnog vremenskog koraka. Pomicanje računske mreže tijekom deformacije mjehurića provodi se primjenom Laplaceove jednadžbe pomaka s prostorno promjenjivim koeficijentom difuzije koji je definiran izrazom (4.29).

Konvektivni član matematičkog modela strujanja fluida diskretiziran je primjenom Gamma sheme diskretizacije s faktorom $\beta_m = 0.25$ [49]. Vremenska diskretizacija mate-

matičkog modela je provedena primjenom Gearove metode, a vremenski korak je odabran tako, da je u stacionarnom stanju Courantov broj manji od 0.5.

7.4.1 2-D mjehurić

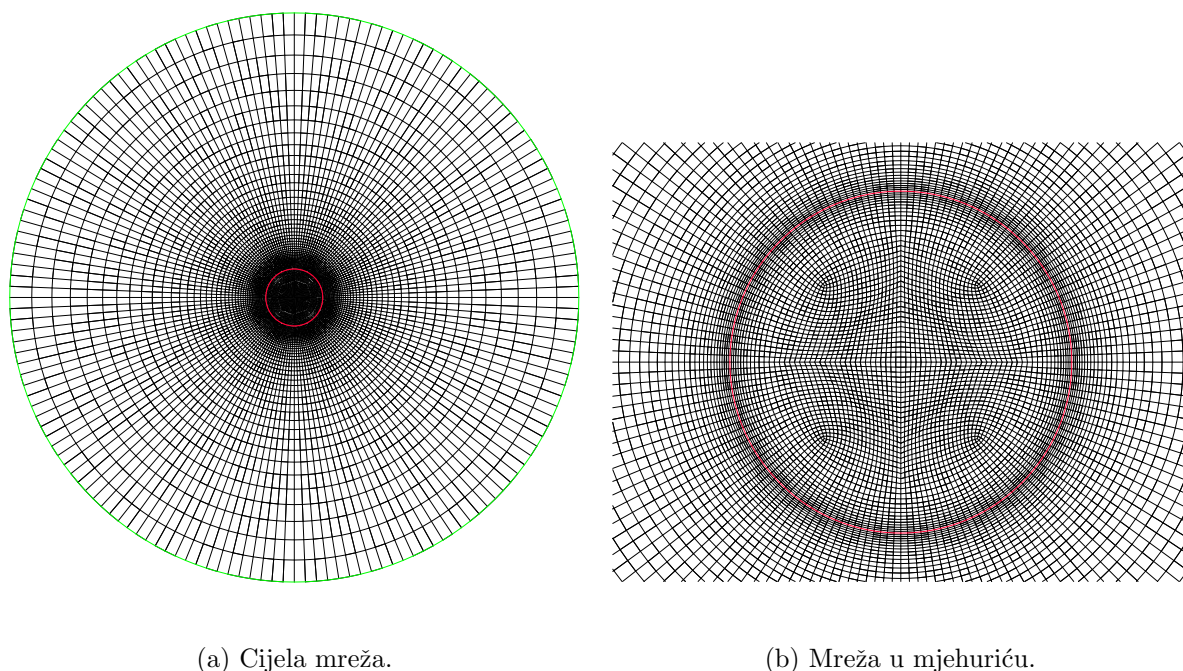
Provedena je numerička simulacija 2-D mjehurića polumjera $r_b = 0.75$ mm, s čistom slobodnom površinom i uz prisustvo molekula surfaktanta na slobodnoj površini. Polumjer 2-D mjehurića odabran je tako, da njegova deformacija kod ustaljenog gibanja bude približno jednaka deformaciji 3-D mjehurića, koji je simuliran u sljedećem odjeljku.

2-D mjehurić, naravno, nije realna fizikalna situacija, jer je nemoguće postići stabilan cilindarski oblik mjehurića. Ova je nerealna fizikalna situacija numerički modelirana iz nekoliko razloga:

- Odvija se isti fizikalni proces kao i u slučaju 3-D mjehurića. Tijekom ubrzavanja mjehurića dolazi do njegove deformacije sve dok to površinske sile dopuštaju. Utjecaj surfaktanta na slobodnoj površini je također usporediv s 3-D mjehurićem, jer se u oba slučaja radi o nastanku gradijenta površinske napetosti zbog neravnomjerne raspodjele surfaktanta na slobodnoj površini.
- Računska je mreža u 2-D slučaju višestruko manja, pa je testiranje postupka rješavanja tijekom razvoja puno brže.
- 2-D proračuni se u nekim dijelovima mogu kvalitativno usporediti s 3-D proračunima ako su ekvivalentne zakrivljenosti promatranih mjehurića iste.

Na slici 7.11 prikazana je početna računska mreža. Mreža se sastoji od 12 500 četverokutnih kontrolnih volumena. Dimenzija kontrolnih volumena uz površinu mjehurića je $0.01 r_b$ u smjeru normale na površinu mjehurića i $0.04 r_b$ uzduž granice mjehurića. Analiza utjecaja rezolucije mreže pokazala je da daljnje povećanje rezolucije ne dovodi do značajnije promjene rezultata.

S podizanjem mjehurića dolazi do promjene njegovog oblika, sve dok ne postigne konstantnu brzinu podizanja. Na slici 7.12 je za dva promatrana slučaja prikazana ovisnost brzine podizanja 2-D mjehurića o vremenu. U slučaju čiste slobodne površine oblik mjehurića nakon vremenskog trenutka $t = 0.4$ s postaje nestabilan, za razliku od slučaja kada

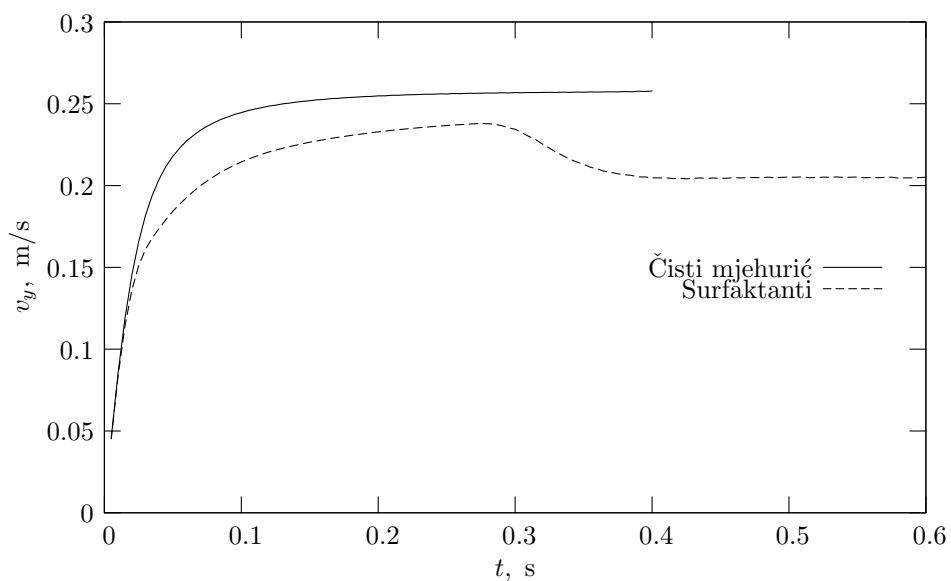


Slika 7.11: Početna računaska mreža za numeričko modeliranje podizanja 2-D mjehurića u mirujućoj tekućini.

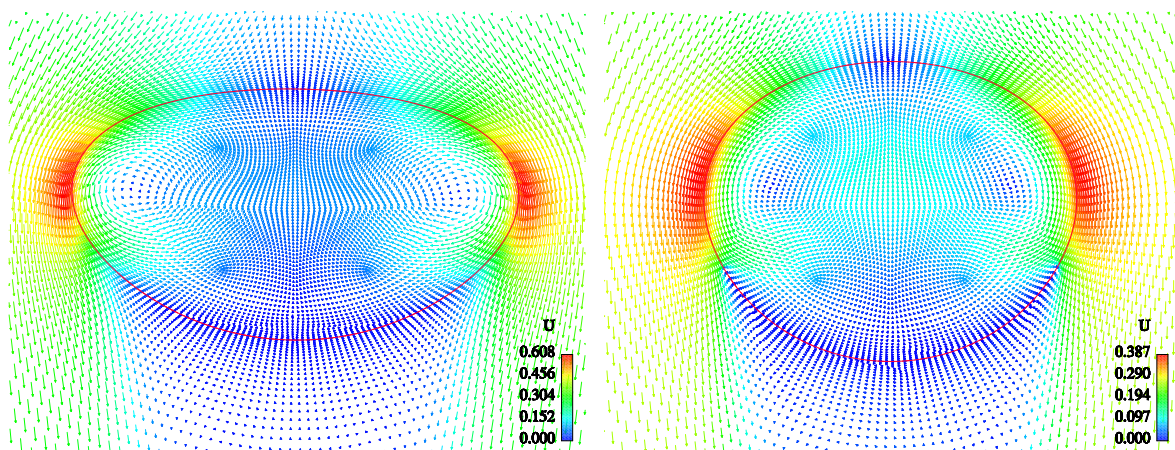
se na slobodnoj površini nalaze surfaktanti. Nazočnost surfaktanata rezultira smanjenom brzinom podizanja mjehurića, u odnosu na slučaj s čistom slobodnom površinom.

Zakrivljenost nedeformiranog 2-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm je 1333.33 m^{-1} , a istu zakrivljenost ima nedeformirani 3-D mjehurić polumjera 1.5 mm. Prema korelaciji koju su definirali Tomiyama *et al.* [78], brzina podizanja mjehurića zraka polumjera 1.5 mm kroz čistu vodu je 0.248 m/s, što je usporedivo s brzinom podizanja 0.257 m/s kod 2-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm. Naravno, ovu uporedbu treba shvatiti samo kao ilustraciju.

Na slici 7.13 prikazani su vektori brzine unutar i izvan mjehurića u trenutku $t = 0.4$ s, kada je u oba slučaja postignuta stacionarna brzina podizanja mjehurića. Crvena linija predstavlja površinu mjehurića. Omjer između velike i male osi mjehurića je 1.75 kod čiste slobodne površine, i 1.24 uz prisutnost surfaktanta na slobodnoj površini. Iza mjehurića se u oba slučaja mogu uočiti dva stacionarna protusmjerna vrtloga, što znači da na površini mjehurića dolazi do odvajanja graničnog sloja. U slučaju kada se na slobodnoj površini nalaze molekule surfaktanta do ranijeg odvajanja graničnog sloja dolazi zbog toga što se zadnja strana mjehurića ponaša kao kruta stijenka.



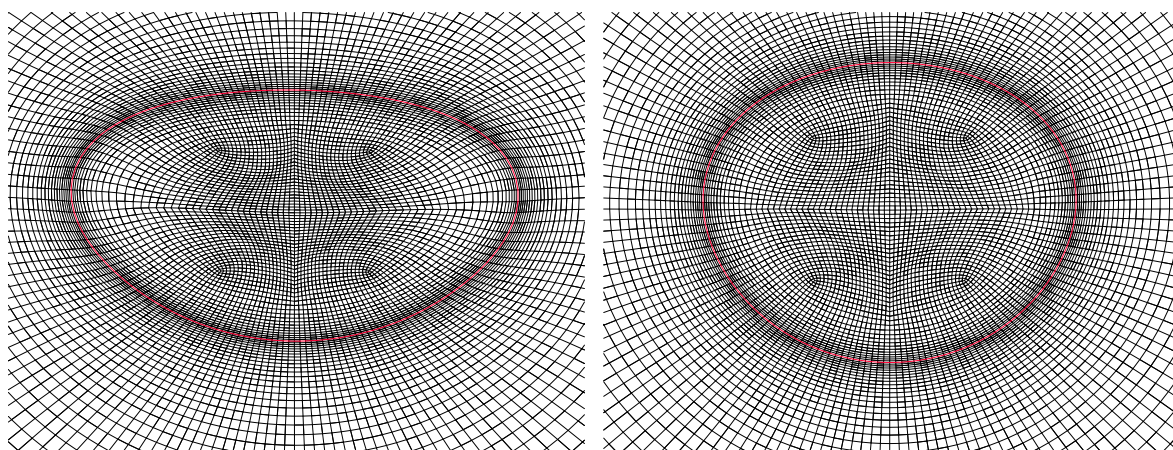
Slika 7.12: Brzina podizanja 2-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, za čistu slobodnu površinu i uz nazočnost molekula surfaktanta na slobodnoj površini.



(a) Čista slobodna površina.

(b) Surfaktanti.

Slika 7.13: Vektori brzine za 2-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, sa i bez nazočnosti molekula surfaktanta na slobodnoj površini, u vremenskom trenutku $t = 0.4$ s.



(a) Čista slobodna površina.

(b) Surfaktanti.

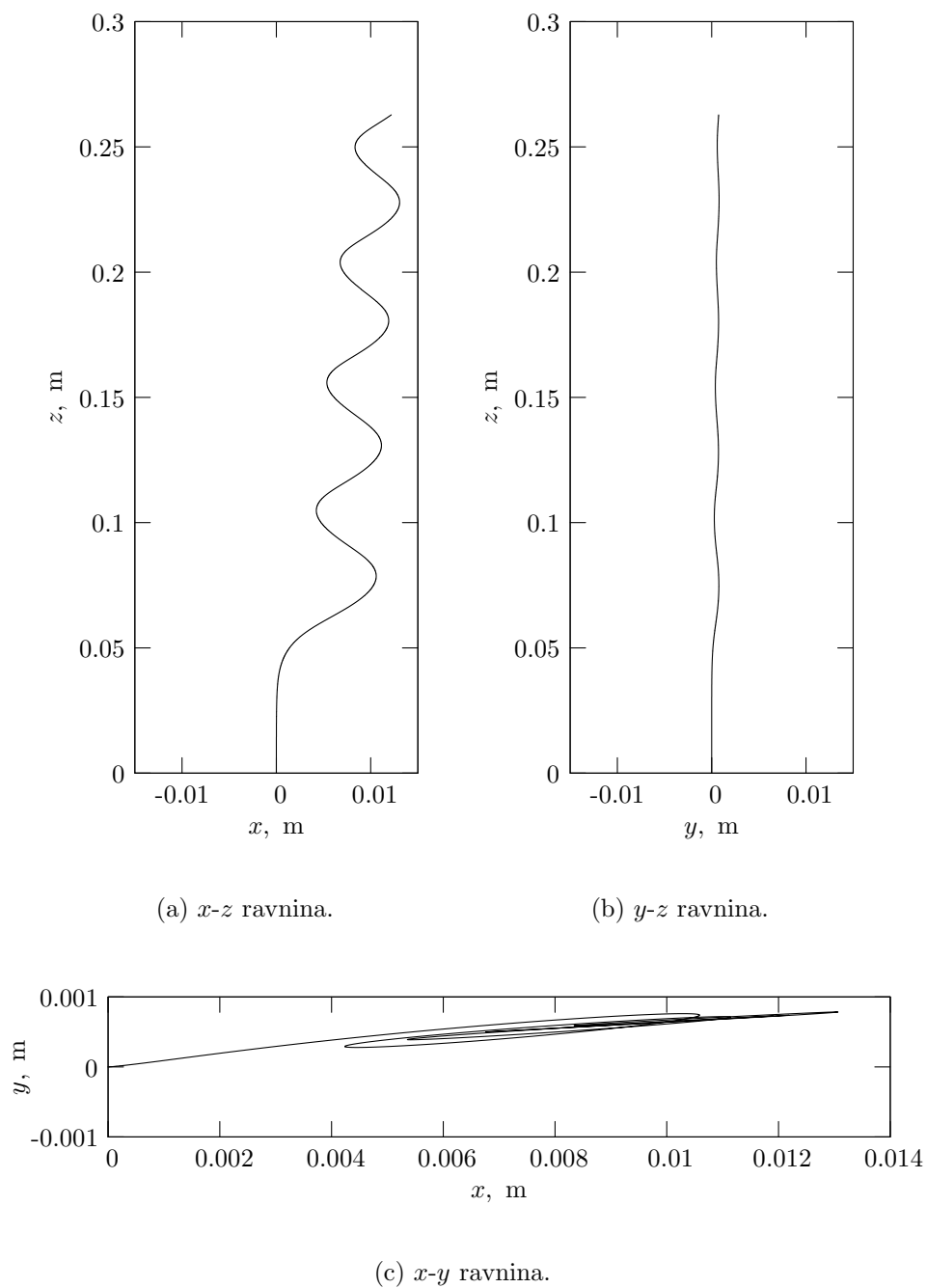
Slika 7.14: Deformirana mreža za 2-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 0.75$ mm, sa i bez nazočnosti molekula surfaktanta na slobodnoj površini, u vremenskom trenutku $t = 0.4$ s.

Razlika koja se pojavljuje u obliku i konačnoj brzini podizanja mjehurića, u odnosu na slučaj s čistom slobodnom površinom, pokazuje značajan utjecaj surfaktanata, a to je u skladu s iskustvom i mjerenjima (Zhang i Finch [87]).

Na slici 7.14 prikazane su deformirane mreže u trenutku $t = 0.4$ s. Može se uočiti da je debljina kontrolnih volumena uz jednu i drugu stranu slobodne površine tijekom simulacije ostala očuvana. To je posljedica primjene promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka, koji je obrnuto proporcionalan kvadratu udaljenosti od pomične granice.

7.4.2 3-D mjehurić

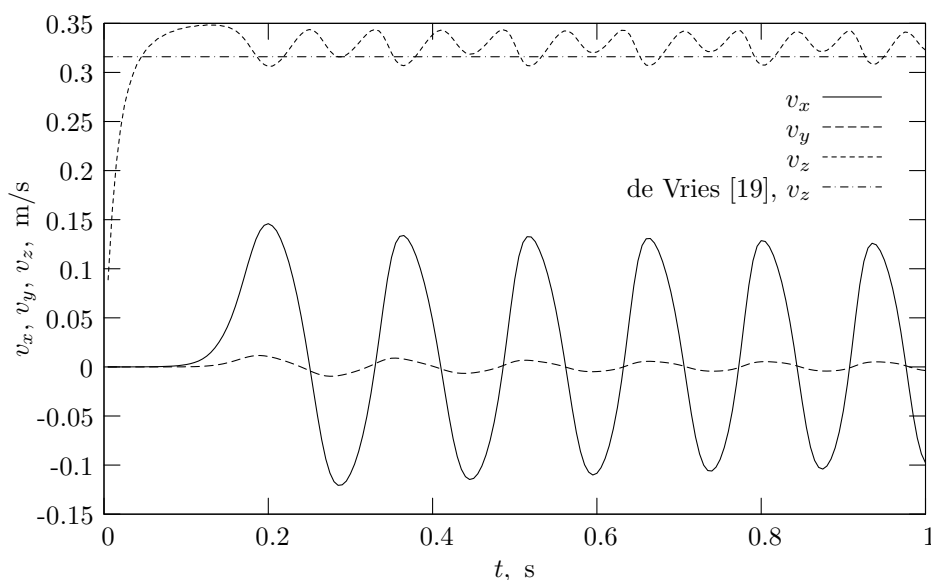
Provedena je direktna numerička simulacija 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm, bez i sa surfaktantima na slobodnoj površini. Računska je mreža prikazana na slici 4.14 u odjeljku 4.5.2. Dimenzija kontrolnih volumena uz površinu mjehurića je $0.02 r_b$ u smjeru normale na površinu mjehurića, i $0.08 r_b$ uzduž granice mjehurića. Mreža se sastoji od 113 600 heksaedarskih kontrolnih volumena, a mreža na površini mjehurića sadrži 2400 kontrolnih površina. Blanco i Magnaudet [9] su proveli analizu rezolucije mreže kod modeliranja osnosimetričnog mjehurića fiksnog oblika u području Reynoldsovog broja $Re < 1000$.



Slika 7.15: Putanja 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.

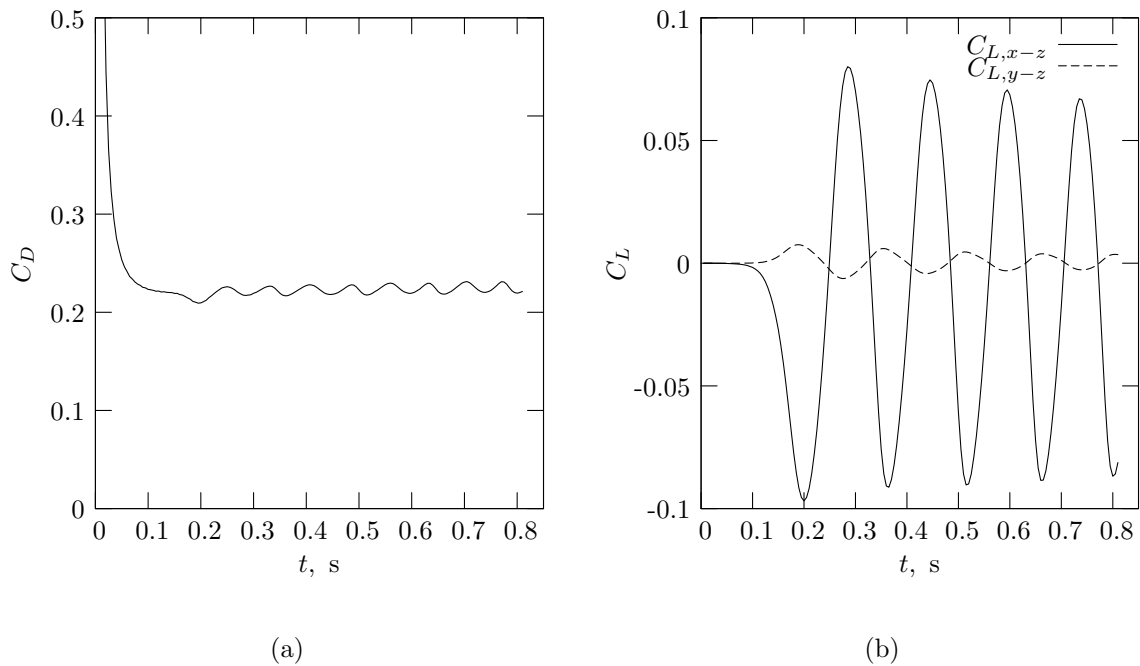
Analiza je pokazala da debljina kontrolnog volumena uz slobodnu površinu mora biti ispod $0.01 r_b$, da bi greška računanja koeficijenta otpora bila ispod 1 %. Mreža koja zadovoljava ove uvjete napravljena je u sklopu ovog rada, i ona se sastoji od 561 920 kontrolnih volumena. Zbog nedostatka odgovarajućih računalnih resursa (paralelno računalo), korištena je gore opisana grublja mreža. Tijekom simulacije korišten je konstantni vremenski korak $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s.

Dijagrami na slici 7.15 prikazuju putanju mjehurića u tri međusobno okomite ravnine. Mjehurić ima cik-cak putanju u ravnini koja je približno paralelna s x - z koordinatnom ravninom, a što je u skladu s mjerenjem koje je proveo de Vries [19]. Rusche [69] je za simulaciju mjehurića koristio volumnu metodu sličnu onoj koju je razvio Ubbink [80]. Putanja mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm ima također cik-cak oblik, ali postoji konstantni odmak mjehurića u smjeru okomitom na glavnu ravninu cik-cak gibanja. Razlog je u tome što se kod primijenjene volumne metode ne može zadovoljiti uvjet da ukupna površinska sila na zatvorenoj slobodnoj površini mora biti jednaka nuli. Zbog toga se dobiva resultantna bočna sila na mjehurić koja nije realna, a koja ne postoji kod primjene površinske napetosti u ovom radu.



Slika 7.16: Brzina 3-D mjehurića ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.

Dijagram na slici 7.16 prikazuje ovisnost komponenata brzine težišta mjehurića o vremenu. Vidi se da je postignuto približno ustaljeno gibanje mjehurića. Prosječna brzina



Slika 7.17: Koeficijenti otpora i uzgona za 3-D mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.

podizanja mjehurića je $v_z = 0.325$ m/s. De Vries [19] (de Vries, Biesheuvel i Wijngaarden [20]) je mjerio mjehurić ekvivalentnog polumjera $r_b = 1$ mm u pročišćenoj vodi. U tipičnom eksperimentu izmjerena je prosječna brzina podizanja mjehurića $v_z = 0.316$ m/s. Maksimalna sila uzgona procijenjena je na $F_L = 2.4 \times 10^{-5}$ N, što odgovara koeficijentu uzgona¹ $C_L = 0.12$. Ovisnost koeficijenata otpora i uzgona o vremenu za modelirani je mjehurić prikazana dijagramom na slici 7.17. Maksimalna vrijednost koeficijenta uzgona odstupa od procijenjene vrijednosti u de Vriesovom [19] eksperimentu za približno 30 %. Jedan od razloga za ovo odstupanje je sigurno u nedostatnoj rezoluciji mreže, međutim, upitna je i vrijednost sile uzgona dobivena u eksperimentu, budući da ona nije direktno mjerena nego je procijenjena na osnovi vizualizacije vrtložnog traga. Prosječna vrijednost

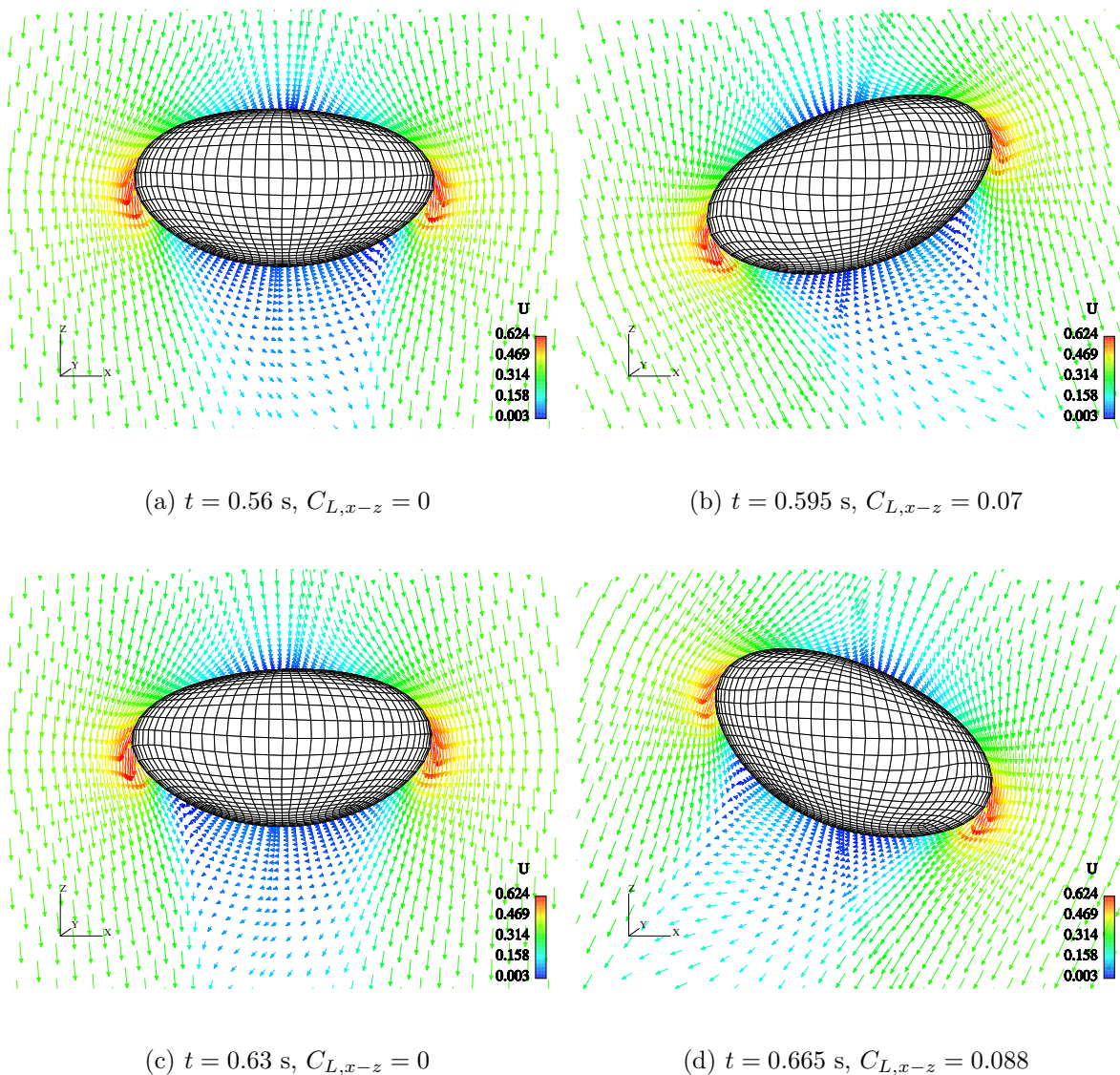
¹Koeficijent uzgona i otpora računaju se prema sljedećim izrazima:

$$C_L = \frac{F_L}{0.5\rho_A v_b^2 r_b^2 \pi}, \quad (7.6)$$

$$C_D = \frac{F_D}{0.5\rho_A v_b^2 r_b^2 \pi}, \quad (7.7)$$

gdje je F_L sila uzgona, F_D sila otpora, v_b apsolutna vrijednost brzine gibanja težišta mjehurića, a r_b ekvivalentni polumjer mjehurića. Sile uzgona je okomita na smjer gibanja težišta mjehurića, a sila otpora je paralelna sa smjerom gibanja težišta mjehurića.

koeficijenta otpora je $C_D = 0.22$, što je za oko 20 % više od vrijednosti koeficijenta otpora koju su izračunali Blanco i Magnaudet [9], za isti Reynoldsov broj, ali za osnosimetrični mjehurić fiksno elipsoidalnog oblika. Ova se razlika također može pripisati nedostatnoj rezoluciji mreže, na što upućuju preliminarni rezultati ostvareni na finoj mreži.



Slika 7.18: Vektori brzine u x - z ravnini koja prolazi kroz težište 3-D mjehurića.

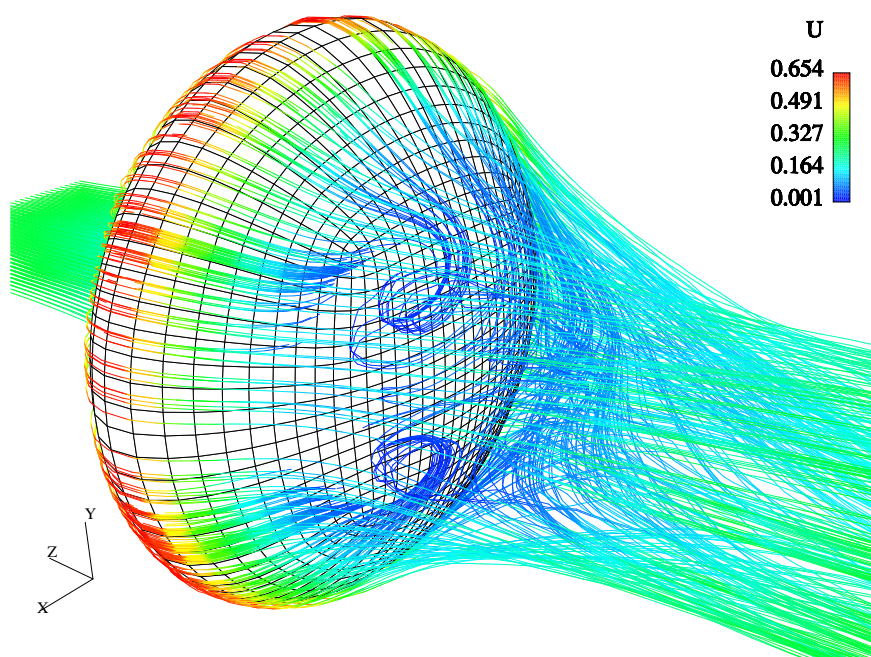
Slučaj bez prisustva surfaktanta na slobodnoj površini.

Na slici 7.18 prikazani su oblici mjehurića i vektori brzine u x - z ravnini koja prolazi kroz težište mjehurića. Odabrani su takvi vremenski trenuci kada je sila uzgona maksimalna, ili jednaka nuli. Treba primijetiti da sila uzgona ima maksimalnu vrijednost u trenutku kada je zakrivljenost cik-cak putanje mjehurića jednaka nuli. Oblik mjehurića

je približno osnosimetričan, ali odstupa od oblika osnosimetričnog elipsoida.

Na slici 7.19 prikazane su putanje obilježenih čestica iza mjehurića. Može se uočiti postojanje dvostrukog vrtložnog traga (engl. double-threaded wake), koji je simetričan s obzirom na ravninu $y-z$ koja prolazi kroz težište mjehurića. Ova se pojava savršeno poklapa s de Vriesovom [19] vizualizacijom vrtložnog traga.

Na slikama 7.18 i 7.19 može se uočiti nedostatna rezolucija površinske mreže na dijelu površine mjehurića na kojem je zakrivljenost maksimalna. U analizi eventualnih netočnosti rezultata simulacije i to treba uzeti u obzir.

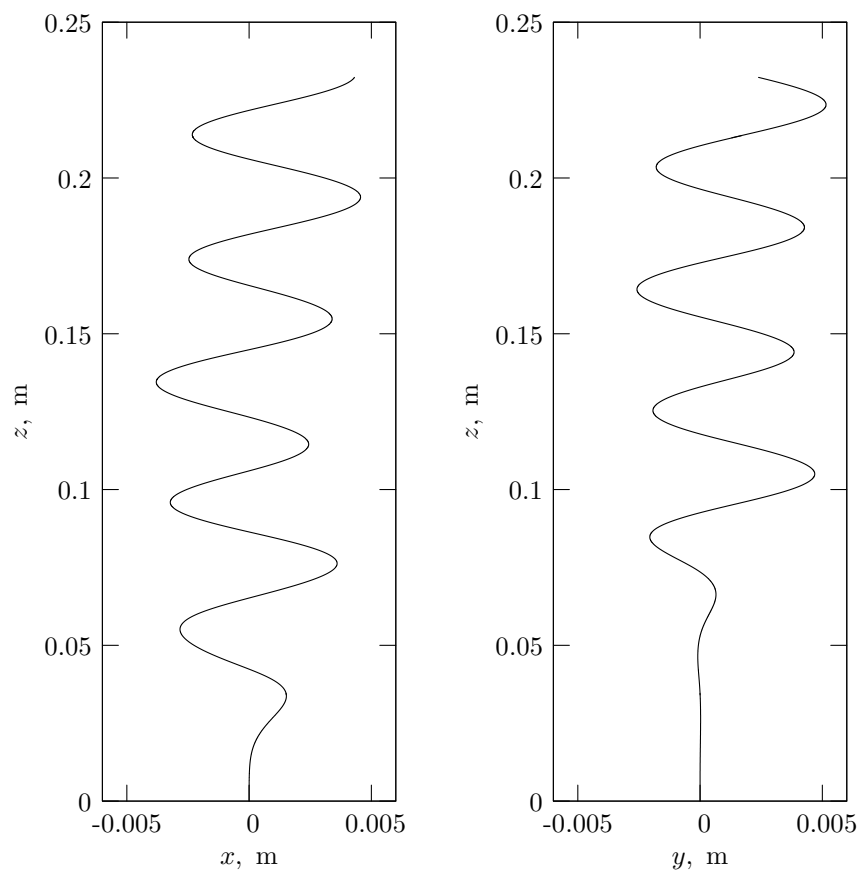
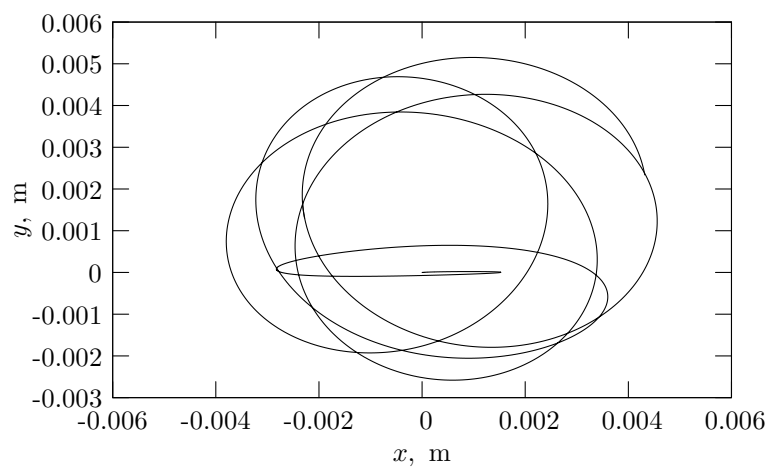


Slika 7.19: Putanje obilježenih čestica iza 3-D mjehurića u trenutku $t = 0.56$ s, kada je $C_{L,x-z} = 0$, za slučaj bez surfaktanta na slobodnoj površini.

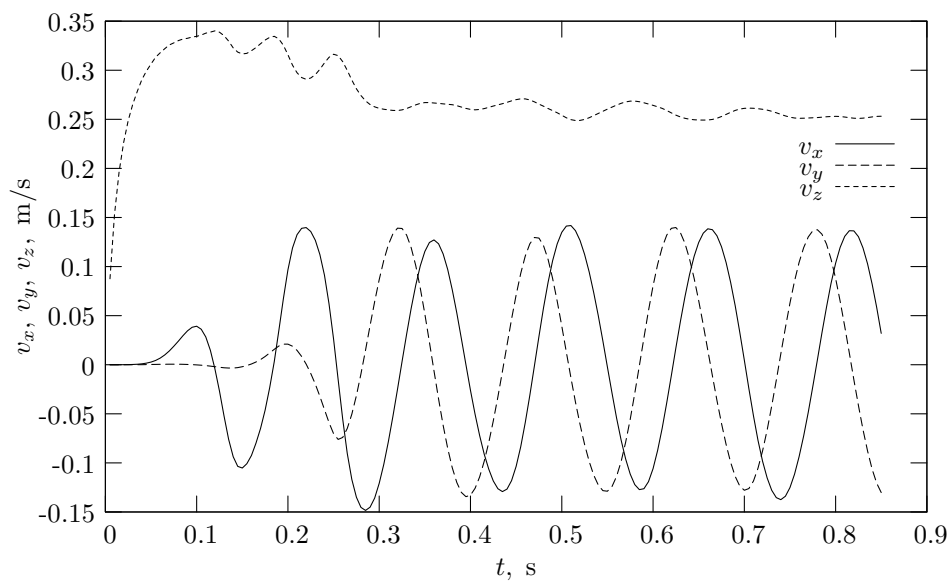
Utjecaj surfaktanta

U sljedećem je koraku provedeno numeričko modeliranje mjehurića jednakog ekvivalentnog polumjera za slučaj kada se u početnom trenutku na slobodnoj površini nalaze jednoliko raspodijeljene molekule surfaktanta s koncentracijom 1×10^{-7} mol/m². Pretpostavlja se da količina surfaktanta tijekom simulacije ostaje konstantna, tj. da nema adsorpcije i desorpcije.

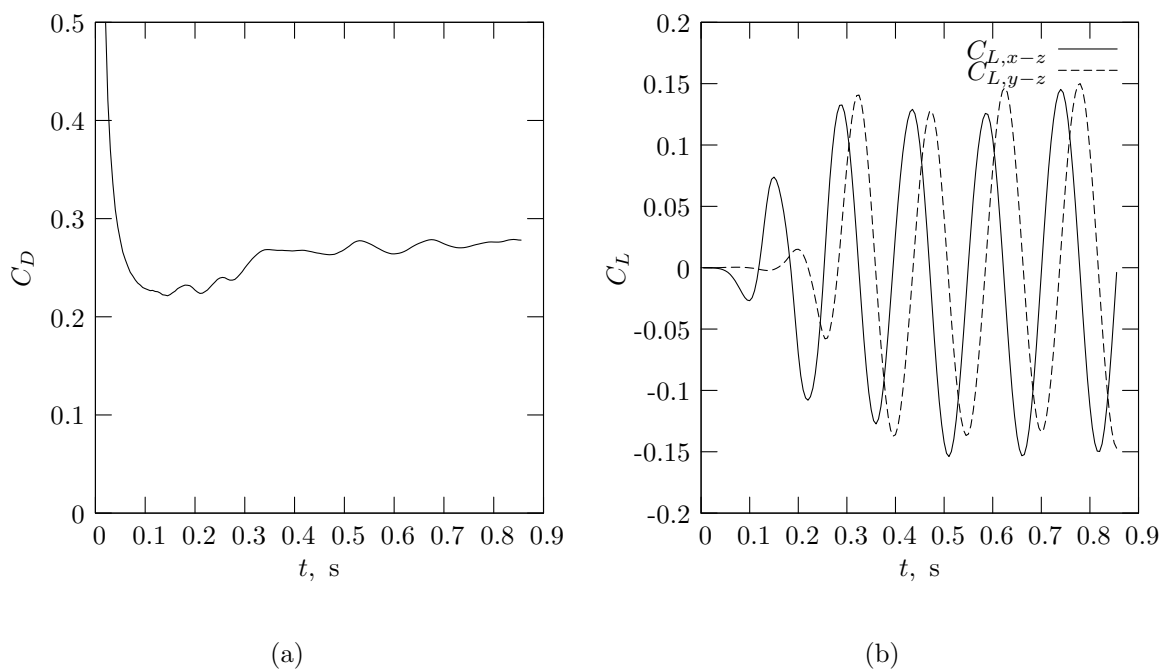
Kao što se može vidjeti na slici 7.20, putanja mjehurića je u ovom slučaju u obliku

(a) x - z ravnina.(b) y - z ravnina.(c) x - y ravnina.

Slika 7.20: Putanja 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slo-
bodnoj površini.

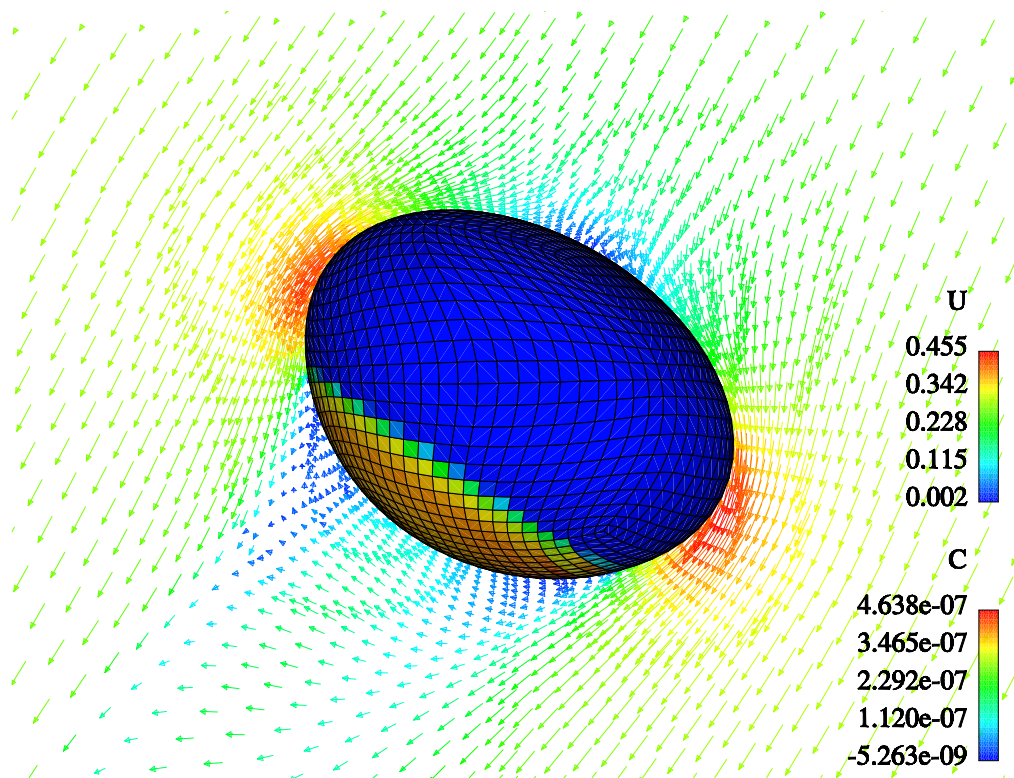


Slika 7.21: Brzina težišta 3-D mjehurića polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slobodnoj površini.



Slika 7.22: Koeficijent otpora C_D i uzgona C_L za 3-D mjehurić polumjera $r_b = 1$ mm sa surfaktantom na slobodnoj površini.

helikoidalne spirale. Brzina podizanja mjehurića približno je konstantna i iznosi $v_z = 0.25$ m/s, što je za 15 % manje od prosječne brzine podizanja mjehurića u slučaju s čistom slobodnom površinom. Na slici 7.22 prikazani su koeficijenti otpora i uzgona. Kao što se moglo očekivati, njihova je vrijednost veća nego u slučaju s čistom slobodnom površinom.



Slika 7.23: Vektori brzine u x - z ravnini za 3-D mjehurić sa surfaktantom na slobodnoj površini. Boje definiraju raspodjelu koncentracije surfaktanta (C , mol/m²) na površini mjehurića.

Na slici 7.23 prikazani su vektori brzine u ravnini x - z koja prolazi kroz težište mjehurića. Na površini mjehurića ujedno je prikazana raspodjela koncentracije surfaktanta (C , mol/m²), iz koje se vidi da se je ukupni sadržaj surfaktanta transportirao prema zadnjem dijelu površine mjehurića. Kao posljedica primjene konzervativne metode diskretizacije površinske transportne jednadžbe, ukupna je količina surfaktanta na slobodnoj površini tijekom vremena sačuvana.

Kao i kod 2-D mjehurića, u slučaju sa surfaktantom na slobodnoj površini deformacija mjehurića je osjetno manja od deformacije mjehurića s čistom slobodnom površinom. Omjer između najveće i najmanje poluosi mjehurića iznosi 1.38, dok je u slučaju s čistom slobodnom površinom taj omjer oko 1.95.

Usporedba vremena trajanja pojedinih dijelova numeričkog postupka

Preostaje još da se usporede vremena trajanja pojedinih dijelova postupka rješavanja u odnosu na ukupno vrijeme rješavanja. U tipičnoj vremenskom koraku, u kojem se pomicanje cijele mreže odvija samo jednom na početku vremenskog koraka, i kod kojeg postupak SIMPLE sadrži 6 vanjskih iteracija, relativno vrijeme trajanja pojedinih dijelova postupka rješavanja prikazano je u tablici 7.2. Korišteno je računalo sljedećih svojstava: Intel Pentium 4, CPU 2.80 GHz. Ukupno vrijeme računanja po jednom vremenskom koraku je 32 s, što znači da je za 1 s modeliranog vremena potrebno 180 sati procesorskog vremena.

Tablica 7.2: Usporedba vremena trajanja pojedinih dijelova postupka rješavanja.

Postupak	Udio u ukupnom vremenu računanja
Pomicanje mreže	25 %
Obnova graničnih uvjeta na slobodnoj površini	5 %
Ostatak	70 %

Na velikoj mreži (561 920 KV) je ukupno vrijeme računanja po jednom vremenskom koraku 174 s, što znači da je za 1 s modeliranog vremena potrebno 80 dana procesorskog vremena ($\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$ s). Na paralelnom računalu koje se sastoji od 8 procesora, postiže se ubrzanje 7.2 puta, što znači da bi za 1 s modeliranog vremena bilo potrebno utrošiti približno 11 dana procesorskog vremena.

7.5 Zaključak

U ovom je poglavlju provjerena opisana metodologija za simulaciju strujanja višefaznog fluida s primjenom metode kontrolnih volumena i pomične mreže. U svim je razmatranim problemima dobiveno dobro poklapanje s dostupnim teorijskim ili eksperimentalnim podacima.

Numeričkim modeliranjem strujanja neviskoznog fluida preko 2-D rampe provjerena je točnost metodologije u određivanju stacionarnog oblika slobodne površine u podkritičnom i nadkritičnom režimu strujanja. Posebno je zahtjevan podkritični režim strujanja kod kojeg se na ulaznim točkama slobodne površine mora osigurati propuštanje valnih poremećaja koji putuju suprotno od smjera strujanja.

Na problemu oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku testirano je nekoliko svojstava metode simulacije. Kao prvo, u slučaju neviskoznog fluida je pokazano da primijenjena numerička metoda ne unosi lažnu difuziju u rješenje, budući da amplituda oscilacije tijekom vremena ostaje nepromijenjena. Kod oscilacije slobodne površine viskozno fluida pokazana je korektnost graničnog uvjeta na slobodnoj površini, koji uključuje utjecaj viskoznih sila. Također je pokazano da eksplicitno povezivanje strujanja s jedne i druge strane slobodne površine daje prihvatljive rezultate za područje omjera gustuća fluida $\rho_B/\rho_A \leq 0.1$. Kada se oscilacije odvijaju samo pod djelovanjem površinske napetosti rezultati proračuna pokazuju da je primjena površinske napetosti na slobodnoj površini provedena na korektan način.

Direktna numerička simulacija 3-D mjehurića je pokazala da opisana metodologija omogućava numeričko rješavanje problema strujanja sa slobodnom površinom u slučaju kada postoji jaka zavisnost između oblika slobodne površine i strujanja, odnosno kada postoji prevladavajući utjecaj površinskih sila na strujanje.

Poglavlje 8

Zaključak

U ovom je radu opisana metodologija za numeričko modeliranje problema mehanike kontinuuma kod kojih se oblik prostorne domene mijenja u vremenu. Primjenjuje se diskretizacija metodom kontrolnih volumena koja podržava proizvoljnu nestrukturiranu pomičnu mrežu. Mreža se prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije mreže. Definirana je automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Metoda kontrolnih volumena je u kombinaciji s predloženim postupkom pomicanja mreže primijenjena pri numeričkom modeliranju strujanja nestlačivog višefaznog fluida sa slobodnom površinom. Postupak praćenja slobodne površine definiran je tako, da na kraju svakog vremenskog koraka simulacije bude zadovoljen kinematički i dinamički uvjet koji vrijedi na granici između dva nestlačiva fluida koji se ne miješaju. Dinamički uvjet uključuje utjecaj viskoznih sila i promjenjive površinske napetosti.

Dodatni fizikalni proces koji znatno utječe na ponašanje višefaznog sustava sa slobodnom površinom je tzv. Marangonijev učinak uzrokovan nejednolikom raspodjelom surfaktanata na slobodnoj površini. Molekule surfaktanta se adsorbiraju na slobodnoj površini modificirajući površinsku napetost. Nejednolika raspodjela molekula surfaktanta na slobodnoj površini uzrokuje pojavu gradijenta površinske napetosti, odnosno tangencijalnih sila, koje mogu značajno utjecati na dinamičko ponašanje sustava. To posebno dolazi do izražaja u slučajevima kada površinska napetost ima prevladavajući utjecaj, npr. kod malih mjehurića zraka u vodi. Da bi se omogućila numerička analiza utje-

caja surfaktanata na strujanje sa slobodnom površinom, razvijena je metoda kontrolnih površina koja omogućava diskretizaciju površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj nestrukturiranoj pomičnoj mreži koja se sastoji od proizvoljnih poligonalnih kontrolnih površina.

Iz provedenog se istraživanja mogu izvesti sljedeći zaključci:

- Metoda kontrolnih volumena primijenjena je na pomičnoj nestrukturiranoj mreži tako, da volumni tokovi stranica kontrolnih volumena egzaktno zadovoljavaju diskretizirani zakon održanja prostora. Izvedeni su izrazi za računanje volumnih tokova stranica kontrolnih volumena, ovisno o primijenjenoj metodi vremenske diskretizacije transportne jednadžbe. Numeričko modeliranje oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za slučaj neviskoznog fluida pokazalo je da tijekom simulacije ne dolazi do prigušenja amplitude vala kada je prostorna i vremenska diskretizacija drugog reda točnosti. To ujedno govori da nije došlo do pojave numeričkih izvora/ponora mase, do čega inače dolazi u slučajevima kada nije zadovoljen diskretizirani zakon održanja prostora.
- Predložena je automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Laplaceova jednadžba pomaka, diskretizirana metodom konačnih elemenata na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu, osigurava očuvanje valjanosti kontrolnih volumena, ali ne i minimizaciju distorzije. Minimizacija distorzije kontrolnih volumena temeljena je na primjeni promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi. Uz koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, predložen je i pristup koji ne zahtijeva nikakvu intervenciju od strane korisnika, a kod kojeg je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije mreže. Oba su pristupa dala vrlo dobre rezultate na primjeru pomicanja mreže oko oscilirajućeg NACA0012 profila i 2-D cilindra u kanalu.
- Primijenjena je metoda kontrolnih površina za zakrivljenu pomičnu površinu, koja koristi nestrukturiranu poligonalnu pomičnu površinsku mrežu. Provjera predložene metode kontrolnih površina na nekoliko primjera za koje postoji analitičko rješenje pokazala je da je metoda konzervativna i drugog reda točnosti.

- Vrlo dobro poklapanje numeričkog i analitičkog rješenja za sve primjere oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku dokazuje korektnost primijenjenog postupka praćenja slobodne površine. To se posebno odnosi na primjenu dinamičkog uvjeta koji uključuje utjecaj viskoznih sila i promjenjivu površinsku napetost. Eksplicitno povezivanje strujanja pojedinih faza fluida daje dobre rezultate za odnos gustoća dvaju fluida manji od 0.1.
- Rezultati simulacije fiktivnog 2-D mjehurića u tekućini uspoređeni su u slučaju čiste slobodne površine i slučaju kada se na slobodnoj površini nalaze molekule netopivog surfaktanta. Prema očekivanju, mjehurić sa surfaktantom na slobodnoj površini manje se deformira i ima manju brzinu podizanja. Raspodjela surfaktanta odgovara nestacionarnom konvekcijsko-difuzijskom transportu na zakrivljenoj površini. Automatski postupak pomicanja mreže obavlja svoju zadaću pouzdano i kvalitetno, bez intervencije korisnika.
- Rezultati simulacije 3-D mjehurića s čistom slobodnom površinom dobro se slažu s eksperimentalnim rezultatima. To se posebno odnosi na računski dobivenu sliku strujanja iza mjehurića, gdje kao i u eksperimentu postoji dvostruki vrtložni trag. Rezultati simulacije 3-D mjehurića sa surfaktantom na slobodnoj površini kvalitativno su očekivani, tj. mjehurić se manje deformira i ima manju brzinu podizanja u odnosu na mjehurić s čistom slobodnom površinom.

Može se zaključiti da metodologija koja je opisana u ovom radu omogućava numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom u posebno zahtjevnim uvjetima, kada površinska napetost ima prevladavajući utjecaj. Direktna numerička simulacija mjehurića može se smatrati ravnopravnom eksperimentalnom pristupu.

8.1 Originalni znanstveni doprinos rada

Ovaj rad daje sljedeći originalni doprinos u području tehničkih znanosti:

- Predložena je nova automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava primjenu nestrukturirane mreže sastavljene od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Pomicanje unutrašnjih čvorova mreže određuje se automatski iz zadanog pomaka

granice. Minimizacija distorzije mreže provodi se primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže. Predložen je originalni postupak računanja promjenjivog koeficijenta difuzije, koji se temelji na trenutnom stanju deformacije mreže.

- Definirana je i primijenjena metoda kontrolnih površina koja omogućava rješavanje površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži koja se sastoji od proizvoljnih poligonalnih kontrolnih površina. Metoda je konzervativna i drugog reda točnosti.
- Definiran je postupak praćenja slobodne površine koji omogućava primjenu metode kontrolnih volumena i pomične mreže pri numeričkom modeliranju strujanja višefaznih fluida sa slobodnom površinom. Granični uvjeti na slobodnoj površini uključuju viskozne učinke i promjenjivu površinsku napetost.
- Rezultati simulacije mjehurića pokazuju da metodologija definirana u ovom radu omogućava direktnu numeričku simulaciju mjehurića sa i bez prisustva molekula surfaktanta na slobodnoj površini.

8.2 Budući rad

Jasno je da obnova mreže pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije, dozvoljava samo ograničene promjene oblika prostorne domene tijekom simulacije. Predložena automatska metoda pomicanja mreže samo povećava dozvoljenu deformaciju prostorne domene uz očuvanje valjanosti i kvalitete mreže. U graničnom slučaju, kada metoda pomicanja više ne može osigurati zadovoljavajuću razinu kvalitete elemenata mreže, mora se mijenjati topologija mreže. Jedan od mogućih pristupa tom zadatku je da se provodi lokalna ograničena promjena topologije mreže tako, da se kontrolni volumeni po potrebi dodaju ili izbacuju iz mreže na način da bude zadovoljen zakon održanja prostora. Prvi koraci u tom smjeru već su napravljeni primjenom mogućnosti uvođenja i brisanja ćelije, te dodavanja i uklanjanja slojeva ćelija iz mreže. Za sada nije jasno da li će se ovaj postupak moći automatizirati.

Metoda kontrolnih površina u ovom je radu primijenjena samo za rješavanje skalarne

transportne jednačbe. U sljedećem će koraku biti potrebno definirati i usporediti vezani i odvojeni postupka rješavanja vektorske transportne jednačbe na zakrivljenoj površini.

Diskretizacijom jednačbe pomaka mreže na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu uvedeni su dodatni čvorovi, a s njima i dodatne nepoznanice koje nisu potrebne za pomicanje mreže. U sljedećem koraku treba pokušati eliminirati jednačbe koje odgovaraju dodanim čvorovima, te ispitati kako to utječe na učinkovitost rješavanja modificiranog sustava linearnih algebarskih jednačbi.

Iskustvo je pokazalo da opisani postupak pomicanja čvorova slobodne površine ne garantira da će slobodna površina tijekom simulacije ostati glatka. Zbog toga je definiran pojednostavljeni postupak izravnavanja slobodne površine koji nije selektivan već djeluje po svim stranicama na slobodnoj površini bez obzira da li je na njima došlo do oscilacije. U sljedećem bi koraku trebalo definirati kriterij prema kojem bi bilo moguće izdvojiti samo one stranice na kojima je stvarno potrebno primijeniti postupak izravnavanja.

Direktna numerička simulacija 3-D mjehurića provedena je samo za jedan polumjer mjehurića i uz nedostatnu rezoluciju mreže. U sljedećem bi koraku trebalo provesti niz računa s mrežom odgovarajuće rezolucije i za različite polumjere mjehurića. Iz dobivenih bi se rezultata mogle izvesti korelacije za brzinu podizanja mjehurića, te koeficijente otpora i uzgona mjehurića, pa iste usporediti sa sličnim korelacijama iz drugih izvora.

Dodatak A

Reynoldsov transportni teorem

Zakoni održanja su definirani za sustav materijalnih čestica odnosno materijalni volumen. Da bi se mogli primijeniti na proizvoljni volumen potrebna je relacija koja povezuje brzinu promjene sadržaja tenzorskog svojstva u materijalnom i proizvoljnom volumenu.

Brzina promjene sadržaja intenzivnog fizikalnog svojstva ϕ u proizvoljnom volumenu V ograničenom zatvorenom površinom S definirana je Reynoldsovim transportnim teoremom (Bird, Lightfoot i Stewart [8]):

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV = \int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v}_s \phi \, dS, \quad (\text{A.1})$$

gdje je $\mathbf{n}$ vanjska jedinična normala na S , a $\mathbf{v}_s$ brzina točaka površine S .

Reynoldsov transportni teorem (A.1) može se primijeniti na materijalni volumen V_M ograničen materijalnom površinom S_M uvažavajući da je u tom slučaju brzina $\mathbf{v}_s$ jednaka brzini fluida $\mathbf{v}$:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_M} \rho \phi \, dV = \int_{V_M} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \, dV + \oint_{S_M} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \phi \, dS. \quad (\text{A.2})$$

Ako se u odabranom vremenskom trenutku materijalni volumen V_M poklopi s proizvoljnim volumenom V , tada je volumni integral $\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \, dV$ u jednadžbi (A.1) jednak volumnom integralu $\int_{V_M} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \, dV$ u jednadžbi (A.2). Izjednačavanjem ove dvije jednadžbe po zajedničkom članu dobiva se tražena relacija koja povezuje brzinu promjene sadržaja svojstva ϕ u materijalnom i proizvoljnom volumenu:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_M} \rho \phi \, dV = \frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \phi \, dS. \quad (\text{A.3})$$

Dodatak B

Gaussov integralni teorem za zakrivljenu površinu

Polazeći od Stokesovog teorema (Hildebrand [39]) Edwards, Brenner i Wasan [26] pokazuju da vrijedi integralna jednačba:

$$\int_S \nabla_s \cdot [(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \otimes \mathbf{T}] dS = \oint_{\partial S} \mathbf{m} \otimes \mathbf{T} dL, \quad (\text{B.1})$$

gdje je S zakrivljena površina ograničena zatvorenom krivuljom ∂S , $\mathbf{T}$ opće tenzorsko polje, $\mathbf{n}$ jedinična normala na S , $\mathbf{m}$ vanjska jedinična binormala na ∂S , L duljina luka mjerena uzduž krivulje ∂S , $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$ operator površinskog gradijenta, a $\mathbf{I}$ jedinični tenzor drugog reda. Simbol $\otimes$ označava operator množenja (skalarni, vektorski, tenzorski) dvije tenzorske veličine.

Nakon daljnjeg raspisivanja desne strane jednačbe (B.1) slijedi konačan oblik Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu:

$$\int_S \nabla_s \otimes \mathbf{T} dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \otimes \mathbf{T} dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \otimes \mathbf{T} dS, \quad (\text{B.2})$$

gdje je κ dvostruka srednja zakrivljenost površine S , definirana sljedećim izrazom:

$$\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}. \quad (\text{B.3})$$

Ako se u jednačbi (B.2) operator $\otimes$ zamjeni skalarnim operatorom množenja, dobiva se tzv. teorem divergensa za zakrivljenu površinu (Weatherburn [83]):

$$\int_S \nabla_s \cdot \mathbf{T} dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{T} dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dS. \quad (\text{B.4})$$

Ako se dopusti da površina S teži u točku, jednačba (B.4) dobiva sljedeći oblik:

$$\nabla_s \bullet \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \bullet \mathbf{T} \, dL}{dS} - \kappa \mathbf{n} \bullet \mathbf{T}. \quad (\text{B.5})$$

Jednačba (B.5) predstavlja definiciju površinskog divergensa tenzorskog polja. Vidljivo je da $\nabla_s \bullet \mathbf{T}$ ne ovisi o izboru koordinatnog sustava.

Jednačba (B.5) može poslužiti za interpretaciju površinskog divergensa brzine točaka materijalne površine. Ako se u jednačbu (B.5) uvrsti zamjena $\mathbf{T} = \mathbf{v}$, gdje je $\mathbf{v}$ brzina čestica promatrane zakrivljene materijalne površine, slijedi:

$$\nabla_s \bullet \mathbf{v} = \lim_{S_M \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S_M} \mathbf{m} \bullet \mathbf{v} \, dL}{dS_M} - \kappa \mathbf{n} \bullet \mathbf{v}. \quad (\text{B.6})$$

Desna strana jednačbe (B.6) predstavlja relativnu brzinu promjene površine beskonačno malog elementa materijalne površine, tj. $\frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt}$. Prema tome površinski je divergens vektora brzine točaka materijalne površine jednak relativnoj brzini promjene veličine te površine:

$$\nabla_s \bullet \mathbf{v} = \frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt}. \quad (\text{B.7})$$

Ako se u jednačbi (B.2) operator $\otimes$ zamjeni tenzorskim operatorom množenja dobiva se tzv. teorem gradijenta za zakrivljenu površinu:

$$\int_S \nabla_s \mathbf{T} \, dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \mathbf{T} \, dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \mathbf{T} \, dS, \quad (\text{B.8})$$

Puštajući da površina S teži u točku, slijedi definicija površinskog gradijenta tenzorskog polja:

$$\nabla_s \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \mathbf{T} \, dL}{dS} - \kappa \mathbf{n} \mathbf{T}. \quad (\text{B.9})$$

Ako se u jednačbi (B.9) stavi $\mathbf{T} = \text{konst.}$, slijedi definicija zakrivljenosti κ :

$$\kappa \mathbf{n} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \, dL}{dS}. \quad (\text{B.10})$$

Ako se u jednačbi (B.5) umjesto tenzora $\mathbf{T}$ stavi tenzor $\nabla_s \mathbf{T}$, slijedi definicija površinskog Laplaceovog operatora za tenzorsko polje $\mathbf{T}$:

$$\nabla_s^2 \mathbf{T} = \nabla_s \bullet \nabla_s \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \bullet \nabla_s \mathbf{T} \, dL}{dS}, \quad (\text{B.11})$$

pri čemu je korištena jednakost $\mathbf{n} \bullet \nabla_s \mathbf{T} = \mathbf{0}$.

Dodatak C

Reynoldsov transportni teorem za deformabilnu površinu

Potrebno je izvesti relaciju koja će povezati brzinu promjene sadržaja površinskog svojstva ψ na materijalnoj i proizvoljnoj površini. Promatra se slučaj proizvoljne površine koja se giba unutar materijalne površine.

Prije svega, treba definirati kretanje ovih dviju površina. Čestice materijalne površine S_M kreću se brzinom $\mathbf{v}$, dok se točke proizvoljne površine S kreću brzinom $\mathbf{b}$. Veza između navedenih brzina definirana je sljedećim uvjetom:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{C.1})$$

gdje je $\mathbf{n}$ zajednička jedinična normala na S_M i S .

Neka je ψ neko površinsko svojstvo koje je definirano na promatranoj materijalnoj površini S_M . Materijalna derivacija tog svojstva može se izraziti sljedećim izrazom (Edwards, Brenner i Wasan [26]):

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_s \psi. \quad (\text{C.2})$$

Najprije će se izvesti Reynoldsov transportni teorem za materijalnu površinu. Brzina promjene sadržaja svojstva ψ na materijalnoj površini S_M može se izraziti na sljedeći način:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \left(\frac{d\psi}{dt} dS + \psi \frac{d(dS)}{dt} \right). \quad (\text{C.3})$$

Uvrštavanjem izraza (B.7) i (C.2) u jednadžbu (C.3) dobiva se:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS + \int_{S_M} \nabla_s \cdot (\mathbf{v} \psi) \, dS. \quad (C.4)$$

Primjenom Gaussovog teorema (B.4) na drugi površinski integral na desnoj strani jednadžbe (C.4) dobiva se:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS - \int_{S_M} \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, \psi \, dS + \oint_{\partial S_M} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v} \psi) \, dL, \quad (C.5)$$

gdje je ∂S_M krivulja koja ograničava površinu S_M , κ dvostruka srednja zakrivljenost površine S_M , $\mathbf{n}$ jedinična normala na površinu S_M , a $\mathbf{m}$ vanjska jedinična binormala na krivulju ∂S_M . Jednadžbe (C.4) i (C.5) predstavljaju dva oblika Reynoldsovog transportnog teorema za materijalnu površinu.

Reynoldsov transportni teorem (C.5) se može primijeniti na proizvoljnu površinu S koja je ograničena zatvorenim krivuljom ∂S , tako da se umjesto brzine $\mathbf{v}$ koristi brzina $\mathbf{b}$:

$$\frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS = \int_S \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS - \int_S \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, \psi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{b} \psi) \, dL. \quad (C.6)$$

Ako se u odabranom vremenskom trenutku materijalna i proizvoljna površina poklope, tada su površinski integrali na desnoj strani jednadžbe (C.5) i (C.6) međusobno jednaki. Izjednačavanjem tih jednadžbi po zajedničkim članovima dobiva se tražena relacija koja povezuje brzinu promjene sadržaja svojstva ψ na materijalnoj i proizvoljnoj površini:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v}_t - \mathbf{b}_t) \psi \, dL, \quad (C.7)$$

gdje je $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{v}$ tangencijalna komponenta brzine čestica materijalne površine S_M , a $\mathbf{b}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{b}$ je tangencijalna komponenta brzine točaka proizvoljne površine S .

Dodatak D

Normalno devijatorsko naprezanje na slobodnoj površini

Primjenjujući postupak koji su koristili Chen, Saric i Stone [14], izvest će se izraz za računanje normalne komponente sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini.

Razmatra se strujanje nestlačivog newtonovskog fluida u prisutnosti slobodne površine. Normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja na jednoj strani slobodne površine je $2\mu \mathbf{nn} \mathbf{:D}$, gdje je $\mathbf{n}$ jedinična normala na slobodnu površinu, $\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]$ tenzor brzine deformacije, μ dinamička viskoznost fluida, a $\mathbf{:}$ operator skalarnog množenja dva tenzora drugog reda.

Operator gradijenta ∇ može se na slobodnoj površini izraziti na sljedeći način:

$$\nabla = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla + \mathbf{nn} \cdot \nabla = \nabla_s + \mathbf{nn} \cdot \nabla, \quad (\text{D.1})$$

gdje je $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$ operator površinskog gradijenta. Prema tome, gradijent brzine na slobodnoj površini je

$$\nabla \mathbf{v} = \nabla_s \mathbf{v} + \mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (\text{D.2})$$

Trag jednadžbe (D.2) daje:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla_s \cdot \mathbf{v} + \mathbf{nn} \mathbf{:} \nabla \mathbf{v}. \quad (\text{D.3})$$

Budući da je $\mathbf{nn} \mathbf{:D} = \mathbf{nn} \mathbf{:} \nabla \mathbf{v}$, slijedi da je

$$\mathbf{nn} \mathbf{:D} = \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla_s \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{D.4})$$

Za strujanje nestlačivog fluida ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) vrijedi $\mathbf{nn} : \mathbf{D} = -\nabla_s \cdot \mathbf{v}$, pa je normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini:

$$2\mu \mathbf{nn} : \mathbf{D} = -2\mu \nabla_s \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{D.5})$$

Korištenjem definicije površinskog divergensa (B.5), jednadžba (D.5) se može zapisati u nešto drukčijem obliku:

$$2\mu \mathbf{nn} : \mathbf{D} = -2\mu (\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t - \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}), \quad (\text{D.6})$$

gdje je $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{v}$ tangencijalna komponenta brzine na slobodnoj površini, a κ dvostruka srednja zakrivljenost slobodne površine ($\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}$).

Dodatak E

Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko–difuzijski transport na površini sfere

Stacionarni transport

Stacionarni konvekcijsko–difuzijski transport površinskog skalarnog svojstva ψ uzduž nepokretne zakrivljene površine definiran je sljedećom parcijalnom diferencijalnom jednačinom:

$$\nabla_s \cdot (\mathbf{v}_t \psi) - \nabla_s \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) = 0, \quad (\text{E.1})$$

gdje je $\mathbf{v}_t$ vektor brzine koji je tangencijalan na promatranu površinu, a Γ_ψ koeficijent difuzije.

Traži se analitičko rješenje jednačine (E.1) na površini sfere u području polarnog kuta $\theta_0 \leq \theta \leq \theta_1$, uz sljedeće granične uvjete: $\psi = \psi_0$ za $\theta = \theta_0$, $\psi = \psi_1$ za $\theta = \theta_1$. Koeficijent difuzije Γ_ψ je konstantan, a vektor brzine $\mathbf{v}_t$ je osnosimetričan i definiran tako, da bude $\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t = 0$, tj.

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_0}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta, \quad (\text{E.2})$$

gdje je v_0 konstanta, θ je polarni kut, a $\mathbf{e}_\theta$ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Uz ovako definiran problem, jednačina (E.1) prelazi u običnu diferencijalnu jednačinu

drugog reda:

$$\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta} - \frac{\text{Pe}}{\sin\theta} \right) \frac{d\psi}{d\theta} = 0, \quad (\text{E.3})$$

gdje je Pe Pecletov broj, definiran na sljedeći način:

$$\text{Pe} = \frac{v_0 R}{\Gamma_\psi}, \quad (\text{E.4})$$

a R je polumjer sfere.

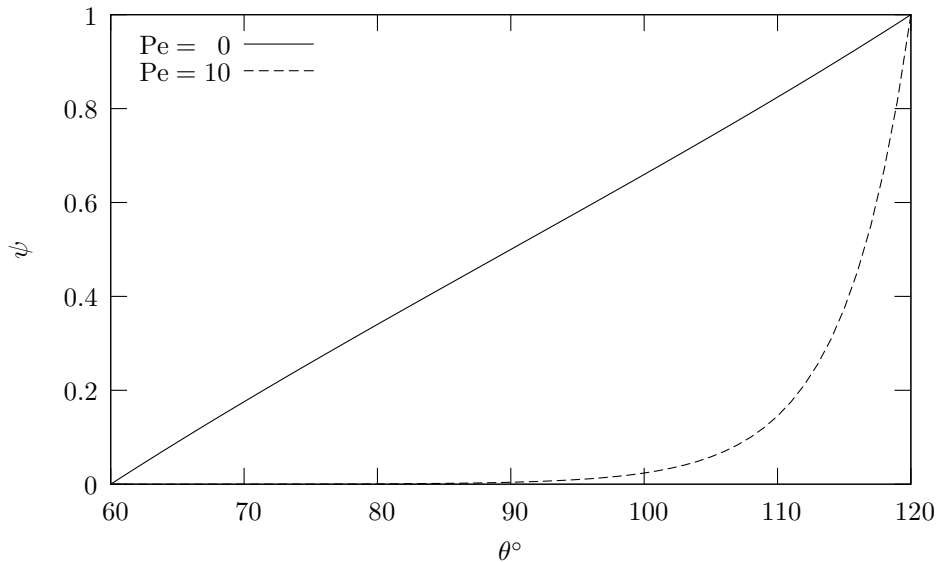
Uz gore definirane granične uvjete jednačba (E.3) ima sljedeće rješenje:

$$\psi(\theta) = \psi_0 + \frac{\tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta}{2}\right) - \tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)}{\tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_2}{2}\right) - \tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)} (\psi_1 - \psi_0). \quad (\text{E.5})$$

U graničnom slučaju kada je $\text{Pe} = 0$ jednačba (E.5) ima sljedeći oblik:

$$\psi(\theta) = \psi_0 + \frac{\ln \left[\tan \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] - \ln \left[\tan \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right]}{\ln \left[\tan \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \right] - \ln \left[\tan \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right]} (\psi_1 - \psi_0). \quad (\text{E.6})$$

Dijagram na slici E.1 prikazuje analitičko rješenje jednačbe (E.3) za Pecletove brojeve 0 i 10 u području polarnog kuta $60^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$.



Slika E.1: Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko-difuzijski transport na površini sfere.

Nestacionarni transport

Nestacionarni konvekcijsko–difuzijski transport površinskog skalarnog svojstva ψ uzduž nepokretne zakrivljene površine definiran je sljedećom parcijalnom diferencijalnom jednačinom:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\mathbf{v}_t \psi) - \nabla_s \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) = 0. \quad (\text{E.7})$$

Traži se rješenje jednačine (E.7) na cijeloj površini sfere radijusa $R = 1$, uz početni uvjet $\psi(\theta, 0) = 1$. Koeficijent difuzije Γ_ψ je konstantan, a polje brzine $\mathbf{v}_t$ je osnosimetrično i definirano sljedećim izrazom:

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_\infty}{4} \sin \theta \mathbf{e}_\theta, \quad (\text{E.8})$$

gdje je v_∞ konstanta, θ polarni kut, a $\mathbf{e}_\theta$ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Površinski divergens polja brzine (E.8) različit je od nule. Uz ovako definiran problem jednačina (E.7) prelazi u jednodimenzijску (osnosimetričnu) parcijalnu diferencijalnu jednačinu:

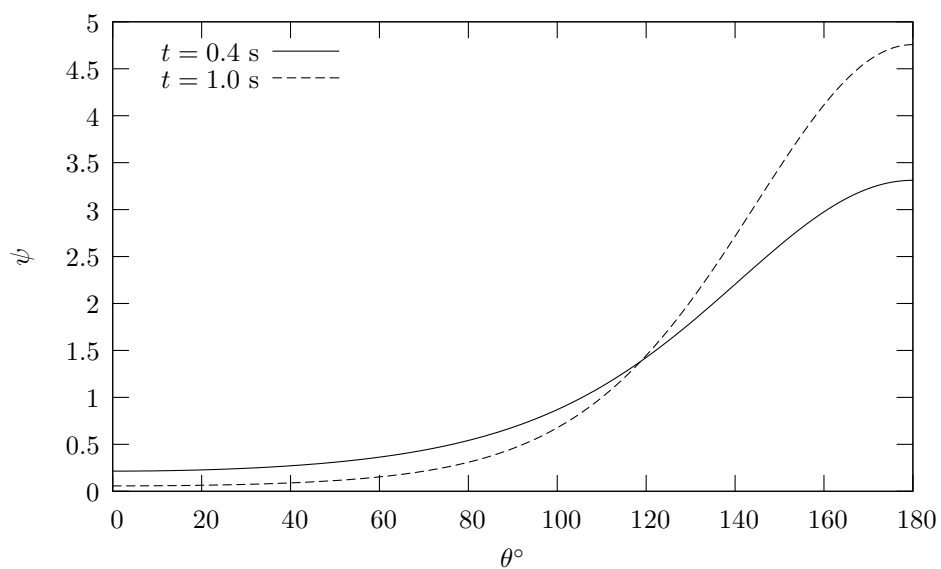
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\Gamma_\psi}{R^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{\Gamma_\psi}{R^2} \left(\frac{\text{Pe} \sin \theta}{4} - \cot \theta \right) \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{\text{Pe} \Gamma_\psi \cos \theta}{2R^2} \psi = 0, \quad (\text{E.9})$$

gdje je Pe Pecletov broj, definiran sljedećim izrazom:

$$\text{Pe} = \frac{v_\infty R}{\Gamma_\psi}. \quad (\text{E.10})$$

Jednačina (E.9) riješena je numeričkim putem, primjenom metode konačnih razlika. Prostorne derivacije su diskretizirane s 2. redom točnosti, a za diskretizaciju vremenskih integrala korištena je Crank-Nicolsonova metoda, koja je također 2. reda točnosti. Trodiagonalni sustav linearnih algebarskih jednačini riješen je pomoću Thomasovog postupka.

Na slici E.2 prikazano je numeričko rješenje jednačine (E.9) za $\text{Pe} = 10$ u trenutku $t = 0.4$ s i $t = 1.0$ s. Na 1-D prostornoj domeni ($0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$) definirana je mreža s jednolikom podjelom ($\Delta\theta = (1/8)^\circ$) koja osigurava rješenje neovisno o rezoluciji mreže. Isto je osigurano u vremenskoj domeni s konstantnim vremenskim korakom $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ s. Na granicama prostorne domene korišteni su sljedeći granični uvjeti: $\frac{d\psi}{d\theta} = 0$ za $\theta = 0^\circ$ i za $\theta = 180^\circ$.



Slika E.2: "Točno" numeričko rješenje za osnosimetrični nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.

Bibliografija

- [1] D. Apsley and W. Hu. CFD simulation of two- and three-dimensional free-surface flow. *International journal for numerical methods in fluids*, 42:465–491, 2003.
- [2] N. Ashgriz, J.Y. Poo. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics*, 93:449–468, 1991.
- [3] T.J. Baker. Mesh modification for solution adaptation and time evolving domains. In *7th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*, Whistler, British Columbia, Canada, September 2000.
- [4] F.R. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- [5] J.T. Batina. Unsteady Euler airfoil solutions using unstructured dynamic meshes. *AIAA Journal*, 28(8):1381–1388, 1990.
- [6] M. Behr, F. Abraham. Free-surface flow simulations in the presence of inclined walls. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:5467–5483, 2002.
- [7] M. Behr, T.E. Tezduyar. Finite element solution strategies for large-scale flow simulations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 112:3–24, 1994.
- [8] R.B. Bird, E.N. Lightfoot, W.E. Stewart. *Transport phenomena*. John Wiley, 1960.
- [9] A Blanco, J. Magnaudet. The structure of the axisymmetric high-Reynolds number flow around an ellipsoidal bubble of fixed shape. *Physics of fluids*, 7(6):1265–1274, 1995.

-
- [10] F.J. Blom. Considerations on the spring analogy. *International journal for numerical methods in fluids*, 32:647–669, 2000.
- [11] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, C. Zemach. A continuum method for modelling surface tension. *Journal of computational physics*, 100:335–354, 1992.
- [12] H. Braess, P. Wriggers. Arbitrary Lagrangian Eulerian finite element analysis of free surface flow. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190:95–109, 2000.
- [13] R.A. Cairncross, P.R. Schunk, T.A. Baer, R.R. Rao, P.A. Sackinger. A finite element method for free surface flows of incompressible fluids in three dimensions. Part I. Boundary fitted mesh motion. *International journal for numerical methods in fluids*, 33:375–403, 2000.
- [14] K.P. Chen, W. Saric, H.A. Stone. On the deviatoric normal stress on a slip surface. *Physics of fluids A*, 12(12):3280–3281, 2000.
- [15] G. Chiandussi, G. Bugeda, E. Oñate. A simple method for automatic update of finite element meshes. *Communications in numerical methods in engineering*, 16:1–19, 2000.
- [16] B. Cuenot, J. Magnaudet, B. Spennato. The effects of slightly soluble surfactants on the flow around a spherical bubble. *Journal of fluid mechanics*, 339:25–53, 1997.
- [17] M.S. Darwish. A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation. *Numerical heat transfer, Part B*, 24:253–371, 1993.
- [18] G.A. Davis, O.O. Bendiksen. Unsteady transonic two-dimensional Euler solutions using finite elements. *AIAA Journal*, 31(6):1051–1059, 1993.
- [19] A.W.G. de Vries. *Path and wake of a rising bubble*. PhD thesis, University of Twente, 2001.
- [20] A.W.G. de Vries, A. Biesheuvel, L. van Wijngaarden. Notes on the path and wake of a gas bubbles rising in pure water. *International journal of multiphase flow*, 28:1823–1835, 2002.

-
- [21] C. Degan, C. Farhat. A three-dimensional torsional spring analogy method for unstructured dynamic meshes. *Computers and structures*, 80:305–316, 2002.
- [22] I. Demirdžić, S. Muzaferija. Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 125:235–255, 1995.
- [23] I. Demirdžić, S. Muzaferija, M. Perić. Advances in computation of heat transfer, fluid flow and solid body deformation using finite volume approaches. In W.J. Minkowycz and E.M. Sparrow, editors, *Advances in numerical heat transfer*, volume 1, chapter 2, pages 59–96. Taylor & Francis, 1997.
- [24] I. Demirdžić, M. Perić. Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. *International journal for numerical methods in fluids*, 8:1037–1050, 1988.
- [25] I. Demirdžić, M. Perić. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. *International journal for numerical methods in fluids*, 10:771–790, 1990.
- [26] D.A. Edwards, H. Brenner, D.T. Wasan. *Interfacial transport processes and rheology*. Butterworth-Heinemann, 1991.
- [27] C. Farhat, C. Degan, B. Koobus, M. Lesoinnen. Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 163:231–245, 1998.
- [28] J.H. Ferziger, M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Verlag, Berlin-New York, 1995.
- [29] G.H. Golub, C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. John Hopkins University Press, Baltimore, 1996.
- [30] W. Gropp, E. Lusk, N. Doss, A. Skjellum. A high performance, portable implementation of the MPI message passing interface standard. *Parallel computing*, 22:789–828, 1996.

- [31] D. Gueyffier, J. Li, R. Scardovelli, S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of computational physics*, 152:423–456, 1999.
- [32] I. Güler, M. Behr, T.E. Tezduyar. Parallel finite element computation of free-surface flows. *Computational mechanics*, 23:117–123, 1999.
- [33] F.H. Harlow, J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8(12):2182–2189, 1965.
- [34] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics*, 49:357–393, 1983.
- [35] A. Harten, B. Enquist, S. Osher, S. Cuakravathy. Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes III. *Journal of computational physics*, 71:231–303, 1987.
- [36] O. Hassan, E.J. Probert, K. Morgan. Unstructured mesh procedures for the simulation of three-dimensional transient compressible inviscid flows with moving boundary components. *International journal for numerical methods in fluids*, 27:41–55, 1998.
- [37] B.T. Helenbrook. Mesh deformation using the biharmonic operator. *International journal for numerical methods in engineering*, 56:1007–1021, 2003.
- [38] H.R. Hestens, E.L. Steifel. Method of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of research*, 29:409–436, 1952.
- [39] F.B. Hildebrand. *Advanced calculus for applications*. Prentice-Hall, 1962.
- [40] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*. John Willey & Sons, 1991.
- [41] C.W. Hirt, A.A. Amsden, J.L. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *Journal of computational physics*, 14(3):227–253, 1972.
- [42] C.W. Hirt, B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39:201–225, 1981.

-
- [43] D.A.H. Jacobs. Preconditioned Conjugate Gradient methods for solving systems of algebraic equations. Technical Report RD/L/N193/80, Central Electricity Research Laboratories, 1980.
- [44] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of computational physics*, 155:96–, 1999.
- [45] H. Jasak. Osobna komunikacija.
- [46] H. Jasak. *Error analysis and estimation for finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1996.
- [47] H. Jasak, A. Gosman. Automatic resolution control for the finite volume method. Part 1: A-posteriori error estimates. *Numerical heat transfer, Part B*, 38:237–256, 2000.
- [48] H. Jasak, H.G Weller. Application of the finite volume method and unstructured meshes to linear elasticity. *International journal for numerical methods in engineering*, 48:267–287, 2000.
- [49] H. Jasak, H.G Weller, Gosman A.D. High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. *International journal for numerical methods in fluids*, 31:431–449, 1999.
- [50] A.A. Johnson, T.E. Tezduyar. Mesh update strategies in parallel finite element computations of flow problems with moving boundaries and interfaces. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 119:73–94, 1994.
- [51] B. Kaluđerčić. *Parallelisation of Eulerian and Lagrangian CFD Algorithms*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2000.
- [52] B Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of computational physics*, 113:134–147, 1994.

- [53] B.P. Leonard. The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 88:17–74, 1991.
- [54] X. Li, C. Pozrikidis. The effect of surfactants on drop deformation and on the rheology of dilute emulsions in Stokes flow. *Journal of fluid mechanics*, 341:165–194, 1997.
- [55] R. Löhner, C. Yang. Improved ALE mesh velocities for moving bodies. *Communications in numerical methods in engineering*, 12:599–608, 1996.
- [56] D.R. Lynch, K. O'Neill. Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change. *International journal for numerical methods in engineering*, 17:81–96, 1981.
- [57] A. Masud, T.J.R. Hughes. A space-time Galerkin/least-square finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 146:91–126, 1997.
- [58] N. Max. Weights for computing vertex normals from facet normals. *J. Graphics Tools*, 4(2):1–6, 1999.
- [59] S. Muzaferija, M. Perić. Computation of free-surface flows using the finite-volume method and moving grids. *Numerical heat transfer, Part B*, 32:369–384, 1997.
- [60] S. Osher, R.P. Fedkiw. Level set methods: an overview and some recent results. *Journal of computational physics*, 169:463–502, 2001.
- [61] S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [62] M. Perić. *A Finite Volume method for the prediction of three-dimensional flow in complex ducts*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1986.
- [63] B. Perot, R. Nallapati. A moving unstructured staggered mesh method for the simulation of incompressible free-surface flows. *Journal of computational physics*, 184:192–214, 2003.

-
- [64] R.C. Peterson, P.K. Jimack, A. Kelmanson. The solution of two-dimensional free-surface problems using automatic mesh generation. *International journal for numerical methods in fluids*, 31:937–960, 1999.
- [65] S. Piperno. Explicit/implicit fluid/structure staggered procedures with a structural predictor and fluid subcycling for 2D inviscid aeroelastic simulations. *International journal for numerical methods in fluids*, 25:1207–1226, 1997.
- [66] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Physics of fluids*, 24(7):1217–1223, 1981.
- [67] S. Rabier, M. Medale. Computation of free surface flows with a projection FEM in a moving mesh framework. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192:4703–4721, 2003.
- [68] C.M. Rhie, W.L. Chow. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21:1525–1532, 1983.
- [69] H. Rusche. *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2002.
- [70] P.A. Sackinger, P.R. Schunk, R.R. Rao. A Newton Raphson pseudo-solid domain mapping technique for free and moving boundary problems: a finite element implementation. *Journal of computational physics*, 125:83–103, 1996.
- [71] M. Souli, J.P. Zolesio. Arbitrary Lagrangian–Eulerian and free surface methods in fluid mechanics. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:451–466, 2001.
- [72] STAR-CD. <http://www.cd-adapco.com>.
- [73] J. Sung, H.G. Choi, J.Y. Yoo. Time-accurate computation of unsteady free surface flows using an ALE-segregated equal-order FEM. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190:1425–1440, 2000.
- [74] T.E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal, J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – The deforming-spatial-

- domain/space-time procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 94:339–352, 1992.
- [75] T.E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal, J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – The deforming-spatial-domain/space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 94:353–371, 1992.
- [76] P.D. Thomas, C.K. Lombard. Geometric conservation law and its application to flow computations on moving grids. *AIAA Journal*, 17:1030–1037, 1979.
- [77] A. Tomiyama, G.P. Celata, S. Hosokawa, S. Yoshida. Terminal velocity of single bubbles in surface tension force dominant regime. *International journal of multiphase flow*, 28:1497–1519, 2002.
- [78] A. Tomiyama, I. Kataoka, I. Źun, T. Sakaguchi. Drag coefficients of single bubbles under normal and microgravity conditions. *JSME Int. J., Ser. B: Fluids Thermal Eng.*, 41:472–479, 1998.
- [79] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of computational physics*, 169:708–759, 2001.
- [80] O. Ubbink. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1997.
- [81] S.O. Unverdi, G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, 100:25, 1992.
- [82] H.A. Van Der Vorst. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Scientific Computing*, 13(2):631–644, 1992.
- [83] C.E. Weatherburn. *Differential geometry in three dimension*. Cambridge University Press, London, 1972.

-
- [84] H.G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques. *Computers in physics*, 12(6):620–631, 1998.
- [85] S. Yon, C. Pozrikidis. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. *Computers and fluids*, 27(8):879–902, 1998.
- [86] S. Yon, C. Pozrikidis. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. *Computers and fluids*, 27(8):879–902, 1998.
- [87] Y. Zhang, J.A. Finch. A note on single bubble motion in surfactant solutions. *Journal of fluid mechanics*, 429:63–66, 2001.
- [88] Y. Zhao, J. Tai, F. Ahmed. Simulation of micro flows with moving boundaries using high-order upwind FV method on unstructured grids. *Computational mechanics*, 28:66–75, 2002.
- [89] O.C. Zienkiewicz. *The finite element method in engineering science*. McGraw Hill, London, 1971.
- [90] P.J. Zwart, G.D Raithby, M.J. Raw. The integrated space-time finite volume method and its application to moving boundary problems. *Journal of computational physics*, 154:497–519, 1999.

Životopis

Željko Tuković je rođen 27. veljače 1972. godine u Pakracu. Osnovno je obrazovanje završio u Daruvaru, a srednje u Centru za odgoj i usmjereno obrazovanje također u Daruvaru, gdje je stekao zvanje strojarskog tehničara.

Školske godine 1990/91. upisao se na Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu. Redoviti studij strojarstva, smjer procesno-energetski, završio je početkom 1996. godine. Diplomski rad pod nazivom “Regulacija temperature svježe pare u termoenergetskom bloku snage 320 MW”, obranio je s odličnim uspjehom, a opći uspjeh studija je vrlo dobar.

Na Fakultetu strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu radi od 1996. godine u Zavodu za energetska postrojenja kao znanstveni novak na Katedri za turbostrojeve. Školske godine 1996/97. upisao je poslijediplomski studij smjera Energetika 2, te je 21. rujna 2001. godine obranio magistarski rad pod naslovom “Strujne karakteristike aerodinamski optimalnih rešetki aksijalnih turbina”. U svojstvu istraživača je sudjelovao na sljedećim znanstveno-istraživačkim projektima: Istraživanje karakteristika rotacijskog strujanja fluida (2-08-340), Poboljšanja energetske pretvorbe u turbostrojima (1-20-011).

Bavi se numeričkim modeliranjem prijenosa topline i mase kod različite strojarske opreme, te sudjeluje u izvođenju nastave. Objavio je devet znanstvenih radova. Govori i piše engleski jezik. Oženjen je i otac je dvoje djece.

Biography

Željko Tuković was born on February 27, 1972 in Pakrac, Croatia. He has completed elementary school in Daruvar, and graduated from Mechanical Engineering Secondary School in Daruvar.

In 1990/91, he commenced his studies at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, majoring in Power Engineering. He earned his B.SC. M.E. at the beginning of 1996. For his Bachelor thesis "Control of the dry steam temperature in thermal power plant 320 MW" he earned excellent grade. Average grade of his studies is very good.

Since 1996, he is employed as a research assistant at the Power Engineering Department, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb. In 1996/97, he commenced his postgraduate studies at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb. He defended his Master thesis "Flow characteristics of aerodynamically optimal axial turbines cascades" on September 21, 2001. As research assistant he has participated on the following research projects: Investigation of rotational fluid flow characteristics (2-08-340), Improvement of energy conversions in turbomachineries (1-20-001).

His research interests are numerical simulations of the heat and mass transport phenomena in the mechanical engineering equipment. He has authored nine scientific papers. He is married and has two children.