

Primerjava lastnosti numeričnih metod kontrolnih prostornin in robnih elementov z dvojno recipročnostjo

Comparison of Control Volume and Dual Reciprocity Boundary Element Numerical Method

A. Košir¹, B. Šarler, FS, Univerza v Ljubljani

Prejem rokopisa - received: 1995-10-04; sprejem za objavo - accepted for publication: 1995-12-22

V delu sta uporabljeni numerični metodi: metoda kontrolnih prostornin in metoda robnih elementov z dvojno recipročnostjo, s katerima z iterativno implicitno shemo rešimo naloge konvekcijsko-difuzijskega prenosa toplote v sistemu s faznim prehodom v poljubno razsežnem prostoru. Temperaturno polje je izračunano iz tako diskretiziranih enačb, da te upoštevajo močno nelinearno zvezo med temperaturo in specifično entalpijo pri temperaturi faznega prehoda. Z Voller-Swaminathanovim nastavkom pri vsaki iteraciji znotraj časovnega koraka napovemo novi prostorninski delež trdne faze. Točnost obeh numeričnih metod primerjamo z enorazsežnim konvektivno-difuzijskim problemom, za katerega smo našli analitično rešitev. Predstavljeni numerični shemi sta bili pri prikazanih primerih konvergentni.

Ključne besede: prenos toplote, fazni prehod, strjevanje, Stefanova naloga, gibajoči se rob, kontinuirano ulivanje, konvekcijsko-difuzijski pojavi, metoda robnih elementov, metoda dvojne recipročnosti, metoda kontrolnih prostornin

Two numerical fixed grid methods, the control volume method and the boundary element method with dual reciprocity, are presented with an updated iterative implicit scheme to solve arbitrary dimensional phase change problems with convection and diffusion heat transport. The temperature field is deduced from the resolution of the governing equations whose discretization takes into account the highly nonlinear relation between temperature and specific heat at the melting point. At each iteration within one time step an updated volume fraction of solid phase is found from the Voller-Swaminathan procedure. The accuracy of the proposed numerical methods has been checked on one dimensional convection-conduction test problems for which we have found an analytical solution. For several examples presented, the numerical schemes have demonstrated convergence properties.

Key words: heat transfer, phase change, solidification, Stefan problem, moving boundary, continuous casting, convective-diffusive phenomena, boundary element method, dual reciprocity method, control volume method

1 Uvod

Učinkovito reševanje konvekcijsko-difuzijske enačbe navadno zahteva posebne in dobro premišljene numerične sheme. Predmet predhodnih¹⁻² in pričujoče raziskave, v kateri nadaljujemo razvoj in preskus numerične metode robnih elementov z dvojno recipročnostjo in študij njenih lastnosti, so sistemi s faznim prehodom med kapljevinško in trdno fazo.

V raziskavi smo na izbranih analitično izračunljivih primerih³ prenosa toplote v eni razsežnosti v snovi, ki se struje

ali tali, primerjali numerični metodi kontrolnih prostornin³ in robnih elementov z dvojno recipročnostjo². Zanimala nas je predvsem stabilnost, točnost, konvergenca s krajšanjem časovnega koraka in večanjem diskretizacije vsake od metod pri različnih začetnih in robnih pogojih ter pri različnih izvedbah numeričnih metod. Fizikalno preproste primere smo izbrali zato, da smo študirali predvsem lastnosti numeričnih metod.

2 Vodilne enačbe

Klasična numerična metoda v uporabi je standardna entalpijska metoda, ki rešuje diskretizirano energijsko enačbo v entalpijski obliki:

¹ Aleš Košir, dipl.inž.fiz.
Fakulteta za strojništvo
Laboratorij za dinamiko fluidov in termodynamiko
1000 Ljubljana, Alščeveva 6

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla h = \nabla \cdot (K \nabla T) \quad (1)$$

Metoda je preprosta za uporabo in učinkovita ter ohranja energijo sistema, vendar pri nelinearnosti enačbe pri neeksplicitni časovni diskretizaciji zahteva uporabo dodatnih iteracijskih shem znotraj enega časovnega koraka. Med temi se je za posebej učinkovito izkazala shema Vollerja in Swaminathana⁴.

Navadno izberemo za spremenljivke v vozelnih točkah diskretiziranega območja vrednosti za entalpije in temperature. Z diskretizacijsko enačbo izračunamo na naslednjem koraku neznane entalpije in iz njih s konstitutivno zvezo $T = T(h)$ vrednosti za temperaturno polje. Entalpija v vozelnih točkah predstavlja povprečno entalpijo v kontrolni prostornini. Če je ta entalpija med entalpijo trdne in kapljevinske faze, pomeni, da se snov v tej prostornini struje. Temperatura v taki kontrolni prostornini je med strjevanjem ves čas enaka temperaturi tališča. Te konstantne vrednosti povzročijo, da se temperature v kontrolnih prostorninah v bližini medfaznega roba s časom spreminjajo stopničasto, a se z oddaljevanjem tudi zgladijo.

Naslednji klasični numerični način je s temperaturno formulacijo energijske enačbe, pri kateri prenesemo latentno toplotno strjevanje v člen z navideznimi topotlnimi izvorji:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \vec{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K \nabla T) + L \rho \frac{\partial f_s}{\partial t} + L \rho \vec{v} \cdot \nabla f_s \quad (2)$$

Poleg te enačbe, ki opisuje fizikalni model, pa na medfaznem robu v točki x_m , določeni s temperaturo faznega prehoda $T = T_m$, velja Stefanov pogoj, ki opisuje ohranitev energije:

$$K \frac{\partial T}{\partial x_m} \Big|_{x_m-\epsilon} - K \frac{\partial T}{\partial x_m} \Big|_{x_m+\epsilon} = L \rho (v_m - v) \operatorname{Sgn}(T \Big|_{x_m-\epsilon} - T \Big|_{x_m+\epsilon}) \quad (3)$$

Tako zapisan Stefanov pogoj velja povsem splošno. Pri tem v_m označuje hitrost medfaznega roba glede na izbrani opozovalni sistem in v hitrost gibanja snovi. Znano je, da standarna entalpijska metoda in temperaturna formulacija energijske enačbe v obliku (2) že vsebuje Stefanov medfazni pogoj (3). Tega potrebujemo pri sestavljanju analitičnih rešitev.

3 Analitična rešitev

Omejimo se na model kontinuiranega ulivanja čistih aluminijastih plošč, tako širokih, da dovolj daleč od stranskih robov ni čutiti njihovega vpliva, in tako tankih, da smemo trditi, da ni prečnega temperaturnega gradiента. Topotne lastnosti trdne in kapljevinske faze naj bodo konstantne, homogene in v obeh fazah enake. Prenos toplotne v takem ingotu pri dani stalni hitrosti ulivanja opisuje enorazsežna linearna konvekcijsko-difuzijska enačba v brezdimenzijski obliki:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + Pe \frac{\partial h}{\partial x} = Ste \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4)$$

Vse snovne lastnosti smo vključili v dve brezdimenzijski števili, Pecletrovo in Stefanovo. Stefanov pogoj se brezdimenzijsko zapiše v obliki:

$$Ste \left(\frac{\partial T}{\partial x_m} \Big|_{\tilde{x}_m-\epsilon} - \frac{\partial T}{\partial \tilde{x}_m} \Big|_{\tilde{x}_m+\epsilon} \right) = \left(\frac{d \tilde{x}_m}{dt} - Pe \right) \operatorname{Sgn}(\tilde{T} \Big|_{\tilde{x}_m+\epsilon} - \tilde{T} \Big|_{\tilde{x}_m-\epsilon}) \quad (5)$$

Fazni prehod poteka izotermno pri temperaturi \tilde{T}_m ,

Pri numerični analizi kontinuiranega ulivanja iščemo rešitev enačbe (4) po dovolj dolgem času, ko so izveneli prehodni pojavi in se je stanje ustabilo. Cilj naloge je poiskati izotermo faznega prehoda določeno lego medfaznega roba in določiti temperaturno polje obeh faz. Rešitve nalog s faznim prehodom so sestavljene iz rešitev nalog brez faznega prehoda. Rešitve so vedno monotone funkcije.

Pri Dirichletovih robnih pogojih na obeh krajiščih intervala $[\tilde{x}_1, \tilde{x}_2]$, $\tilde{T}(\tilde{x}_1) = \tilde{T}_1$ in $\tilde{T}(\tilde{x}_2) = \tilde{T}_2$ in pri procesnih parametrih $Pe \neq 0$ je rešitev v enem območju enaka:

$$\tilde{T}(\tilde{x}) = C_1 \exp(Pe \tilde{x}) + D_1 \quad (6)$$

in v drugem

$$\tilde{T}(\tilde{x}) = C_2 \exp(Pe \tilde{x}) + D_2 \quad (7)$$

Rešitvi morata ustrezati robnima pogojema:

$$\tilde{T}_1 = \tilde{T}(\tilde{x}_1) = C_1 \exp(Pe \tilde{x}_1) + D_1 \quad (8)$$

$$\tilde{T}_2 = \tilde{T}(\tilde{x}_2) = C_2 \exp(Pe \tilde{x}_2) + D_2 \quad (9)$$

temperaturnemu medfaznemu pogoju:

$$\tilde{T}_m = \tilde{T}(\tilde{x}_m) = C_1 \exp(Pe \tilde{x}_m) + D_1 \quad (10)$$

$$\tilde{T}_m = \tilde{T}(\tilde{x}_m) = C_2 \exp(Pe \tilde{x}_m) + D_2 \quad (11)$$

in Stefanovemu medfaznemu pogoju:

$$\operatorname{Ste}(C_1 - C_2) \exp(Pe \tilde{x}_m) = - \operatorname{Sgn}(\tilde{T}_2 - \tilde{T}_1) \quad (12)$$

Vpeljimo naslednje označke:

$$E_1 = \exp(Pe \tilde{x}_1) \quad (13)$$

$$E_2 = \exp(Pe \tilde{x}_2) \quad (14)$$

$$E = \exp(Pe \tilde{x}_m) \quad (15)$$

$$\operatorname{sgn} = \operatorname{Sgn}(\tilde{T}_2 - \tilde{T}_1) \quad (16)$$

Iz temperaturnega pogoja na medfaznem robu izrazimo konstanti D_1 in D_2 :

$$D_1 = \tilde{T}_m - C_1 E \quad (17)$$

$$D_2 = \tilde{T}_m - C_2 E \quad (18)$$

Iz robnih pogojev izrazimo konstantni C_1 in C_2 :

$$C_1 = \frac{\tilde{T}_1 - \tilde{T}_m}{E_1 - E} \quad (19)$$

$$C_2 = \frac{\tilde{T}_2 - \tilde{T}_m}{E_2 - E} \quad (20)$$

Lega medfaznega roba je določena z rešitvijo kvadratne enačbe:

$$\{\operatorname{Ste}(\tilde{T}_2 - \tilde{T}_1) + \operatorname{sgn}\} E^2 + \{\operatorname{Ste}(\tilde{T}_2 - \tilde{T}_1) E_2 - E_1\} - \operatorname{sgn}(E_1 + E_2) \} E + \operatorname{sgn} E_1 E_2 = 0 \quad (21)$$

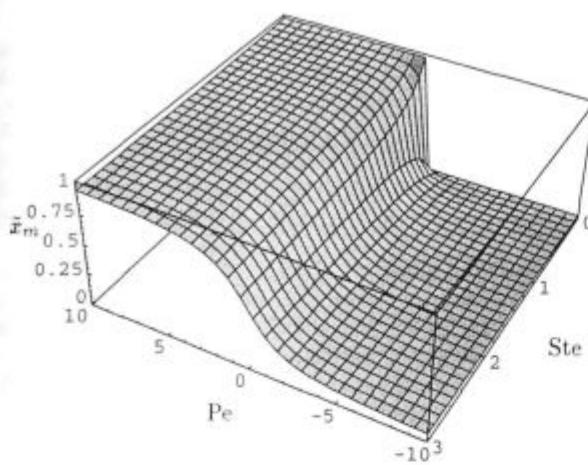
v kateri označimo koeficiente

$$aE^2 + bE + c = 0 \quad (22)$$

tako da se rešitvi izrazita po znanem obrazcu:

$$\tilde{x}_m = \frac{1}{Pe} \log \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (23)$$

Korena izračunamo tako, da prvemu ustreza znak plus in drugemu znak minus. Nekatere značilne rešitve pri karakterističnih vrednostih parametrov so predstavljene v tabeli 1.



Slika 1: Lega medfaznega roba v odvisnosti od Pe in Ste pri referenčnem primeru $\tilde{x}_1 = 0$, $\tilde{x}_2 = 1$, $\tilde{T}_1 = 1$, $\tilde{T}_2 = 0$, $T_m = 0,95$

Figure 1: Interphase boundary position, dependent on Pe and Ste in reference test case $\tilde{x}_1 = 0$, $\tilde{x}_2 = 1$, $\tilde{T}_1 = 1$, $\tilde{T}_2 = 0$, $T_m = 0,95$

Tabela 1: Odvisnost lega medfaznega roba od parametrov. Pri temperaturnem polju, ki raste s koordinato x , je fizikalno smiseleni prvi koren $\tilde{x}_{m,1}$ kvadratne enačbe (21), sicer pa drugi $\tilde{x}_{m,2}$. V tabeli sta navedena fizičalno nesmiselna korena samo pri prvih treh primerih. Zadnji primer kaže, da s to analitično rešitvijo ne moremo zajeti primerov z ničelno hitrostjo

Table 1: Dependence of interphase boundary position on parameters.

In temperature fields which increase with x coordinate, the physically correct solution of the quadratic equation (21) is $\tilde{x}_{m,1}$, otherwise it is $\tilde{x}_{m,2}$. The table shows physically impossible roots only in the first three places. The final example shows that with this solution we cannot take into account examples with zero velocity

\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{T}_1	\tilde{T}_2	\tilde{T}_m	Ste	Pe	$\tilde{x}_{m,1}$	$\tilde{x}_{m,2}$
0	1	1	0	0,95	1	2	-0,028234	0,681661
1	0	1	0	0,95	1	2	-0,334824	0,988250
0	1	0	1	0,95	1	2	0,988250	-0,334824
0	1	1	0	0,5	1	2	0,864614	
0	1	1	0	0,95	10	2	0,209455	
0	1	1	0	0,95	0,1	2	0,954876	
0	1	1	0	0,95	0	2	1	
0	1	1	0	0,95	1	10	0,935564	
0	1	1	0	0,95	1	1	0,398643	
0	1	1	0	0,95	1	0,1	0,058178	
0	1	1	0	0,95	1	0	/	/

4 Numerični shemi

4.1 Metoda kontrolnih prostornin

Pri numeričnem reševanju smo uporabili metodo kontrolnih prostornin na ekvidistantni mreži, predstavljeni na **sliki 2**, primer a. Za diskretizacijo konvektivnega člena smo uporabili privetreno shemo in za diskretizacijo v času delno ali popolnoma implicitno shemo. Znotraj enega časovnega koraka se z iteracijo približujemo vrednostim za temperaturno polje in za prostorninski delež trdne faze pri naslednjem časovnem koraku, dokler ni razlika med dvema zaporednima iteracijskima približkom dovolj majhna. Za napovedovanje prostorninskega deleža trdne faze v enačbi (2) smo uporabili Voller-Swaminathanovo shemo

$$f_i^{+ \Delta t i} = f_i^{+ \Delta t i-1} + \frac{\partial f_i^{+ \Delta t i-1}}{\partial T} (T^{+ \Delta t i} - T^{+ \Delta t i-1})$$

Natančnost rezultatov numerične metode ocenimo z napako, ki jo izračunamo kot razliko med numeričnimi in analitičnimi vrednostmi za temperaturno polje v vozelnih točkah. V **tabeli 2** so predstavljene vrednosti za povprečno absolutno napako e_a , za koren povprečnega kvadrata napake e_R in za največjo napako e_M .

4.2 Metoda robnih elementov z dvojno recipročnostjo

Kot pri metodi kontrolnih prostornin smo tudi v tem primeru uporabili temperaturno formulacijo, izbrali stalno mrežo, predstavljeno na **sliki 2**, primeri b, c in č, in diskretizirali navidezno enorazsežno območje z geometrijsko konstantnimi robnimi elementi s konstantnimi interpolacijskimi funkcijami na njih. Na stranskih robovih smo predpisali homogene Neumannove robne pogoje. Temperaturno polje in njegov gradient smo v času diskretizirali z delno implicitno metodo in kot fundamentalno rešitev uporabili rešitev Laplaceove enačbe v dveh razsežnostih. Za radialne interpolacijske funkcije metode dvojne recipročnosti smo izbrali funkcije $1 + r$. Z njimi prenesemo vpliv notranjih točk na rob območja in se izognemo integraciji po notranosti območja. Integrali po robnih elementih so bili izračunani z numerično integracijo z 32 Gaussovimi točkami. Kot pri metodi kontrolnih prostornin smo tudi tu za napovedovanje prostorninskega deleža trdne faze uporabili Voller-Swaminathanovo shemo. Metoda je obširnejše predstavljena v ⁴.

Stacionarni analitični primer je z obema numeričnima metodama rešen s približevanjem stacionarnemu stanju ob začetnem pogoju

$$\tilde{T}(\tilde{x}, 0) = 1$$

V **tabeli 3** so predstavljene vrednosti za napako numerične metode.

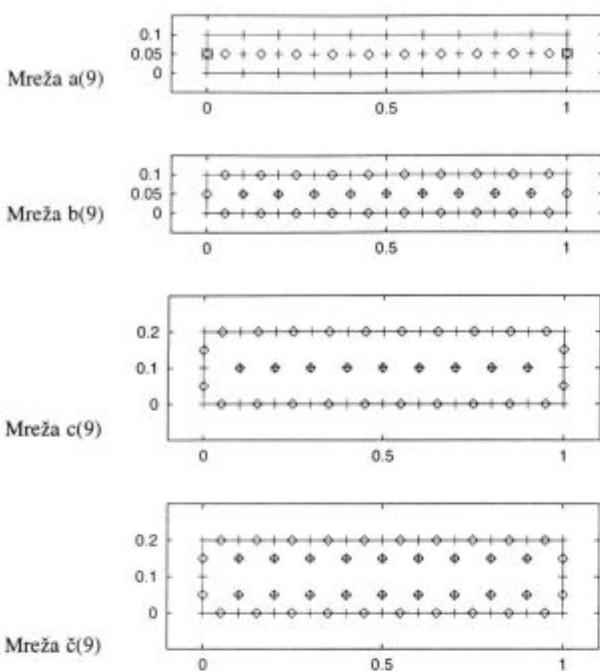
5 Rezultati

Rezultati so predstavljeni v obliki **tabel 2 in 3** z vrednostmi za povprečno absolutno napako e_a , za koren povprečnega kvadrata napake e_R in za največjo napako e_M v odvisnosti od Peletrovega in Stefanovega števila.

Tabela 2: Napake med analitično in numerično rešitvijo z metodo kontrolnih prostornin. Črka a označuje mrežo in v oklepaju število točk znotraj območja v vrsti

Table 2: Error between analytical and numerical solutions using the control volume method. Letter a stands for the grid and the number in brackets for the number of points in a single row

Ste	Pe = 1			
	e _a	e _R	e _M	
0,2	a(14)	0,582E-2	0,627E-2	0,712E-2
1	a(14)	0,567E-2	0,666E-2	0,702E-2
∞	a(14)	0,567E-2	0,666E-2	0,702E-2
Pe = 2				
1	a(14)	0,587E-2	0,596E-2	0,633E-2
Pe = 5				
0,2	a(14)	0,333E-1	0,473E-1	0,832E-1
1	a(14)	0,288E-1	0,322E-1	0,542E-1
∞	a(14)	0,172E-1	0,288E-1	0,357E-1



Slika 2: Uporabljene diskretizacije območja z devetimi točkami v vrsti znotraj območja

Figure 2: Discretization of domains with nine internal points in one row

Tabela 3: Napake med analitično in numerično rešitvijo z BEM DRM. Črke b, c in č označujejo mrežo in v oklepaju število točk znotraj območja v vrsti

Table 3: Error between analytical and numerical solutions using the boundary element method with dual reciprocity. Letters b, c and č stand for the grid and the number in brackets for the number of points in a single row

Ste		e_a	e_R	e_M
$Pe = 1$				
0,2	c(14)	0,498E-2	0,455E-2	0,593E-2
0,5	c(9)	0,402E-2	0,432E-2	0,551E-2
1	c(14)	0,310E-2	0,340E-2	0,430E-2
∞	c(14)	0,286E-2	0,310E-2	0,407E-2
$Pe = 2$				
0,2	c(14)	0,548E-2	0,578E-2	0,669E-2
0,5	c(14)	0,327E-2	0,354E-2	0,460E-2
	b(9)	0,423E-2	0,459E-2	0,575E-2
	c(9)	0,413E-2	0,443E-2	0,563E-2
	č(9)	0,420E-2	0,451E-2	0,572E-2
1	c(14)	0,315E-2	0,341E-2	0,445E-2
∞	c(14)	0,294E-2	0,319E-2	0,418E-2
	c(9)	0,384E-2	0,413E-2	0,530E-2
$Pe = 5$				
0,2	c(14)	0,877E-2	0,103E-1	0,171E-1
	c(9)	0,630E-2	0,968E-2	0,234E-1
1	c(14)	0,582E-2	0,637E-2	0,727E-2
∞	c(14)	0,535E-2	0,566E-2	0,668E-2

6 Sklep

Z opisanim modelom smo ugotovili, kakšen je vpliv treh brezdimenzijskih števil na lego medfaznega roba pri izbranih stalnih vrednostih za preostale parametre naloge. Brž ko Stefanovo število zraste preko 3, se njegov vpliv na lego medfaznega roba ustali. Pecletrovo število najmočneje vpliva na lego medfaznega roba na intervalu $|Pe| < 1$. Če je $Pe > 10$ ali $Pe < -1$, je pri referenčnem primeru medfazni rob tik ob robu območja.

Preglednici napak numeričnih metod 2 in 3 kažeta, kako se napaka povečuje z večanjem Pecletrovega števila in s približevanjem Stefanovega števila proti nič. Metoda robnih elementov kaže pri enakih razmerah bolj stabilno vedenje in daje bolj točne rezultate, posebej pri večjih Pecletrovih številih.

Tabela 4: Pregled definicij za brezdimenzijska števila

Table 4: Overview of definitions of nondimensional numbers

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{x}{a} \\ \bar{t} &= \frac{Kt}{\rho c_p a^2} \\ \bar{T} &= \frac{T - \min(T_1, T_2)}{|T_2 - T_1|} \\ \bar{h} &= \frac{h}{L} \\ \text{Ste} &= \frac{c_p |T_2 - T_1|}{L} \\ \text{Pe} &= \frac{\rho c_p a v}{K}\end{aligned}$$

Tabela 5: Pregled uporabljenih oznak. Znak \sim pomeni, da je količina pod njim brezdimenzijska

Table 5: Symbols used. The symbol \sim denotes a non-dimensional quantity

oznaka	enota	opis
a	m	polovična debelina plošče
C, C _{1,2}		proste konstante
c _p	J/kg K	specifična toplota
D, D _{1,2}		proste konstante
E, E _{1,2}		pomožne oznake
e _a , e _R , e _M		napake
ϵ	m	majhen odmik
f _s	l	prostorninski delež trdne faze
h	J/kg	specifična entalpija
i		števec iteracij znotraj časovnega koraka
K	W/m K	koeficient toplotne prevodnosti
L	J/kg	specifična talilna toplota
$\lambda_{1,2}$		korena karakterističnega polinoma diferencialne enačbe
ρ	kg/m ³	gostota
Sgn	l	funkcija predznaka
sgn		pomožna oznaka
T	K	temperatura
T ₁ , T ₂	K	temperatura na levem oziroma desnem robu
T _a	K	temperatura okolice

T_m	K	temperatura tališča
t	s	čas
Δt	s	velikost časovnega koraka
v	m/s	hitrost vlečenja ingota
v_m	m/s	hitrost medfaznega roba
x	m	koordinata
x_m	m	lega medfaznega roba
$x_{m1,2}$	m	korena kvadratne enačbe za lego medfaznega roba

Zahvala

Delo je nastalo v okviru projektov Dvoelementno modeliranje trdno-kapljevinskih sistemov, podprtega s strani MZT, in Modeling in material science and processing v okviru COST-512.

7 Literatura

- ¹ Šarler, B., Košir, A.: *Solution of melting and solidification problems by the dual reciprocity boundary element method*, Lewis, R. W. (ed.): Numerical Methods in Thermal Problems, Vol VIII., Pineridge Press, Swansea 1993, 139-150
- ² Šarler, B., Košir, A.: *Solution of conduction-convection heat transport in systems with solid-liquid phase change by dual reciprocity boundary element method*, in: Lewis, R. W. (ed.): Numerical Methods in Thermal Problems, Vol IX., Pineridge Press, Swansea 1995, 737-748
- ³ Patankar, S. V.: *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere, New York, 1980
- ⁴ Voller, V. R., Swaminathan, C. R.: General source-based method for solidification phase change, *Num. Heat Transfer*, 19B, 1991, 175-189
- ⁵ Pardo, E., Weckman, D. C.: A fixed grid finite element technique for modelling phase change in steady-state conduction-advection problems, *Int. J. Num. Met. Eng.*, 29, 1990, 969-984