

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Tomislav Gradinščak

Zagreb, 2014.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Mentor:
prof.dr.sc. Hrvoje Jasak, dipl.ing.

Student:
Tomislav Gradinščak

Zagreb, 2014.

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći stečena znanja tijekom studija i navedenu literaturu.

Zahvaljujem se profesoru Jasaku na velikoj pomoći koju mi je pružio i znanju koje mi je prenio tijekom izrade diplomskog rada. Također se zahvaljujem profesoru Baueru na materijalima koje je nesebično podijelio kako bi izrada bila moguća. Želim zahvaliti Vuki Vukčeviću na izuzetnoj strpljivosti i konstantnoj pomoći koju je pružio tijekom ovog razdoblja.

Tomislav Gradinščak

Sadržaj

Popis slika	iii
Popis tablica	vi
1. Uvod	1
2. Kompresibilno dvofazno strujanje	3
2.1. Modeliranje slobodnih površina i granica između fluida	3
2.1.1. Površinske metode	4
2.1.2. Volumne metode	5
2.2. Pregled literature	6
3. Matematički model	8
3.1. Osnovne jednačbe mehanike fluida	8
3.1.1. Rubni uvjeti Navier-Stokesovih jednačbi	9
3.2. Osnovne jednačbe višefaznog strujanja	9
3.3. Modificirane Navier-Stokesove jednačbe	10
3.3.1. Jednačbe očuvanja: konzervativna forma	11
3.3.2. Izentropska jednačba stanja za plinsku fazu	12
3.3.3. Izotermalna jednačba stanja za tekuću fazu	12
3.3.4. Jednačbe očuvanja: nekonzervativna forma	12
4. Diskretizacija metodom kontrolnih volumena	15
4.1. Diskretizacija	15
4.2. Diskretizacija standardne transportne jednačbe	15
4.3. Pohrana i raspored varijabli	16
4.4. Interpolacija na stranicama	17
4.5. Gradijent	19
4.6. Diskretizacija nestacionarnog člana	19
4.7. Diskretizacija konvekcijskog člana	19
4.8. Diskretizacija difuzijskog člana	20
4.9. Diskretizacija izvorskog člana	21
4.10. Rubni uvjeti	22
4.10.1. Fizički rubni uvjeti	23

4.11. Vremenska diskretizacija	24
4.12. Diskretizirani sustav linearnih jednadžbi	25
4.13. Svojstva diskretizacijskih shema	26
4.13.1. Konzervativnost	26
4.13.2. Ograničenost	26
4.13.3. Transportivnost	27
4.14. Diskretizacija modificiranih Navier-Stokesovih jednadžbi	28
4.14.1. Jednadžba za brzinu	29
4.14.2. Jednadžba za tlak	29
4.14.3. Jednadžba za volumni udio	30
4.14.4. Diskretizacija kompresijskog člana u jednadžbi za volumni udio	31
4.14.5. Sprega brzine i tlaka	31
4.14.6. Konačni algoritam rješavanja	33
5. Validacijski slučajevi	35
5.1. Dinamika sferičnog mjehurića	35
5.1.1. Izvod Rayleigh-Plessetove jednadžbe	35
5.1.2. Podvodne eksplozije (UNDEX)	38
5.2. Duboka eksplozija	42
5.3. Eksplozija ispod krute ploče	51
5.4. Eksplozija pod slobodnom površinom	61
6. Ubrizgavanje tekućeg metala u zatvoreni kalup	69
7. Zaključak	77
Bibliografija	79

Popis slika

2.1	Različite metode praćenja granice [3].	3
4.1	Raspored varijabli: a) u središtima volumena b) u središtima stranica [2].	17
4.2	Parametri u metodi kontrolnih volumena [2].	18
4.3	Korekcija zbog neortogonalnosti.	20
4.4	Parametri u metodi kontrolnih volumena za volumene s granični stranicama [2].	22
4.5	a) čista konvekcija; b) difuzija i konvekcija [8].	27
4.6	Dijagram toka PISO algoritma	33
5.1	Shema sferičnog mjehurića u beskonačnom fluidu [11].	36
5.2	Dio površine sferičnog mjehurića [11].	38
5.3	Shema podvodne eksplozije [5].	39
5.4	Shema podvodne eksplozije blizu čvrste granice [14].	41
5.5	Prikaz domene.	43
	a Granice domene.	43
	b Kut isječka.	43
5.6	Prikaz mreže.	44
5.7	Promjena radijusa mjehurića u vremenu.	46
5.8	Promjena radijusa mjehurića u vremenu [5].	46
5.9	Prikaz mjehurića na: početku simulacije (lijevo) i pri maksimalnom radijusu (desno).	47
5.10	Prikaz mjehurića na: kraju prvog ciklusa (lijevo) i početku drugog ciklusa (desno).	47
5.11	Promjena tlaka u središtu mjehurića.	49
5.12	Promjena gustoće u središtu mjehurića.	49
5.13	Promjena brzine u središtu mjehurića.	50
5.14	Promjena mase plina u vremenu.	50
5.15	Shema eksplozije ispod krute ploče.	51
5.16	Granice domene.	52
5.17	Kruta ploča.	52
5.18	Mreža u cijeloj domeni.	54
5.19	Mreža blizu krute ploče.	54

5.20	Prikaz tlaka nakon: 0.1 ms (lijevo) i 0.2 ms (desno)	56
5.21	Prikaz tlaka nakon: 0.4 ms (lijevo) i 0.6 ms (desno)	56
5.22	Prikaz tlaka nakon: 0.8 ms (lijevo) i 1 ms (desno)	56
5.23	Prikaz tlaka iz [16] nakon: 0.1 ms (lijevo) i 0.4 ms (desno)	57
5.24	Prikaz tlaka iz [16] nakon: 0.8 ms (lijevo) i 1 ms (desno)	57
5.25	Volumni udio mjehurića nakon: 1 ms (lijevo) i 4 ms (desno)	58
5.26	Volumni udio mjehurića nakon: 8 ms (lijevo) i 15 ms (desno)	58
5.27	Volumni udio mjehurića nakon: 18.5 ms (lijevo) i 20 ms (desno) . . .	58
5.28	Volumni udio mjehurića iz [16] nakon: 1 ms (lijevo) i 8 ms (desno) . .	59
5.29	Volumni udio mjehurića iz [16] nakon: 11 ms (lijevo) i 12 ms (desno)	59
5.30	Promjena tlaka u centru mjehurića.	60
5.31	Prikaz tlaka na ploči.	60
5.32	Promjena mase plina u vremenu.	61
5.33	Prikaz domene.	62
5.34	Mreža u cijeloj domeni.	63
5.35	Mreža kod slobodne površine.	64
5.36	Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 0 s (lijevo) i 0.5 s (desno)	65
5.37	Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 0.75 s (lijevo) i 1 s (desno)	65
5.38	Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 1.25 s (lijevo) i 1.5 s (desno)	66
5.39	Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 1.75 s (lijevo) i 2 s (desno)	66
5.40	Promjena tlaka u pojedinim točkama.	67
5.41	Promjena mase plina u vremenu.	67
6.1	Prikaz geometrije kalupa.	70
	a Izometrijski pogled.	70
	b Bočni pogled.	70
6.2	Prikaz mreže.	70
6.3	Ubrizgavanje pri 0 s.	71
	a Volumni udio pri 0 s.	71
	b Volumni udio na presjeku pri 0 s.	71
6.4	Ubrizgavanje nakon 1 s.	72
	a Volumni udio nakon 1 s.	72
	b Volumni udio na presjeku nakon 1 s.	72
6.5	Ubrizgavanje nakon 2 s.	72
	a Volumni udio nakon 2 s.	72
	b Volumni udio na presjeku nakon 2 s.	72
6.6	Ubrizgavanje nakon 3 s.	73

a	Volumni udio nakon 3 s.	73
b	Volumni udio na presjeku nakon 3 s.	73
6.7	Ubrizgavanje nakon 4 s.	73
a	Volumni udio nakon 4 s.	73
b	Volumni udio na presjeku nakon 4 s.	73
6.8	Mreža u disku.	74
a	Mreža na lijevoj strani diska.	74
b	Mreža na desnoj strani diska.	74
6.9	Točka u kojoj su prikazani tlak i temperatura.	74
6.10	Promjena tlaka u određenoj točki.	75
6.11	Promjena temperature u određenoj točki.	75
6.12	Promjena mase zraka u vremenu.	76

Popis tablica

5.1	Svojstva plina.	42
5.2	Svojstva vode.	42
5.3	Numeričke sheme diskretizacije.	42
5.4	Parametri proračuna.	43
5.5	Rubni uvjeti.	44
5.6	Rubni uvjeti.	53
5.7	Parametri proračuna.	53
5.8	Rubni uvjeti.	62
5.9	Parametri proračuna.	62
6.1	Svojstva plina.	69
6.2	Svojstva aluminija.	69
6.3	Rubni uvjeti.	70

Popis oznaka

Latinska slova

Oznaka	Mjerna jedinica	Opis
\mathbf{u}	m/s	vektor brzine
\mathbf{u}^r	m/s	vektor brzine za kompresiju prijelaznog sloja
$\tilde{\mathbf{u}}^*$	m/s	izvorski član u jednadžbi za brzinu
\mathbf{g}	m/s ²	gravitacijsko ubrzanje
p	Pa	apsolutni tlak
p_0	Pa	referentni tlak
p_d	Pa	dinamički tlak
p_B	Pa	tlak unutar mjehurića pare
p_{G_0}	Pa	početni tlak u mjehuriću plina
t	s	vrijeme
V	m ³	volumen
\mathbf{x}	m	vektor položaja
T	K	temperatura
T_B	K	temperatura unutar mjehurića pare
c	m/s	brzina zvuka
R	J/kg K	masena plinska konstanta
a_c	m ² /s ²	adijabatska konstanta
S_ϕ	-	izvorski dio veličine ϕ
S	m ²	površina
\mathbf{S}	m ²	površinski vektor
\mathbf{d}	m	vektor udaljenosti središta dvaju volumena
\mathbf{d}_n	m	vektor udaljenosti okomit na stranicu
f_x	-	omjer dužina
F	kg/s	maseni protok
F^{rb}	kg/s	maseni protok u prijelaznom sloju
\mathbf{n}	m	vektor normale
$\hat{\mathbf{n}}$	m	jedinični vektor normale
\mathbf{k}	m	neortogonalni dio površinskog vektora
S_I	-	komponenta izvora veličine ϕ koja stoji uz nju
S_E	-	komponenta izvora veličine ϕ koja stoji samostalno

Oznaka	Mjerna jedinica	Opis
g_B	-	gradijent u smjeru normale na stranicu na granici domene
Co	-	Courantov broj
a	-	koeficijenti diskretizacije
$[A]$	-	rijetka kvadratna matrica s koeficijentima
$[R]$	-	vektor izvora
$[D]$	-	koeficijenti na dijagonali
$[L] + [U]$	-	koeficijenti izvan dijagonale
Pe	-	Pecletov broj
H	kg/ms ²	operator brzine
r	m	udaljenost od središta mjehurića pare
R	m	radijus mjehurića pare
S	Pa	površinska napetost
W	ekv.g TNT – a	masa eksploziva
V_0	m ³	početni volumen mjehurića plina
R_0	m	početni radijus mjehurića plina
R_m	m	maksimalni radijus mjehurića plina
m_z	kg	masa plina

Grčka slova

Oznaka	Mjerna jedinica	Opis
ρ	kg/m ³	gustoća
ρ_0	kg/m ³	referentna gustoća
μ	Pas	dinamička viskoznost
μ_{eff}	Pas	efektivna dinamička viskoznost
ν	m ² /s	kinematička viskoznost
α	-	volumni udio
δ	-	prijelazni sloj
δ_x	m	karakteristična duljina
σ_C^D	Pa	devijatorski dio tenzora naprezanja
σ	Pa	površinska napetost
γ	-	omjer specifičnih toplina
ψ	s ² /m ²	kompresibilnost vode
ϕ	-	općenita veličina
Γ	-	koeficijent difuzije
γ	-	faktor stapanja
Δ	m	ortogonalni dio površinskog vektora

Oznaka	Mjerna jedinica	Opis
λ	kg/m s^3	izvorski član u jednadžbi za tlak
θ	$^\circ$	kut isječka

Gornji i donji indeksi

Oznaka	Opis
" k "	oznaka za k-tu fazu
" P "	oznaka za kontrolni volumen za koji računamo
" N "	oznaka za susjedni kontrolni volumen
" f "	oznaka za veličinu u središtu stranice volumena
" \perp "	oznaka za okomit smjer na stranicu
" n "	vrijednosti u novom vremenskom trenutku
" o "	vrijednosti u starom vremenskom trenutku
" oo "	vrijednosti u pretprošlom vremenskom trenutku
" $*$ "	vrijednosti iz prethodne iteracije
" B "	oznaka za veličinu u središtu stranice volumena na granici domene
" V "	svojstva pare
" L "	svojstva tekućine
" ∞ "	svojstva tekućine okolo mjehurića pare/plina

Sažetak

U ovom radu je prikazan novi numerički pristup za rješavanje kompresibilnih strujanja sa slobodnom površinom. Prikazan je izvod modificiranih Navier-Stokesovih jednažbi koje su implementirane u programski paket OpenFOAM. Kao dopunske jednažbe korištene su izotermalna i izentropska jednažba stanja za proračun svojstava pojedinih faza. Korišten je volumni udio kako bi se razlikovale pojedine faze. Za praćenje slobodne površine korištena je metoda VOF ("Volume of Fluid"). Također je prikazana diskretizacija jednažbi matematičkog modela metodom kontrolnih volumena. Kako bi se izračunale primitivne varijable (volumni udio, brzina, dinamički tlak) korišten je odvojeni (eng. "segregated") algoritam koji je baziran na tlaku (eng. "pressure-based"). Odvojeni algoritam se naziva PIMPLE te je dan detaljan pregled njegove implementacije u OpenFOAM-u.

Simulacije strujanja sa slobodnom površinom kod kojih se u obzir uzima kompresibilnost jedne ili više faza predstavljaju izazov za numeričko modeliranje. Podvodne eksplozije zasigurno spadaju u tu kategoriju. U tim slučajevima omjer gustoća između plinova nakon eksplozije i okolnog fluida su tipično reda veličine $O(10^3)$, a omjeri tlakova mogu biti jednako toliko veliki. U svrhu testiranja robustnosti rješavača u prisutnosti vrlo velikih diskontinuiteta u tlaku i gustoći bilo je potrebno provesti validacijske proračune i utvrditi njihove parametre. Ti proračuni obuhvaćaju duboku eksploziju, eksploziju pod krutom pločom i eksploziju pod slobodnom površinom. Dobiveni rezultati su uspoređeni s eksperimentima odnosno drugim numeričkim simulacijama. Kako bi se rješavač dodatno provjerio odabran je slučaj ubrizgavanja tekućeg metala u zatvoreni kalup te su rezultati uspoređeni s literaturom.

Ključne riječi: metoda kontrolnih volumena, višefazni tok, podvodne eksplozije, lijevanje metala

Abstract

A new numerical approach for compressible flow simulations with free surface is presented in this thesis. Derivation of modified Navier-Stokes equations which is implemented in software package OpenFOAM is carried out. Isentropic and isothermal equations of state are used as a supplementary equations to calculate properties for each phase. A volume fraction is used to distinguish between the disparate phases. VOF method is used to capture free surface. Discretization of mathematical model with finite volume method is shown. A pressure-based, segregated algorithm is used to solve for primitive variables (volume fraction, velocity, dynamic pressure). The segregated algorithm is called PIMPLE and overview of its implementation in OpenFOAM is given.

Flow simulations with free surface in which the compressibility of one or more phases needs to be considered presents a challenge for numerical modelling. Underwater explosions surely belong in this category. In this cases, the density ratio between explosion gases and surrounding liquid is typically $O(10^3)$, and the pressure ratio can be just as high. To test solver robustness in presence of large density and pressure discontinuities validation cases had to be solved and simulation parameters to be determined. Simulations in this work included deep underwater explosion, explosion near a plate and explosion near a free surface. The results were compared with experiments and other numerical simulations. One more example of compressible flow with free surface was simulated: liquid metal casting in closed mould. The results were compared with those found in literature.

Key words: finite volume method, multiphase flow, underwater explosions, metal casting

1. Uvod

Mehanika fluida je teorijsko eksperimentalna znanost. Teorijski pristup se temelji na analitičkom rješavanju matematičkih modela strujanja fluida. Kada je analitičko rješenje određeno, ono je pogodno za analizu utjecaja pojedinih parametara u matematičkom modelu. No, većina problema vezanih uz strujanje fluida opisana je nelinearnim parcijalnim diferencijalnim jednadžbama koje nemaju opće analitičko rješenje. Analitičko rješenje Navier-Stokesovih jednadžbi moguće je odrediti samo za slučaj laminarnog strujanja u ograničenom broju slučajeva [1]. Turbulentna strujanja koja su stohastičke prirode ne mogu se opisati analitičkim rješenjima [1]. Iz tih razloga se u prošlosti koristio uglavnom eksperimentalni pristup koji pak daje ograničeni broj informacija o nekoj veličini zbog mjerenja u konačnom broju točaka. Oni također mogu biti vrlo skupi.

Kako bi se savladali gore navedeni problemi razvijene su numeričke metode. Nagli razvojem računala u posljednjih 20 godina, nastali su uvjeti za njihovu implementaciju. Numeričko rješavanje sastoji se od tri koraka. Prvo se provodi diskretizacija područja proračuna. Područje proračuna se dijeli na određeni broj kontrolnih volumena te se svakom volumenu dodaje jedan ili više čvorova u kojima se računaju polja fizikalnih veličina. Diskretizacijom prostora dobiva se proračunska mreža. Na njoj je potrebno diskretizirati parcijalne diferencijalne jednadžbe uz zadane rubne uvjete. Diskretizacija jednadžbi moguće je provesti raznim metodama (metoda kontrolnih volumena, metoda konačnih elemenata itd.) Nakon diskretizacije parcijalnih diferencijalnih jednadžbi dobiva se sustav algebarskih jednadžbi na zadanoj proračunskoj mreži koje se rješavaju uz pomoć linearnih rješavača. Ukoliko je polazna diferencijalna jednadžba linearna dobiva se sustav linearnih algebarskih jednadžbi. U slučaju nelinearnog sustava jednadžbi, on se rješava iterativnim postupkom koji u sebi sadrži rješavanje sustava linearnih algebarskih jednadžbi [1].

U mnogim različitim industrijama, uključujući procesnu, aeroindustriju, transportnu itd., strujanje s dvije ili više faza su uobičajena pojava te su često takva strujanja pravilo prije nego iznimka [2]. Višefazna strujanja mogu se pojaviti i izvan industrije kao što su npr. podvodne eksplozije. U posebnu kategoriju spadaju strujanja fluida sa slobodnom površinom kod kojih treba u obzir uzeti kompresibilnost jedne ili više faza. Takva strujanja zahtijevaju posebnu pažnju. Također postoje slučajevi gdje su višefazna strujanja nepoželjna, ali su neizbježna. Stoga su analiza i razumijevanje višefaznih tokova od velike važnosti ukoliko se želi osigurati

optimalno i sigurno provođenje te kontrola raznih procesa.

u ovom radu opisano je numeričko modeliranje strujanja dva kompresibilna fluida sa slobodnom površinom. U poglavlju 2 su prikazani načini modeliranja slobodnih površina i granica između fluida te su predstavljeni radovi koji se bave problematikom kompresibilnog višefaznog strujanja. U poglavlju 3 prikazan je opći sustav Navier-Stokesovih jednažbi koje opisuju strujanje fluida. Zatim je prikazan matematički model koji je implementiran u rješavač koji je korišten u ovom radu. Tim matematičkim modelom opisuje se strujanje višefaznih kompresibilnih fluida. U poglavlju 4 je prikazana diskretizacija pojedinih članova transportne jednažbe metodom kontrolnih volumena. Prikazana je i diskretizacija članova koji se pojavljuju u jednažbama matematičkog modela implementiranog u ovom radu. Uz to je prikazana i implementacija rubnih uvjeta u sustav diskretiziranih jednažbi i sprega jednažbi brzine i tlaka. U poglavlju 5 izveden je matematički model dinamike sferičnog mjehurića uz teoriju koja opisuje podvodne eksplozije u različitim slučajevima. Nakon toga su prikazani rezultati validacijskih slučajeva. U poglavlju 6 opisan je slučaj ubrizgavanja tekućeg metala u kalup te su dani rezultati simulacija. Na kraju rada opisani su zaključci i rezultati istraživanja.

2. Kompresibilno dvofazno strujanje

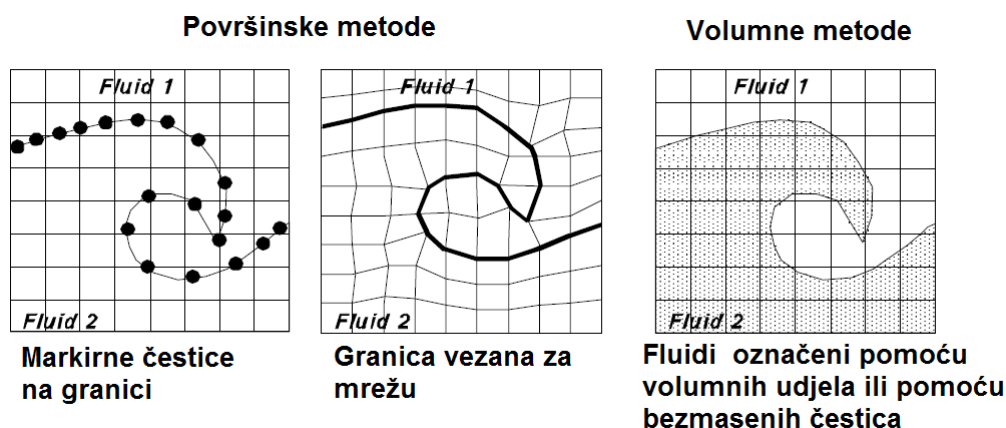
U prethodnom poglavlju dan je uvod u numeričke metode u mehanici kontinuuma. U ovom poglavlju bit će dan pregled metoda kojima se modeliraju granice između dva fluida te je dan pregled radova koji se bave kompresibilnim višefaznim strujanjem.

2.1. Modeliranje slobodnih površina i granica između fluida

Postojeće metode modeliranja slobodnih površina i granica između fluida mogu se podijeliti u dvije grupe [3]:

1. Površinske metode
2. Volumne metode

Na slici 2.1 se nalazi shematski prikaz gore navedenih metoda. U prvoj metodi granica je označena i praćena eksplicitno posebnim markirnim česticama ili vezanjem za mrežu koja je prisiljena micati se s granicom. U drugoj metodi fluidi su s obje strane granice označeni ili pomoću bezmasenih čestica ili pomoću volumnih udjela.



Slika 2.1: Različite metode praćenja granice [3].

2.1.1. Površinske metode

Kao što je prethodno napomenuto, u ovoj metodi granica dvaju fluida je označena posebnim markirnim česticama lociranim na njoj. Između tih točaka, njena pozicija je aproksimirana interpolacijom, najčešće polinomnom funkcijom sastavljenom od više dijelova.

Prednost ovog pristupa je ta da je pozicija granice poznata cijelo vrijeme te ostaje oštra dok se pomiče kroz mrežu. Ovo olakšava računalno vrijeme potrebno za proračun zakrivljenosti što pak olakšava implementaciju sile površinske napetosti koja se javlja kod višefaznih strujanja.

Postoji nekoliko načina označavanja granice od kojih će neki biti objašnjeni u narednom tekstu.

- **Čestice na granici dvaju fluida:** u [4] je predstavljena metoda za eksplisitno praćenje na fiksnoj mreži označavajući granicu sa nizom povezanih bezmasenih markirnih čestica. Lokalne brzine su iskorištene za konvekciju čestica.
- **Visinske funkcije:** u [5] su proširili ideju markirnih čestica povezujući točke na granici s točkama na referentnoj ravnini. Lokacija granice je tada određena visinom ili udaljenošću od referentne ravnine. Za strukture sa zatvorenom granicom kao što su kapljice ili mjehurići, moguće je definirati jednu referentnu točku unutar tog objekta. U tom je slučaju radijus, koji stoji pod različitim kutevima, funkcija udaljenosti.
- **"Level set" metoda:** kontinuirana funkcija, poznata kao "level set" funkcija ([6]), se računa na području cijele računalne domene. Vrijednost funkcije u svakoj točki je određena kao najkraća udaljenost između te točke i granice dvaju fluida. Granica se nalazi tamo gdje je vrijednost "level set" funkcije nula. Kako bi se fluidi razlikovali na obje strane granice, funkciji udaljenosti jednom od fluida je dodan negativni predznak. Jedan od bitnih problema koji se javljaju u ovoj metodi je mogućnost presjecanja kontrolnog volumena granicom dvaju fluida. Takvi, djelomično popunjeni volumeni zahtijevaju poseban pristup.
- **Metoda vezanja uz mrežu:** posljednjih godina razvijeno je nekoliko tehnika vezanja granice na mrežu ([7], [8]). Ova metoda je implementirana uglavnom zbog tri razloga: smanjenje računalne memorije potrebne za pohranu markirnih čestica, osiguranje oštre granice i izbjegavanje djelomično popunjenih kontrolnih volumena.

2.1.2. Volumne metode

Volumne metode označuju fluide na obje strane granice. To je ujedno uzrok glavnog nedostatka ovih metoda budući da se točna pozicija granice ne može znati eksplicitno. Stoga su potrebne posebne tehnike hvatanja granice koje su dio algoritma rješavanja.

- **Čestice u fluidu:** u metodi markera i kontrolnih volumena (eng. "Marker and Cell" - MAC) ([9]), bezmasene markirne čestice su rasprostranjene po volumenu koji obuhvaća fluid sa slobodnom površinom. Kontrolni volumen bez markirnih čestica smatra se praznim. Kontrolni volumen s markirnim česticama, koji graniči s praznim volumenom, sadrži segment granice. Svi ostali kontrolni volumeni s markirnim česticama smatraju se ispunjenima fluidom.
- **Volumni udjeli:** skalarna indikatorska funkcija vrijednosti između 0 i 1, poznata kao volumni udio, korištena je za razlikovanje dva različita fluida. Vrijednost 0 ukazuje na postojanje jednog fluida, a vrijednost 1 ukazuje na postojanje drugog fluida. Ukoliko se vrijednost volumnog udjela kreće između tih granica, to nam ukazuje na prisutnost granice dvaju fluida dok je sama vrijednost pokazatelj relativnog odnosa volumnih udjela u kontrolnom volumenu. Unutar ove metode razvijeno je nekoliko tehnika od kojih su neke:
 - **Linijske tehnike:** poznata SLIC metoda (eng. Simple Line Interface Calculation) ([10]) spada u ove tehnike i razvijena je radi rješavanja višefaznih strujanja. Distribucija fluida u kontrolnom volumenu, koji sadrži dio granice, je dobivena koristeći distribuciju volumnih udjela u susjednim kontrolnim volumenima. Originalna SLIC metoda aproksimira granicu u svakom kontrolnom volumenu kao liniju paralelnu s jednom od koordinatnih osi te pretpostavlja drugačiji raspored fluida u istom kontrolnom volumenu u horizontalnom odnosno vertikalnom smjeru.
 - **Davatelj-primatelj shema:** osnovna ideja ove formulacije je ta da se koriste vrijednosti volumnog udjela na stranicama nizvodnog kontrolnog volumena (primatelj) kako bi se odredio protok te veličine kroz taj kontrolni volumen. Problem vezan uz korištenje nizvodnih vrijednosti je taj da vrijednosti volumnih udjela mogu postati nefizikalne i neograničene, odnosno vrijednosti mogu prijeći granice 0 i 1. U [11] su poboljšali davatelj-primatelj formulaciju sa VOF metodom (eng. Volume of Fluid) koja u proračun uključuje mogućnost kontinuiranog prijelaza između dvaju fluida što prije nije bio slučaj. VOF je vjerojatno najraširenija metoda te se mogu pronaći mnogi primjeri u kojima se koristi.

2.2. Pregled literature

Simulacije višefaznih tokova mogu se temeljiti na rješavanju dvofaznog sustava što znači da se rješava i za plin i za tekućinu (kompresibilnu ili nekompresibilnu). Također se mogu temeljiti na rješavanju jednofaznog sustava. Npr., rješava se samo za tekućinu (kompresibilnu ili nekompresibilnu) dok se svojstva plina računaju analitički. Simulacije s kompresibilno(plin)-kompresibilno(voda) i kompresibilno(plin)-nekompresibilno(voda) modelom mogu se naći u [12]. Kompresibilno (plin)-kompresibilno(voda) model također su koristili [13], [14] i [15]. Metode za rješavanje višefaznih strujanja u kojima se tekućina tretira kao kompresibilna obično se formuliraju kao eksplicitne što je slučaj u prethodno navedenim referencama. Vremenski korak kod eksplicitnih metoda ograničen je kako brzinom samog fluida tako i brzinom zvuka u njemu. Suprotno tome, vremenski korak kod polu-implicitnih metoda nije ograničen brzinom zvuka. Polu-implicitne metode za tretiranje fluida kao kompresibilnog razvijene su u [16], [17], [18] te [19]. U kontekstu višefaznih tokova, vrlo je malo pridodano pažnje polu-implicitnom pristupu, [20].

U kontekstu višefaznih kompresibilnih strujanja razvijeno je mnogo matematičkih modela. Model sa sedam jednadžbi sa dvije brzine i dva tlaka može se naći u [21]; model s pet jednadžbi predložen je u [22] te je poznat kao reducirani model; sličan model s pet jednadžbi izveden je iz modela sa sedam jednadžbi u [23] te su još dva reducirana modela prikazana u [24].

Provedeno je mnogo numeričkih simulacija koje se bave interakcijom tlačnih valova i mjehurića. Npr. numerička metoda bazirana na uzvodnoj shemi predstavljena je u [25]. Interakcija između tlačnog vala pri različitim Machovim brzinama i mjehurića u obliku cilindra simulirana je u [26]. Efikasna metoda za simulaciju i praćenja granice između dva kompresibilna fluida može se naći u [27]. U [28] je predstavljena nova metoda, temeljena na metodi kontrolnih volumena, s mogućnošću praćenja granice za simulaciju višefaznih kompresibilnih strujanja s visokim omjerima gustoća i snažnim tlačnim valovima.

Također je mnogo numeričkih simulacija provedeno u kontekstu podvodnih eksplozija. U [29] su istraživali rješenja za mjehuriće nakon podvodnih eksplozija koristeći više jednodimenzionalnih modela, uključujući kompresibilne i nekompresibilne modele. Model koji je bio najdetaljnije ispitivan bio je neviskozni model za ispitivanje strujanja fluida unutar plinskog mjehurića. Korišten je "Arbitrary Lagrangian-Eulerian" (ALE) okvir i Godunov metoda. U [30] je korišten program DYNA2D koji se temelji na metodi konačnih elemenata za proučavanje tlačnih valova i tlakova generiranih podvodnim eksplozijama.

U [31] su pomoću MSC/DYTRAN, koji koristi metodu konačnih elemenata,

simulirane duboke podvodne eksplozije u svrhu istraživanja ponašanja plinskih mjehurića. U [32] su proučavane podvodne eksplozije s "Boundary Element Method" (BEM) što je dalo rezultate koji se dobro slažu s rješenjima Rayleigh-Plesset jednadžbe kao i s rezultatima iz Swift i Decius.

U [33] su računalno proučavali interakcije mjehurića. Kako bi izračunali svojstva plina i vode, koristili su izentropsku odnosno izotermalnu jednadžbu stanja. Za proračun brzine, gustoće, tlaka i faznih masa korištena je metoda konačnih razlika te je implementirana metoda za praćenje slobodne površine. U [34] su iskoristili neke aspekte potencijalne teorije za proračun potencijala brzine što je pak korišteno za proračun oblika i pozicije mjehurića. To su nadopunili sa BEM metodom te elastičnom, pomičnom mrežom.

U [35] su predstavili metodu za praćenje slobodne površine nakon podvodnih eksplozija koja koristi strategiju prilagodljivog profinjenja mreže. Njihov pristup je jedinstven u smislu da se ne koristi model dvofaznog fluida. Plinska faza je predstavljena analitički unutar praćene granice te se koristi Jones-Wilkins-Lee (JWL) jednadžba stanja za proračun svojstava unutar mjehurića. Oni su ispitivali i duboke podvodne eksplozije i eksplozije u blizini čvrstih granica. U [36] su proučavali fenomen kolapsa mjehurića ispod ravne ploče koristeći dvofaznu CFD metodu. U [37] su proučavali viskozne efekte prisutne u oscilaciji mjehurića blizu nepropusnog zida. Simulacije su provedene kao osnosimetrične uz RANS model turbulencije metodom kontrolnih volumena. Za praćenje slobodne površine korištene su markirne čestice i krivulja trećeg reda. Simulacije podvodnih implozija (suprotan fenomen podvodne eksplozije, ali uz vrlo sličnu fiziku) mogu se naći u [38]. Koristili su dvofaznu metodu nepostojećeg fluida s točnim Riemannovim rješenjima. Ta približno konzervativna metoda dala je dobre rezultate koji se slažu s eksperimentalnim podacima.

U ovom poglavlju dan je pregled radova koji se tiču višefaznih kompresibilnih strujanja. U slijedećem poglavlju biti će prikazane osnovne jednadžbe mehanike kontinuuma odnosno višefaznog strujanja. Uz to će biti opisan matematički model korišten u ovom radu.

3. Matematički model

U prethodnom poglavlju dan je pregled radova koji se bave višefaznim kompresibilnim strujanjem. U ovom poglavlju bit će dane osnovne jednačbe mehanike kontinuuma i višefaznog strujanja. Također će bit prikazan matematički model implementiran u ovom radu.

3.1. Osnovne jednačbe mehanike fluida

Gibanje fluida opisano je parcijalnim diferencijalnim jednačbama. Osnovne jednačbe kompresibilnog, jednofaznog, viskoznog strujanja su jednačba kontinuiteta (3.1) i Navier-Stokesove jednačbe (3.2):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g} - \nabla p. \quad (3.2)$$

Članovi u jednačbi (3.2) nazivaju se s lijeva na desno:

- nestacionarni član - promjena vezana uz vrijeme;
- konvekcijski član - promjena vezana uz gibanje fluida;
- difuzijski član - bitno je napomenuto da vrijedi samo za Newtonovski fluid (tenzor naprezanja je linearno proporcionalan tenzoru brzine deformacije preko dinamičke viskoznost);
- član masene sile - gravitacijsko ubrzanje;
- član gradijenta tlaka;

Difuzijski član predstavlja devijatorski dio simetričnog tenzora naprezanja (ekvivalent trenju u mehanici) dok je gradijent tlaka normalni dio simetričnog tenzora naprezanja (invarijantan na rotaciju koordinatnog sustava).

Potrebno je napomenuti da se javlja problem zbog nelinearnosti konvekcijskog člana. Tijekom diskretizacije, konvekcijski član bi proizveo nelinearne članove u sustavu jednačbi. Kako bi se izbjegao taj problem, taj član se linearizira, a efekt nelinearnosti se razrješava iterativno.

3.1.1. Rubni uvjeti Navier-Stokesovih jednadžbi

Rubni uvjeti osiguravaju jedinstvenost rješenja sustava opisanog jednadžbama (3.1) i (3.2). Dva su osnovna tipa rubnih uvjeta iz kojih se mogu izvesti mnogobrojni različiti oblici rubnih uvjeta. Dirichletov rubni uvjet propisuje vrijednost varijable na granici domene dok von Neumannov rubni uvjet propisuje vrijednost nultog gradijenta na granici. Generalizirani von Neumannov uvjet propisuje proizvoljnu vrijednost gradijenta varijable u smjeru normale na granicu. Najčešća su četiri tipa granica: ulazna granica, izlazna granica, zid i ravnina simetrije. Ulazna granica fizikalno označava ulaz fluida u domenu, te je najčešće zadana s Dirichletovim rubnim uvjetom brzine te von Neumannovim uvjetom za tlak. Izlazna granica predstavlja izlaz fluida iz domene, te se na njoj najčešće postavlja von Neumannov rubni uvjet za brzinu i tlak. Zid predstavlja nepropusnu granicu, te je u viskoznom strujanju brzina jednaka nuli. Simetrija uvelike smanjuje vrijeme proračuna jer se domena nekog simetričnog strujanja može smanjiti dva puta.

3.2. Osnovne jednadžbe višefaznog strujanja

U ovom radu koristi se metoda "Volume of Fluid" (VOF). Ideja ovog modela je da opisuje strujanje dva fluida koji se ne miješaju kao strujanje jednog fluida. Zbog toga se uvodi funkcija volumnih udjela [3] koja prilikom rješavanja sustava predstavlja nepoznato skalarno polje koje se označuje s α_k pri čemu donji indeks "k" označuje pojedinu fazu i ima svojstvo:

$$\alpha_k = \begin{cases} 1 & \text{za k-tu fazu,} \\ 0 & \text{za drugu fazu.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Uz tako definirane volumne udjele, svojstva fluida se mogu izračunati prema (uz dvije faze):

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2, \quad (3.4)$$

$$\mu = \alpha_1 \mu_1 + (1 - \alpha_1) \mu_2. \quad (3.5)$$

Iz prethodnih jednadžbi je vidljivo da se svojstva jednog, novog kontinuuma, opisuju pomoću svojstva pojedine faze.

Za simulaciju višefaznih strujanja volumni udio je korišten kao pokazatelj udjela faza u svakoj točki strujanja. Volumni udio definiran je kao omjer volumena faze i kontrolnog volumena [3].

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V}. \quad (3.6)$$

Kako bi funkcije koje opisuju promjenu gustoće i dinamičke viskoznosti bile derivabilne po cijeloj domeni, ne smije biti diskontinuiteta u skalarnom polju α_k . To se rješava drugačijom definicijom funkcije α_k prema:

$$\alpha_k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1, & \text{ako točka } \mathbf{x} \text{ leži unutar prve faze,} \\ 0 < \alpha_k < 1, & \text{ako točka } \mathbf{x} \text{ leži unutar tankog prijelaznog sloja } \delta, \\ 0, & \text{ako točka } \mathbf{x} \text{ leži unutar druge faze.} \end{cases} \quad (3.7)$$

U višefaznim strujanjima jednadžba kontinuiteta postavlja se za svaku fazu zasebno; no, budući da ukupna masa mora biti očuvana, može se napisati zajednička jednadžba kontinuiteta za sve faze [39].

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \rho_k \alpha_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k \right) = 0. \quad (3.8)$$

Stoga jednadžba (3.8) predstavlja jednadžbu kontinuiteta i za tekuću i za plinovitu fazu, gdje ρ_k predstavlja gustoću, a α_k predstavlja volumni udio faze.

Kako model ne dozvoljava preklapanje faza, jednadžbe očuvanja količine gibanja za pojedine faze također mogu biti spojene u jednu što rezultira jednadžbom [39]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot (\sigma_{Ck}^D). \quad (3.9)$$

U gornjoj jednadžbi \mathbf{u} predstavlja vektor brzine prisutne faze, \mathbf{g} je gravitacijska konstanta, p je tlak i σ_{Ck}^D je devijatorski dio tenzora naprežanja koji uključuje viskoznost, turbulenciju, površinsku napetost itd.

3.3. Modificirane Navier-Stokesove jednadžbe

U ovom radu koristiti će se model koji koristi dvofazni kompresibilni pristup. Diferencijalne forme jednadžbi preuređene su na način pogodan za implementaciju metodom kontrolnih volumena gdje se sve varijable rješavaju u njihovim centrima. Takva formulacija razlikuje se od većine metoda za rješavanje kompresibilnih višefaznih strujanja [40].

Pretpostavka je da se faze ne miješaju u kratkom vremenskom periodu na malom području. To omogućava model jednadžbi za opis homogenog dvofaznog fluida: nepomiješan bez viskoznog sloja među fazama. Ta pretpostavka dovodi do smanjenog broja jednadžbi očuvanja mase i količine gibanja te se one svode na jednadžbe očuvanja za jednu fazu.

Derivacije različitih transportnih jednadžbi višefaznih fluida, koje se tretiraju kao homogene, mogu poprimiti različite forme, npr. vremenskim ili prostornim osrednjavanjem po kontrolnim volumenima na mikro-razini kako bi se izvele diferencijalne jednadžbe pojedinih veličina na makroskopskoj razini.

3.3.1. Jednadžbe očuvanja: konzervativna forma

Jednadžba kontinuiteta za pojedinu fazu k je:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}) = 0, \quad k = \{1, 2\}, \quad (3.10)$$

gdje su α_k , ρ_k , \mathbf{u} volumni udio, gustoća i brzina faze k , redom. Kod brzine je indeks izostavljen budući da homogeni model ima samo jedno polje brzine. Zajednička jednadžba za kontinuitet dobiva se zbrajanjem jednažbi kontinuiteta za pojedinu fazu k :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.11)$$

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2. \quad (3.12)$$

Volumni udjeli zadovoljavaju algebarsku jednadžbu:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (3.13)$$

Zajednička jednadžba za očuvanje količine gibanja za homogeni model je:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - (\nabla \mathbf{u}) \cdot \nabla \mu_{eff} - \mu_{eff} \Delta \mathbf{u} = -\nabla p_d - (\nabla \rho) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad (3.14)$$

gdje je $p_d = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ dinamički tlak, a efektivna viskoznost je osrednjena po volumenu prema izrazu $\mu_{eff} = 4(\alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2)/3$.

U podvodnim eksplozijama, promjene u plinskoj fazi uglavnom se smatraju izentropskim. Voda se tretira kao nekompresibilna ili neznatno kompresibilna. U slučaju ovog rješavača odabran je drugi slučaj te je uvedena izotermna jednadžba stanja ($T = c^2/\gamma R$) budući da je brzina zvuka konstantna. Odabrane jednadžbe stanja određuju gustoću faza kao funkciju tlaka. Zbog gore navedenih pretpostavki nije potrebno rješavati energetska jednadžbu [40].

3.3.2. Izentropska jednadžba stanja za plinsku fazu

Fluid u kojem su prisutni samo izentropski procesi modeliran je jednadžbom stanja:

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = a_c = \text{const.}, \quad (3.15)$$

gdje je γ omjer (konstantnih) specifičnih toplina, a a_c je izentropska konstanta. *Totalna derivacija* ρ u odnosu na tlak dana je kao:

$$\left(\frac{d\rho}{dp}\right)\Big|_s = \frac{1}{a_c\gamma} \left(\frac{p}{a_c}\right)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}. \quad (3.16)$$

3.3.3. Izotermalna jednadžba stanja za tekuću fazu

Brzina zvuka u fluidu dana je prema relaciji:

$$\left(\frac{d\rho}{dp}\right)\Big|_s = \frac{1}{c^2}, \quad (3.17)$$

gdje je c brzina zvuka. Pretpostavljajući konstantnu brzinu zvuka, integracija jednadžbe (3.17) daje:

$$\rho - \rho_0 = \psi(p - p_0), \quad \psi = \frac{1}{c^2}, \quad (3.18)$$

gdje se ρ_0 i p_0 pojavljuju kao konstante integracije, a predstavljaju referentne vrijednosti gustoće odnosno tlaka.

3.3.4. Jednadžbe očuvanja: nekonzervativna forma

Iz dosadašnjih razmatranja može se uvidjeti da postoje dvije nezavisne jednadžbe kontinuiteta (3.10), jedna jednadžba za očuvanje količine gibanja (3.14), dvije jednadžbe stanja (3.15), (3.18) te algebarska jednadžba koja se tiče volumnih udjela (3.13): ukupno tri diferencijalne jednadžbe i tri algebarske jednadžbe. Također postoji šest nepoznatih polja: $\alpha_1, \alpha_2, \rho_1, \rho_2, \mathbf{u}, p_d$. Potrebno je odabrati tri polja koja će se riješiti pomoću diferencijalnih jednadžbi, a ostala tri polja moguće je izračunati uz pomoć algebarskih jednadžbi.

Budući da su jednadžbe stanja dane preko tlaka, računa se polje tlaka te se ρ_1 i ρ_2 dobivaju algebarski. Jednadžba za očuvanje količine gibanja je očiti izbor za izračunavanje polja brzina. Moguće je izračunati volumni udio jedne faze pomoću diferencijalne jednadžbe, a druge pomoću algebarskog izraza, uz uvjet da svi volumni udjeli moraju imati vrijednosti u intervalu $[0, 1]$. Stoga, nepoznata polja su: $\alpha_1, p_d, \mathbf{u}$, a algebarski dobivena polja su: α_2, ρ_1, ρ_2 [40].

Jednadžba (3.14) rješava se za polje brzina. Jednadžbe (3.10) i (3.11) moraju se presložiti u formu koja je podložna za postupak rješavanja.

Za početak se u obzir uzima jednadžba kontinuiteta za fazu k , uzimajući u obzir i zavisnost gustoće faza o tlaku: $\rho_k = \rho_k(p)$. Jednadžba (3.10) proširuje se uz $k = 1$ u oblik:

$$\alpha_k \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho_k \right) + \alpha_k \rho_k \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho_k \left(\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_k \right) = 0. \quad (3.19)$$

Sljedeće se primjenjuje lančano pravilo deriviranja te se izrazi preslažu kako bi se dobilo:

$$\left(\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_k \right) = -\frac{\alpha_k}{\rho_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) - \alpha_k \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (3.20)$$

Potrebno je podsjetiti kako je jednadžba (3.11) dobivena zbrajajući jednadžbu (3.10) za sve faze. Slično, jednadžba (3.20) može se zbrojiti za sve faze kako bi se dobila jedna jednadžba kontinuiteta:

$$\left(\frac{\alpha_1}{\rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial p} + \frac{\alpha_2}{\rho_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial p} \right) \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.21)$$

Konačni izgled jednadžbe za volumni udio (3.20) je dobiven koristeći (3.21) kako bi se zamijenili izrazi na desnoj strani:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{u}) - \alpha_1 \nabla \cdot \mathbf{u} = \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{\rho_{1,p} \rho_2 - \rho_{2,p} \rho_1}{\alpha_1 \psi_1 \rho_2 + \alpha_2 \psi_2 \rho_1} \right) \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.22)$$

gdje je $\rho_{k,p} = \partial \rho_k / \partial p$. U jednadžbi (3.22) vrijednosti volumnog udjela α_1 ograničene su između 0 i 1. Ukoliko se koriste interpolacijske sheme drugog ili višeg reda točnosti koje daju oscilatorna rješenja, rezultati nisu prihvatljivi jer njihove vrijednosti premašuju gore spomenute granice. Sheme koje zadovoljavaju ovaj uvjet su prvog reda točnosti, no one uvode lažnu difuziju (poglavlje 3.2.), odnosno razvukle bi prijelazni sloj δ koji mora biti što tanji. Kako bi se smanjio prijelazni sloj uvodi se Wellerova shema kompresije [2]. Kompresija prijelaznog sloja ostvaruje se uvođenjem dodatnog kompresijskog člana s lijeve strane jednadžbe (3.22):

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}^r \alpha_1 (1 - \alpha_1)),$$

gdje \mathbf{u}^r predstavlja polje brzine koje je prikladno za kompresiju prijelaznog sloja. U kompresijskom članu javlja se nelinearnost. Dodatni član ima doprinos u prijelaznom sloju upravo zbog nelinearnog oblika $\alpha_1(1 - \alpha_1)$ koji poprima vrijednost nula ukoliko vrijednost α_1 nije između 0 i 1. Prednost koju daje dodatni član je mo-

gućnost korištenja jednostavih interpolacijskih shema, a da ne dođe do narušavanja ograničenosti, naravno uz prikladno odabrano polje brzine \mathbf{u}^r .

U ovom poglavlju prikazane su osnovne jednažbe mehanike kontinuuma i njihovo proširenje u obliku jednažbi koje opisuju višefazno strujanje. Također je prikazan matematički model koji je implemetiran u ovom radu. U slijedećem poglavlju će bit opisana diskretizacija jednažbi, kako standardne transportne jednažbe, tako i jednažbi implemetiranih u ovom radu. Biti će prikazana sprega jednažbi brzine i tlaka.

4. Diskretizacija metodom kontrolnih volumena

U prethodnom poglavlju dane su osnovne jednažbe višefaznog strujanja i matemtički model implemetiran u ovom radu. U ovom poglavlju će biti dana diskretizacija standardne transportne jednažbe i matemtičkog modela korištenog u ovom radu. Također će biti prikazana sprega jednažbi brzine i tlaka.

4.1. Diskretizacija

Pojam diskretizacije znači da se problem kontinuuma aproksimira s diskretnim operatorima. Metoda kontrolnih volumena i ostale, kao što je metoda konačnih elemenata, provode diskretizaciju prema sljedećoj shemi:

- **diskretizacija prostora:** dijeli prostornu domenu na elemente koje ju u potpunosti ispunjavaju;
- **vremenska diskretizacija:** za tranzijentne probleme, dijeli vremensku domenu u konačni broj vremenskih intervala, ili vremenskih trenutaka;
- **diskretizacija jednažbi:** iz osnovnih jednažbi koje karakteriziraju problem generira se sustav algebarskih jednažbi pomoću diskretnih vrijednosti koje su definirane na točno određenim lokacijama u domeni (npr. u središtu kontrolnog volumena).

4.2. Diskretizacija standardne transportne jednažbe

Kako je gore napomenuto, svrha diskretizacije je transformacija jedne ili više parcijalnih diferencijalnih jednažbi u odgovarajući sustav algebarskih jednažbi. Rješenje ovog sustava aproksimacija je rješenja originalnih jednažbi na određenim lokacijama u prostoru i vremenu. Općenita forma opće transportne jednažbe za bilo koju veličinu ϕ dana je kao:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot (\gamma\nabla\phi) + S_\phi(\phi), \quad (4.1)$$

u kojoj članovi redom predstavljaju: brzinu promjene po jedinici volumena (vremenska derivacija), promjenu ili transport uslijed konvekcije po jedinici volumena (konvekcijski član), transport uslijed difuzije (difuzijski član), te izvor odnosno ponor po jedinici volumena (izvorski član).

Diskretizacija jednadžbe (4.1) metodom kontrolnih volumena formulirana je integracijom po kontrolnom volumenu V_P i vremenu:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (\gamma \nabla \phi) dV + \int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right] dt. \quad (4.2)$$

Većina prostornih derivacija prevodi se u površinske integrale po površini S koja zatvara kontrolni volumen prema generalnoj formi Gaussovog teorema:

$$\int_V \nabla \otimes \phi dV = \int_S \mathbf{ds} \otimes \phi, \quad (4.3)$$

gdje je vektor \mathbf{ds} diferencijalni dio površine koj je usmjeren od kontrolnog volumena prema van.

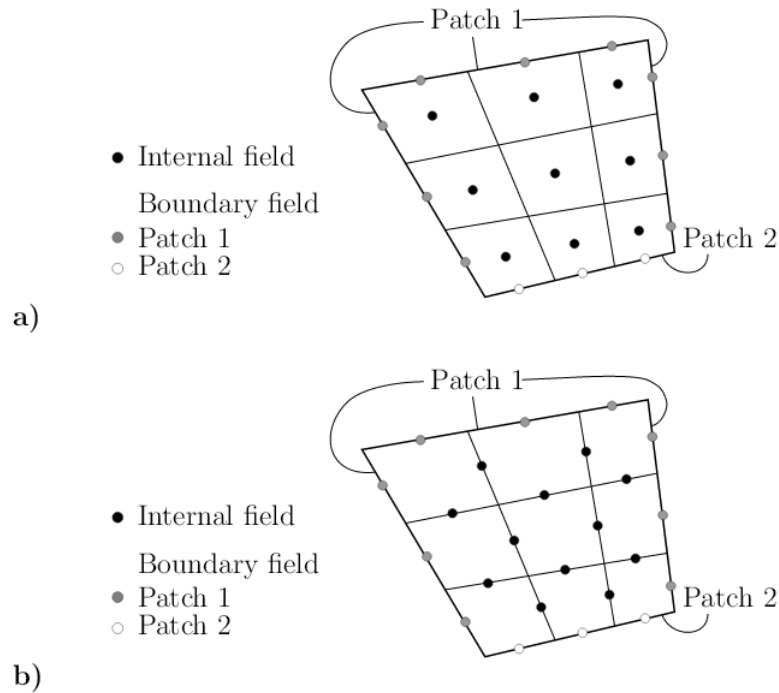
4.3. Pohrana i raspored varijabli

Prvi problem s diskretizacijom osnovnih jednadžbi je izbor lokacije gdje će varijable biti pohranjene. Postoji nekoliko alternativa od kojih su dvije uobičajeno korištene u metodi kontrolnih volumena prikazane na slici 4.1. U prvom slučaju varijable su pohranjene u središtima kontrolnih volumena i središtima stranica koje se nalaze na rubovima prostorne domene. U drugom slučaju varijable su pohranjene u središtima svih stranica.

Očiti je izbor pohrana svih zavisnih varijabli u središtima kontrolnih volumena te korištenje istih volumena za sve varijable. To se naziva "kolocirani" raspored. Kod "pomaknutog" rasporeda brzine su pohranjene u središtima stranica ili vrhovima, odvojeno od ostalih varijabli.

Kolocirani raspored ima velike prednosti: prvo, broj koeficijenata koji moraju biti izračunati je minimaliziran zbog činjenice da su sve jednadžbe diskretizirane koristeći isti volumen za sve varijable. Drugo, ima velike prednosti u kompleksnim domenama, posebice kada se javljaju diskontinuiteti na granicama ili su pak rubni uvjeti diskontinuirani.

Međutim, kolocirani raspored nije bio dugo u upotrebi zbog poteškoća sa spregom brzine i tlaka te pojave oscilacija u polju tlaka što se naziva problemom "šahovske ploče". Ukoliko se tlakovi i brzine pohranjuju na istim lokacijama, gore spome-



Slika 4.1: Raspored varijabli: a) u središtima volumena b) u središtima stranica [2].

nuti problem može uzrokovati pojavu neuniformnog polja tlaka kao uniformnog u Navier-Stokesovim jednadžbama [2].

4.4. Interpolacija na stranicama

Na slici 4.2 \mathbf{s} je vektor koji ima smjer normale stranice, a veličinu površine stranice, s P je označeno središte volumena. S N je označeno središte susjednog volumena, a vektor \mathbf{d} je udaljenost među njihovim središtima $\mathbf{d} = \mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P$.

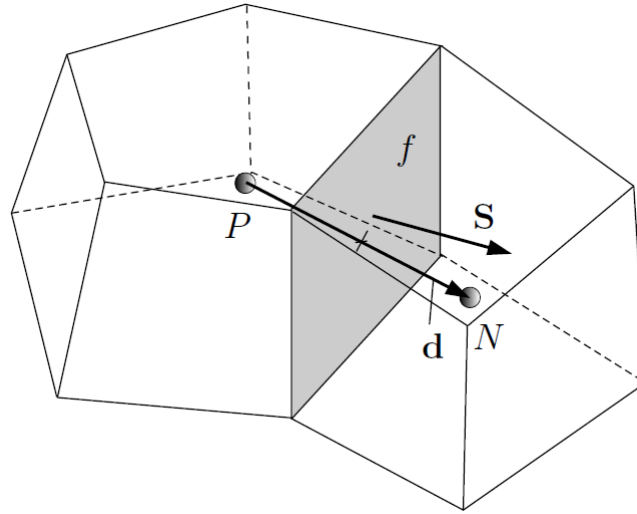
Interpolacija vrijednosti u središtima kontrolnih volumena na središta stranica je fundamentalna za metodu kontrolnih volumena.

Najčešće sheme interpolacije su [2]:

- **CD** (engl. "Central differencing") je drugog reda točnosti, no nije ograničena¹, odnosno može prouzrokovati oscilatorna rješenja:

$$\phi_{f(CD)} = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N, \quad (4.4)$$

¹Vrijednosti veličina poput gustoće ili volumnog udjela moraju ležati unutar određenih granica.



Slika 4.2: Parametri u metodi kontrolnih volumena [2].

gdje donji indeks "f" označuje veličinu u središtu stranice, a $f_x = \frac{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N|}{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N| + |\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_P|}$.

- **UD** (engl. "Upwind differencing") određuje ϕ_f prema smjeru gibanja fluida. Shema je određena prema:

$$\phi_{f(F,UD)} = \begin{cases} \phi_P & \text{za } F \geq 0 \\ \phi_N & \text{za } F < 0, \end{cases} \quad (4.5)$$

gdje je $F = \mathbf{s} \cdot (\rho \mathbf{u})_f$ maseni protok na promatranoj stranici. UD osigurava ograničenje rješenja, no prvog je reda točnosti. Može se pokazati da najveći zanemareni ostatak ove interpolacije podsjeća na difuzijski protok. Taj se efekt često naziva numerička difuzija. Ova vrsta greške posebno dolazi do izražaja u višedimenzionalnim problemima gdje se fluid giba pod proizvoljnim kutem s obzirom na mrežu. Brze prostorne promjene u skalarnim ili vektorskim poljima biti će razvučene i ublažene, te je potrebno koristiti finiju mrežu, pogotovo na mjestima gdje se očekuju veći gradijenti funkcija [41].

- **BD** (engl. "Blended differencing") sheme kombiniraju UD i CD s namjerom očuvanja ograničenja s prihvatljivom točnošću. One su linearne kombinacije između UD i CD:

$$\phi_{f(F,BD,\gamma)} = (1 - \gamma)\phi_{f(F,UD)} + \gamma\phi_{f(CD)} \quad (4.6)$$

Faktor stapanja $0 \leq \gamma \leq 1$ određuje koliko će numeričke difuzije biti uključeno. One se dijele u dvije glavne skupine: NVD sheme i TVD sheme (vidjeti [42], [43]).

4.5. Gradijent

Izraz za gradijent, $\nabla\phi$, može biti evaluiran na mnogo načina. Najčešće metode su [2]:

- **Gaussova integracija** koja daje vrijednosti gradijenta od ϕ u središtima kontrolnih volumena prema formuli:

$$\int_V \nabla\phi dV = \int_S \phi ds \approx \sum_f \mathbf{s}\phi_f. \quad (4.7)$$

- **Gradijent u smjeru normale na stranicu** koja je unutarnji produkt gradijenta $\nabla_f\phi$ i jediničnog normalnog vektora na stranicu \mathbf{n} , prema jednadžbi:

$$\nabla_f^\perp\phi = \mathbf{n} \cdot \nabla_f\phi = \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|}. \quad (4.8)$$

4.6. Diskretizacija nestacionarnog člana

Eulerova implicitna shema je bezuvjetno stabilna te je prvog reda točnosti. Ako se pretpostavi statička mreža i linearna varijacija veličine ϕ unutar vremenskog koraka dobiva se [2]:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV \approx \frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^o \phi_P^o}{\Delta t} V_P, \quad (4.9)$$

gdje gornji indeks "n" označuje vrijednost u središtu kontrolnog volumena u novom vremenskom trenutku, dok gornji indeks "o" vrijednost u starom vremenskom trenutku.

4.7. Diskretizacija konvekcijskog člana

Diskretizacija konvekcijskog člana $\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\phi)$ iz jednadžbe (4.1) vrši se integracijom po kontrolnom volumenu te njegovom pretvorbom u površinski integral pomoću Gaussovog teorema [2]:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\phi) dV = \int_S ds \cdot (\rho\mathbf{u}\phi) \approx \sum_f \mathbf{s} \cdot (\rho\mathbf{u})_f \phi_{f(F,S)} = \sum_f F\phi_{f(F,S)}, \quad (4.10)$$

gdje je $F = \mathbf{s} \cdot (\rho \mathbf{u})_f$ maseni protok kroz stranicu f . Vrijednost ϕ_f na stranici određuje se prema prethodno navedenim interpolacijskim shemama.

4.8. Diskretizacija difuzijskog člana

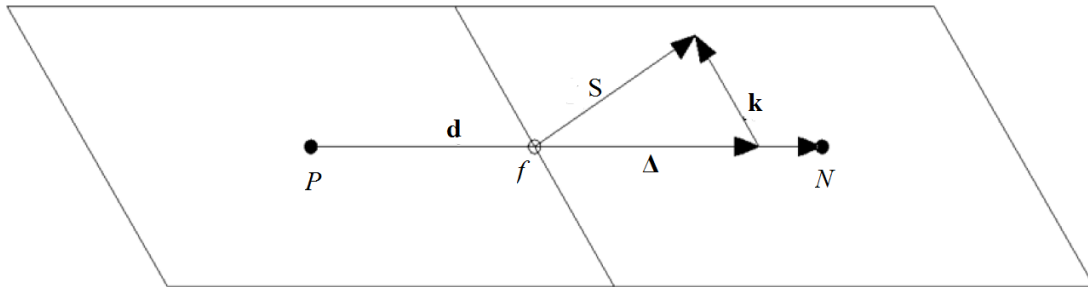
Diskretizacija difuzijskog člana $\nabla \cdot (\gamma \nabla \phi)$ iz jednadžbe (4.1) vrši se slično kao i za konveksijski član. Nakon integracije po kontrolnom volumenu te pretvorbom u površinski integral dobije se [2]:

$$\int_V \nabla \cdot (\gamma \nabla \phi) dV = \int_S d\mathbf{s} \cdot (\gamma \nabla \phi) \approx \sum_f \Gamma_f (\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi). \quad (4.11)$$

Gornja jednadžba točna je jedino ako je γ skalar. Na ortogonalnim mrežama, gradijent u smjeru normale na stranicu $\nabla_f \phi$ definiran je u podpoglavlju 2.2.3. i drugog je reda točnosti. No, na neortogonalnim mrežama, potrebno je uvesti novi korekcijski član kako bi se očuvao drugi red točnosti aproksimacije. Uvođenjem novog člana, potpuna aproksimacija gradijenta izgleda:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi = \underbrace{|\Delta| \nabla_f^\perp \phi}_{\text{ortogonalni doprinos}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f^o}_{\text{neortogonalna korekcija}}, \quad (4.12)$$

gdje su Δ i \mathbf{k} vektori koji trebaju biti određeni nakon provođenja korekcije uslijed



Slika 4.3: Korekcija zbog neortogonalnosti.

neortogonalnosti, slika 4.3. Vektor Δ može se odrediti pomoću izraza [42]

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{s}|. \quad (4.13)$$

Kako su vektori Δ i \mathbf{d} paralelni, ortogonalni doprinos u jednadžbi (4.12) uvrštavanjem izraza (4.13) postaje [42]:

$$|\Delta| \nabla_f^\perp \phi = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|}. \quad (4.14)$$

Za proračun člana koji služi za korekciju uslijed neortogonalnosti koriste se vrijednosti iz prethodnog vremenskog trenutka i linearna interpolacija [42]:

$$\mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f^o = \mathbf{k} \cdot (f_x \cdot (\nabla \phi)_f^o + (1 - f_x) \cdot (\nabla \phi)_f^o). \quad (4.15)$$

Jednadžba (4.12) se konačno može zapisati kao:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (f_x \cdot (\nabla \phi)_f^o + (1 - f_x) \cdot (\nabla \phi)_f^o), \quad (4.16)$$

gdje se vrijednosti gradijenta skalarnog polja u težištu kontrolnog volumena u prethodnom vremenskom koraku računaju pomoću Gaussovog teorema [42]:

$$(\nabla \phi)_f^o = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{s} \phi_f^o. \quad (4.17)$$

4.9. Diskretizacija izvorskog člana

Izvorski član iz jednadžbe (4.1) može se linearizirati u oblik [2]:

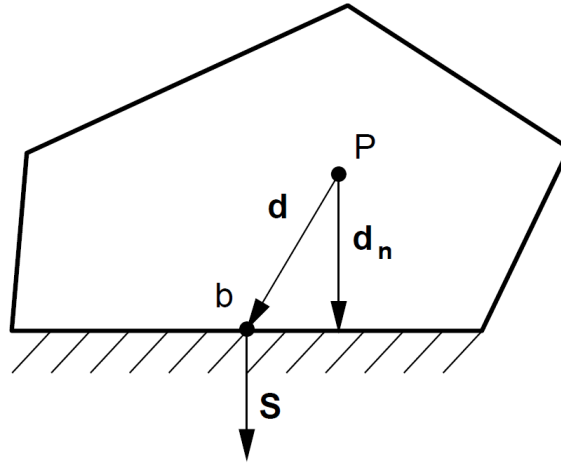
$$S_\phi(\phi) = \phi S_I + S_E, \quad (4.18)$$

gdje S_E i S_I mogu ovisiti o ϕ . Izraz se tada može integrirati po kontrolnom volumenu kako slijedi:

$$\int_V S_\phi(\phi) dV = S_I V_P \phi_P + S_E V_P. \quad (4.19)$$

4.10. Rubni uvjeti

Problem kontinuuma nije u potpunosti definiran ukoliko ne postoje rubni i početni uvjeti. Kao što je napomenuto ranije, postoje dva osnovna tipa rubnih uvjeta: Dirichletov i generalizirani von Neumannov.



Slika 4.4: Parametri u metodi kontrolnih volumena za volumene s granični stranicama [2].

Na slici 4.4 prikazani su parametri koje je potrebno objasniti za daljnju diskusiju. P označuje središte kontrolnog volumena. Jedna od stranica koincidira s granicom prostorne domene. Ta stranica je označena s b . Vektor između P i središta stranice b označen je s \mathbf{d} i njegova normala na istu stranicu s \mathbf{d}_n . Dalje se prikazuje implementacija osnovnih rubnih uvjeta uz oznaku u OpenFOAM-u [2]:

- **Fiksna vrijednost (Dirichletov uvjet)** Varijablu na granici označavamo s ϕ_B i stoga:

- kada diskretizacija traži određenu vrijednost na stranici, kao npr. u konveksijskom članu, radi se supstitucija $\phi_f = \phi_B$.
- U članovima gdje je potreban gradijent $\nabla_f \phi$, kao npr. u difuzijskom članu, on se računa preko vrijednosti na stranici i u središtu kontrolnog volumena prema:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi = |\mathbf{s}| \frac{\phi_b - \phi_P}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (4.20)$$

Ukoliko je ϕ_B konstantan duž stranice, ovaj rubni uvjet osigurava drugi red točnosti. Ukoliko ϕ_B varira duž stranice ili je mreža neortogonalna red točnosti je prvog reda. Naravno, može se vršiti korekcija kako je prikazano kod difuzijskog člana.

- **Fiksni gradijent (generalizirani von Neumannov uvjet)** Gradijent je određen u smjeru normale na stranicu kao $g_B = \nabla_f^\perp \phi$ i iz toga slijedi:

- Kada diskretizacija zahtijeva određenu vrijednost ϕ_f na stranici, vrijednost u središtu kontrolnog volumena se ekstrapolira na tu stranicu:

$$\phi_f = \phi_P + \mathbf{d}_n \cdot \nabla_f \phi = \phi_P + |\mathbf{d}_n| g_B. \quad (4.21)$$

- g_B može izravno biti supstituiran ukoliko diskretizacija zahtijeva gradijent na stranici:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi = |\mathbf{s}| g_B. \quad (4.22)$$

Ukoliko je g_B konstantan duž granice, diskretizacija uz ovaj rubni uvjet biti će drugog reda točnosti. Ukoliko varira ϕ_B duž granice ili je mreža neortogonalna red točnosti je prvi.

- **Nulti gradijent** Ovaj rubni uvjet isti je kao i fiksni gradijent, samo što je u ovom slučaju $g_B = 0$.

4.10.1. Fizički rubni uvjeti

Uobičajeni fizički tipovi rubova domene su [42]:

- **Ulazna granica.** Na ulazu je polje brzine zadano kao fiksna vrijednost, a rubni uvjet za tlak je dan kao nulti gradijent. Ostale veličine poput volumnog udjela također se zadaju kao fiksne vrijednosti.
- **Izlazna granica.** Rubni uvjeti na izlazu moraju biti tako zadani da je zadovoljena ukupna masena bilanca za cijelu domenu.

To je moguće izvesti na dva načina:

- distribucija brzine na granici je projicirana iz unutrašnjosti domene (prvi red kontrolnih volumena do granice). Te brzine su tada skalirane kako bi se zadovoljio kontinuitet. Ovaj pristup može dovesti do nestabilnosti ukoliko postoji povratni tok mase na izlaznoj granici. Rubni uvjet za tlak je ponovno postavljen kao nulti gradijent.
- Ovaj pristup ne zahtijeva distribuciju brzine na izlazu nego distribuciju tlaka. Tlak se zadaje kao fiksna vrijednost, a brzina je zadana kao nulti gradijent. Sveukupna masena bilanca garantirana je jednadžbom tlaka.

- Postoji izvedeni rubni uvjet koji se postavlja na granicu, a u OpenFOAM-u se naziva `inletOutlet` koji, ukoliko je smjer protoka u smjeru normale izlazne granice, pripisuje veličini nulti gradijent, a ukoliko je smjer obrnut normali pripisuje zadanu vrijednost veličini.
- **Simetrija.** Rubni uvjet na simetriji implicira da komponenta gradijenta okomita na stranicu mora biti jednaka nuli. Komponente paralelne sa simetrijom projicirane su na nju iz domene. Ukoliko je geometrija osnosimetrična kao npr. za isječak iz cilindra odnosno kugle, koristi se rubni uvjet koji se u OpenFOAM-u naziva `wedge`.
- **Nepropusni zid.** Brzina fluida na zidu je jednaka brzini zida što znači da se brzina zadaje kao fiksna vrijednost. Budući da je protok kroz zid jednak nuli, gradijent tlaka je nulti gradijent.

4.11. Vremenska diskretizacija

U prijašnjim poglavljima opisana je diskretizacija volumnih integrala u standardnoj transportnoj jednadžbi u integralnoj formi, jednadžba (4.2) [2]:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (\gamma \nabla \phi) dV + \int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right] dt. \quad (4.23)$$

Koristeći pojedine članove u diskretiziranom obliku i pretpostavljajući da se kontrolni volumeni ne mijenjaju s vremenom, jednadžba (4.2) se može zapisati:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\rho_P \frac{\phi_P^n - \phi_P^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{f(F,S)} \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f \gamma_f (\mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi) + S_I V_P \phi_P + S_E V_P \right] dt. \quad (4.24)$$

Varijacija veličine ϕ_P te njenih gradijenta se zanemaruje unutar vremenskog koraka. Unatoč tome, potrebno je napraviti izbor između načina na koji će se gore spomenute veličine vrijednovati u kontekstu novih i starih vrijednosti. Stoga se koriste:

- **Eulerova eksplicitna shema** koja koristi eksplicitnu diskretizaciju prostornih članova, odnosno koristi stare vrijednosti ϕ^o :

$$\rho_P \frac{\phi_P^n - \phi_P^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{f(F,S)}^o = \sum_f \gamma_f \mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi^o + S_I V_P \phi_P^o + S_E V_P. \quad (4.25)$$

Ona je prvog reda točnosti u vremenu i nestabilna je ukoliko je Courantov broj Co veći od 1. Courantov broj na stranici je definiran kao:

$$Co = \frac{\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{s}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{s}} \Delta t, \quad (4.26)$$

gdje je \mathbf{u}_f brzina strujanja. Kada se sustav rješava eksplicitno nije potrebno koristiti linearne rješavače.

- **Eulerova implicitna shema** koja koristi implicitnu diskretizaciju prostornih članova, odnosno koristi nove vrijednosti ϕ^n :

$$\rho_P \frac{\phi_P^n - \phi_P^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{f(F,S)}^n = \sum_f \gamma_f \mathbf{s} \cdot \nabla_f \phi^n + S_I V_P \phi_P^n + S_E V_P. \quad (4.27)$$

Ona je prvog reda točnosti u vremenu te garantira ograničenost rješenja i bezuvjetno je stabilna. No, treba napomenuti, kako bi se garantirala ograničenost, neortogonalna korekcija mora se računati eksplicitno.

U ovom radu koristi se Eulerova implicitna metoda (osim ako drugačije nije napomenuto).

4.12. Diskretizirani sustav linearnih jednadžbi

Procesi diskretizacije i linearizacije koji su provedeni u prijašnjem tekstu proizvode linearne algebarske jednadžbe za svaki kontrolni volumen (ukoliko se ne koristi eksplicitna shema). Točna forma linearnih jednadžbi ovisi o osnovnim jednažbama te o shemama diskretizacije, no može biti zapisana u generičkoj formi:

$$a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = b_P. \quad (4.28)$$

Vrijednost ϕ_P^n zavisi o susjednim volumenima, tako stvarajući sustav linearnih algebarskih jednadžbi s jednom jednadžbom (ili jednim redom matrice) za svaki volumen prostorne domene. Sustav algebarskih jednadžbi može se izraziti i u formi matrice:

$$[A][\phi] = [B], \quad (4.29)$$

gdje je $[A]$ rijetka kvadratna matrica s koeficijentima a_P na dijagonali i a_N izvan dijagonale. $[\phi]$ je vektor zavisne varijable dok je $[B]$ vektor izvora. To su vrijednosti definirane u središtima kontrolnih volumena. Matrica $[A]$ može se rastaviti na dva

dijela. Jedan dio su koeficijenti na dijagonali $[D]$, a drugi dio su koeficijenti izvan dijagonale $[L] + [U]$, tako da:

$$[A] = [D] + [L] + [U], \quad (4.30)$$

gdje $[L]$ označuje dio koeficijenata ispod dijagonale, a $[U]$ dio iznad dijagonale. Općenito, svaki član osnovnih jednadžbi doprinosi koeficijentima matrice $[A]$ kao i vektoru izvora $[B]$. Članovi koji su računati implicitno uvijek doprinose koeficijentima matrice i mogu doprinijeti vektoru desne strane. Eksplicitni članovi, s druge strane doprinose samo vektoru desne strane.

4.13. Svojstva diskretizacijskih shema

Kako bi numerički rezultati bili što bliži "egzaktnim" rješenjima transportne jednadžbe broj kontrolnih volumena trebao bi biti što je moguće veći. U realnosti, broj kontrolnih volumena bit će puno manji te će numerički rezultati biti fizikalni jedino ako diskretizacijske sheme sadrže osnovna svojstva. Najvažnija su [43]:

- konzervativnost,
- ograničenost,
- transportivnost.

4.13.1. Konzervativnost

Integracija difuzijskog ili konvekcijskog člana preko određenog broja kontrolnih volumena daje sustav diskretiziranih konzervativnih jednadžbi koje uključuju protoke transportiranog svojstva ϕ kroz stranice kontrolnih volumena. Kako bi se osigurala konzervacija svojstva ϕ u cijeloj računalnoj domeni, protok tog svojstva koji napušta kontrolni volumen kroz određenu stranicu mora biti jednak protoku koji ulazi u susjedni volumen kroz tu istu stranicu. Kako bi se to postiglo, protok kroz istu stranicu koju dijele dva susjedna volumena mora biti izražen istom jednadžbom.

4.13.2. Ograničenost

Diskretizirane jednadžbe u svakoj točki računalne domene predstavljaju sustav algebarskih jednadžbi koje se moraju riješiti. Uobičajeno je koristiti iterativne metode kako bi se riješio veliki sustav jednažbi. Ove metode koriste početnu, pretpostavljenu vrijednost varijable ϕ te se ona uzastopno ponovno obnavlja dok se ne

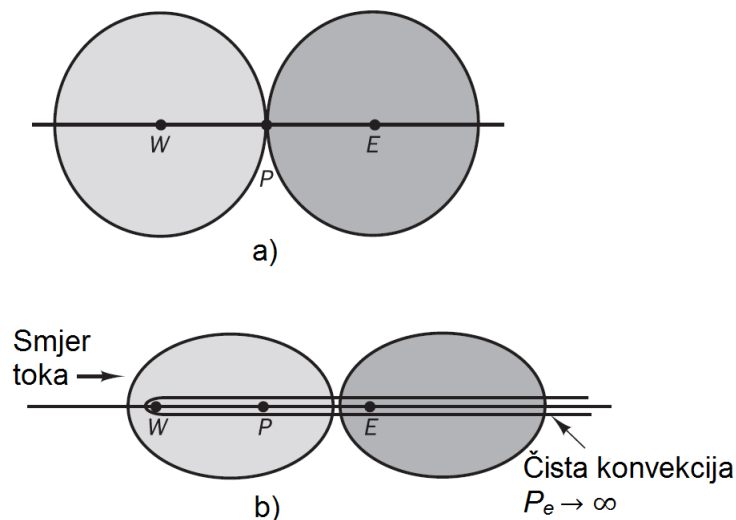
postigne konvergencija rješenja. Dovoljan uvjet da se postigne konvergencija može se izraziti pomoću koeficijenata diskretiziranih jednažbi:

$$\frac{\sum |a_N|}{|a'_P|} \begin{cases} \leq 1 & \text{u svim točkama,} \\ < 1 & \text{barem u jednoj točki.} \end{cases} \quad (4.31)$$

Ovdje $|a'_P|$ označuje ukupni koeficijent za jednažbu za vrijednost ϕ_P u središtu kontrolnog volumena P (odnosno $a_P - S_I$). Suma u brojniku označuje zbroj svih koeficijenata u susjednim središtima. Ukoliko diskretizacijske sheme proizvedu koeficijente koje zadovoljavaju gornji kriterij, u rezultirajućoj matrici koeficijenti na dijagonali su dominantni. Kako bi se sačuvala dijagonalna dominantnost linearizacija izvorskog člana mora osigurati negativni iznos S_I . U tom slučaju će izraz $-S_I$ biti pozitivan i zbrajat će se s a_P .

Ograničenost rješenja znači da se, u odsustvu izvora, vrijednosti varijable ϕ unutar računalne domene uvijek kreću između vrijednosti zadanih rubnim uvjetima. Još jedan od važnijih zahtjeva za ograničenost rješenja je taj da predznak svih koeficijenata diskretiziranih jednažbi bude jednak (obično da su svi pozitivni). Fizikalno to znači da povećanje varijable ϕ u jednoj točki mora rezultirati povećanjem iste veličine u susjednim točkama. Ukoliko to nije zadovoljeno, postoji mogućnost da rješenje ne konvergira ili oscilira.

4.13.3. Transportivnost



Slika 4.5: a) čista konvekcija; b) difuzija i konvekcija [8].

Transportivnost toka fluida može se ilustrirati promatrajući efekt u točki P iz-

među dvaju konstantnih izvora veličine ϕ označenih s W i E kako je prikazano na slici 4.5. Najprije je potrebno definirati bezdimenzijski Pecletov broj kao mjeru odnosa snaga konvekcije i difuzije:

$$P_e = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\gamma/\delta x}, \quad (4.32)$$

gdje je δx karakteristična duljina (duljina volumena).

U slučaju čiste difuzije ($P_e \rightarrow 0$), a konture veličine ϕ su koncentrične kružnice oko izvora budući da proces difuzije ima tendenciju jednakog širenja u svim smjerovima. Na slici 4.5. je vidljivo da su uvjeti u točki P pod utjecajem oba izvora. Kako se P_e povećava konture mijenjaju svoj oblik iz kružnog u eliptični te su usmjerene u smjeru toka, slika 4.5. U slučaju čiste konvekcije ($P_e \rightarrow \infty$) eliptične konture su u potpunosti izdužene u smjeru toka. U tom slučaju, uvjeti u P su u potpunosti određeni izvorom u W , a izvor E uopće nema utjecaja. Budući da nema difuzije, može se napisati da je $\phi_P = \phi_W$. Kada bi tok bio u obrnutom smjeru potpuni utjecaj bi bio od strane E . Vrlo je važno da je odnos između smjera toka, utjecaja pojedinog izvora i veličine Pecletovog broja, što se naziva transportivnost, obuhvaćen diskretizacijskom shemom.

4.14. Diskretizacija modificiranih Navier-Stokesovih jednadžbi

U ovom podpoglavlju bit će prikazani detalji diskretizacije jednadžbe za brzinu (3.14), tlak (3.21) i volumni udio (3.22). Potom će biti opisana sprega brzine i tlaka pomoću PISO algoritma. Na kraju je prikazan ukupan algoritam rješavanja koji se naziva PIMPLE te su opisani razlozi za njegovu primjenu. Koristi se kolocirana metoda kontrolnih volumena koja je implementirana u OpenFOAM-u.

Odvojeni algoritam koji spada u projekcijske metode podsjeća u mnogome na PISO algoritam; glavna razlika je tome što se rješava jednadžba za tlak (4.39), a ne jednadžba za korekciju tlaka. Korišteni su gornji indeksi $\{^n, ^o, ^*\}$ kako bi se označili trenutna vrijednost, vrijednost iz prijašnjeg vremenskog trenutka odnosno vrijednost iz prijašnje iteracije. Vremenske derivacije bit će aproksimirane Eulerovom implicitnom shemom.

4.14.1. Jednadžba za brzinu

Linearizirana jednadžba za brzinu je [40]:

$$\frac{\rho^* \mathbf{u}^n - \rho^o \mathbf{u}^o}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho^* \mathbf{u}^* \otimes \mathbf{u}^n) - (\nabla \mathbf{u}^*) \nabla \mu_{eff} - \nabla \cdot \mu_{eff} \nabla \mathbf{u}^n = -\nabla p_d^* - (\nabla \rho^*) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad (4.33)$$

koja dolazi iz (3.14) te se rješava za brzinu \mathbf{u}^n . Kada se primjene diskretizacijske sheme jednadžba (4.33) poprima oblik:

$$\rho_P \frac{\mathbf{u}_P^n}{\Delta t} V_P + \sum_f F_f^* \mathbf{u}_{f(F,S)}^n - \sum_f \mu_{eff}^f |\Delta| \frac{\mathbf{u}_N^n - \mathbf{u}_P^n}{|\mathbf{d}|} = \mathbf{S}_u - \nabla p_d^*, \quad (4.34)$$

gdje su sa \mathbf{S}_u označeni poznati izvorski članovi:

$$\mathbf{S}_u = \rho_P \frac{\mathbf{u}_P^o}{\Delta t} V_P + \left(\sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^* \right) \cdot \left(\sum_f \mathbf{s} \cdot \mu_{eff}^f \right) - (\nabla \rho^*) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} + \sum_f \mu_{eff}^f \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f^o. \quad (4.35)$$

Zadnji član u jednadžbi (4.34) i član koji sadrži ρ^* u jednadžbi (4.35) diskretiziraju se kao i difuzijski član što znači da se uz ortogonalnu komponentu dodaje i korekcija uslijed neortogonalnosti ukoliko je potrebno. Gradijent u zadnjem članu jednadžbe (4.35) diskretizira se pomoću Gaussovog teorema.

Koristeći projekcijski korak, brzina se može zapisati kao:

$$\mathbf{u}_P^n = \mathbf{A}_P^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{u}^*) - \mathbf{A}_P^{-1} (\nabla \rho^*) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{A}_P^{-1} \nabla_f p_d^*. \quad (4.36)$$

Grupirajući prva dva izraza u gornjoj jednadžbi na desnoj strani kao $\tilde{\mathbf{u}}^*$ brzina se može izraziti kao:

$$\mathbf{u}^n = \tilde{\mathbf{u}}^* - \mathbf{A}_P^{-1} \nabla p_d^*, \quad (4.37)$$

gdje je:

$$\tilde{\mathbf{u}}^* = \mathbf{A}_P^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{u}^*) - \mathbf{A}_P^{-1} (\nabla \rho^*) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \quad (4.38)$$

4.14.2. Jednadžba za tlak

Jednadžba (3.21) je linearizirana prema [40]:

$$\left(\frac{\alpha_1^* \psi_1^*}{\rho_1^*} + \frac{\alpha_2^* \psi_2^*}{\rho_2^*} \right) \left(\frac{p_d^n - p_d^o}{\Delta t} + \nabla \cdot (p_d^n \mathbf{u}^*) - p_d^n \nabla \cdot \mathbf{u}^* + \lambda \right) + \nabla \cdot \mathbf{u}^n = 0. \quad (4.39)$$

Kada se primjene diskretizacijske sheme jednadžba (4.39) poprima oblik:

$$\left(\frac{\alpha_1^* \psi_1^*}{\rho_1^*} + \frac{\alpha_2^* \psi_2^*}{\rho_2^*} \right) \left(\frac{p_{dP}^n - p_{dP}^o}{\Delta t} V_P + \sum_f \mathbf{s} \cdot p_{df}^n \mathbf{u}_f^* - p_{dP}^n \sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^* + \lambda \right) + \sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^n = 0, \quad (4.40)$$

gdje je $\psi_k = \partial \rho_k / \partial p$, a izvorski član je dan kao:

$$\lambda = \frac{(\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - (\rho^o \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})}{\Delta t} + \nabla \cdot ((\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u}^*) - (\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (4.41)$$

odnosno kada se izvrši potpuna diskretizacija:

$$\lambda = \frac{(\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})_P - (\rho^o \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})_P}{\Delta t} V_P + \sum_f \mathbf{s} \cdot (\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})_f \mathbf{u}_f^* - (\rho^* \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^*. \quad (4.42)$$

Član \mathbf{u}^n zamijenjen je izrazom iz (4.37). Odnosno, koristi se:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^n = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^* - \nabla \cdot (\mathbf{A}_P^{-1} \nabla p_d^n), \quad (4.43)$$

te kada se diskretizira:

$$\sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^n = \sum_f \mathbf{s} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_f^* - \nabla \cdot (\mathbf{A}_P^{-1} \nabla p_d^n), \quad (4.44)$$

gdje se zadnji član diskretizira kao difuzijski član u Navier-Stokesovim jednadžbama. Izraz (4.43) omogućuje implicitno rješavanje p_d^n .

4.14.3. Jednadžba za volumni udio

Ukoliko se jednadžba za volumni udio rješava nakon što se riješe jednadžbe za tlak i brzinu, može se iskoristiti \mathbf{u}^n i p^n . Linearizirani oblik jednadžbe je [40]:

$$\frac{\alpha_1^n - \alpha_1^o}{\Delta t} + \nabla \cdot (\alpha_1^n \mathbf{u}^n) - \alpha_1^n \nabla \cdot \mathbf{u}^n + \nabla \cdot (\mathbf{u}^r \alpha_1^n (1 - \alpha_1^o)) = \alpha_1^n (1 - \alpha_1^*) (\alpha_{src}), \quad (4.45)$$

Jednadžba (4.45) se rješava implicitno za α_1^n . Izvorski član (α_{src}) dan je kao:

$$(\alpha_{src}) = \left(\frac{\psi_2^n}{\rho_2^n} - \frac{\psi_1^n}{\rho_1^n} \right) (p^n + \nabla \cdot (p^n \mathbf{u}^n) - p^n \nabla \cdot \mathbf{u}^n). \quad (4.46)$$

U gornjim jednadžbama pojavljuju se nestacionarni, konveksijski i izvorski članovi. Diskretizacija tih članova provodi se kao što je to bilo prikazano u prethodnim poglavljima.

4.14.4. Diskretizacija kompresijskog člana u jednadžbi za volumni udio

Diskretizacija započinje integracijom po volumenu:

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{u}^r \alpha_1^n (1 - \alpha_1^o)) dV = \int_S d\mathbf{s} \cdot (\mathbf{u}^r \alpha_1^n (1 - \alpha_1^o)) = \sum_f \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^r \alpha_1^{fn} (1 - \alpha_1^{fo}) = \sum_f F^{rb} \alpha_1^{fn}. \quad (4.47)$$

U jednadžbi (4.47) uvedena je supstitucija:

$$F^{rb} = \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}_f^r (1 - \alpha_1^{fo}) = F^r (1 - \alpha_1^{fo}), \quad (4.48)$$

gdje se koristi vrijednost $(1 - \alpha_1^{fo})$ iz starog vremenskog koraka ili iteracije zbog linearizacije. Polje brzine \mathbf{u}^r se određuje prema najvećoj brzini u prijelaznom sloju [2]. Budući da se kompresija mora odvijati u smjeru okomitom na prijelazni sloj, maksimalna komponenta brzine množi se s vektorom normale na prijelazni sloj. Koristi se slijedeći izraz:

$$F^r = K_c \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}_f \max \left(\frac{F}{|\mathbf{s}_f|} \right), \quad (4.49)$$

gdje je K_c parametar koji određuje jačinu kompresije prijelaznog sloja. $\hat{\mathbf{n}}$ je jedinični vektor normale. Kako se mogu javiti veliki gradijenti u prijelaznom sloju, potrebno je izgladiti funkciju kako bi se vektor normale mogao odrediti što bolje. O načinu glađenja funkcije vidjeti [2].

4.14.5. Sprega brzine i tlaka

Sustav jednadžbi koji se rješavasastoji se od jednadžbi (4.37) i (4.39):

$$\mathbf{u}^n = \tilde{\mathbf{u}}^* - \mathbf{A}_P^{-1} \nabla_f p_d^n;$$

$$\left(\frac{\alpha_1^* \psi_1^*}{\rho_1^*} + \frac{\alpha_2^* \psi_2^*}{\rho_2^*} \right) \left(\frac{p_d^n - p_d^o}{\Delta t} + \nabla \cdot (p_d^n \mathbf{u}^*) - p_d^n \nabla \cdot \mathbf{u}^* + \lambda \right) + \nabla \cdot \mathbf{u}^n = 0.$$

U ovom podpoglavlju bit će opisan PISO algoritam koji koristi odvojeni algoritam rješavanja sustava. PISO se temelji na iterativnom rješavanju linearnog sustava jednadžbi. Postupak se ponavlja dok se ne zadovolje jednadžba kontinuiteta i jednadžba očuvanja količine gibanja.

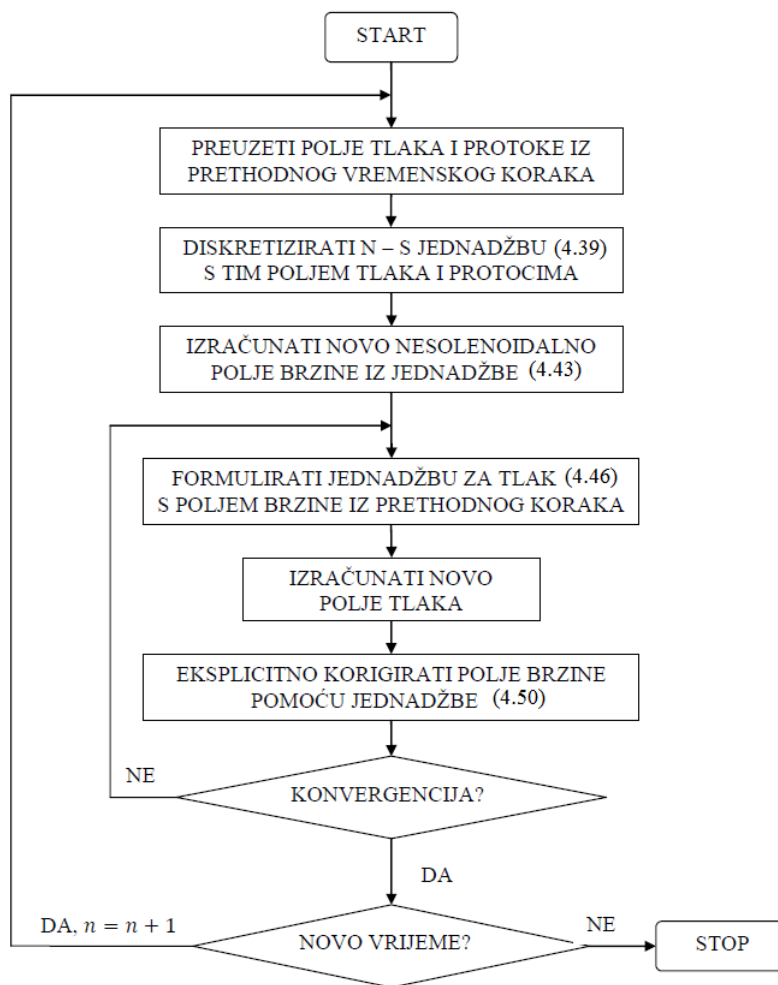
Ime PISO je kratica, a puni naziv na engleskom jeziku je "Pressure Implicit with

Splitting of Operators“ [43]. Koraci ovog algoritma su slijedeći:

- Prvo se rješava sustav lineariziranih jednadžbi koje predstavljaju modificirane Navier-Stokesove jednadžbe, jednadžba (4.37). Time se dobije polje brzine. Kako bi te jednadžbe bile rješive potrebno je polje tlaka koje nije poznato pa se koristi polje tlaka iz prethodnog vremenskog koraka (ili iz početnih uvjeta). Također je potrebno linearizirati konveksijski član i stoga se uzimaju poznati protoci iz prošlog vremenskog koraka (ili iteracije). Nakon rješavanja sustava dobije se aproksimacija novog polja brzine koje nije solenoidalno. Ovaj korak se zove prediktor količine gibanja (engleski "momentum predictor“).
- S novim poljem brzina moguće je definirati operator (\mathbf{u}) što omogućava rješavanje jednadžbe (4.39) za dobivanje tlaka. Ovdje je potrebno napomenuti da se u slučaju ovog rješavača ne rješava jednadžba za korekciju tlaka (vidjeti [42]) već jednadžba za dobivanje "ukupnog" polja tlaka.
- Sada se mogu izračunati novi maseni protoci F_f koji su konzervativni (zadovoljavaju jednadžbu kontinuiteta). Ti protoci su konzistentni s novim poljem tlaka. No, sada je potrebno ponovno korigirati polje brzine budući da postoji novo polje tlaka. Ta korekcija provodi se eksplicitno pomoću jednadžbe (4.43).

Eksplicitna korekcija brzine provodi se na temelju razlike između starih i novih članova jednadžbe (4.43). Prvi član nosi utjecaj koji je proporcionalan operatoru $\mathbf{H}(\mathbf{u})$, što predstavlja utjecaj korekcije brzina u susjednim kontrolnim volumenima. Drugi član je korekcija uslijed utjecaja novog gradijenta tlaka. Budući da se polje brzine korigira eksplicitno, prvi član se u potpunosti zanemaruje. Tada ostaje samo gradijent tlaka kao utjecajni član što, naravno, nije točno. Stoga je potrebno korigirati operator $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ s eksplicitno korigiranim brzinama, ponovno riješiti jednadžbu tlaka, te ponavljati taj postupak do konvergencije rješenja. Dakle, PISO algoritam se sastoji od implicitnog koraka predikcije količine gibanja (proračun nesolenoidalnog polja brzine s tlakom i protocima iz prošlog vremenskog koraka), te niza rješenja jednadžbe za tlak i eksplicitnih korekcija brzine.

Potrebno je napomenuti da su, nakon rješavanja jednadžbi tlaka, dostupni novi konzervativni protoci. Pomoću njih je moguće korigirati koeficijente u operatoru $\mathbf{H}(\mathbf{u})$. To se u praksi ne radi jer se smatra da je sprema uslijed nelinearnosti manja od sprege brzine i tlaka [42]. To je posebno vidljivo kod malih vremenskih koraka gdje se brzine između uzastopnih koraka malo razlikuju. Stoga se koeficijenti u operatoru $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ vezani za protoke drže konstantnim kroz cijeli niz korekcija brzine, te se mijenjaju samo u slijedećem vremenskom koraku. Na slici 4.6 je prikazan dijagram toka PISO algoritma.



Slika 4.6: Dijagram toka PISO algoritma

4.14.6. Konačni algoritam rješavanja

Prije nego što se prikaže konačni algoritam potrebno je napomenuti da je konvekcijski član u Navier-Stokesovoj jednadžbi problematičan zbog svoje nelinearnosti. Budući da PISO algoritam ne razrješava nelinearnosti potrebne su višestruke vanjske korekcije kako bi se to riješilo. Višestruke vanjske korekcije potrebne su i radi dobivanja novih i boljih vrijednosti gustoća s kojima se ulazi u novi vremenski korak.

Postupak linearizacije omogućuje nam zasebno rješavanje pojedinih jednadžbi s mogućnošću višestrukih vanjskih korekcijskih ciklusa po jednom vremenskom koraku kako bi se polja pojedinih rješenja varijabli spregnula s ostalim što bolje. Algoritam koji sadrži više vanjskih korektora naziva se PIMPLE algoritam. Unutar svakog vanjskog korektora implementiran je PISO algoritam. Na kraju svakog vanjskog korektora računa se α_1 te se nakon toga određuje gustoća s kojom se ulazi u slijedeći

vanjski korektor. Tipičan broj vanjskih korektora je 4 ili 6, no potrebno je pratiti vrijednosti reziduala rješenja kako bi se odredio točan broj.

Sveukupni algoritam [40]:

Za svaki vremenski korak, napravi

Za svaki vanjski korektor, napravi:

1. riješi prediktor brzine,
2. izračunaj $\tilde{\mathbf{u}}^*$ pomoću (4.38),
3. riješi (4.39) za p_d^n ,
4. podrelaksiraj tlak
5. izračunaj $p = p_d + \rho \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$,
6. evaluiraj jednadžbe stanja,
7. izračunaj α^n iz (4.45),
8. namjesti gustoće mješavine.

Završi ciklus vanjskih korekcija

Završi vremenski korak

U ovom poglavlju prikazana je diskretizacija standardne transportne jednadžbe te diskretizacija matematičkog modela korištenog u ovom radu. Također je opisana sprega jednadžbi brzine i tlaka. U slijedećem poglavlju bit će prikazani validacijski slučajevi koji uključuju: duboku eksploziju, eksploziju pod krutom pločom i eksploziju pod slobodnom površinom.

5. Validacijski slučajevi

U prethodnom poglavlju dana je diskretizacija standardne transportne jednadžbe i jednadžbi matematičkog modela implemetiranog u ovom radu uz opis sprege jednadžbi brzine i tlaka. U ovom poglavlju biti će prikazana izvedba matematičkog modela dinamike sferičnog mjehurića. Također je dana teorija koja opisuje podvodne eksplozije. Na kraju su predloženi rezultati validacijskih slučajeva.

Za sve simulacije korišten je programski paket OpenFOAM. Ovim programom moguće je riješiti probleme vezane uz dinamiku fluida uz modeliranje kemijskih reakcija, turbulencije i prijenosa topline. Također je moguće rješavanje problema nelinearne dinamike elastičnih tijela i elektromagnetizma. U sebi dodatno sadržava alate za generiranje proračunskih mreža, a za analizu rezultata koristi program ParaView.

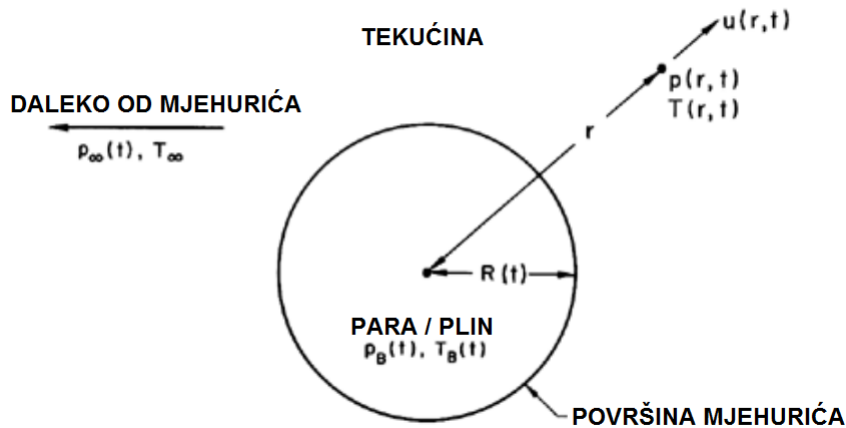
5.1. Dinamika sferičnog mjehurića

Lord Rayleigh prvi je istraživao kavitacijske mjehuriće te je u konačnici postavio model koji je danas poznat pod imenom Rayleighov model [44]. Rayleighov model pojednostavljena je verzija Navier-Stokesovih jednadžbi u radijalnom smjeru pretpostavljajući formaciju i kolapsiranje sferičnog mjehurića u beskonačnom mediju [45]. Rayleigh-Plessetova jednadžba je Rayleighov model u koju su uključeni izrazi za površinsku napetost, viskoznost tekućine te sastav plinova unutar mjehurića. Usprkos jednostavnosti, Rayleigh-Plessetov model dobro predviđa većinu slučajeva s oscilirajućim mjehurićima [44].

5.1.1. Izvod Rayleigh-Plessetove jednadžbe

Uzmimo u obzir sferični mjehurić radijusa, $R(t)$ (gdje je t vrijeme), u beskonačnoj domeni tekućine čiji su temperatura i tlak okolo mjehurića označeni s T_∞ i $p_\infty(t)$. Pretpostavlja se da je T_∞ konstantna budući da su gradijenti temperature eliminirani *a priori* te se uniformno grijanje tekućine uslijed unutarnjih toplinskih izvora i radijacije zanemaruje. S druge strane, pretpostavljeno je da je vrijednost tlaka $p_\infty(t)$, poznata (moguće i kontrolirana) što regulira nastajanje ili kolaps mjehurića [45].

Iako kompresibilnost tekućine može imati važnu ulogu u kontekstu kolapsa mjehurića, pretpostavlja se da je gustoća tekućine, ρ_L , konstantna. Nadalje, dinamička viskoznost, μ_L , smatra se konstantnom i uniformnom. Također je pretpostavljen homogeni sastav plinova unutar mjehurića te se iznosi temperature i tlaka, $T_B(t)$ i $p_B(t)$, unutar mjehurića smatraju uniformnima [45]. Radijus mjehurića, $R(t)$, biti



Slika 5.1: Shema sferičnog mjehurića u beskonačnom fluidu [11].

će rezultat ove analize. Kao što je prikazano na slici 5.1. radijalna pozicija unutar tekućine označena je udaljenošću, r , od centra mjehurića. Tlak, $p(r, t)$, radijalna brzina od centra prema van, $u(r, t)$ i temperatura, $T(r, t)$, označeni su također kako je prikazano na slici 5.1. Očuvanje mase zahtjeva:

$$u(r, t) = \frac{F(t)}{r^2}, \quad (5.1)$$

gdje je $F(t)$ ovisi o $R(t)$ preko kinematičkog rubnog uvjeta na površini mjehurića. U idealnom slučaju nepostojećeg transporta mase kroz granicu dvaju fluida vrijedi $u(R, t) = dR/dt$ i stoga:

$$F(t) = R^2 \frac{dR}{dt}. \quad (5.2)$$

Jednadžba (5.2) zadovoljavajuća je aproksimacija i uslijed pojave kondenzacije ili isparavanja na granici dvaju fluida. Za demonstraciju, potrebno je zamisliti mjehurić pare [45]. Volumni protok pare u procesu isparavanja mora biti jednak brzini rasta mjehurića, $4\pi R^2 dR/dt$, i stoga maseni protok pare u procesu isparavanja mora biti $\rho_V(T_B) 4\pi R^2 dR/dt$ gdje je $\rho_V(T_B)$ gustoća zasićene pare pri temperaturi unutar mjehurića, T_B . To, s druge strane, mora biti jednako masenom protoku nadolazeće tekućine čiji je smjer suprotan širenju mjehurića i stoga je njena brzina dana izrazom

$\rho_V(T_B)dR/dt/\rho_L$. Iz toga slijedi:

$$u(R, t) = \frac{dR}{dt} - \frac{\rho_V(T_B)}{\rho_L} \frac{dR}{dt} = \left[1 - \frac{\rho_V(T_B)}{\rho_L} \right] \frac{dR}{dt} \quad (5.3)$$

i

$$F(t) = \left[1 - \frac{\rho_V(T_B)}{\rho_L} \right] R^2 \frac{dR}{dt}. \quad (5.4)$$

U mnogim praktičnim slučajevima $\rho_V(T_B) \ll \rho_L$ i stoga se aproksimacijska forma jednadžbe (5.2) može smatrati adekvatnom.

Pretpostavljajući Newtonovski fluid, Navier-Stokesova jednadžba gibanja u radijalnom smjeru glasi:

$$\frac{-1}{\rho_L} \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial r} - \nu_L \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2u}{r^2} \right]. \quad (5.5)$$

Uvrštavanjem $u = F(t)/r^2$ dobije se:

$$\frac{-1}{\rho_L} \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{dF}{dt} - \frac{2F^2}{r^2}. \quad (5.6)$$

Primjećujemo da su viskozni članovi jednadžbe nestali; jedini doprinos viskoznosti u Rayleigh-Plesset jednadžbi dolazi od rubnog uvjeta na površini mjehurića [45]. Jednadžbu (5.6) možemo integrirati te se dobije:

$$\frac{p - p_\infty}{\rho_L} = \frac{1}{r} \frac{dF}{dt} - \frac{1}{2} \frac{F^2}{r^4}, \quad (5.7)$$

poslije primjene uvjeta $p \rightarrow p_\infty$ kada $r \rightarrow r_\infty$.

Sada je potrebno postaviti dinamički rubni uvjet na površini mjehurića. U tu svrhu u obzir uzimamo kontrolni volumen koji se sastoji od malenog, beskonačno tankog listića koji sadrži dio slobodne površine, slika 5.2.

Rezultantna sila na taj volumen u radijalnom smjeru prema van po jedinici površine je:

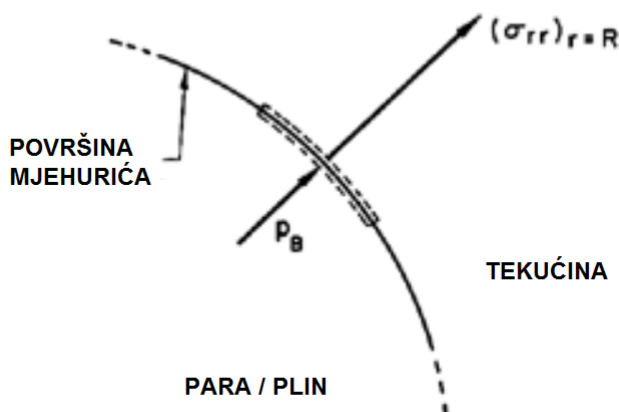
$$(\sigma_{rr})_{r=R} + p_B - \frac{2S}{R}, \quad (5.8)$$

ili, budući da je:

$$\sigma_{rr} = -p + 2\mu_L \frac{\partial u}{\partial r}, \quad (5.9)$$

rezultantna sila po jedinici površine je:

$$p_B - (p)_{r=R} - \frac{4\mu_L}{R} \frac{dR}{dt} - \frac{2S}{R}. \quad (5.10)$$



Slika 5.2: Dio površine sferičnog mjehurića [11].

U odsutnosti transfera mase kroz površinu mjehurića (isparavanje ili kondenzacija) ova sila mora iznositi nula. Zamjena člana $(p)_{r=R}$ iz jednadžbe (5.10) s izrazom $F = R^2 dR/dt$ daje opću Rayleigh-Plesset jednadžbu koja opisuje dinamiku mjehurića:

$$\frac{p_B(t) - p_\infty(t)}{\rho_L} = R \frac{d^2 R}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + \frac{4\nu_L}{R} \frac{dR}{dt} \frac{2S}{\rho_L R}. \quad (5.11)$$

Uz zadani $p_\infty(t)$ i uz poznavanje $p_B(t)$ moguće je izračunati $R(t)$ pomoću jednadžbe (5.11).

5.1.2. Podvodne eksplozije (UNDEX)

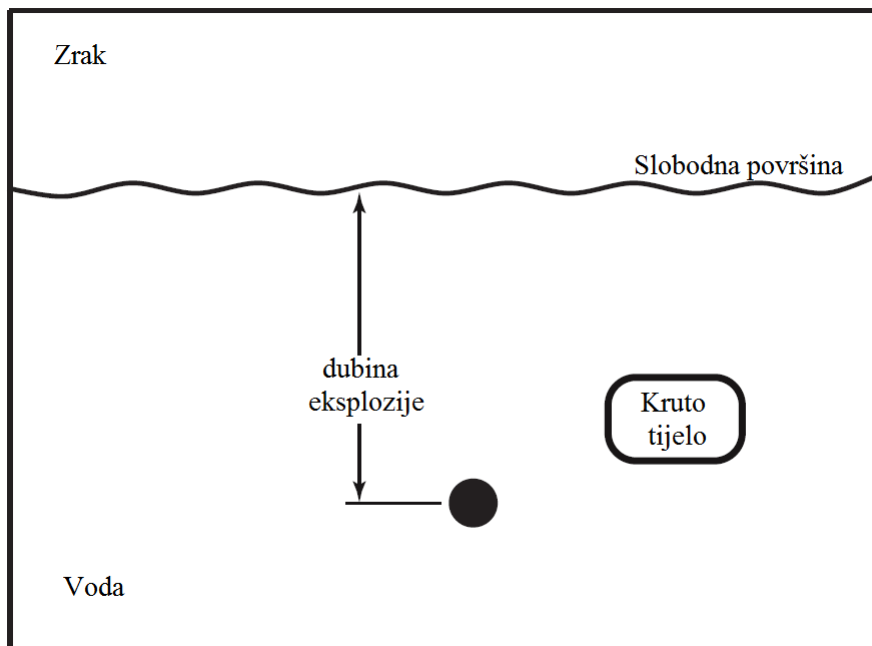
Početni uvjeti

UNDEX (eng. "Underwater Explosions") se odnosi na detonaciju eksplozivnih naprava pod vodom. Slika 5.3. shematski prikazuje podvodnu eksploziju. Eksploziv je detoniran na nekoj dubini d relativno u odnosu na slobodnu površinu, moguće blizu čvrstog objekta. Fizika same eksplozije vrlo je kompleksna; kemijske promjene nastaju vrlo rapidno tijekom detonacijskog procesa i to u vrlo kratkom vremenskom roku.

Hidrodinamičke pojave odmah nakon eksplozije modeliraju se pretpostavljajući da se sav materijal pretvorio u plin visoke gustoće i visokog tlaka [40]. Bilo kakve krute čestice i drugi ostaci eksplozivne naprave su ignorirani. Rezultirajući model sličan je trodimenzionalnom sferičnom tlačnom valu. Početni uvjeti diskontinuirani su na početnom radijusu mjehurića u vremenu $t = 0$. Uslijed velikih skokova tlaka i gustoće u početnim uvjetima, podvodne eksplozije su većinom inercijske prirode

[40]. U tom slučaju, površinska napetost te viskozni efekti imaju vrlo malu ulogu u rješavanju podvodnih eksplozija.

Modeliranje pretvorbe eksploziva u efektivni tlak i gustoću za hidrodinamičko modeliranje podvodne eksplozije predstavljeno je u [46], u izvještajima "Office of Naval Research" te u [31]. Većina modela pretpostavlja da je ukupna masa eksploziva pretvorena u masu plina. Za plin je pretpostavljeno da se ponaša izentropski uz $\gamma = 1.25$. Za početno stanje mjehurića pretpostavljeno je da nema brzine. Pre-



Slika 5.3: Shema podvodne eksplozije [5].

ostaju samo tri nepoznanice koje je potrebno odrediti: početni tlak, početni radijus mjehurića te izentropska konstanta. Poznavajući bilo koje dvije od njih, treću je moguće izračunati.

Empirijske jednadžbe korištene su kako bi se odredili početni tlak i radijus poznavajući početnu dubinu i masu. Tlak na površini mjehurića dan je kao [32]:

$$p_R = 7.8 \left(\frac{W}{V} \right)^\gamma + \sigma, \quad (5.12)$$

gdje je W masa eksploziva u ekvivalentnim gramima TNT-a, V je volumen mjehurića u cm^3 , σ je površinska napetost, a p_R je dan u $kbar$. U [34] je dana jednadžba

$$p_0 = 1.39 \cdot \left(\frac{W}{V_0} \right)^\gamma, \quad (5.13)$$

gdje je W u kg , V_0 u m^3 , p_0 u Pa . Ukoliko se postavi $\gamma = 1.25$ te se napravi pretvorba jedinica izrazi (5.12) i (5.13) postaju jednaki. U [16] se također može pronaći izraz za izračun početnog radijusa:

$$\frac{1.39 \cdot 10^5}{\Delta p} \frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{3W}{4\pi R_m^3} \right)^\gamma \left[1 - \left(\frac{R_0}{R_m} \right)^{-3(\gamma-1)} \right] = \left(\frac{R_0}{R_m} \right)^3 - 1. \quad (5.14)$$

U (5.14), masa eksploziva W je dana u kilogramima, a radijusi R_0 i R_m su u metrima. Tlak Δp je uzet kao okolni tlak p_∞ . U [34] se također može pronaći empirijska jednadžba za maksimalni radijus mjehurića

$$R_m = 3.38 \cdot \left(\frac{W}{H + 10} \right)^{1/3}. \quad (5.15)$$

Koristeći (5.15) i (5.14), zajedno s (5.12) ili (5.13), moguće je u potpunosti definirati početne uvjete.

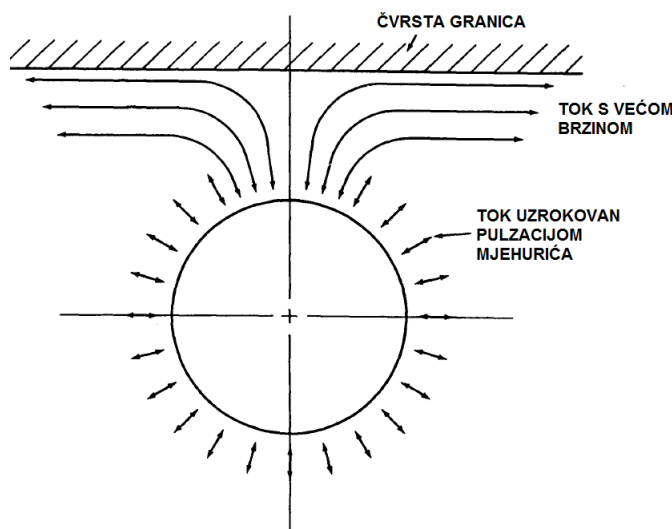
Hidrodinamika podvodne eksplozije

Dinamika podvodnog mjehurića slična je sustavu mase i opruge. Vrlo visoki tlak unutar mjehurića koji nastaje uslijed eksplozije uzrokuje usporeno kretanje fluida prema van. Istovremeno se oslobađaju tlačni valovi koji putuju od mjehurića kroz vodu prema van do ekspanzijski valovi putuju prema centru mjehurića. Uslijed svoje inercije, mjehurić će ekspanzirati pri čemu će se iznos tlaka unutar njega smanjiti do djelića hidrostatskog tlaka fluida koji ga okružuje. Nakon toga počinje ubrzana kontrakcija mjehurića. Ta kontrakcija uzrokovana je hidrostatskim tlakom okolnog fluida. Proces će trajati dok tlak unutar mjehurića ne poraste i opet pokrene njegovu ekspanziju. Iz takvog ponašanja slijedi zaključak da elastična svojstva plina i fluida dovode do uvjeta koji podsjećaju na oscilatorni sustav. Ovaj proces se naziva oscilacija mjehurića [32].

Tijekom kontrakcijske faze pulzacije mjehurića, varijacije u tlaku okolnog fluida mogu prouzrokovati različitu brzinu kontrakcije različitih dijelova mjehurića. Varijacije u tlaku mogu biti uzrokovane migracijom mjehurića, blizinom čvrstog objekta, uslijed prirodnog gradijenta tlaka s promjenom dubine, te ostalim poremećajima. Te varijacije u vanjskom tlaku će uzrokovati veće ubrzanje fluida prema unutra na određenim dijelovima površine mjehurića. Dijelovi površine mjehurića na koje djeluje fluid s većim ubrzanjem formirat će mlaz u završetku kontrakcijske faze pulzacije mjehurića. Mlaz može uvelike varirati u veličini te jačini što ovisi o faktorima koji dovode do njegova formiranja. Ovaj se fenomen naziva "bubble jetting" [32].

Tri su karakteristična slučaja u vezi podvodnih eksplozija: eksplozija okružena kontinuiranim medijem, eksplozija u blizini slobodne površine te eksplozija u blizini čvrstog objekta. Kao što je već napomenuto, kolaps mjehurića uvjetovan je mnogobrojnim fizikalnim faktorima. Neki od faktora su: gradijent hidrostatskog tlaka kao funkcija dubine, migracija mjehurića te blizina čvrste granice.

Utjecaj gradijenta tlaka na stvaranje mlaza mnogo je izraženiji kod velikih mjehurića nego kod malih, primjerice kavitacijskih mjehurića. U slučaju većeg mjehurića hidrostatski tlak u podnožju mjehurića može biti i dvostruko veći nego vrhu. Nasuprot gore spomenutom slučaju, migracija mjehurića dovodi do stvaranja mlaza kako kod velikih tako i kod malih mjehurića. U pravilu, kretanje mjehurića prema gore uzrokovano je uzgonom. Posljedica toga je što veće brzine pri vrhu mjehurića uzrokuju pad hidrostatskog tlaka dok je u podnožju stagnirajući režim što dovodi do povećanja tlaka. Ovaj fenomen u sprezi s oscilacijom mjehurića dovodi do pojave mlaza, obično pred kraj ciklusa oscilacija. Nadalje, blizina čvrste granice može uvelike utjecati na pojavu mlaza, slika 5.4. Kada mjehurić oscilira blizu tijela, fluid u



Slika 5.4: Shema podvodne eksplozije blizu čvrste granice [14].

blizini tijela ima veću brzinu nego fluid koji se nalazi oko ostalih dijelova mjehurića. Taj pad tlaka u fluidu blizu tijela generirat će migraciju mjehurića prema tijelu. Kada mjehurić dođe u kontakt s tijelom, u fazi ekspanzije, voda ispod mjehurića može postići vrlo velike brzine. Tome je uzrok i sama priroda oscilacije mjehurića. Kako mjehurić ekspandira, unutarnji se tlak može spustiti do malenog dijelića hidrostatskog tlaka fluida koji ga okružuje. Rezultat je mlazni udar donje površine mjehurića u tijelo. Konačno, zavisno o načinu zajedničkog djelovanja raznih čim-

benika koji utječu na kolaps mjehurića i stvaranje mlaza, oni mogu uzrokovati jači intenzitet mlaza ali, također, i smanjiti njegov intenzitet.

5.2. Duboka eksplozija

Dinamika mjehurića koji nastaje nakon eksplozije opisana je u podpoglavlju 5.1.2. Jednadžba kojom se opisuje dinamika je Rayleigh-Plesset jednadžba (5.11).

Testni slučaj duboke eksplozije prikazan je u [40] u kojem su rezultati uspoređeni s onima u [32]. Početni radijus mjehurića je $R_0 = 0.0667815$ m te je njegovo središte u ishodištu koordinatnog sustava. Dubina eksplozije 0.3 kg TNT-a je 167.64 m. Početni tlak unutar mjehurića je $p_{G_0} = 1.31 \cdot 10^8$ Pa. U tablicama 5.1 i 5.2 dana su svojstva medija potrebna za simulacije.

Tablica 5.1: Svojstva plina.

Kinematička viskoznost, ν	$1.589 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Masena plinska konstanta, R	300 J/kgK
Omjer specifičnih toplina, γ	1.25
Gustoća, ρ	1 m^3
Adijabatska konstanta, a_c	$138999.59 \text{ m}^2/\text{s}^2$

Tablica 5.2: Svojstva vode.

Kinematička viskoznost, ν	$1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Početna gustoća, ρ_0	1025 m^3
Početni tlak, p_0	1786987.1 Pa
Kompresibilnost vode, ψ	$4.54 \cdot 10^{-7} \text{ s}^2/\text{m}^2$
Temperatura, T	300 K
Gustoća, ρ	1025 m^3

Tablica 5.3: Numeričke sheme diskretizacije.

$\frac{\partial}{\partial t}$	Eulerova implicitna shema
∇	Gaussova linearna shema
$\nabla \cdot$	Gaussove sheme
$\nabla \cdot \nabla$	Gaussova linearna shema s neortogonalnom korekcijom
Interpolacijske sheme	Linearna interpolacija
∇^\perp	Gaussova linearna shema s korekcijom

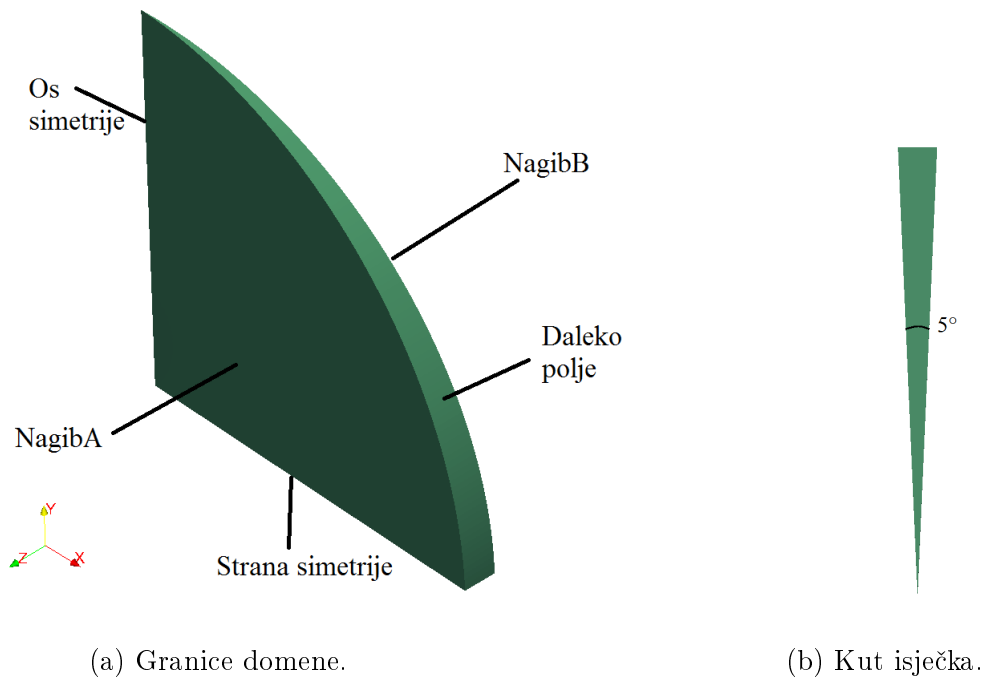
U tablici 5.3 su prikazane numeričke sheme diskretizacije. Za vremenske derivacije korištena je Eulerova implicitna shema prvog reda točnosti dok su za dis-

kretizaciju gradijenata, konvekcijskih članova te difuzijskih članova korištene Gaussove sheme. Postoje razlike između shema korištenih za diskretizaciju konvekcijskog člana; većinom su to TVD sheme (npr. vanLeer limited) ili uzvodne sheme prvog reda točnosti. Ovakve numeričke sheme diskretizacije vrijede za sve simulacije.

Tablica 5.4: Parametri proračuna.

Broj vanjskih korektora	4
Broj unutarnjih korektora	2
Podrelaksacijski faktor za pd	0.5
Podrelaksacijski faktor za \mathbf{u}	0.7
Maksimalni Courant-ov broj	10

Na slici 5.5a je prikazana domena na kojoj su vršene simulacije. To je kuglin isječak čiji kut iznosi $\theta = 5^\circ$, slika 5.5b. Polumjer domene je $R = 50$ m što je dovoljno kako bi utjecaj tlačnih valova koji se odbijaju od ruba domene bio umanjen. Budući da je eksplozija osnosimetrična moguće je simulirati na dijelu ukupne domene radi smanjenja računalnog vremena. Na slici 5.5a su također prikazane granice s pripadajućim nazivima. Tablica 5.4 prikazuje parametre proračuna dok tablica 5.5 prikazuje rubne uvjete koji su implementirani na određenim granicama.

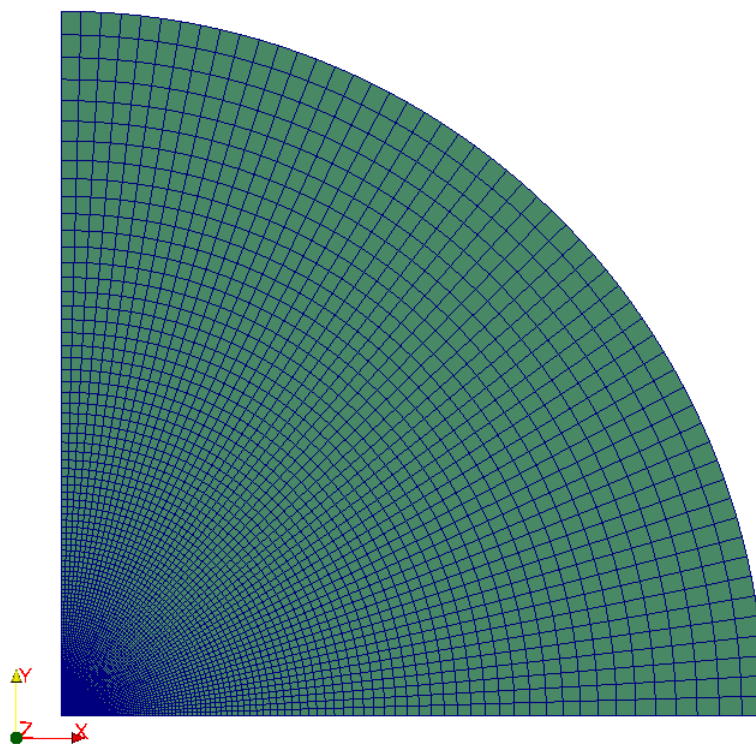


Slika 5.5: Prikaz domene.

Tablica 5.5: Rubni uvjeti.

Granica	α_1	p_d	\mathbf{u}
Strana simetrije	symmetryPlane	symmetryPlane	symmetryPlane
Daleko polje	inletOutlet uniform 0	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
NagibA	wedge	wedge	wedge
NagibB	wedge	wedge	wedge

Računalna mreža je radijalno simetrična, slika 5.6. U intervalu $R \in (0, 0.55)$ kontrolni volumeni su jedanke duljine koja se postupno povećava prema kraju domene. Broj kontrolnih volumena je 11275. Budući da je slučaj 2D, broj kontrolnih volumena u z smjeru je 1 što je pravilo u OpenFOAM-u.



Slika 5.6: Prikaz mreže.

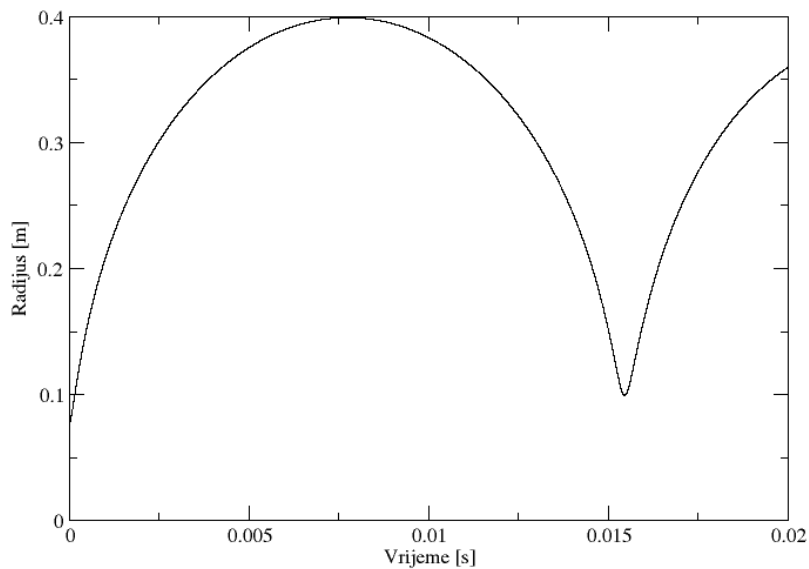
Početni vremenski korak je $\Delta t = 10^{-7} s$ (ovo vrijedi za sve validacijske slučajeve) te je on promjenjiv u zavisnosti od Courantovog broja koji se računa preko brzine zvuka prema jednadžbi:

$$Co = \frac{c\Delta t}{\Delta x} \quad (5.16)$$

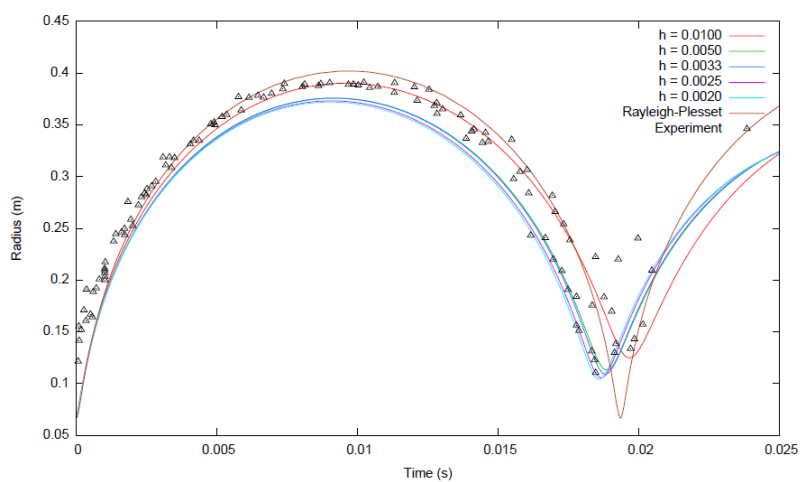
Rezultati

Slika 5.7 prikazuje promjenu radijusa u ovisnosti o vremenu. Na slici 5.8 su prikazani rezultati dobiveni u [40]. Na toj slici je potrebno promotriti krivulju koja je dobivena na mreži s $h = 0.0100$ m u intervalu $R \in (0, 0.55)$ jer je takva mreža korištena u ovom radu. Rezultati se dobro poklapaju s onima u [40] i [32]. Maksimalni radijusi koji se postižu su jednaki ali se razlikuju u vremenu pri kojem se dostižu. U ovom radu maksimalni radijus se postiže u vremenu $t = 0.0075$ s dok je to u [40], $t = 0.01$ s. Također je vremenski pomaknut kraj prvog ciklusa koji je u ovom radu malo iza $t = 0.015$ s, a u [40] oko $t = 0.02$ s. Ovakve razlike mogu se pripisati promjenama koje su se napravile na rješavaču koje npr. uključuju različito tretiranje pojedinih članova u jednadžbama radi stabilnosti simulacija. Rezultati se u jednom i u drugom slučaju ne poklapaju s teorijskim dobivenim rezultatim rješavajući Rayleigh-Plesset jednadžbu. Nekoliko je mogućih razloga: tretiranje vode kao kompresibilne, neuniforman tlak u mjehuriću, uključivanje viskoznih efekata itd.

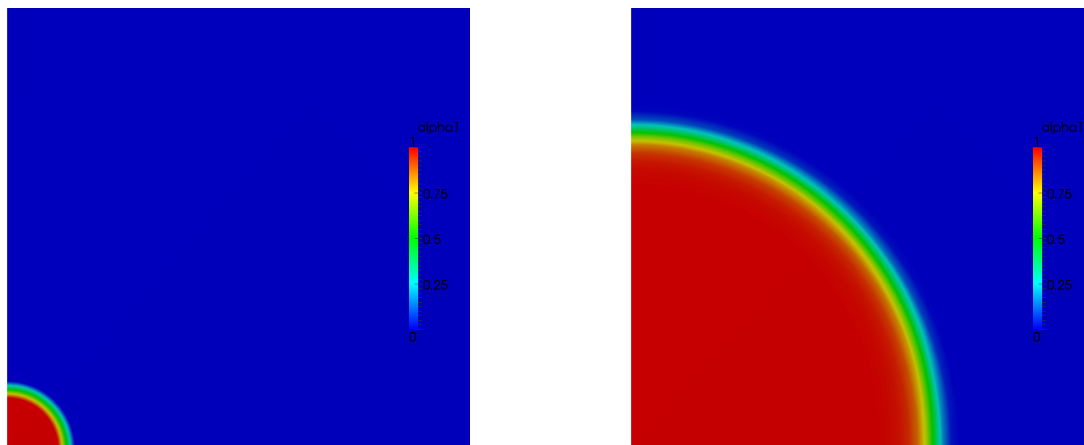
Slike 5.9-5.10 prikazuju profil mjehurića u specifičnim fazama osciliranja. Promjene mjehurića slijede one opisane teorijom i provjerene eksperimentom [32]. Kada se radijus približava maksimalnom, ekspanzija usporava. Mjehurić ostaje pri maksimalnom radijusu neko vrijeme te počinje ubrzana kontrakcija. Pri kraju prvog ciklusa mjehurić se počinje deformirati te poprima oblik torusa. Takva promjena profila može se vidjeti u eksperimentima (vidjeti u [44]).



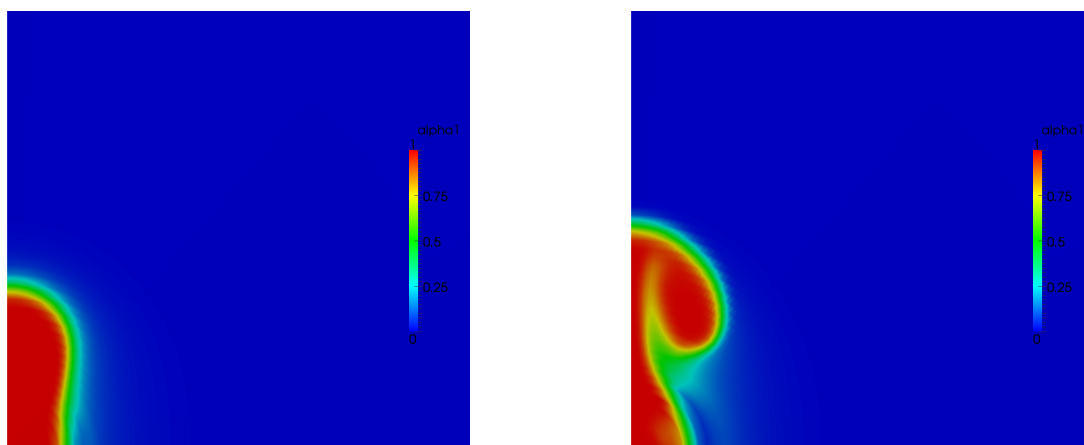
Slika 5.7: Promjena radijusa mjehurića u vremenu.



Slika 5.8: Promjena radijusa mjehurića u vremenu [5].



Slika 5.9: Prikaz mjehurića na: početku simulacije (lijevo) i pri maksimalnom radijusu (desno).



Slika 5.10: Prikaz mjehurića na: kraju prvog ciklusa (lijevo) i početku drugog ciklusa (desno).

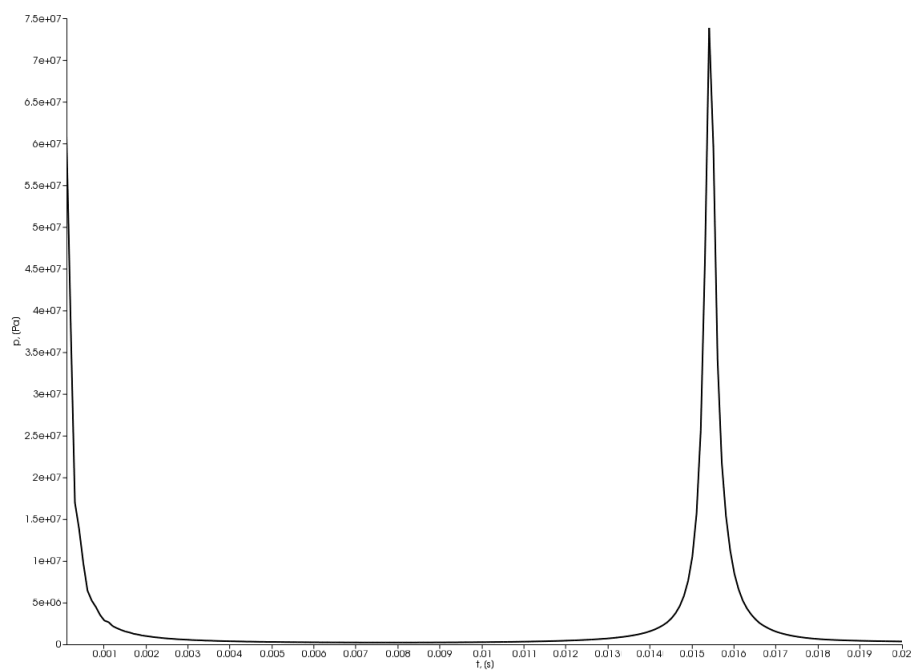
Slika 5.11 prikazuje promjenu tlaka u središtu mjehurića. Zbog boljeg pregleda slike, izbačen je početni vremenski korak u kojem tlak iznosi $1.31 \cdot 10^8$ Pa te je time smanjena slika i dobivena je bolja rezolucija. Vidljivo je naglo opadanje u početku simulacije koje usporava te stagnira na određenoj vrijednosti (≈ 10 Pa) koja je vrlo mala. Ta vrijednost je određena kao granična vrijednost unutra numeričkih postavki ispod koje tlak ne može ići. Tlak počinje naglo rasti kako kreće kontrakcija. Tlak dosegne vrijednost koja je manja nego početni tlak. Kako počinje druga ekspanzija, tlak opet počinje opadati.

Na slici 5.12 vidljiva je promjena gustoće. Kao i tlak ona ubrzano opada na samom početku te nakon nekog vremena postiže određenu vrijednost na kojoj se nalazi neko vrijeme. To je logično budući da se volumen povećava ekspanzijom, a masa ostaje ista što se može vidjeti na slici 5.14. Kada počinje kontrakcija vrijednost gustoće ponovo raste.

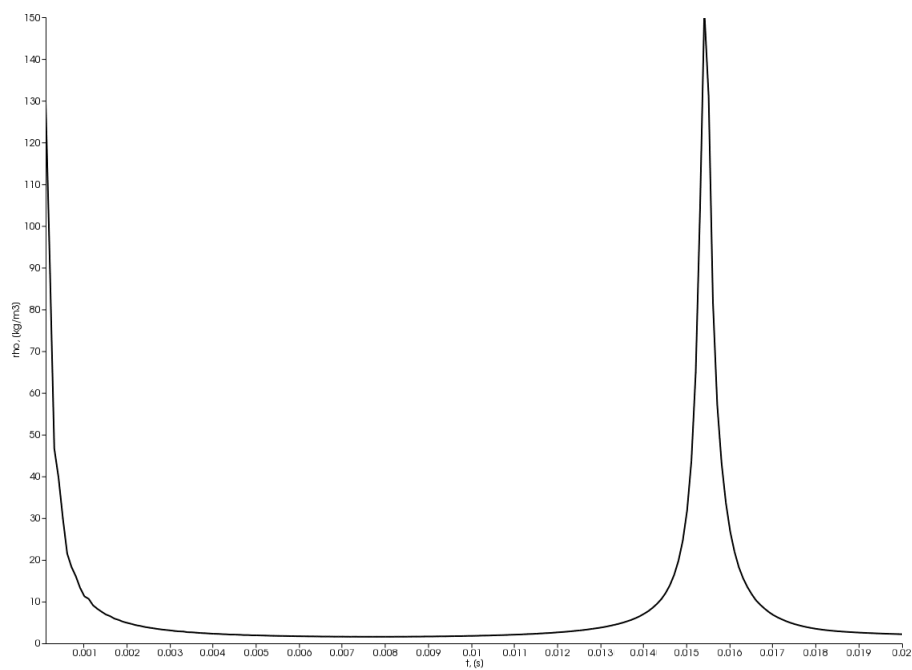
Promjena brzina je prikazana na slici 5.13. Njene promjene također slične na promjenu tlaka što je i očekivano budući da pri kontrakciji postoji akceleracija odnosno pri ekspanziji postoji deceleracija te brzina između tih događaja stagnira.

Kao što je gore napomenuto, na slici 5.14 je prikazana promjena mase plina. Može se reći da je ona konstantna. Potrebno je napomenuti da su fluktuacije zane-marive budući da su najveća odstupanja od srednje vrijednosti 0.003122 kg reda veličine 10^{-6} . Fluktuacije koje su vidljive na samom početku i oko trenutka ≈ 0.015 s mogu se pripisati naglim promjenama tlaka. Može se uočiti smanjenje mase pri ekspanziji odnosno povećanje pri kontrakciji budući da fluktuacije odgovaraju tim trenucima.

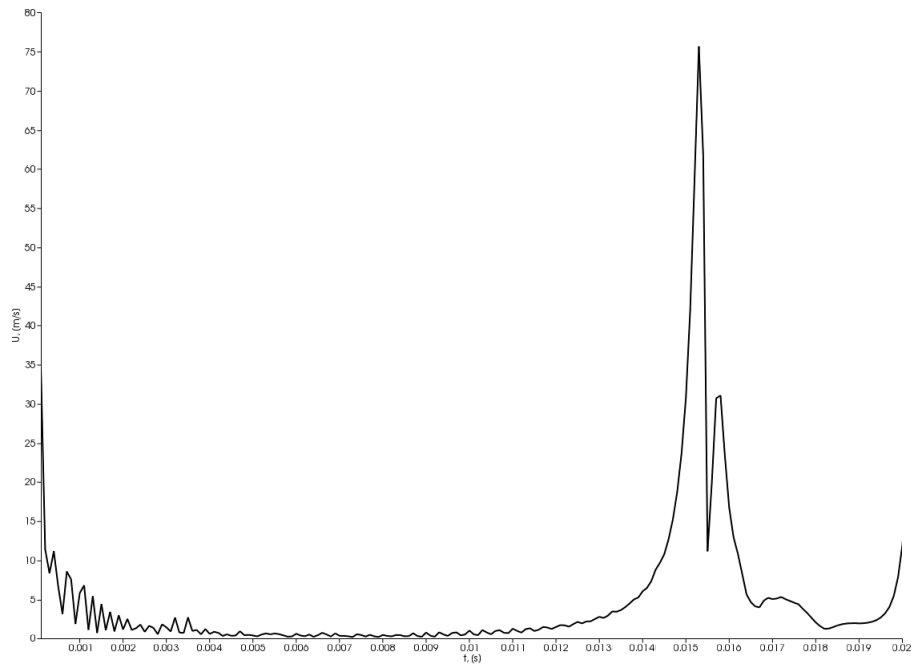
Proračun je proveden serijski na jednoj jezgri te je trajao 27.8 h na računalu s karakteristikama: Intel Core 2 Quad CPU Q6600 @ 2.4 GHz 8 GiB.



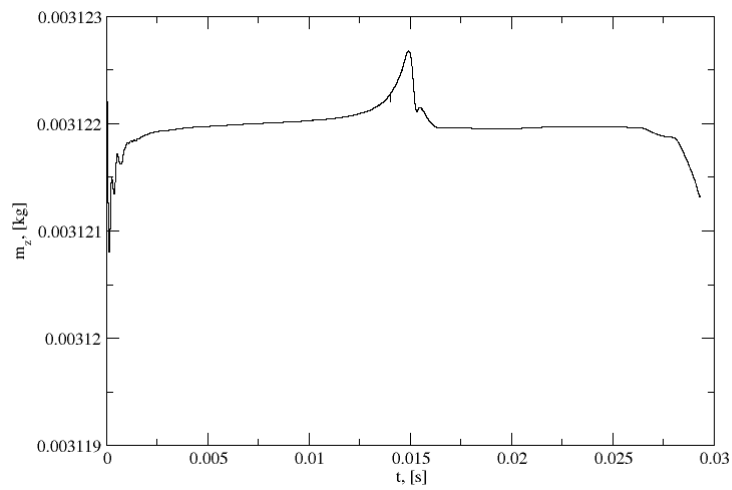
Slika 5.11: Promjena tlaka u središtu mjehurića.



Slika 5.12: Promjena gustoće u središtu mjehurića.



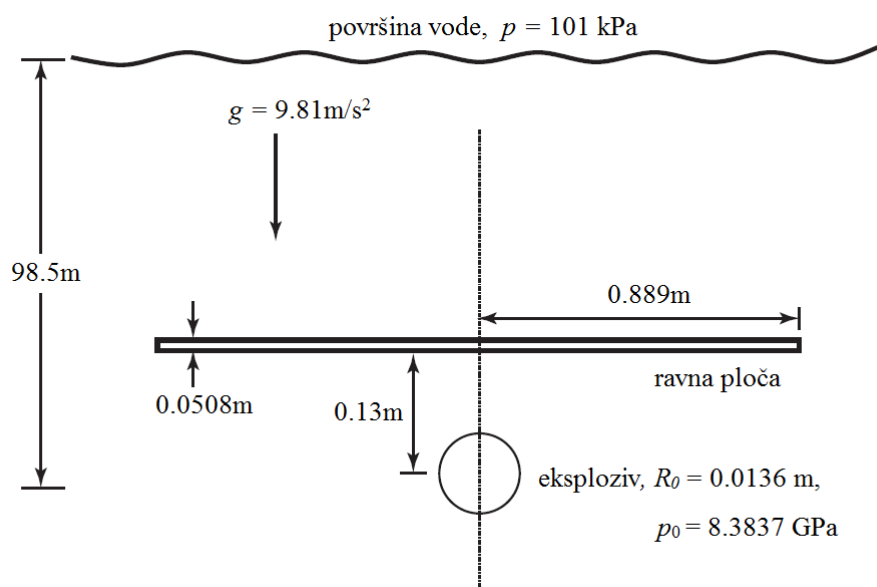
Slika 5.13: Promjena brzine u središtu mjehurića.



Slika 5.14: Promjena mase plina u vremenu.

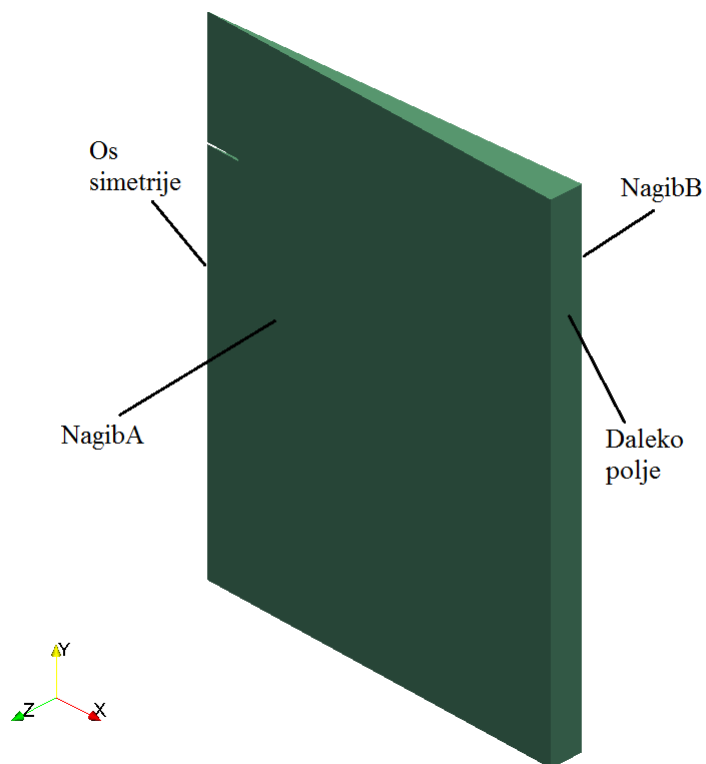
5.3. Eksplozija ispod krute ploče

Na slici 5.15 prikazana je shema eksplozije ispod krute ploče sa ulaznim podacima potrebnim za simulacije. Rezultati simulacije uspoređivani su s onima danim u [35].

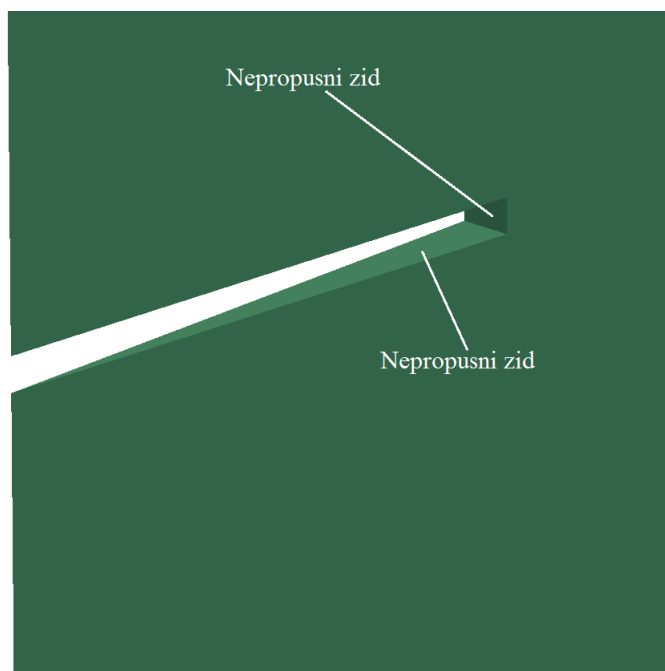


Slika 5.15: Shema eksplozije ispod krute ploče.

Na slici 5.16 je prikazan domena na kojoj su izvršene simulacije. Ovdje je još uvijek zanemarena slobodna površina zbog dovoljno velike dubine. To je isječak iz cilindra čiji kut također iznosi $\theta = 5^\circ$. Dimenzije domene su: 10×10 m. Komponenta u z smjeru računa se prema izrazu: $R \cdot \cos \theta$ (vidjeti [44]) pri čemu je $R = 10$ m. Što se tiče svojstva fluida, ona ostaju ista kao i u podpoglavlju 5.2. osim početnog tlaka vode koji za dubinu od 98.5 m iznosi $p_0 = 1067285$ Pa.



Slika 5.16: Granice domene.



Slika 5.17: Kruta ploča.

Tablica 5.6 prikazuje rubne uvjete koji su postavljeni na pojedine granice, a tablica 5.7 prikazuje parametre proračuna.

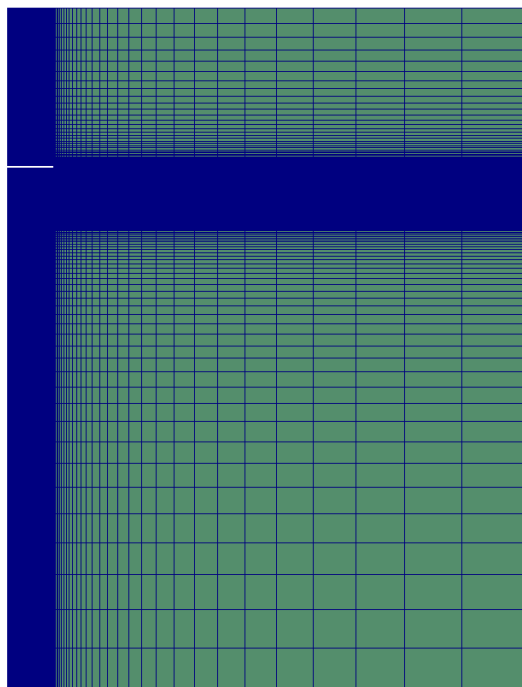
Tablica 5.6: Rubni uvjeti.

Granica	α_1	pd	\mathbf{u}
Nepropusni zid	zeroGradient	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
Daleko polje	inletOutlet uniform 0	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
NagibA	wedge	wedge	wedge
NagibB	wedge	wedge	wedge

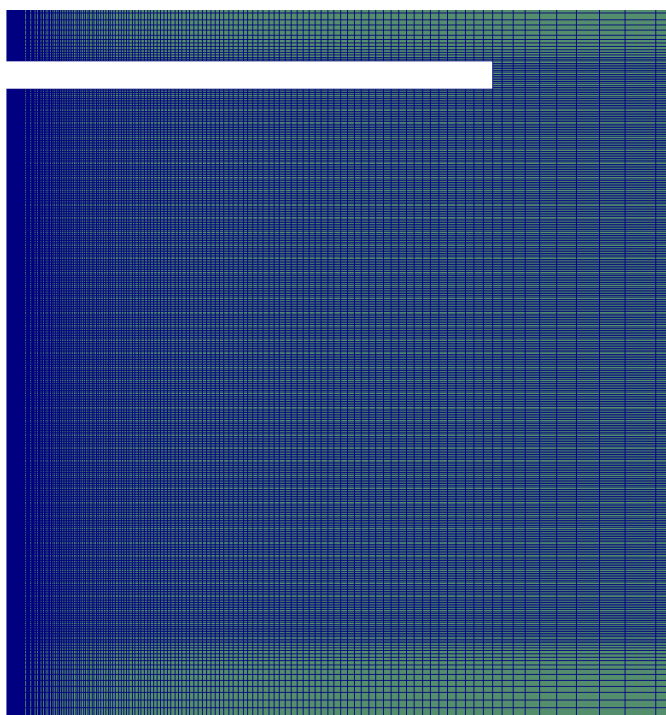
Tablica 5.7: Parametri proračuna.

Broj vanjskih korektora	4
Broj unutarnjih korektora	2
Podrelaksacijski faktor za pd	–
Podrelaksacijski faktor za \mathbf{u}	0.3
Maksimalni Courant-ov broj	2

Slike 5.18 i 5.19 prikazuju proračunske mreže. Mreža je gušća blizu ploče te su kontrolni volumeni jednake duljine kako bi se što bolje uhvatile fizikalne pojave nakon eksplozije. Interval tog područja iznosi 1 m. Udaljavanjem od ploče u svim smjerovima mreža postaje rjeđa budući da tamo nema potrebe za velikim brojem kontrolnih volumena. Ukupni broj kontrolnih volumena je 73350. Slučaj je 2D pa je broj kontrolnih volumena u z smjeru 1. Unutar početnog mjehurića je u x smjeru 11, a u y smjeru 4 kontrolna volumena. Volumen neposredno ispod ploče i pokraj osi simetrije ima duljinu u y smjeru $3.33 \cdot 10^{-3}$ m, a u x smjeru $1.24 \cdot 10^{-3}$ m te postepeno raste s koeficijentom 15 do ruba ploče.



Slika 5.18: Mreža u cijeloj domeni.



Slika 5.19: Mreža blizu krute ploče.

Rezultati

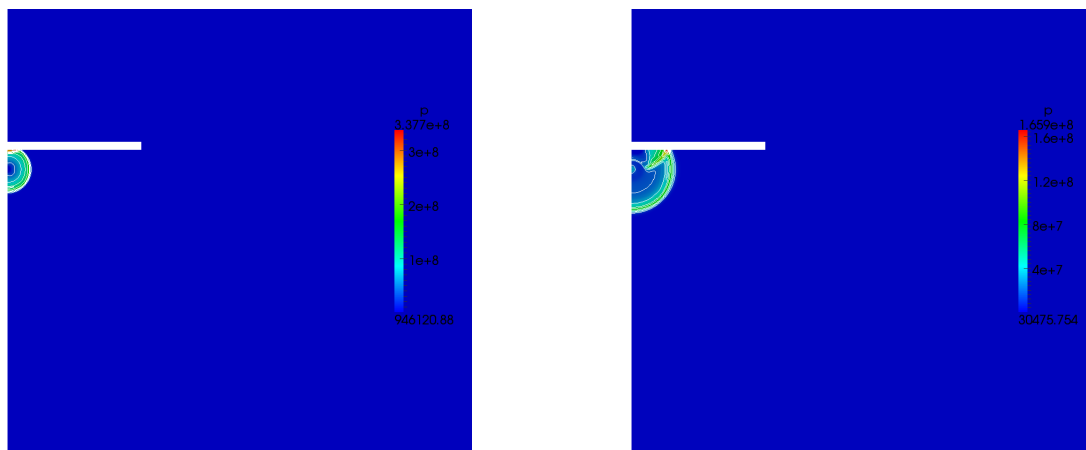
Slike 5.20-5.22 prikazuju polje tlaka. Vidljivo je kako inicijalni udarni val putuje prema rubu ploče. Kako vrijeme prolazi, udarni val doseže rub ploče te se zavija oko nje i propagira prema osi simetrije. Istovremeno se val širi prema unutrašnjosti domene.

Slike 5.25-5.27 prikazuju profil mjehurića. Radijus mjehurića ne podliježe utjecaju tlačnog vala. Teorijska razmatranja u [32] (podpoglavlje 5.1.2.) opisuju oscilaciju mjehurića ispod krute ploče. Takvo ponašanje mjehurića može se primjetiti u ovom radu. Oko trenutka $t = 18.5$ ms vidljiv je proboj vodenog mlaza kroz sredinu mjehurića te nakon toga potpuno probijanje i udar u ploču. Nakon udara mlaza u ploču mjehurić poprima oblik torusa koji se polagano udaljuje od centra simetrije. Rezultati se vrlo dobro poklapaju s rezultatima u [35]. Kada se pogledaju slike tlaka iz [35] 5.23-5.24 poklapanja su očita. Međutim, tlačni val je za isti vremenski trenutak uvijek nešto dalje u radijalnom smjeru u njihovom slučaju. Slike 5.28-5.29 prikazuju promjenu profila mjehurića iz [35]. Kod njih je plavom bojom označen mjehurić plina. Profili mjehurića ostaju slični sve do trenutka ≈ 8 ms. U njihovom slučaju se vodeni mlaz javlja oko trenutka $t = 12$ ms. Mogući razlog tome je što se u [35] koristi Taitova jednadžba stanja za vodu odnosno JWL jednadžba za računanje tlaka i gustoće unutar mjehurića. JWL jednadžba uzima u obzir eksplozivni materijal. Taitova jednadžba je posebna jednadžba stanja za tekućine koja služi za povezivanje gustoće i tlaka. Također koriste metodu profinjena mreže s početnom mrežom od 102400 kontrolnih volumena i dvije razine adaptacije mreže što im omogućuje bolje hvatanje tranzijentnih pojava.

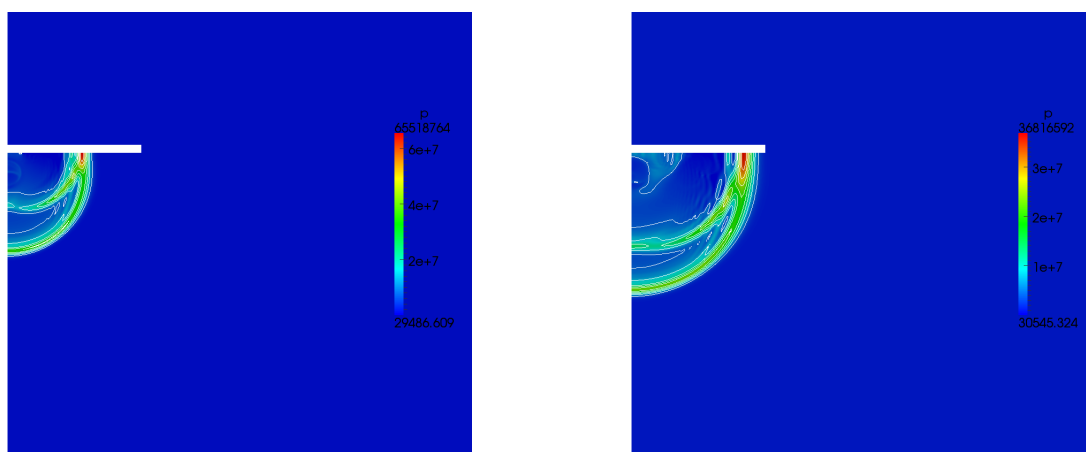
Slike 5.30-5.31 prikazuju promjenu tlaka u vremenu. Ovdje je također izbačen početni vremenski korak zbog istih razloga kao i u prethodnom slučaju. Na slici 5.30 vidljiv je isti trend kao i u slučaju s dubokom eksplozijom. Slika 5.31 prikazuje promjenu tlaka u tri točke ispod ploče. Kao što je i očekivano najveći tlak pojavljuje se u točki koja leži na osi simetrije, posebno u trenutku udara vodenog mlaza (≈ 19 ms) i iznosi oko $4 \cdot 10^7$ Pa. Udaljavanjem od osi simetrije iznosi tlakova padaju. Na slici je $L = 0.889$ m polumjer ploče te je graf promjene tlaka u toj točki označen zelenom bojom. Veliki iznosi tlakova vidljivi su i na početku simulacije što je vjerojatno posljedica tlačnog vala koji se širi prema van nakon same eksplozije.

Slika 5.32 prikazuje promjenu mase plina te se vide fluktuacije koje su reda veličine 10^{-3} . One su vrlo vjerojatno posljedica zaustavljanja simulacija te njihovog ponovnog pokretanja. Osim toga vidljivo je da je masa konstantna cijelo vrijeme.

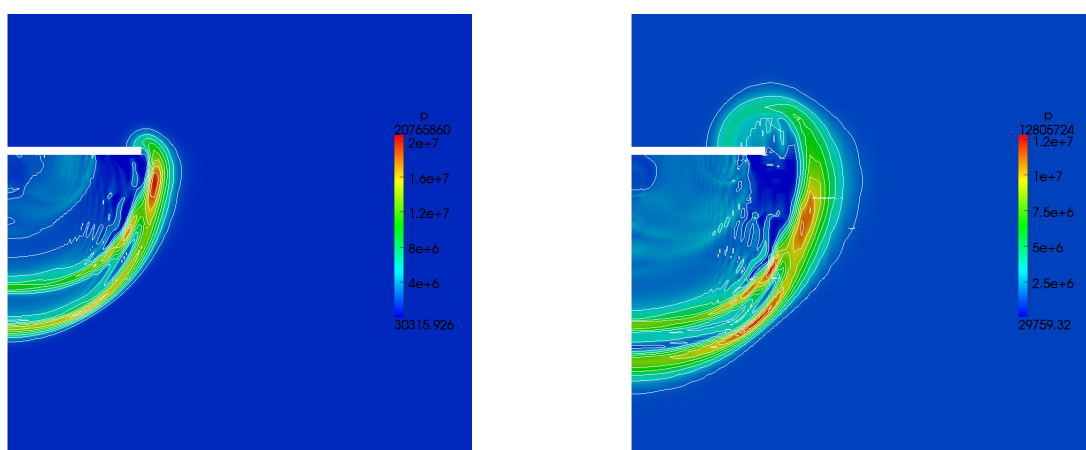
Proračun je proveden paralelno na četiri jezgre te je trajao 47.6 h na računalu s karakteristikama: Intel Core i7-3770 CPU @ 3.4 GHz 15.6 GiB.



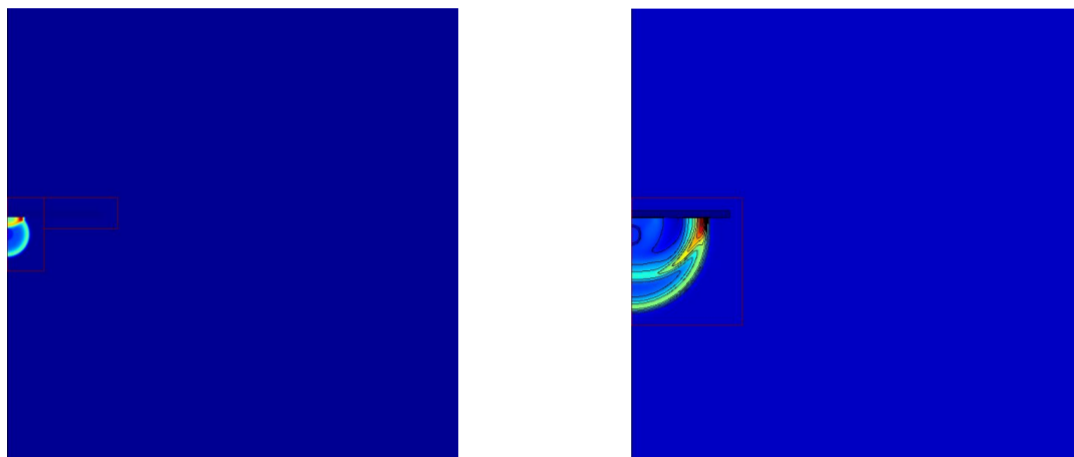
Slika 5.20: Prikaz tlaka nakon: 0.1 ms (lijevo) i 0.2 ms (desno)



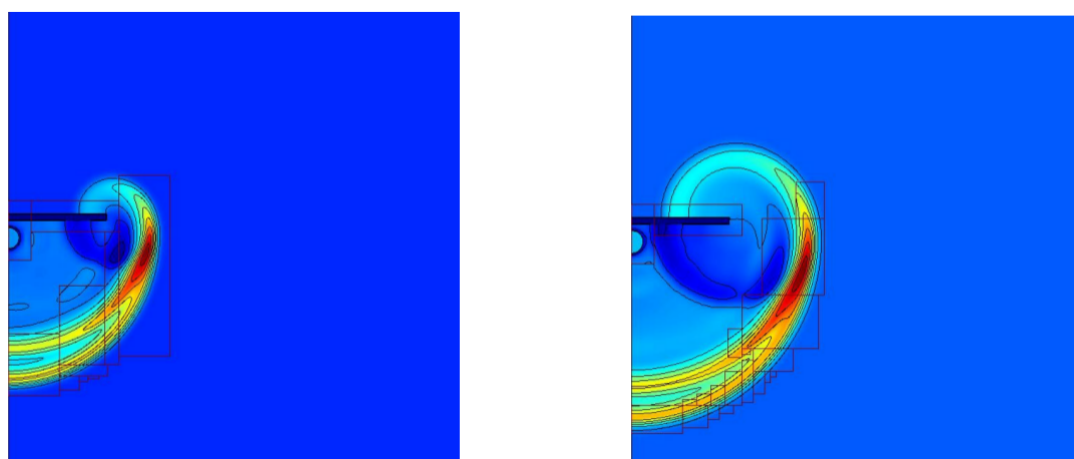
Slika 5.21: Prikaz tlaka nakon: 0.4 ms (lijevo) i 0.6 ms (desno)



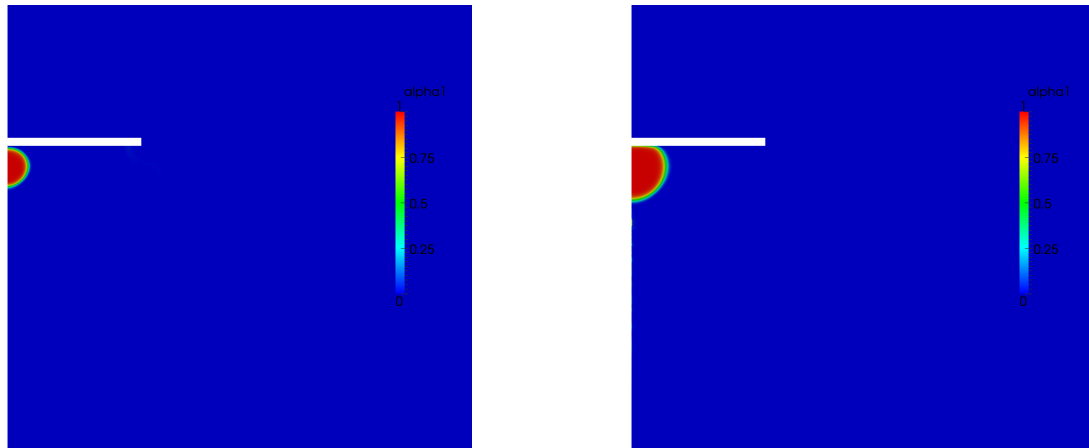
Slika 5.22: Prikaz tlaka nakon: 0.8 ms (lijevo) i 1 ms (desno)



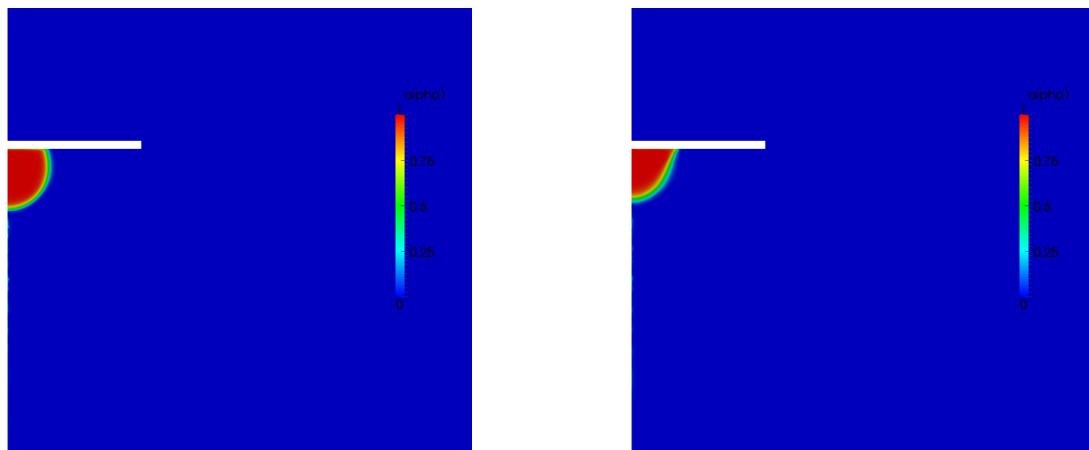
Slika 5.23: Prikaz tlaka iz [16] nakon: 0.1 ms (lijevo) i 0.4 ms (desno)



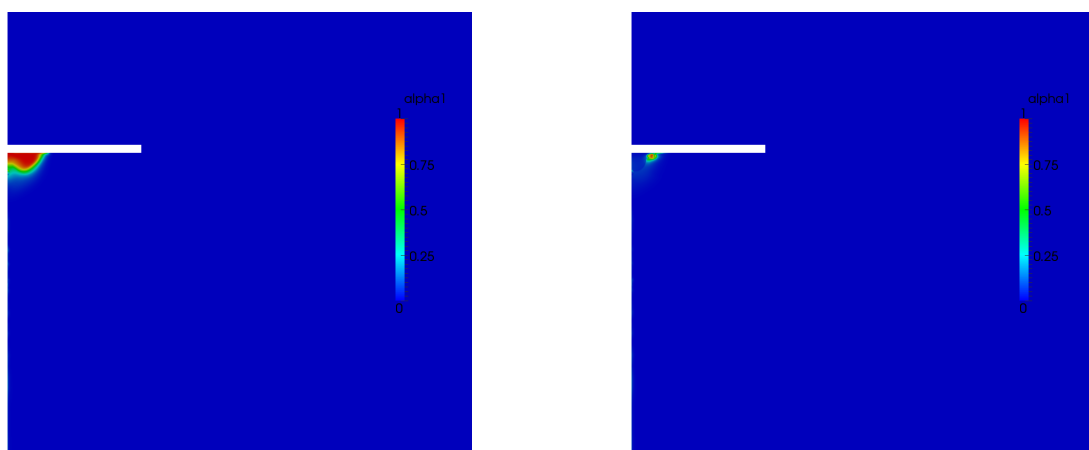
Slika 5.24: Prikaz tlaka iz [16] nakon: 0.8 ms (lijevo) i 1 ms (desno)



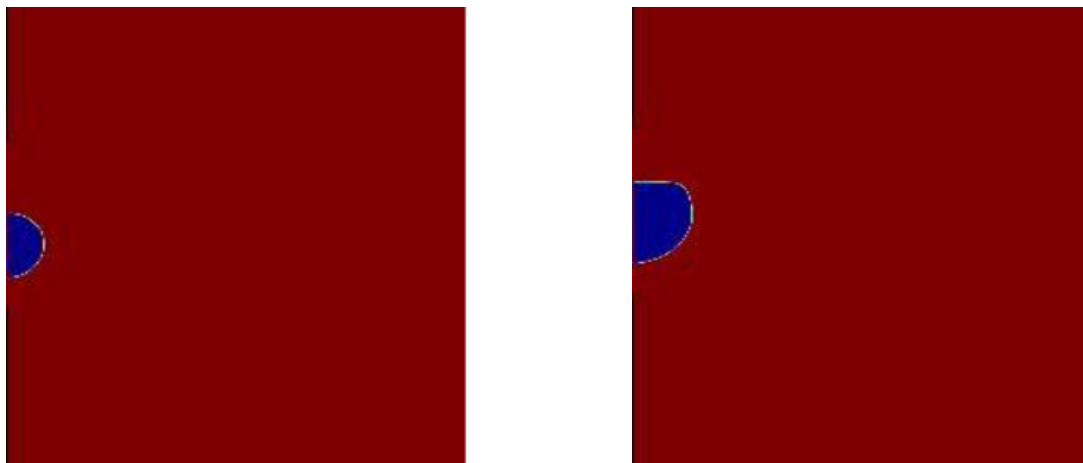
Slika 5.25: Volumni udio mjehurića nakon: 1 ms (lijevo) i 4 ms (desno)



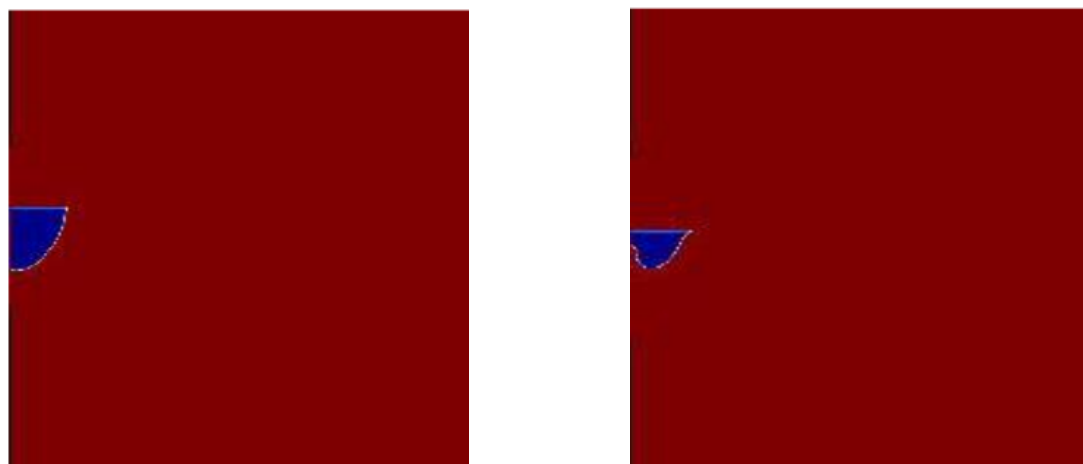
Slika 5.26: Volumni udio mjehurića nakon: 8 ms (lijevo) i 15 ms (desno)



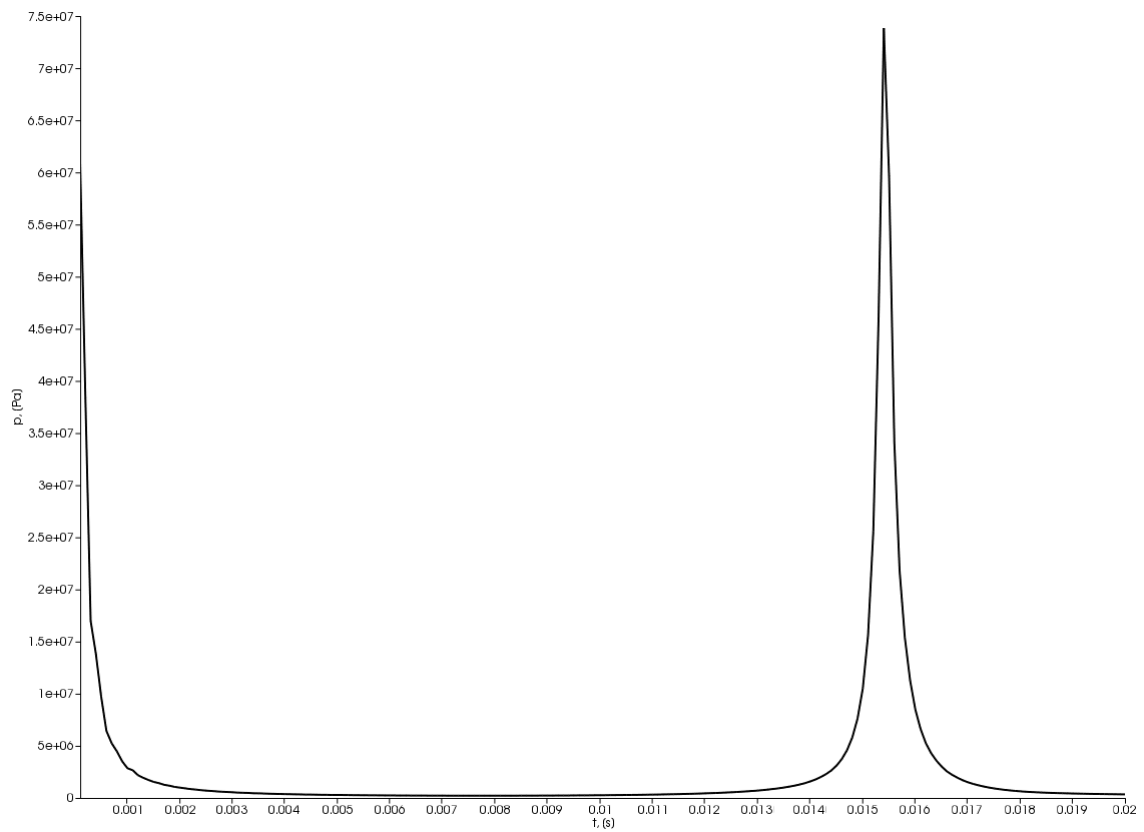
Slika 5.27: Volumni udio mjehurića nakon: 18.5 ms (lijevo) i 20 ms (desno)



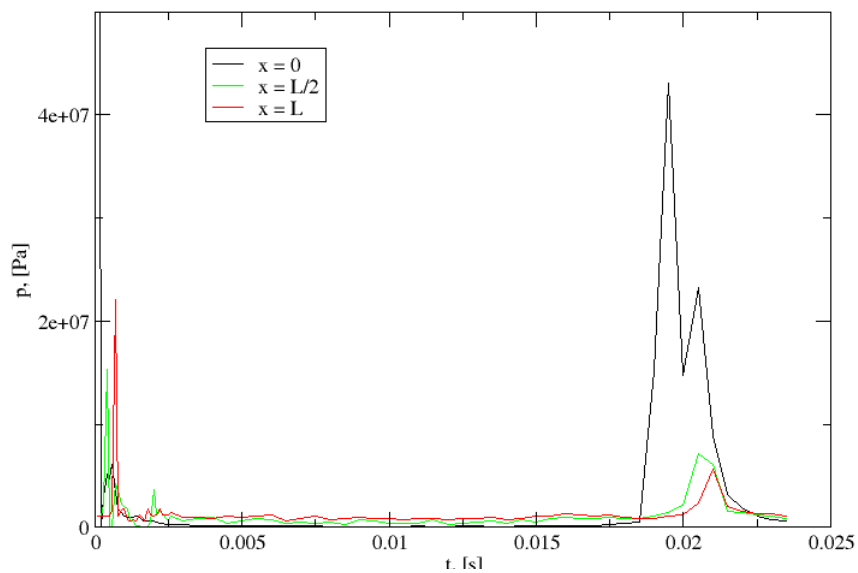
Slika 5.28: Volumni udio mjehurića iz [16] nakon: 1 ms (lijevo) i 8 ms (desno)



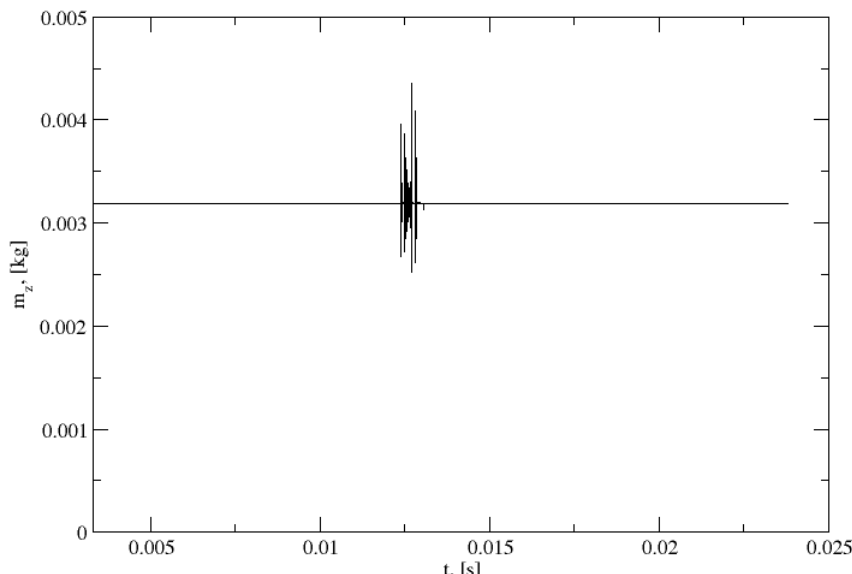
Slika 5.29: Volumni udio mjehurića iz [16] nakon: 11 ms (lijevo) i 12 ms (desno)



Slika 5.30: Promjena tlaka u centru mjehurića.



Slika 5.31: Prikaz tlaka na ploči.



Slika 5.32: Promjena mase plina u vremenu.

5.4. Eksplozija pod slobodnom površinom

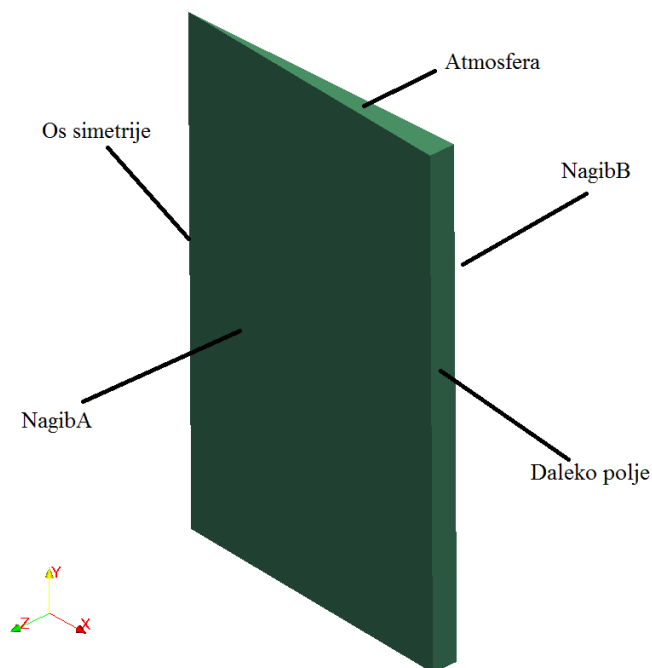
Redoslijed događaja kod eksplozija ispod slobodne površine može se podijeliti na tri glavna dijela: dolazak primarnog tlačnog vala do površine, doticaj ruba mjehurića i slobodne površine te proboj plinova u atmosferu [46]. Kretanje vode u smjeru slobodne površine ne nailazi na prepreku kada tlačni val dosegne slobodnu površinu. Razlog tome je što zrak iznad slobodne površine ne može pružiti dovoljan otpor svojom kompresijom. Kao rezultat toga se odbijeni tlačni val i nadolazeći tlačni val poništavaju te je njihov zbroj praktički nula. Nakon same eksplozije, voda je u blizini površine mjehurića izbačena uvis brzinom koja je proporcionalna tlačnom valu koji nadolazi ispod tog sloja vode. U idućem trenutku se iznad mjesta eksplozije stvara kupola vode "bjelkaste" boje. Područja dalje od eksplozije su poremećena mnogo manje, ali se može vidjeti prsten vode koja se naizgled čini crnom, koji se brzo širi od eksplozije stotinama metara. Ukoliko je mjehurić dovoljno blizu slobodne površine, postoji mogućnost njenog remećenja i prije konačnog proboja plinova [46].

U ovom slučaju simulirana je eksplozija 0.3 kg TNT-a (kao u slučaju duboke eksplozije) na dubini od 6 m. Početni radijus mjehurića je $R_0 = 0.6$ m, a početni tlak unutar mjehurića je $p_{G_0} = 72.7 \cdot 10^6$ Pa. Svojstva atmosferskog zraka i plina unutar mjehurića ostaju ista. Što se tiče vode, jedino se mijenja referentni tlak koji sada iznosi $p_0 = 101325$ Pa.

Tablica 5.8: Rubni uvjeti.

Granica	α_1	p_d	\mathbf{u}
Atmosfera	inletOutlet uniform 0	totalPressure uniform 101325	pressureInletOutlet Velocity uniform (0 0 0)
Daleko polje	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient
NagibA	wedge	wedge	wedge
NagibB	wedge	wedge	wedge

Na slici 5.33 prikazan je domena s naznačenim granicama. Dimenzije domene su: 50×100 m. Komponenta u z smjeru računa se kao i u slučaju s krutom pločom. U tablici 5.8 su prikazani rubni uvjeti pridodani svakoj granici, a u tablici 5.9 su prikazani parametri proračuna.

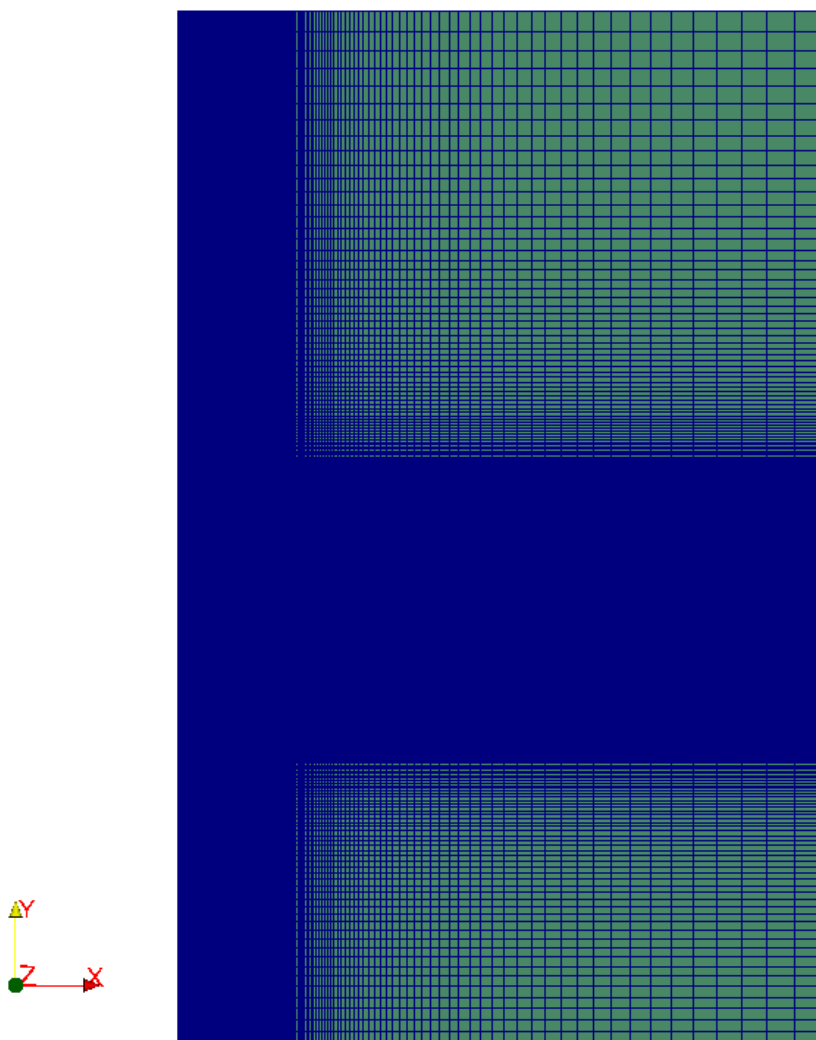


Slika 5.33: Prikaz domene.

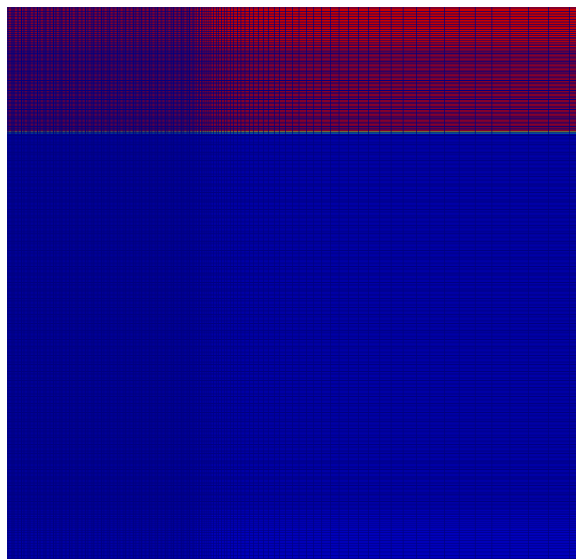
Tablica 5.9: Parametri proračuna.

Broj vanjskih korektora	4
Broj unutarnjih korektora	2
Podrelaksacijski faktor za p_d	–
Podrelaksacijski faktor za \mathbf{u}	0.7
Maksimalni Courant-ov broj	6

Slika 5.34 prikazuje mrežu na području cijele domene. Mreža je najgušća oko slobodne površine budući da se tamo odvijaju najzanimljivije pojave što se vrlo dobro može vidjeti na slici 5.35. Ukupni broj kontrolnih volumena je 129360. Slučaj je 2D pa je broj kontrolnih volumena u z smjeru 1. Unutar mjehurića su u oba smjera 11 kontrolnih volumena. Dimenzije kontrolnih volumena ispod i iznad slobodne površine su 0.053 m.



Slika 5.34: Mreža u cijeloj domeni.



Slika 5.35: Mreža kod slobodne površine.

Rezultati

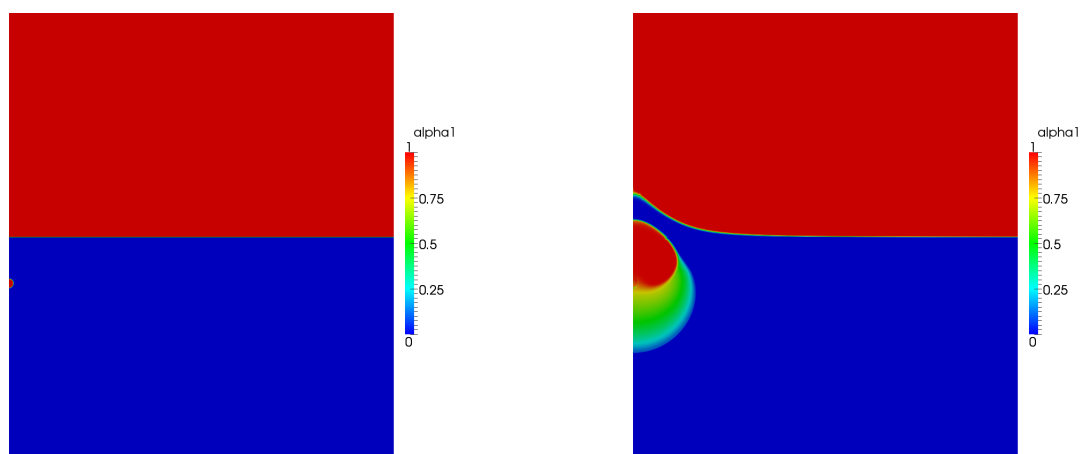
Slike 5.36-5.39 prikazuju profil mjehurića u pojedinim trenucima simulacije. Crvenom bojom su označeni mjehurić i atmosfera iznad slobodne površine. Uočljiva je "razmazanost" prijelaznog sloja koja je sve izraženija nakon 0.25 s. Ona se pojavljuje kada uzgon počinje djelovati te se donji dio mjehurića počinje podizati prema gore. To je očiti primjer numeričke difuzije. Mogući razlog leži u činjenici što je za interpolaciju konvekcijskog člana u jednadžbi (3.22) korištena TVD shema Gauss vanLeer01. Budući da je ona kombinacija UD i CD interpolacijskih shema postoji mogućnost da u tom dijelu prevladava UD shema i samim time unosi lažnu difuziju. Nakon što postigne maksimalni radijus, slobodna površina ostaje glatka. Bez obzira na to količina gibanja koju fluid posjeduje nastavlja gurati taj fluid vertikalno. Zatim slijedi sažimanje mjehurića u toroidalni oblik, slika 5.37 lijevo. Vidljivo je područje zelene boje što se također može pripisati numeričkim greškama. Potom slijedi druga ekspanzija. Pri tom se površina vode podiže i okružuje središnji brijeg. Oko 1.5 s mjehur se u potpunosti rasipao na sitnije mjehuriće koji se svaki zasebno sažima i potom opet ekspandira. Nakon treće ekspanzije nastaje efekt "krune" na slobodnoj površini odnosno površina se lomi. Rezultati se dobro poklapaju s eksperimentima u [46] i [32], barem u pogledu broja ekspanzija i pojava na slobodnoj površini.

Slika 5.40 prikazuje promjene tlakova u dvije različite točke. Jedan je točka centar mjehura (crna boja) dok druga točka odgovara presijecanju mirne slobodne površine i osi simetrije (crvena boja). Naravno, iznosi tlakova veći su u centru mjehurića te se u jednom i u drugom slučaju vrhovi javljaju u trenucima kontrakcije mjehurića.

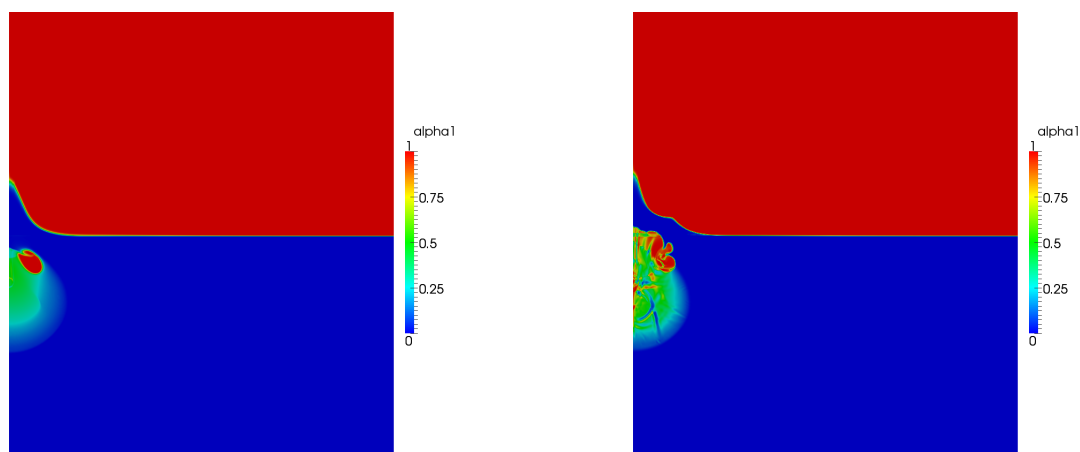
Na slikama 5.37 (lijevo) i slikom 5.38 (desno) na kojima se vide kontrakcije.

Slika 5.41 prikazuje promjenu mase plina. Vrlo veliki iznos mase plina posljedica je prisutnosti atmosfere iznad slobodne površine. Vidljive su fluktuacije no njihov je iznos manji od 0.005 % ukupne mase što je zanemarivo. Kod prve kontrakcije vidljiv je nagli pad kao i u slučaju s dubokom eksplozijom što vjerojatno ima veze s naglom promjenom tlaka.

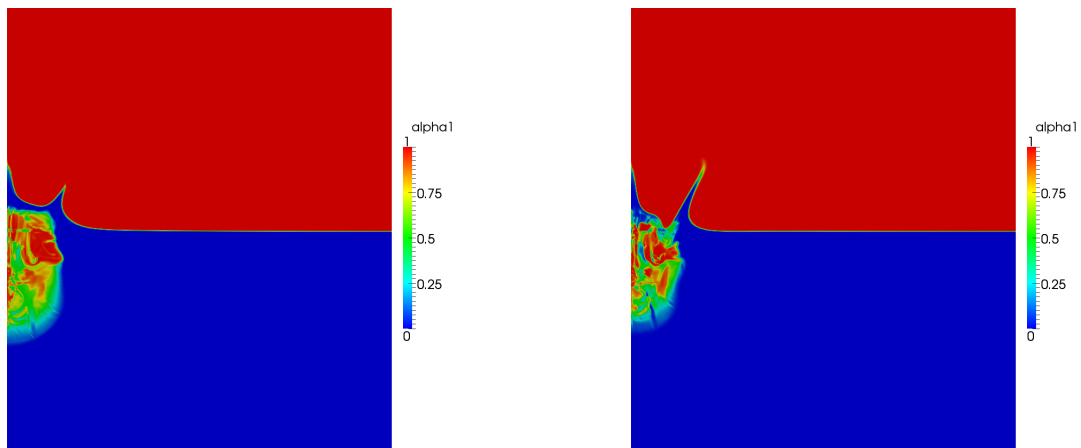
Proračun je proveden paralelno na četiri jezgre te je trajao 34.6 h na računalu s karakteristikama: Intel Core i5-3570 CPU @ 3.4 GHz 15.6 GiB.



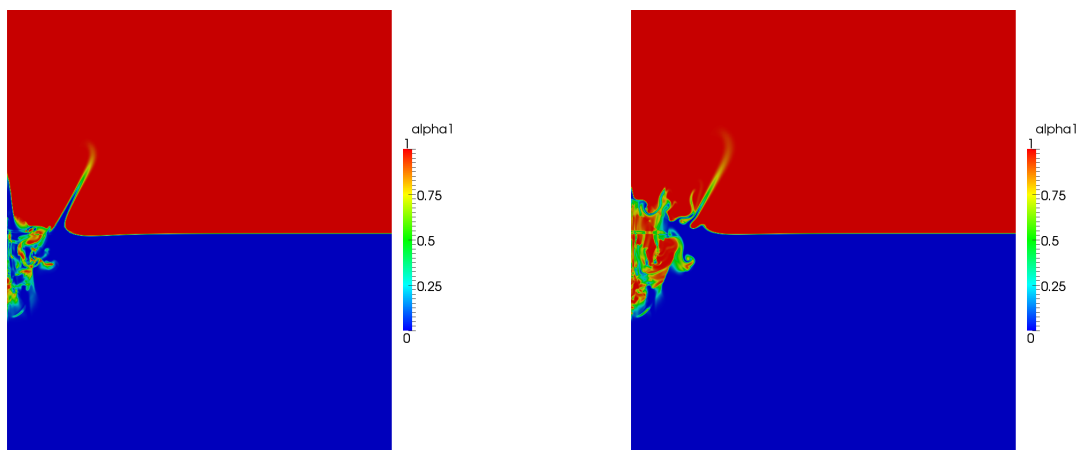
Slika 5.36: Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 0 s (lijevo) i 0.5 s (desno)



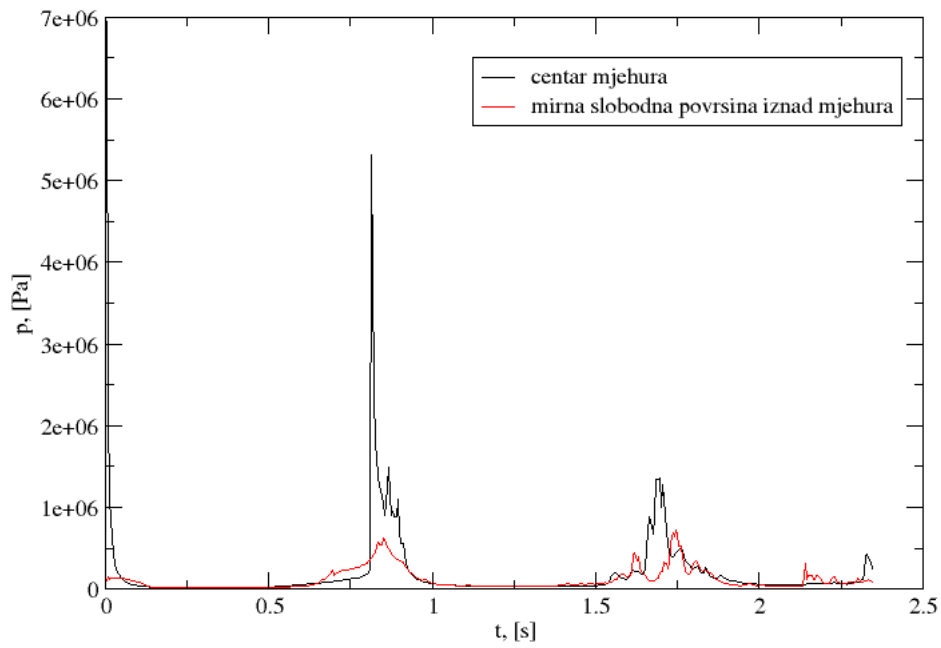
Slika 5.37: Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 0.75 s (lijevo) i 1 s (desno)



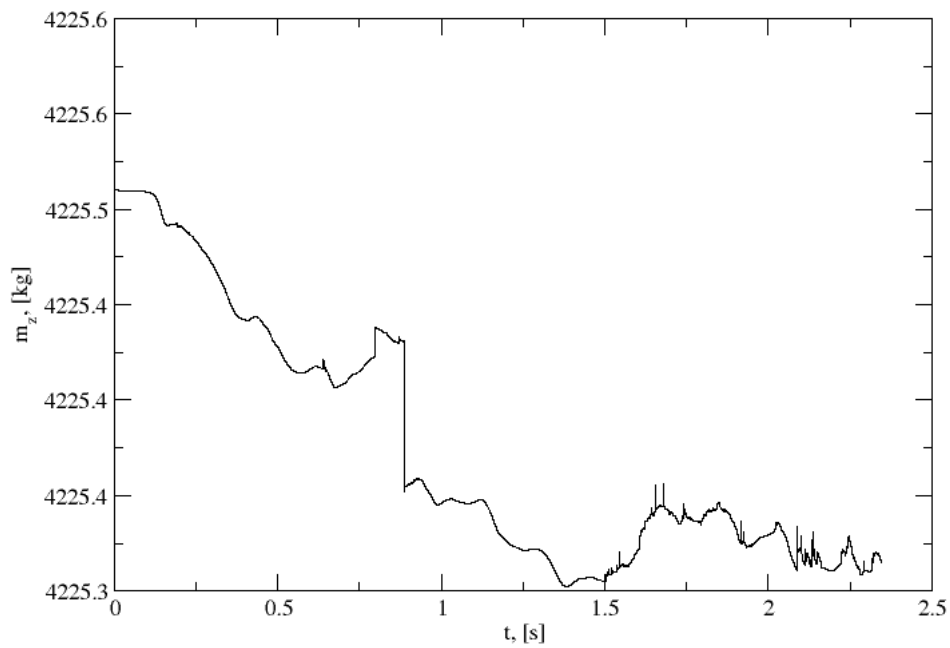
Slika 5.38: Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 1.25 s (lijevo) i 1.5 s (desno)



Slika 5.39: Prikaz mjehurića i slobodne površine nakon: 1.75 s (lijevo) i 2 s (desno)



Slika 5.40: Promjena tlaka u pojedinim točkama.



Slika 5.41: Promjena mase plina u vremenu.

U ovom poglavlju prikazana je izvedba matematičkog modela dinamike sferičnog mjehurića uz teoriju koja opisuje podvodne eksplozije. Također su prikazani rezultati validacijskih slučajeva. U slijedećem poglavlju biti će prikazani rezultati simulacije ubrizgavanja metala pri velikim brzinama u kalup.

6. Ubrizgavanje tekućeg metala u zatvoreni kalup

U ovom poglavlju biti će prikazana geometrija i numeričke postavke slučaja ubrizgavanja tekućeg metala u kalup. Također će biti dani rezultati simulacija.

Ubrizgavanje tekućeg metala u kalup pri velikim brzinama spada u klasu strujanja fluida sa slobodnom površinom u kojima je jedna faza kompresibilna. U ovom radu za simulacije je uzet aluminij kao metal. Svojstva tekućeg aluminija i plina dani su u tablicama 6.1 i 6.2. Svojstva aluminija preuzeta su iz [47] i [48]. Podaci za ulaznu brzinu i geometrija uzeti su iz [49].

Tablica 6.1: Svojstva plina.

Kinematička viskoznost, ν	$1.589 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Masena plinska konstanta, R	300 J/kgK
Omjer specifičnih toplina, γ	1.3
Gustoća, ρ	1 m^3
Adijabatska konstanta, a_c	$101325 \text{ m}^2/\text{s}^2$

Tablica 6.2: Svojstva aluminija.

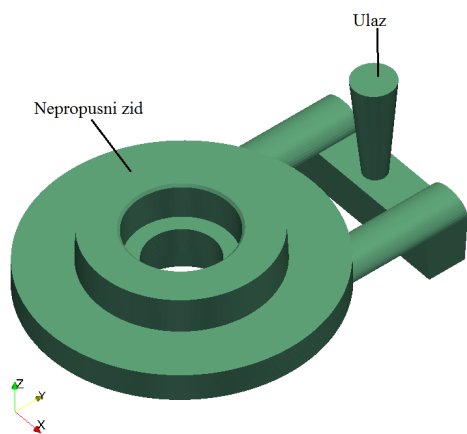
Kinematička viskoznost, ν	$4.62 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
Početna gustoća, ρ_0	2380 m^3
Početni tlak, p_0	101325 Pa
Kompresibilnost aluminija, ψ	$2.568 \cdot 10^{-8} \text{ s}^2/\text{m}^2$
Temperatura, T	933.47 K
Gustoća, ρ	2380 m^3

U tablici 6.3 dani su rubni uvjeti na pojedinim granicama. Na ulazu je postavljen rubni uvjet `fixedValue` za brzinu koja ima komponentu u z-smjeru čiji je iznos -0.26 m/s . Na slikama 6.1a i 6.1b je prikazana geometrija kalupa čije su glavne dimenzije $0.12 \times 0.16 \times 0.05 \text{ m}$ sa označenim granicama gdje je ishodište u centru diska.

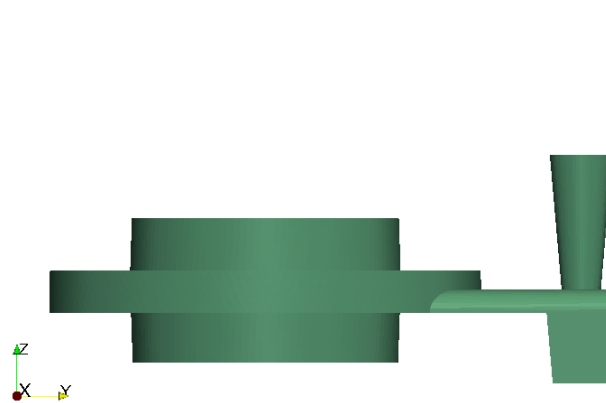
Slika 6.2 prikazuje proračunsku mrežu. Ona se sastoji od 174227 kontrolnih volumena od čega je: 102303 tetraedara, 69167 heksaedara, 656 prizmi i 2101 piramida.

Tablica 6.3: Rubni uvjeti.

Granica	α_1	p_d	\mathbf{u}
Ulaz	fixedValue uniform 0	zeroGradient	fixedValue uniform (0 0 -0.26)
Nepropusni zid	zeroGradient	zeroGradient	fixedValue uniform (0 0 0)

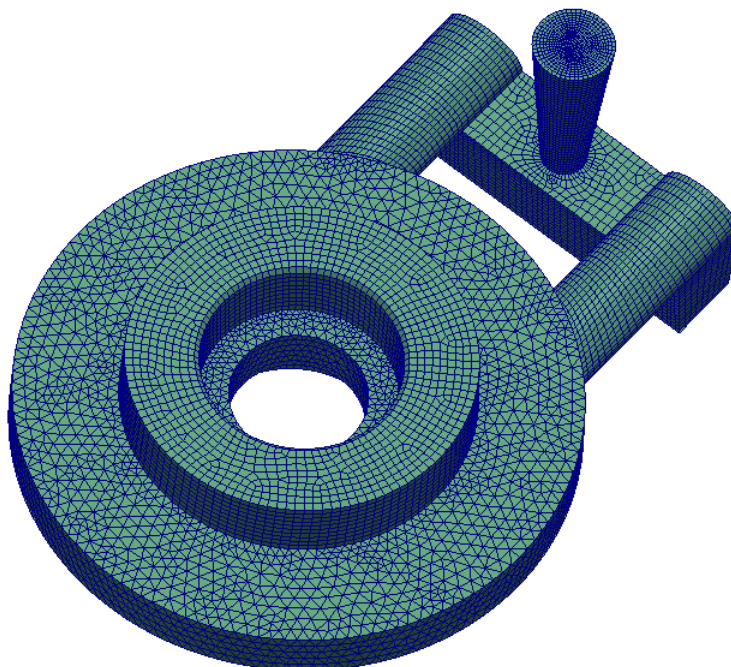


(a) Izometrijski pogled.



(b) Bočni pogled.

Slika 6.1: Prikaz geometrije kalupa.

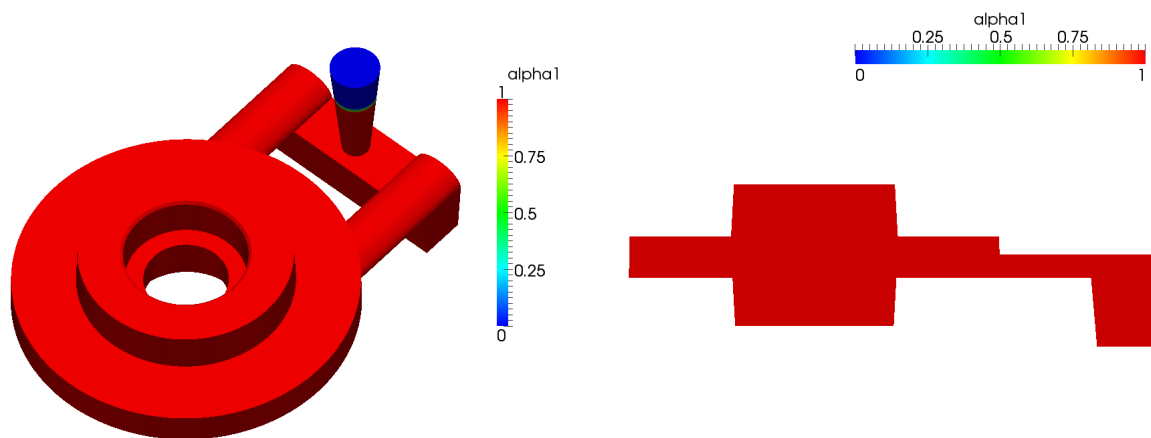


Slika 6.2: Prikaz mreže.

Rezultati

Ukoliko se usporede rezultati s [49] vidljive su razlike. Međutim, rezultati pokazuju fizikalno korektno ponašanje te se smatra da su numeričke postavke točne. Mogući razlog razlika leži u tome što je medij korišten u ovom radu čisti tekući aluminij koji se ponaša kao Newtonovski fluid što pak pojednostavljuje simulacije. U [49] je također korišten posebno namijenjeni program QuikCast [50] za simulaciju lijevanja u kojem postoji veliki izbor materijala sa svim potrebnim svojstvima za simulaciju lijevanja. Također se simulira hlađenje kalupa što uzrokuje povećanje viskoznosti što pak usporava strujanje. Vrijeme punjenja kalupa je u ovom radu za ≈ 2 s manje što je očekivano uzevši u obzir gore navedene razloge. U ovom radu se veliki disk počinje puniti sa suprotne strane dolaska aluminija dok je u [49] obrnut slučaj. To se također može objasniti velikim brzinama punjenja koje su iznosile i do 1.5 m/s što uzrokuje mlaz koji posjeduje veliku količinu gibanja. To je relativno velika brzina budući da su dimenzije vrlo male.

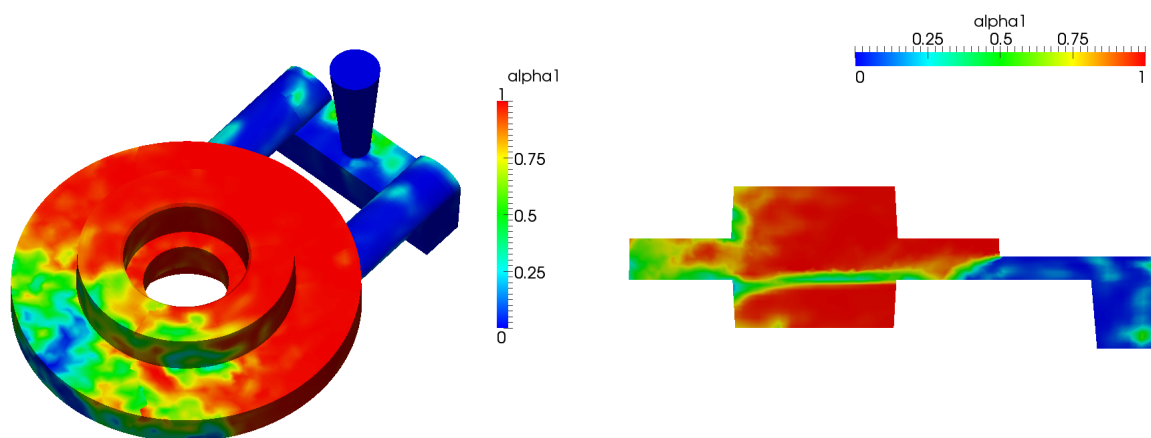
Slike 6.3-6.7 prikazuju punjenje kalupa. Na početku se vidi da je dio lijevka zauzet plavom bojom što označava aluminij. To se radi kako bi se simulacija stabilizirala na samom početku. Prvo se puni dio u koji ulazi lijevak. Nakon toga slijedi punjenje kanala koji ulaze u glavni disk. Na slikama koje prikazuju presjek (0.003 m u x smjeru) moguće je vidjeti gore spomenuti mlaz koji se javlja na ulazu u disk i objašnjava zašto se najprije puni suprotni kraj diska. Nakon toga se disk popunjuje u smjeru kanala koji ulaze u njega.



(a) Volumni udio pri 0 s.

(b) Volumni udio na presjeku pri 0 s.

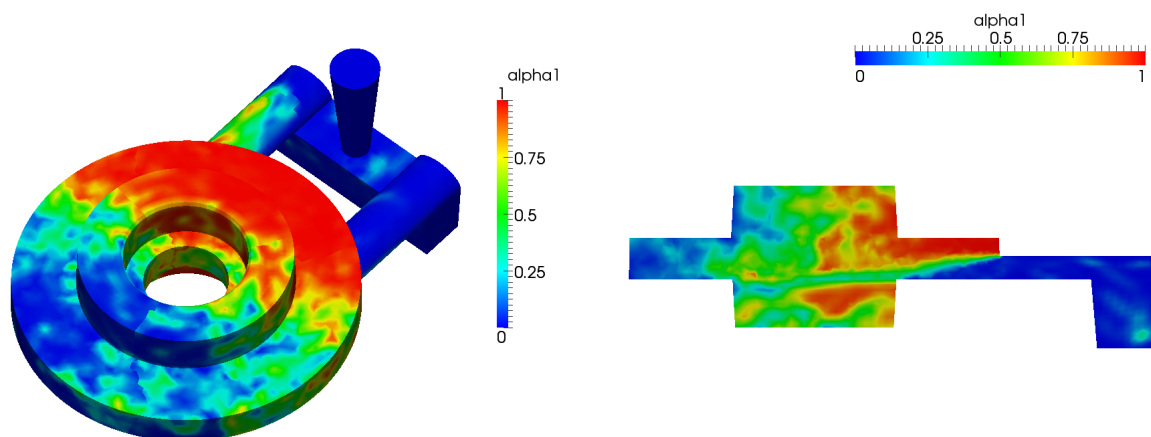
Slika 6.3: Ubrizgavanje pri 0 s.



(a) Volumni udio nakon 1 s.

(b) Volumni udio na presjeku nakon 1 s.

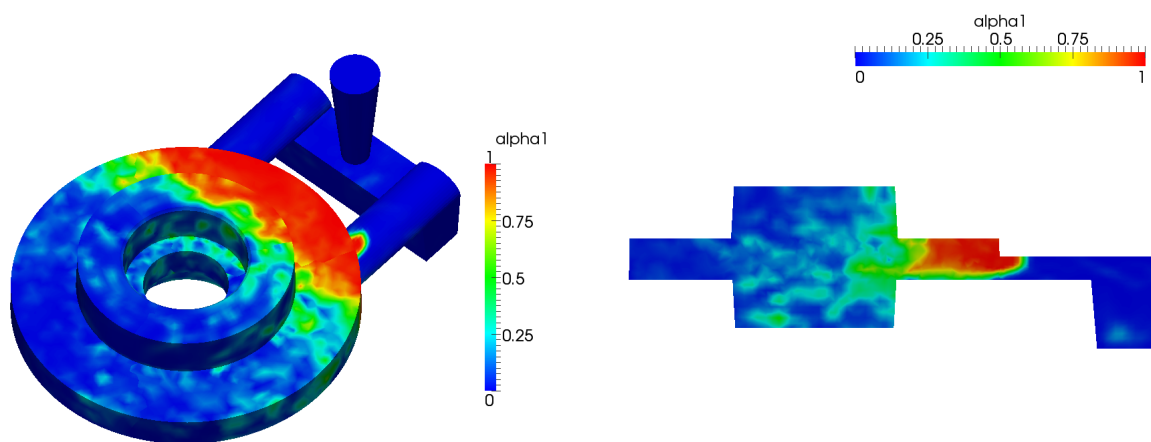
Slika 6.4: Ubrizgavanje nakon 1 s.



(a) Volumni udio nakon 2 s.

(b) Volumni udio na presjeku nakon 2 s.

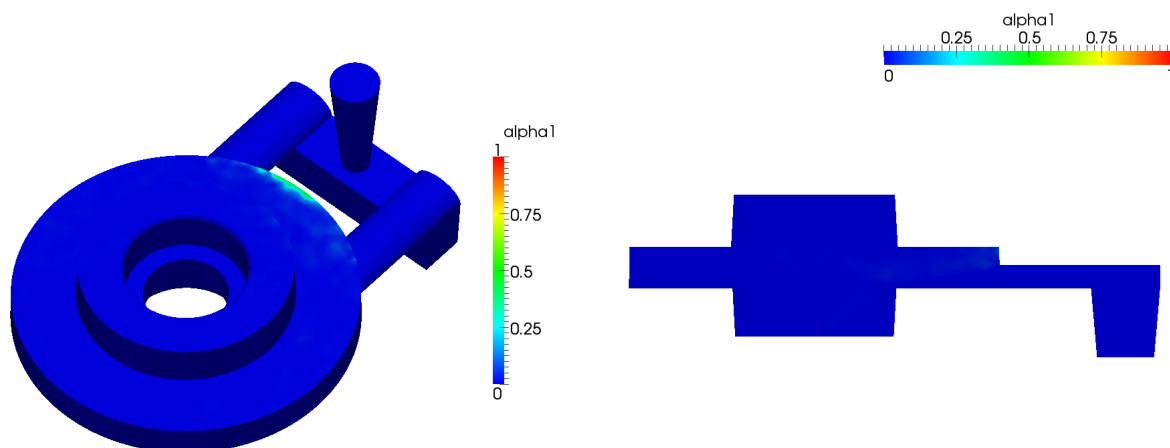
Slika 6.5: Ubrizgavanje nakon 2 s.



(a) Volumni udio nakon 3 s.

(b) Volumni udio na presjeku nakon 3 s.

Slika 6.6: Ubrizgavanje nakon 3 s.

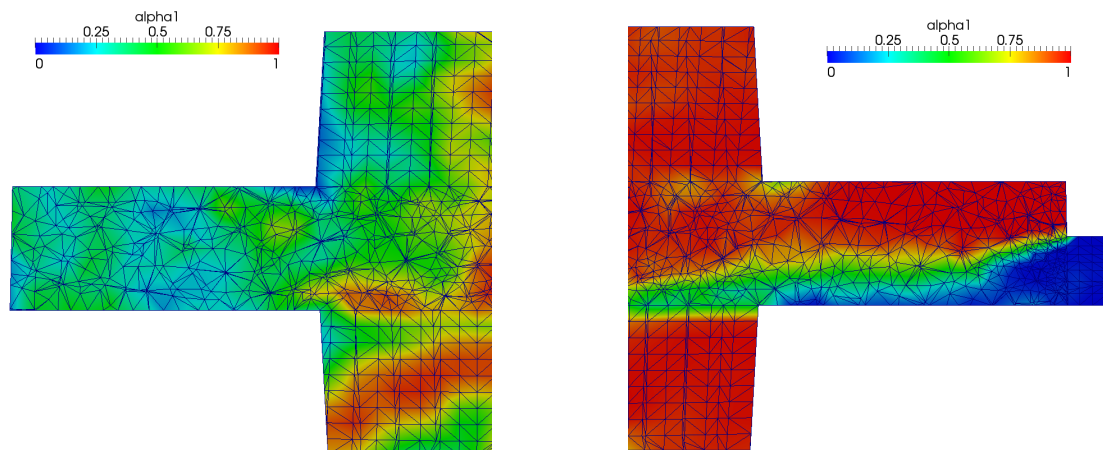


(a) Volumni udio nakon 4 s.

(b) Volumni udio na presjeku nakon 4 s.

Slika 6.7: Ubrizgavanje nakon 4 s.

Na slici 6.8 je vidljiva "razmazanost" pojedinih faza čemu je razlog vrlo gruba mreža. Kako bi se to umanjilo potrebno je profinjene mreže. Budući da su računalni resursi ograničeni to nije ostvareno u ovom radu.



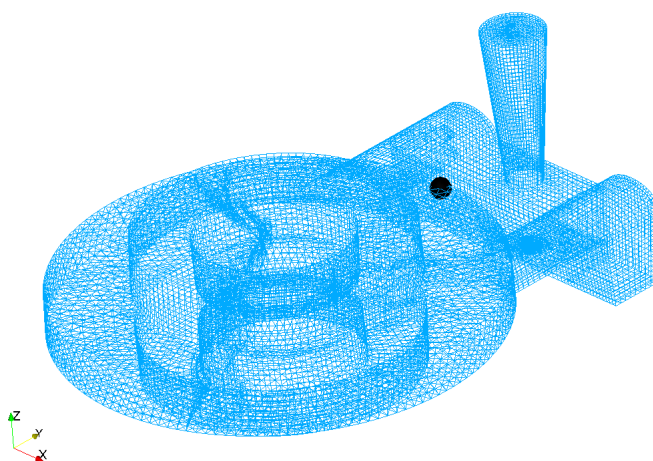
(a) Mreža na lijevoj strani diska.

(b) Mreža na desnoj strani diska.

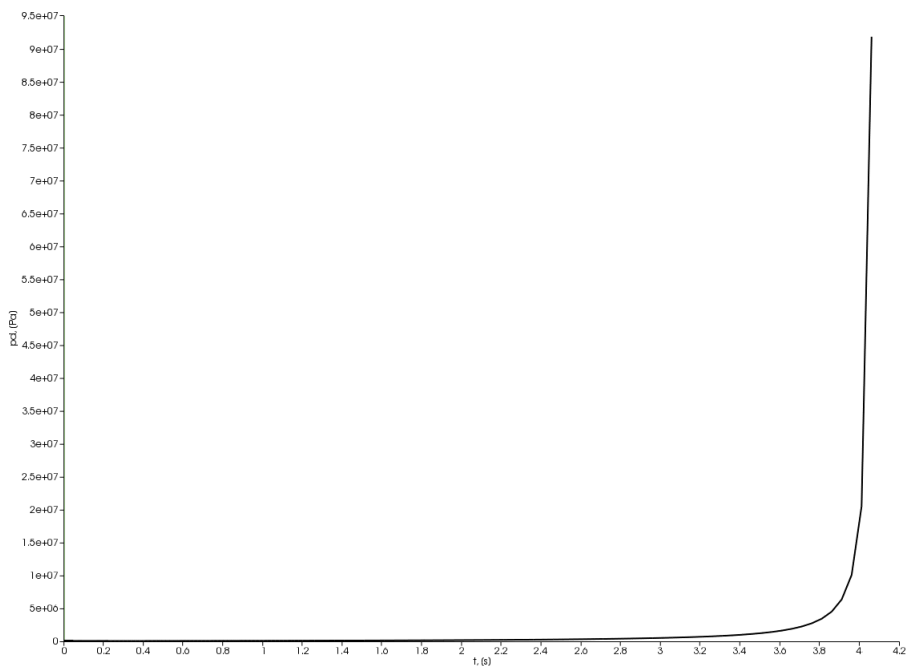
Slika 6.8: Mreža u disku.

Slika 6.10 prikazuje promjenu tlaka u točki prikazanoj na slici 6.9. Ta točka je odabrana budući da ovdje ostaje zarobljeni zrak koji se komprimira kako punjenje napreduje. To potvrđuje i krivulja tlaka. Slika 6.11 prikazuje promjenu temperature u istoj točki. Ona također raste što je pak posljedica naglog rasta tlaka.

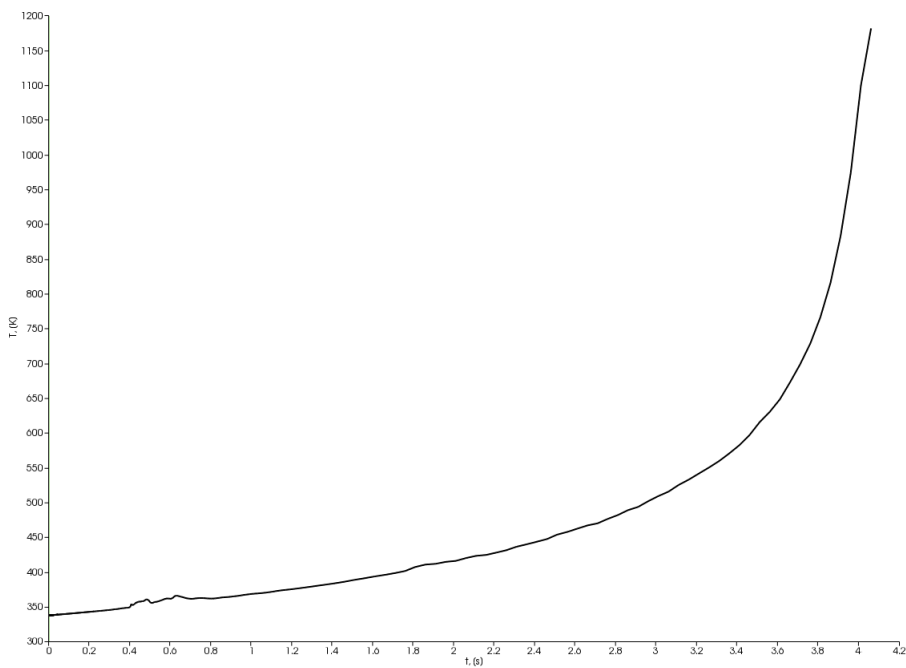
Slika 6.12 prikazuje promjenu mase zraka u vremenu te se gotovo ne mijenja. Fluktuacije koje nastaju su vjerojatno posljedica zaustavljanja simulacije te njenog ponovnog uključivanja.



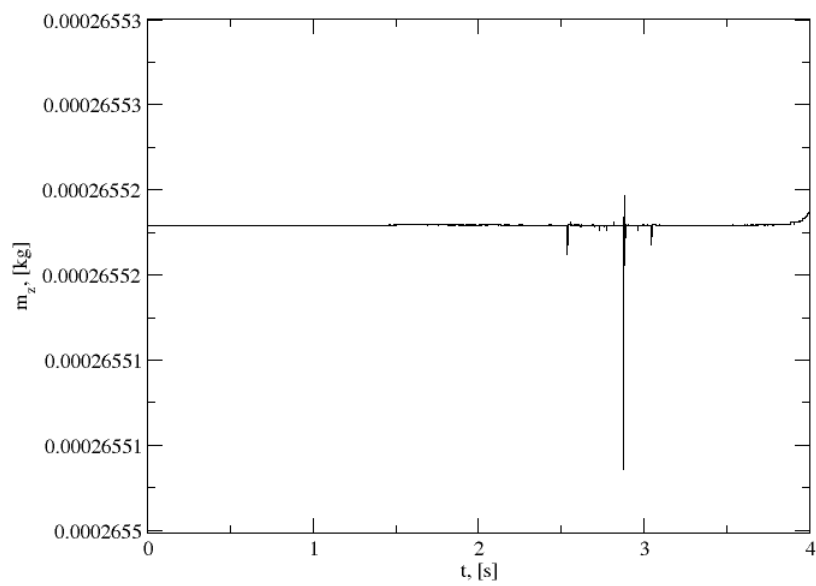
Slika 6.9: Točka u kojoj su prikazani tlak i temperatura.



Slika 6.10: Promjena tlaka u određenoj točki.



Slika 6.11: Promjena temperature u određenoj točki.



Slika 6.12: Promjena mase zraka u vremenu.

7. Zaključak

Novi numerički pristup za rješavanje homogenih kompresibilnih višefaznih strujanja pokazuje vrlo dobru stabilnost i robusnost čak i kod slučajeva s vrlo velikim omjerima tlakova. Provedene simulacije obuhvaćaju podvodne eksplozije i ubrizgavanje tekućeg metala u kalup.

Slučajevi s podvodnom eksplozijom pokazuju vrlo dobra poklapanja s eksperimentima i drugim numeričkim simulacijama. Ponašanje mjehurića u slučaju s dubokom eksplozijom kvantitativno odstupa od teorijskog rješenja Rayleigh-Plessetove jednadžbe no maksimalni radijus ($R = 0.4$ m) i kvalitativni izgled krivulje (slika 5.7) vrlo se dobro poklapaju s tim rješenjem. Nadalje, slike volumnog profila mjehurića se u određenim trenucima također poklapaju s onima viđenim u eksperimentima. Neslaganja simulacija s teorijskim rješenjem ne iznenađuje budući da ono zanemaruje utjecaj nekih fizikalnih veličina kao npr. viskoznost. Time, zapravo, rješenje Rayleigh-Plesset jednadžbe ne uzima u obzir realno strujanje fluida.

Simulacije eksplozije ispod ploče daju rezultate koji se vrlo dobro poklapaju s onima dobivenim u [35]. Mogući uzroci razlika koje se javljaju u volumnom profilu mjehurića mogu biti drugačije jednadžbe stanja koje se koriste u [35] te različite sheme diskretizacije u vremenu. Potrebno je napomenuti da se u simulacijama javlja fenomen vodenog mlaza koji se također javlja u eksperimentima. Vrijednosti tlakova u podnožju ploče pokazuju očekivane odnose u zavisnosti od udaljenosti od osi simetrije pri čemu najveću vrijednosti ima onaj koji je najbliži.

U simulaciji eksplozije ispod slobodne površine ponašanje mjehurića pokazuje dobro poklapanje s teoretskim razmatranjima. Javlja se "razmazanost" prijelaznog sloja što se može pripisati numerici. Mogući razlog leži u slaboj sprezi jednadžbi. Nova metoda povezivanja jednadžbi trebala bi riješiti taj problem.

Simulacije ubrizgavanja tekućeg metala u kalup dale su rješenja koja se ne poklapaju s onima u [49] ali imaju fizikalnog smisla. Moguće rješenje je uvođenje transportnog modela koji može simulirati ne-Newtonovske fluide što bi omogućilo korištenje šireg spektra materijala. Potrebno je razmotriti mogućnost simuliranja hlađenja kalupa što također utječe na brzinu lijevanja budući da povećava viskoznost fluida i bliže je stvarnom procesu. Također je potrebno napraviti profinjenje mreže kako bi se što bolje uhvatila granica fluida. Krivulje koje pokazuju promjenu tlaka odnosno temperature ne izgledaju fizikalno budući da u kratkom vremenu poprimaju vrlo velike iznose. S druge strane, rast tih veličina je očekivan budući da se zrak

komprimira kako punjenje napreduje.

U svim slučajevima praćena je promjena mase plina. Iako je u većem dijelu vremena ona očuvana postoje trenuci gdje oscilira. Najčešće su to trenuci naglih promjena tlaka s kojim je indirektno povezana preko jednadžbe stanja.

Neki problemi bi se vjerojatno mogli riješiti implementacijom energetske transportne jednadžbe za plin umjesto jednadžbe stanja. Ona se pokušavala rješavati u ovom radu, međutim to nije uspjelo. Također bi se mogla poboljšati stabilnost i brzina postojećeg rješavača implementacijom nove metode povezivanja jednadžbi.

Bibliografija

- [1] I. Džijan. *Računalna mehanika fluida*. unpublished, 2010.
- [2] H. Rusche. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two - Phase Flows at High Phase Fractions*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, 2002.
- [3] O. Ubbink. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, 1997.
- [4] B.J. Daly. A technique for including surface tension effects in hydrodynamic calculations. *Journal of Computational Physics*, 4:97–117, 1969.
- [5] B.D. Nichols and C.W. Hirt. Calculating three-dimensional free surface flows in the vicinity of submerged and exposed structures. *J. Comput. Phys.*, 4:234–246, 1973.
- [6] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependant speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79:12–49, 1988.
- [7] A. Dervieux and F. Thomasset. *A finite element method for the simulation of a Rayleigh-Taylor instability*. -, 1979.
- [8] J. Glimm, O. McBryan, R. Menikoff, and Sharp. Front tracking applied to rayleigh-taylor instability. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7 (1):230–251, 1986.
- [9] F.H. Harlow and J.E Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8 (12):2182–2189, 1965.
- [10] W.F. Noh and P. Woodward. Slic (simple line interface calculations). *Lecture Notes in Physics*, 59:330–340, 1976.
- [11] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39:201–225, 1981.
- [12] R. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152:457, 1999.

- [13] R. R. Nourgaliev, T. N. Dinh, T. G. Theofanous, and J. M. Koning. Direct numerical simulation of disperse multiphase high-speed flows. *AIAA Aerospace Sciences Meeting*, -:-, 2004.
- [14] F. K. L. Tan, B. C. Khoo, and J. White. A level set-boundary element method for the simulation of underwater bubble dynamics. *J. Sci. Comput.*, -:-, 2006.
- [15] A. Wardlaw. *Underwater explosion test cases*. Office of Naval Research, 1998.
- [16] P. Colella and K. Pao. A projection method for low speed flows. *J. Comput. Phys.*, 149 (2):245–269, 1999.
- [17] F. Xiaoi, R. Akoh, and S. Ii. Unified formulation for compressible and incompressible flows by using multi-integrated moments ii: Multi-dimensional version for compressible and incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, 213:31–56, 2006.
- [18] T. Yabe, Y. Ogata, and K. Takizawa. The next generation cip as a conservative semi-lagrangian solver for solid, liquid, and gas. *J. Comput. Appl. Math.*, 149:267–277, 2002.
- [19] T. Yabe and Wang P. Y. Unified numerical procedure for compressible and incompressible flow. *J. Phys. Soc. Japan*, 60:2105–2108, 1991.
- [20] T. Yabe, F. Xiaoi, and T. Utsumi. The constrained interpolation profile method for multiphase analysis. *J. Comput. Phys.*, 169:556–593, 2001.
- [21] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *J. Comput. Phys.*, 150:425–467, 1999.
- [22] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the numerical simulation of interfaces in two-phase flows. *C. R. Acad.Sci. - Series I: Mathematics*, 331:1017– 1022, 2000.
- [23] A. Murrone and H. Guillard. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181:577–616, 2005.
- [24] A. K. Kapila, R. Menikoff, and J. B. Bdzil. Two-phase modeling of deflagration to detonation transition in granular materials: Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13 (10):3002–3024, 2001.
- [25] F. Coquel, K. E. Amine, E. Godlewski, B. Perthame, and P. Rascle. A numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 136:272–288, 1997.

- [26] A. Bagabir and D. Drikakis. Mach number effects on shock-bubble interaction. *Shock Waves*, 11:209–218, 2001.
- [27] H. Terashima and G. Tryggvason. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 288 (11):4012–4037, 2009.
- [28] R. K. Shukla, C. Pantano, and J. B. Freund. An interface capturing method for the simulation of multi-phase compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 229:7411–7439, 2010.
- [29] A. Wardlaw Jr and H. Mair. Spherical solutions of an underwater explosion bubble. *Shock and Vibration*, 5 (2):89–102, 1998.
- [30] J. Brett. *Numerical modelling of shock wave and pressure pulse generation by underwater explosions.* -, 1998.
- [31] J. Chisum. *Simulation of the dynamic behavior of explosion gas bubbles in a compressible fluid medium.* PhD thesis, Naval Postgraduate School, 1996.
- [32] S. A. Wilkerson. *Boundary Integral Technique for Explosion Bubble Collapse Analysis.* Army Research Laboratory, 1993.
- [33] P. Chan, K. Kan, and J. Stuhmiller. A computational study of bubble-structure interaction. *Journal of Fluids Engineering*, 122:783, 2000.
- [34] A. M. Zhang, X. L. Yao, and X. B. Yu. The dynamics of three-dimensional underwater explosion bubble. *Journal of Sound and Vibration*, 311:1196–1212, 2008.
- [35] S. Y. Kadioglu and M. Sussman. Adaptive solution techniques for simulating underwater explosions and implosions. *Journal of Computational Physics*, 227 (3):2083–2104, 2008.
- [36] K. Kan, P. Chan, and J. Stuhmiller. Simulation of the collapse of an underwater explosion bubble under a circular plate. *Shock and Vibration*, 12 (3):217–226, 2005.
- [37] S. Popinet and S. Zaleski. Bubble collapse near a solid boundary: a numerical study of the influence of viscosity. *Journal of Fluid Mechanics*, 464 (1):137–163, 2002.

- [38] C. Farhat, A. Rallu, and S. Shankaran. A higher-order generalized ghost fluid method for the poor for the three-dimensional two-phase flow computation of underwater implosions. *Journal of Computational Physics*, 227 (16):7674–7700, 2008.
- [39] C. E. Brennen. *Fundamentals of Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2005.
- [40] S.T. Miller, H. Jasak, D.A. Boger, E.G. Paterson, and A. Nedungadi. A pressure-based, compressible, two-phase flow finite volume method for underwater explosions. *Computers and Fluids*, 87:132–143, 2013.
- [41] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1996.
- [42] H. Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, 1996.
- [43] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. Pearson Education Limited, 2007.
- [44] M. C. Cinnamon. Modeling laser-generated cavitation bubbles. Master’s thesis, The Pennsylvania State University, 2012.
- [45] C. E. Brennen. *Cavitation and Bubble Dynamics*. Oxford University Press, 1995.
- [46] R. H. Cole. *Underwater Explosions*. Princeton University Press, 1948.
- [47] M. Bachmann, V. Avilov, A. Gumenyuk, and M. Rethmeier. Cfd simulation of the liquid metal flow in high power laser welding of aluminum with electromagnetic weld pool support. *Fluid mechanics and heat and mass transfer; Recent researches in mechanics*, -:-, 2011.
- [48] National Physical Laboratory. Tables of physical and chemical constants. http://kayelaby.npl.co.uk/general_physics/2_2/2_2_3.html.
- [49] D. Brčić. Lijevanje dijela od aluminijske legure. Master’s thesis, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, Zagreb, 2013.
- [50] ESI Group. Software and services. <https://www.esi-group.com/software-services/virtual-manufacturing/casting>.

UNIVERSITY OF ZAGREB
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING AND NAVAL
ARCHITECTURE

MASTER'S THESIS
Extended summary

Tomislav Gradinščak

Zagreb, 2014.

UNIVERSITY OF ZAGREB
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING AND NAVAL
ARCHITECTURE

MASTER'S THESIS
Extended summary

Supervisor:

Ph.D DIC Hrvoje Jasak, CEng

MIMechE

Student:

Tomislav Gradinščak

Zagreb, 2014.

Contents

List of Figures	ii
List of Tables	iv
1. Introduction	1
2. Mathematical model	2
2.1. Modified Navier-Stokes equations	2
2.1.1. Conservation equations: Conservative form	2
2.1.2. Isentropic equation of state for gas phase	3
2.1.3. Isothermal equation of state for liquid phase	3
2.1.4. Conservation equations: non-conservative form	3
2.2. Volume of Fluid method for interface capturing	4
3. Validation cases	6
3.1. Deep underwater explosion	7
3.2. Deep explosion near a plate	14
3.3. Underwater explosion near a free surface	23
4. Liquid metal casting in closed mould	28
Bibliography	37

List of Figures

3.1	Schematic of an underwater explosion event [4].	6
3.2	Computational domain.	8
3.3	Radius vs time.	9
3.4	Radius vs time.	9
3.5	Bubble profile: at the initial conditions (left); at the maximum radius (right).	10
3.6	Bubble profile: at the end of the first cycle (left); at the beginning of the second cycle (right).	10
3.7	Pressure change in bubble centre.	11
3.8	Density change in bubble centre.	12
3.9	Velocity change in bubble centre.	12
3.10	Gas mass change in time.	13
3.11	Schematic of an underwater explosion near a plate [4].	14
3.12	Computational domain.	15
3.13	Pressure field after: 0.1 ms (left); 0.2 ms (right)	17
3.14	Pressure field after: 0.4 ms (left); 0.6 ms (right)	17
3.15	Pressure field after: 0.8 ms (left); 1 ms (right)	17
3.16	Pressure field from [16] after: 0.1 ms (left); 0.4 ms (right)	18
3.17	Pressure field from [16] after: 0.8 ms (left); 1 ms (right)	18
3.18	Bubble profile after: 1 ms (left); 4 ms (right)	19
3.19	Bubble profile after: 8 ms (left); 15 ms (right)	19
3.20	Bubble profile after: 18.5 ms (left); 20 ms (right)	19
3.21	Bubble profile from [16] after: 1 ms (left); 8 ms (right)	20
3.22	Bubble profile from [16] after: 11 ms (left); 12 ms (right)	20
3.23	Pressure change in bubble centre.	21
3.24	Pressure change under plate	21
3.25	Gas mass change in time.	22
3.26	Computational domain.	23
3.27	Bubble profile and free surface after: 0 s (left); 0.5 s (right)	25
3.28	Bubble profile and free surface after: 0.75 s (left); 1 s (right)	25
3.29	Bubble profile and free surface after: 1.25 s (left); 1.5 s (right)	25
3.30	Bubble profile and free surface after: 1.75 s (left); 2 s (right)	26

3.31	Pressure change in different points.	26
3.32	Gas mass change in time.	27
4.1	Mould geometry.	29
a	Isometric view.	29
b	Side view.	29
4.2	Computational mesh.	29
4.3	Casting at 0 s.	30
a	Volume fraction at 0 s.	30
b	Volume fraction on intersection at 0 s.	30
4.4	Casting at 1 s.	31
a	Volume fraction at 1 s.	31
b	Volume fraction on intersection at 1 s.	31
4.5	Casting at 2 s.	31
a	Volume fraction at 2 s.	31
b	Volume fraction on intersection at 2 s.	31
4.6	Casting at 3 s.	32
a	Volume fraction at 3 s.	32
b	Volume fraction on intersection at 3 s.	32
4.7	Casting at 4 s.	32
a	Volume fraction at 4 s.	32
b	Volume fraction on intersection at 4 s.	32
4.8	Computational mesh inside disk.	33
a	Computational mesh on the left side disk.	33
b	Computational mesh on the right side disk.	33
4.9	Point in which pressure and temperature are shown.	34
4.10	Pressure change in point.	34
4.11	Temperature change in point.	35
4.12	Gas mass change in time.	35

List of Tables

3.1	Gas properties.	7
3.2	Water properties.	7
3.3	Simulation parameters.	7
3.4	Boundary conditions.	8
3.5	Boundary conditions.	14
3.6	Simulation parameters.	15
3.7	Boundary conditions.	23
3.8	Simulation parameters.	23
4.1	Gas properties.	28
4.2	Aluminum properties.	28
4.3	Boundary conditions.	28

Nomenclature

Latin letters

Symbol	Unit	Description
\mathbf{u}	m/s	velocity vector
\mathbf{u}^r	m/s	velocity vector for transitional area compression
\mathbf{g}	m/s ²	gravitational acceleration
p	Pa	absolute pressure
p_0	Pa	reference pressure
p_d	Pa	dynamic pressure
p_{G_0}	Pa	initital pressure inside the bubble
t	s	time
V	m ³	volume
\mathbf{x}	m	spatial vector
T	K	temperature
c	m/s	speed of sound
R	J/kg K	gas constant
a_c	m ² /s ²	isentropic constant
V_0	m ³	initial gas bubble volume
R_0	m	initial gas bubble radius

Greek letters

Symbol	Unit	Description
ρ	kg/m ³	density
ρ_0	kg/m ³	reference density
μ	Pas	dynamic viscosity
μ_{eff}	Pas	effective dynamic viscosity
ν	m ² /s	kinematic viscosity
α	-	volume fraction
δ	-	transitional area
σ_C^D	Pa	deviatoric stress tensor
γ	-	specific heat ratio
ψ	s ² /m ²	water compressibility

Symbol	Unit	Description
θ	$^{\circ}$	cut out angle

Abstract

A new numerical approach for compressible flow simulations with free surface is presented in this thesis. Derivation of modified Navier-Stokes equations which is implemented in software package OpenFOAM is carried out. Isentropic and isothermal equations of state are used as a supplementary equations to calculate properties for each phase. A volume fraction is used to distinguish between the disparate phases. VOF method is used to capture free surface. Discretization of mathematical model with finite volume method is shown. A pressure-based, segregated algorithm is used to solve for primitive variables (volume fraction, velocity, dynamic pressure). The segregated algorithm is called PIMPLE and overview of its implementation in OpenFOAM is given.

Flow simulations with free surface in which the compressibility of one or more phases needs to be considered presents a challenge for numerical modelling. Underwater explosions surely belong in this category. In this cases, the density ratio between explosion gases and surrounding liquid is typically $O(10^3)$, and the pressure ratio can be just as high. To test solver robustness in presence of large density and pressure discontinuities validation cases had to be solved and simulation parameters to be determined. Simulations in this work included deep underwater explosion, explosion near a plate and explosion near a free surface. The results were compared with experiments and other numerical simulations. One more example of compressible flow with free surface was simulated: liquid metal casting in closed mould. The results were compared with those found in literature.

Key words: finite volume method, multiphase flow, underwater explosions, metal casting

1. Introduction

Most of the problems in fluid flows are described by nonlinear partial differential equations which don't have analytical solution for problems of engineering interest. Navier-Stokes equations have limited number of analytical solutions and only for laminar flows [1]. Turbulent flows cannot be described by analytical solution because of their stochastic behavior [1]. This reason explains why were experiments used in the past as a main tool for data gathering. Although very useful, they can give limited number of informations and can be very expensive.

To overcome above mentioned problems, numerical methods were developed. With the rapid computer development in past 2 decades, conditions for their implementation were created. To start the numerical procedure, one must discretise the computational domain. This produces computational mesh which is used to calculate field variables in discrete manner. It is followed by discretisation of the partial differential equations which can be done by various methods (finite volume method, finite element method etc.). The system of algebraic equations is then obtained which is solved by linear system solvers.

In many diverse industries, including process, aerospace and transport, flows with two or more phases are common practice and often such flows are the rule rather than the exception [2]. Also, multiphase flows can be found outside industrial applications and such examples are underwater explosions. Flows with free surface in which compressibility of one or more phases needs to be consider represent demanding class of problems. There are also cases where multiphase flows are unwanted, but are unavoidable. Hence, the analysis and understanding of such flows are of great importance if the optimal and safe process control and conduction wanted to be secured.

2. Mathematical model

2.1. Modified Navier-Stokes equations

In this work a compressible two-phase approach will be used. The differential forms of the equations are rearranged into a form suitable for implementation within co-located, cell-centered finite volume method. Such formulation differs from majority of methods developed for solving compressible multiphase flows [3].

The macro-scale physics of underwater explosions are essentially inviscid with little to no mixing over sufficiently short time intervals. This allows the formulation of model equations for homogeneous two-phase fluid: immiscible with no slip between phases. This reduces the number of conservation equations to single phase.

2.1.1. Conservation equations: Conservative form

Continuity equation for each phase k is:

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}) = 0, \quad k = \{1, 2\}, \quad (2.1)$$

with $\alpha_k, \rho_k, \mathbf{u}$ being the volume fraction, density and velocity of phase k , respectively. Final continuity equation is obtained by summing over both phases k :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.2)$$

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2. \quad (2.3)$$

The volume fractions obey the algebraic relationship:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (2.4)$$

The single momentum equation for the homogeneous mixture model is:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - (\nabla \mathbf{u}) \cdot \nabla \mu_{eff} - \mu_{eff} \Delta \mathbf{u} = -\nabla p_d - (\nabla \rho) \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad (2.5)$$

where the dynamic pressure is $p_d = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ and the effective viscosity is volume averaged as $\mu_{eff} = 4(\alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2)/3$.

In this work the changes in gas phase are considered as isentropic. The water is treated as compressible with isothermal equation of state (constant sound speed). The equations of state specify the phasic densities as functions of pressure.

2.1.2. Isentropic equation of state for gas phase

A fluid undergoing only isentropic processes is modeled with the equation of state:

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = a_c = \text{const.}, \quad (2.6)$$

where γ is the ratio of (constant) specific heats and a_c is the isentropic constant. *Total derivation* of ρ with respect to pressure is given as:

$$\left(\frac{d\rho}{dp}\right)\Big|_s = \frac{1}{a_c^\gamma} \left(\frac{p}{a_c}\right)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}. \quad (2.7)$$

2.1.3. Isothermal equation of state for liquid phase

The speed of sound in a fluid medium is given by the relation:

$$\left(\frac{d\rho}{dp}\right)\Big|_s = \frac{1}{c^2}, \quad (2.8)$$

where c is the speed of sound. Assuming a constant speed of sound, integration of (2.8) gives:

$$\rho - \rho_0 = \psi(p - p_0), \quad \psi = \frac{1}{c^2}, \quad (2.9)$$

with ρ_0 and p_0 arising as constants of integration representing a reference density and pressure.

2.1.4. Conservation equations: non-conservative form

Since the equations of state are given in terms of pressure, the pressure field is calculated and ρ_1 and ρ_2 are obtained algebraically. Momentum equation is obvious choice to calculate the velocity field. Volume fraction for one phase can be calculated and other can be obtained algebraically. The constraint is that all volume fractions have values in the interval $[0, 1]$. Hence, unknown fields are $\alpha_1, p_d, \mathbf{u}$ and algebraically obtained fields are α_2, ρ_1, ρ_2 , [3].

Equation (2.5) is solved to obtain the velocity field. Equations (2.1) and (2.2) must be rearranged into a form which is more suitable for numerical procedure.

To begin, continuity equation for phase k is considered, regarding the phase density as a function of pressure: $\rho_k = \rho_k(p)$. Equation (2.1) is expanded for $k = 1$ as:

$$\alpha_k \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho_k \right) + \alpha_k \rho_k \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho_k \left(\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_k \right) = 0. \quad (2.10)$$

Next, the chain rule to the derivative is applied and the terms are rearranged to obtain:

$$\left(\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_k \right) = -\frac{\alpha_k}{\rho_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) - \alpha_k \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.11)$$

Recall that (2.2) was obtained by summing (2.1) over all phases. Similarly, equation (2.11) can be summed over all phases to obtain single continuity equation:

$$\left(\frac{\alpha_1}{\rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial p} + \frac{\alpha_2}{\rho_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial p} \right) \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.12)$$

where $p = p_d + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$. The final form of volume fraction equation (2.11) is derived by using equation (2.12) in order to replace terms on the right-hand side:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{u}) - \alpha_1 \nabla \cdot \mathbf{u} = \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{\rho_{1,p} \rho_2 - \rho_{2,p} \rho_1}{\alpha_1 \psi_1 \rho_2 + \alpha_2 \psi_2 \rho_1} \right) \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.13)$$

where $\rho_{k,p} = \partial \rho_k / \partial p$. In equation (2.13) the volume fraction values α_1 are limited between 0 and 1. Numerical schemes which satisfy this condition introduce false diffusion. It would smear the transitional area δ which must be as thin as possible. In order to fix this, Weller scheme for the compression is implemented [2]. To achieve this, an extra term is added on the left-hand side in equation (2.13):

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}^r \alpha_1 (1 - \alpha_1)),$$

where \mathbf{u}^r represents velocity field, suitable for transitional area compression. The extra term allows use of simple interpolation schemes while keeping the values inside the boundaries with properly chosen velocity field \mathbf{u}^r .

2.2. Volume of Fluid method for interface capturing

The idea of this model is to describe immiscible two-phase flow as single phase flow. The method is conducted using volume fraction function [4] α_k which presents

unknown scalar field. Lower index "k" depicts single phase and has property:

$$\alpha_k = \begin{cases} 1 & \text{for k-th phase,} \\ 0 & \text{for other phase.} \end{cases} \quad (2.14)$$

Function α_k is used to give the two phases appropriate physical properties:

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2, \quad (2.15)$$

$$\mu = \alpha_1 \mu_1 + (1 - \alpha_1) \mu_2. \quad (2.16)$$

Volume fraction values for each phase α_k in individual cells is simply defined as [4]:

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V}. \quad (2.17)$$

For the purpose of numerical calculations, it is necessary for the volume fraction function to be continuous and differentiable over the whole domain. There should not be discontinuity in scalar field α_k . To solve this problem, the transitional area is given a small thickness:

$$\alpha_k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1, & \text{for point } \mathbf{x} \text{ in first phase,} \\ 0 < \alpha_k < 1, & \text{for point } \mathbf{x} \text{ in transitional area } \delta, \\ 1, & \text{for point } \mathbf{x} \text{ in second phase.} \end{cases} \quad (2.18)$$

3. Validation cases

Underwater explosions (UNDEX) refer to the detonation of explosive devices immersed in water. Figure 3.1 shows a schematic representation of a generic underwater explosion. The charge is detonated at some depth d relative to the free surface, possibly near a solid body. The physics of the explosion are very complex; they involve rapid chemical changes during the detonation process and they occur on an extremely short timescale.

The hydrodynamical response immediately after the detonation is modeled by assuming the explosion converts all of the fuel into a high pressure and high density gas bubble [3]. Any solid particles or other remnants of the explosive device are ignored. The resulting model is similar to a three-dimensional, spherical shock problem. The initial conditions are discontinuous at the initial bubble radius at time $t = 0$. Due to the large pressure and density jumps in the initial conditions, underwater explosions are mostly inertially dominated effects [3]. In this case, viscous effects and surface tension play a minor role in UNDEX simulations.

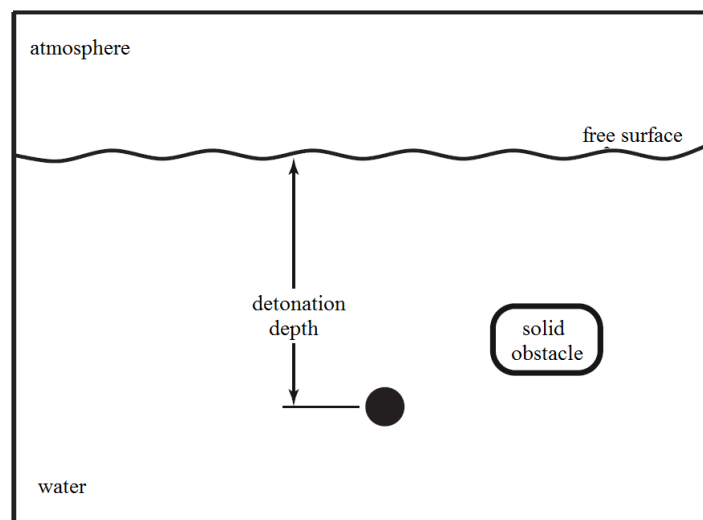


Figure 3.1: Schematic of an underwater explosion event [4].

3.1. Deep underwater explosion

Deep explosion test case is given in [3] where the results are compared with those in [5]. The initial gas bubble with $R_0 = 0.0667815$ m is centered at the coordinate origin. The explosion depth of the 0.3 kg TNT charge is 167.64 m. Initial pressure inside the bubble is $p_{G_0} = 1.31 \cdot 10^8$ Pa. In Tables 3.1 and 3.2 the fluids properties are given.

Table 3.1: Gas properties.

Kinematic viscosity, ν	$1.589 \cdot 10^{-5}$ m ² /s
Gas constant, R	300 J/kgK
Ratio of specific heats, γ	1.25
Density, ρ ; m ³	1
Adiabatic constant, a_c	138999.59; m ² /s ²

Table 3.2: Water properties.

Kinematic viscosity, ν	$1 \cdot 10^{-6}$ m ² /s
Initial density, ρ_0	1025 m ³
Initial pressure, p_0	1786987.1 Pa
Water compressibility, ψ	$4.54 \cdot 10^{-7}$ s ² /m ²
Temperature, T	300 K
Density, ρ	1025 m ³

An implicit Euler scheme is used for the time derivatives, while Gaussian schemes are used for the gradient, convection and diffusion terms. There are some slight differences in schemes for convection terms; however mostly TVD schemes (e.g. vanLeer limited) or first order upwind schemes were used. The same numerical schemes are used in all cases.

Table 3.3: Simulation parameters.

Outer correctors number	4
Inner correctors number	2
Underrelaxation factor for pd	0.5
Underrelaxation factor for \mathbf{u}	0.7
Max Courant number	10

Computational domain is sphere cut out with angle of $\theta = 5^\circ$, Figure 3.2. The domain is created with a maximum radius $R = 50$ m to reduce shock waves boundary reflections. Boundary conditions are listed in Table 3.4 while the simulation parameters are listed in Table 3.3 .

Computational mesh is radially symmetric. In the $R \in (0, 0.55)$ cells are equally spaced and gradually increase towards the domain end. Mesh consists of 11275 cells.

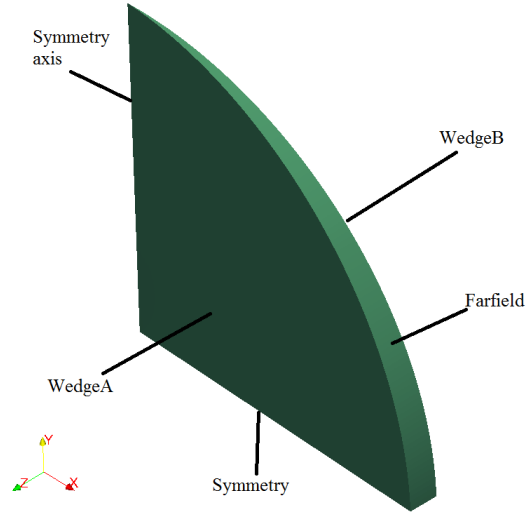


Figure 3.2: Computational domain.

Table 3.4: Boundary conditions.

Boundary	α_1	p_d	\mathbf{u}
Symmetry	symmetryPlane	symmetryPlane	symmetryPlane
Farfield	inletOutlet uniform 0	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
WedgeA	wedge	wedge	wedge
WedgeB	wedge	wedge	wedge

Results

Figure 3.3 shows bubble radius in time while Figure 3.4 shows bubble radius from [3]. Simulation results are in good agreement with those in [3] and [5]. Maximum radii are equal in value but reached at slightly different times. In this work maximum radius is reached at time $t = 0.0075$ s while in [3] it is at $t = 0.01$ s. Also, the time shift of the end of the first cycle can be seen. Here it is slightly after $t = 0.015$ s while in [3] it is around $t = 0.02$ s. These differences could be explained due to numerical changes introduced to obtain better simulation stability. The results in both cases differ from analytic solution of Rayleigh-Plesset equation. Possible reasons for the discrepancy with the Rayleigh-Plesset solution include: isothermal compressible water instead of incompressible, non-uniform pressure inside of the bubble, viscous effect etc.

Figures 3.5-3.6 show bubble profiles in the corresponding moment of oscillation. Bubble changes follow theoretically and experimentally described ones in [5]. While radius approaches maximum radius, expansion slows down. At this moment in time bubble stagnants for a while what is followed by accelerated contraction. At the end of the first cycle bubble starts to deform into toroidal shape. This profile change can be observed in experiments (see [6]).

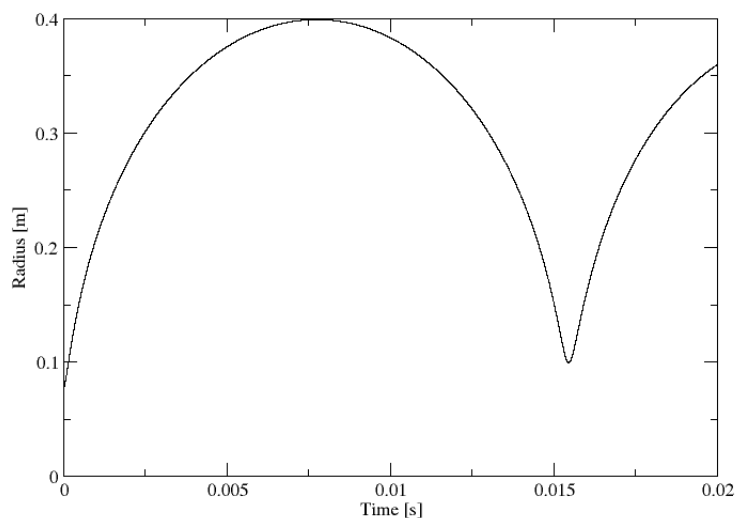


Figure 3.3: Radius vs time.

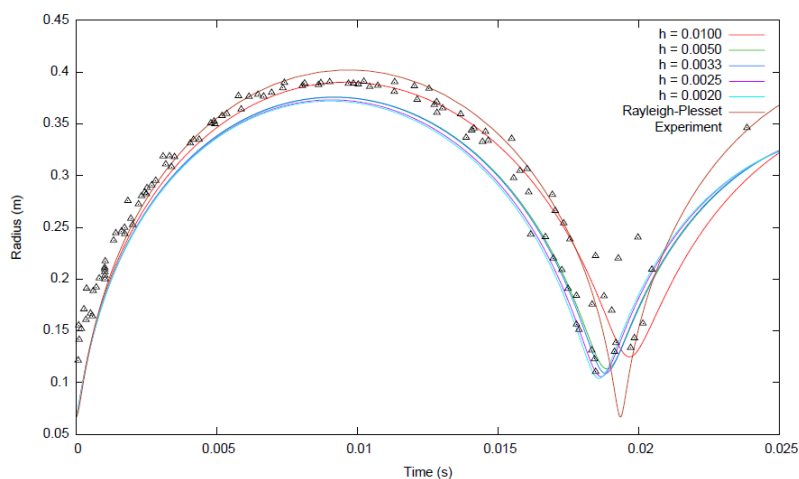


Figure 3.4: Radius vs time.

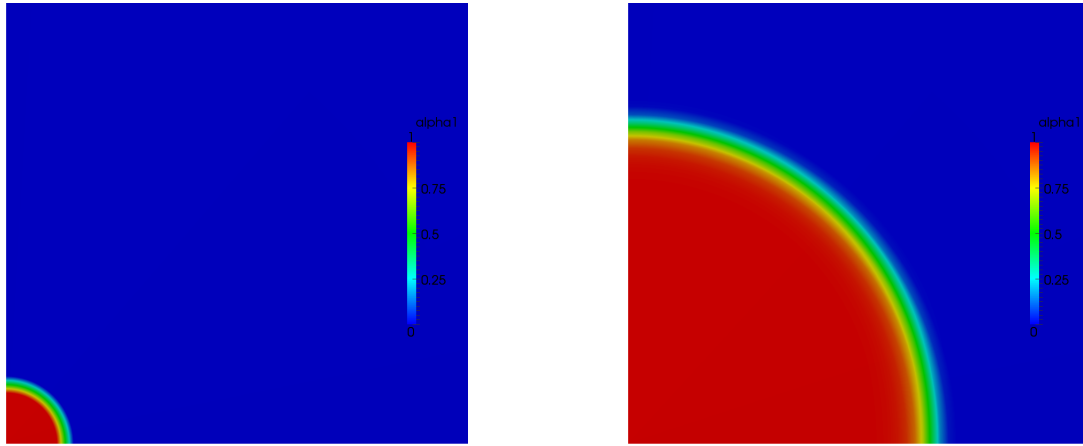


Figure 3.5: Bubble profile: at the initial conditions (left); at the maximum radius (right).

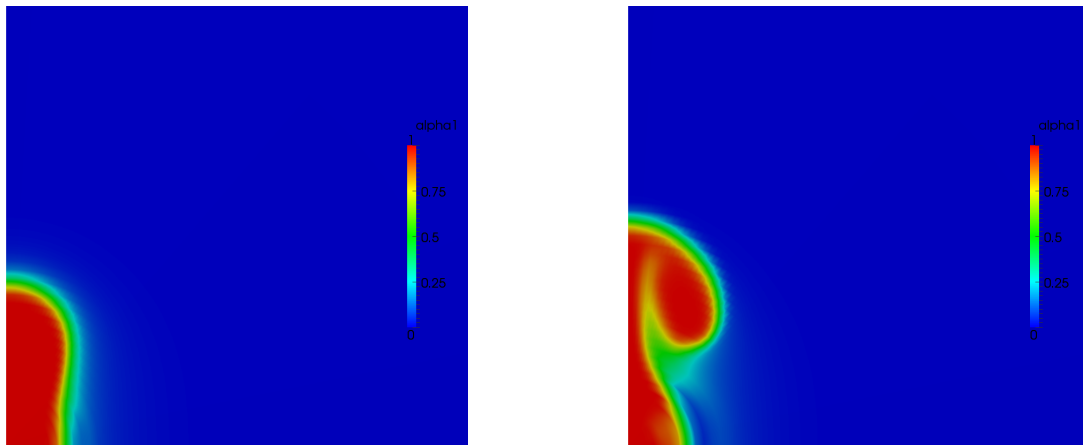


Figure 3.6: Bubble profile: at the end of the first cycle (left); at the beginning of the second cycle (right).

Figure 3.7 shows pressure change in bubble centre. For better figure overview, initial time step with pressure value $1.31 \cdot 10^8$ Pa is left out. The rapid pressure decrease can be observed at the beginning of the simulation. After that the pressure stagnates at certain value (≈ 10 Pa) which is very small. This value is determined as boundary value in numerical settings which cannot be exceeded. The pressure value starts to increase as the contraction begins. Pressure reaches values that are smaller than initial pressure. As the expansion starts, the pressure value decreases.

Figure 3.8 shows density change in bubble centre. Its value also decreases at the beginning. For a certain period of time it stagnates. This is due to volume change in expansion process while mass stays the same all the time, Figure 3.10. The density value starts to grow as the contraction begins.

On the Figure 3.10 gas mass changes in time can be observed. Its value is roughly

constant all the time but certain fluctuations around mean value (0.003122 kg) can be observed. Their order of magnitude is around 10^{-6} . Fluctuations at the very beginning and around ≈ 0.015 s can be explained by the rapid pressure changes. The mass value decrease appears in the moments of the contraction and vice versa.

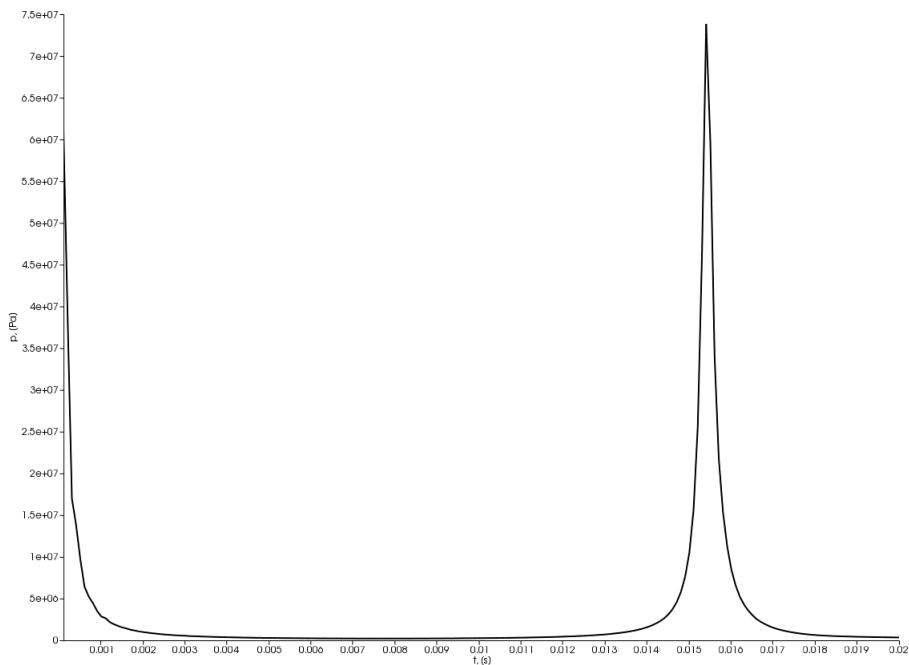


Figure 3.7: Pressure change in bubble centre.

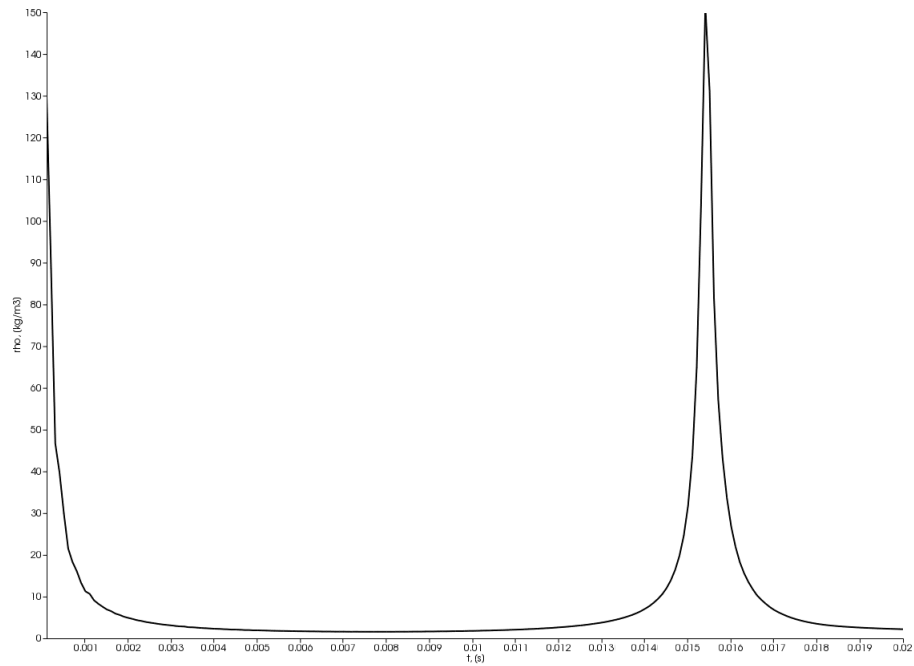


Figure 3.8: Density change in bubble centre.

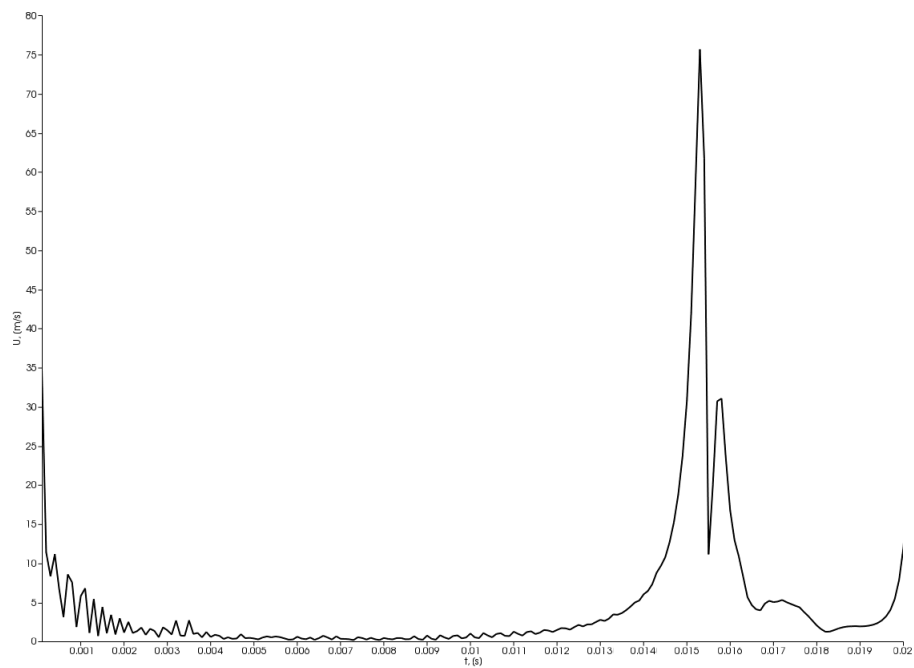


Figure 3.9: Velocity change in bubble centre.

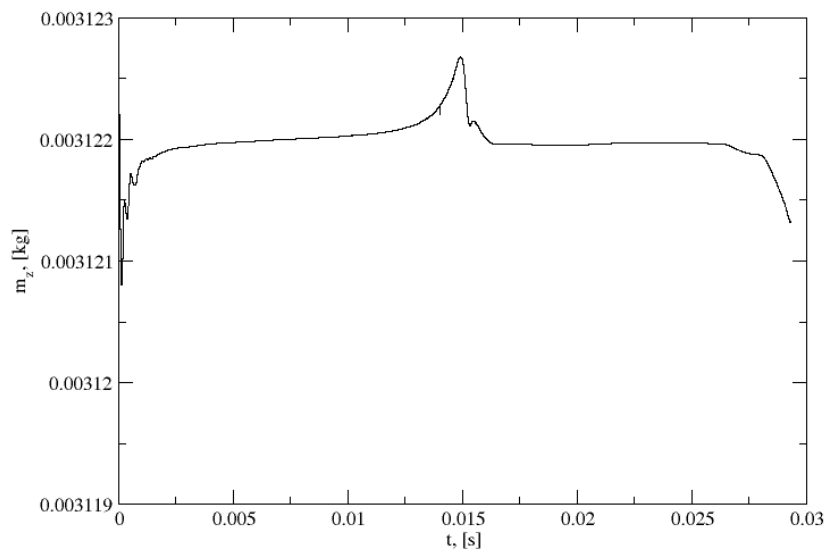


Figure 3.10: Gass mass change in time.

3.2. Deep explosion near a plate

Figure 3.11 shows schematic representing explosion near a plate with necessary input data. Results are compared with those in [7].

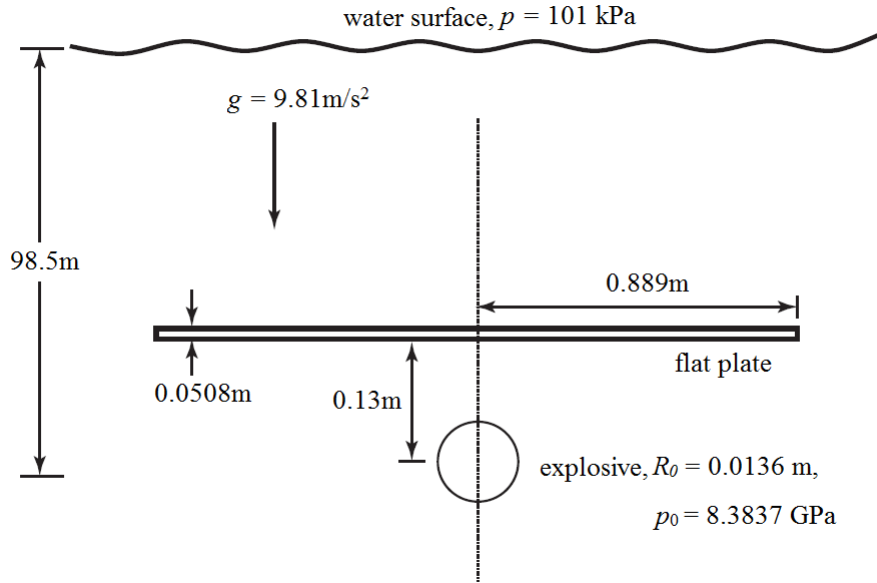


Figure 3.11: Schematic of an underwater explosion near a plate [4].

The computational domain is wedge geometry with angle of $\theta = 5^\circ$, Figure 3.12. Fluid properties stay the same as in previous case with exception of the initial water pressure. At the 98.5 m depth the surrounding pressure is $p_0 = 1067285$ Pa. Boundary conditions are listed in Table 3.5 and simulation parameters are listed in Table 3.6.

Table 3.5: Boundary conditions.

Boundary	α_1	p_d	\mathbf{u}
Wall	zeroGradient	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
Farfield	inletOutlet uniform 0	zeroGradient	fixedValue (0 0 0)
WedgeA	wedge	wedge	wedge
WedgeB	wedge	wedge	wedge

Table 3.6: Simulation parameters.

Outer correctors number	4
Inner correctors number	2
Underrelaxation factor for pd	—
Underrelaxation factor for \mathbf{u}	0.3
Max Courant number	2

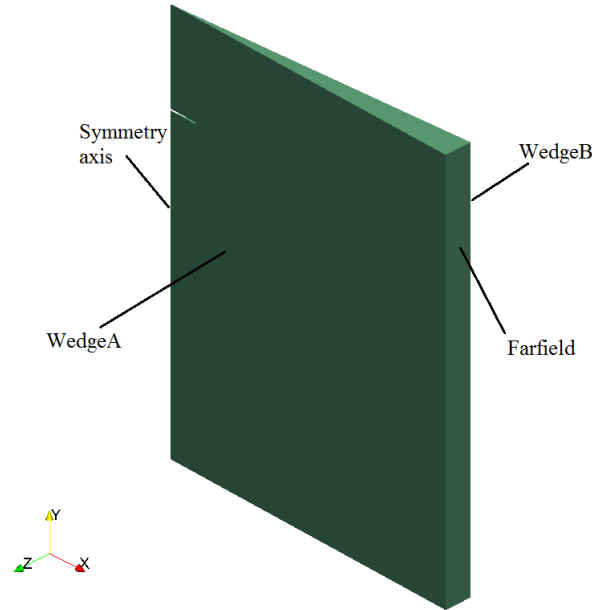


Figure 3.12: Computational domain.

Computational mesh is denser in the plate vicinity for better phenomena capturing in explosion aftermath. Cells are equally spaced in this region which extends 1 m from the plate. From there towards the edges of computational domain cells gradually increase in size. Mesh consists of 73350 cells. Inside the initial bubble there are 11 cells in x direction and 4 cells in y direction. Immediately under the plate and next to the axis of symmetry cell length of $3.33 \cdot 10^{-3}$ m in y direction and $1.24 \cdot 10^{-3}$ m in x direction which gradually increase with aspect ratio 15 towards the plate end.

Results

Figures 3.13-3.15 show pressure field. It can be observed that initial shock wave approaches the edge of the flat plate. As time goes by, the shock wave reaches the edge of the plate, then curls around and propagates towards the symmetry axis while still radiating outwards.

Figures 3.18-3.20 show bubble profile in the corresponding moment of time. The bubble radius remains unaffected by the propagating shock wave. Bubble shows behaviour described by the theory in [5]. In the moment $t = 18.5$ ms bubble jetting appears which hits the plate. Afterwards, bubble deforms into torodial shape and propagates from the symmetry axis. Although, there are some differences in time, the results show very good agreement with [7]. Figures 3.16-3.17 show pressure field in [7]. Although, figures are very similar, the shock wave in their case is always a bit further in radial direction for the same moment. Figures 3.21-3.22 show bubble profile in [7]. Bubble profiles are similar until the moment ≈ 8 ms. In their case the water jet appears around 12 ms. In [7] the Tait equation of state for water and JWL equation of state for gas are used. The JWL equation considers the explosion material and the Tait equation is special equation of state used for liquids to couple density and pressure. They use adaptive mesh method with two adaptive steps to resolve for better catching of transient phenomena. Their initial mesh consists of 102400 cells. All of this could be the reason for differences.

Figures 3.23-3.24 show pressure changes in time. The initial time step is also left out for the same reasons. Trends are the same as in the previous case. Figure 3.24 shows pressure changes for three different locations under the plate. As expected, the largest pressure values are located on the axis of symmetry, especially at the moment of water jet impact (≈ 19 ms). The largest pressure value is around $4 \cdot 10^7$ Pa. The pressure values decrease moving further from the axis. $L = 0.889$ m depicts the plate radius. The great pressure values are also visible at the beginning of the simulation. It could be due to shock wave produced by the explosion.

On the Figure 3.25 the gas mass changes can be observed. Except some fluctuations which are of the magnitude of order 10^{-3} the mass value is constant all the time. These fluctuations could be due to the forced simulation stopping and starting.

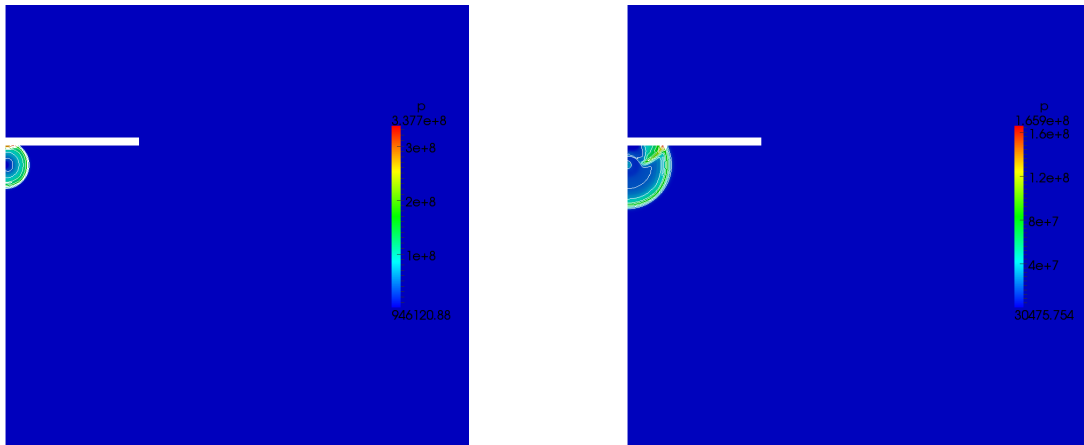


Figure 3.13: Pressure field after: 0.1 ms (left); 0.2 ms (right)

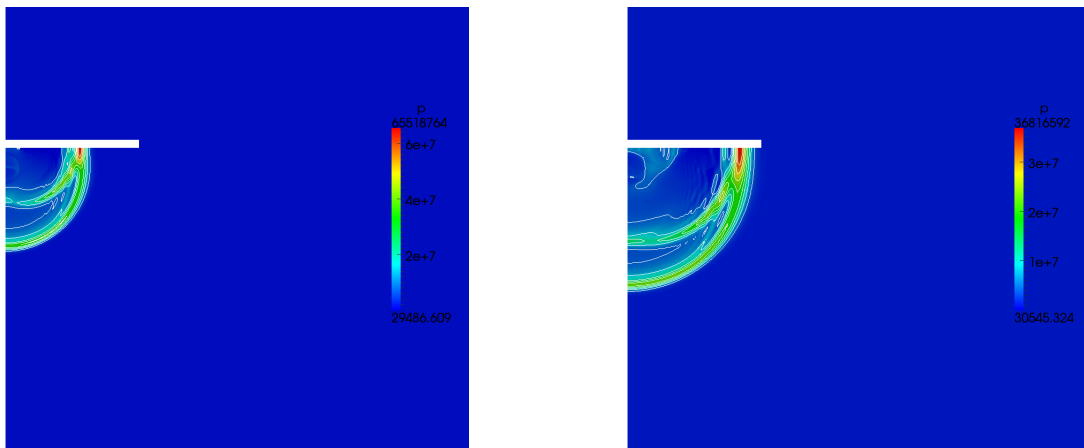


Figure 3.14: Pressure field after: 0.4 ms (left); 0.6 ms (right)

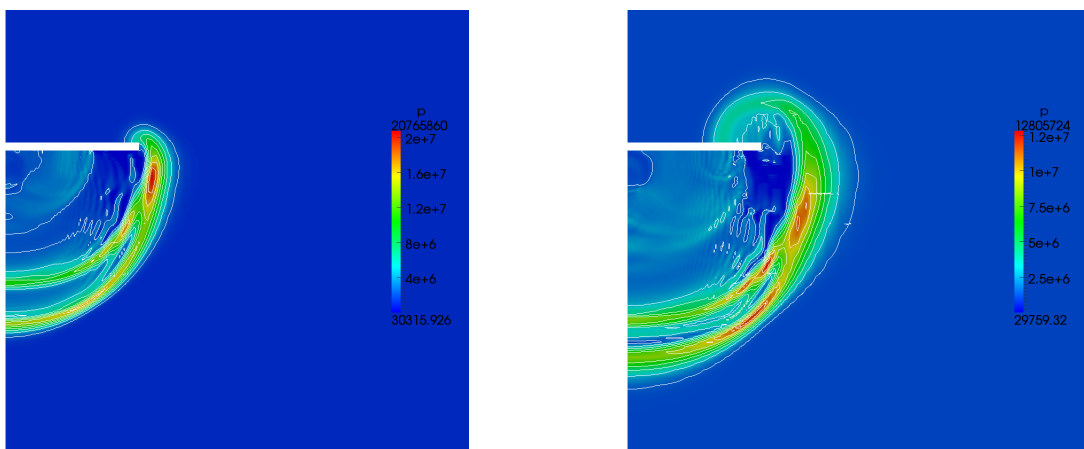


Figure 3.15: Pressure field after: 0.8 ms (left); 1 ms (right)

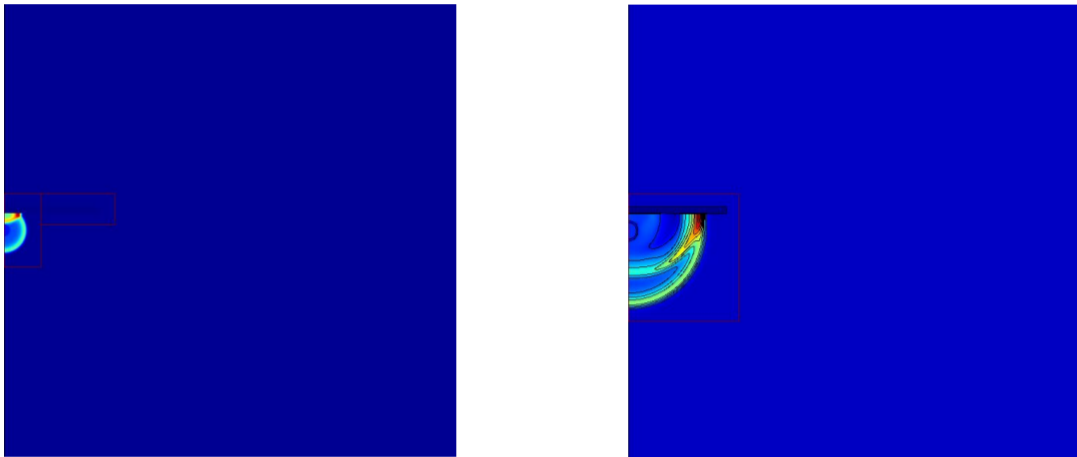


Figure 3.16: Pressure field from [16] after: 0.1 ms (left); 0.4 ms (right)

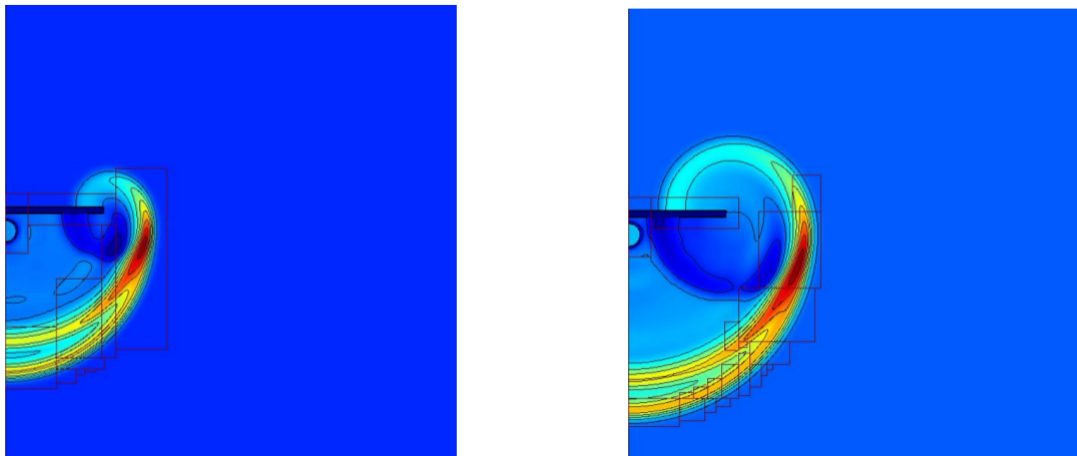


Figure 3.17: Pressure field from [16] after: 0.8 ms (left); 1 ms (right)

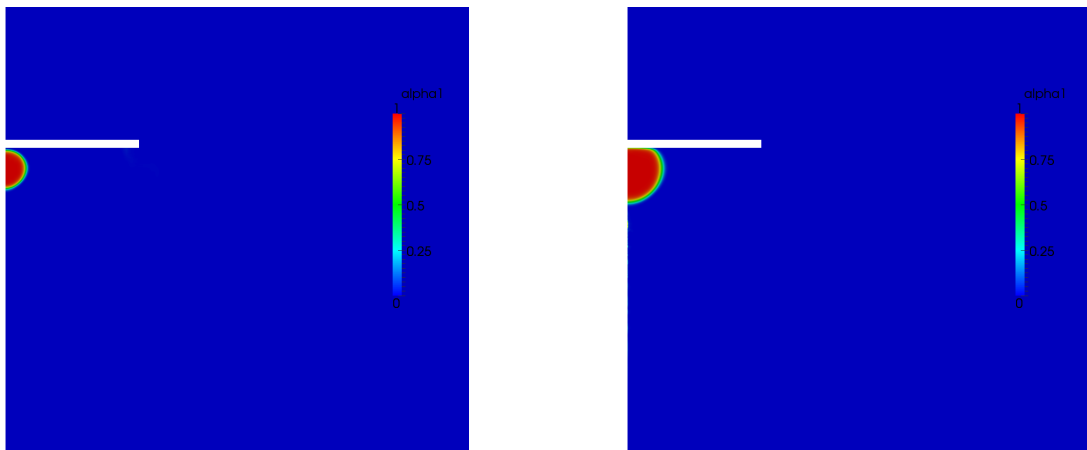


Figure 3.18: Bubble profile after: 1 ms (left); 4 ms (right)

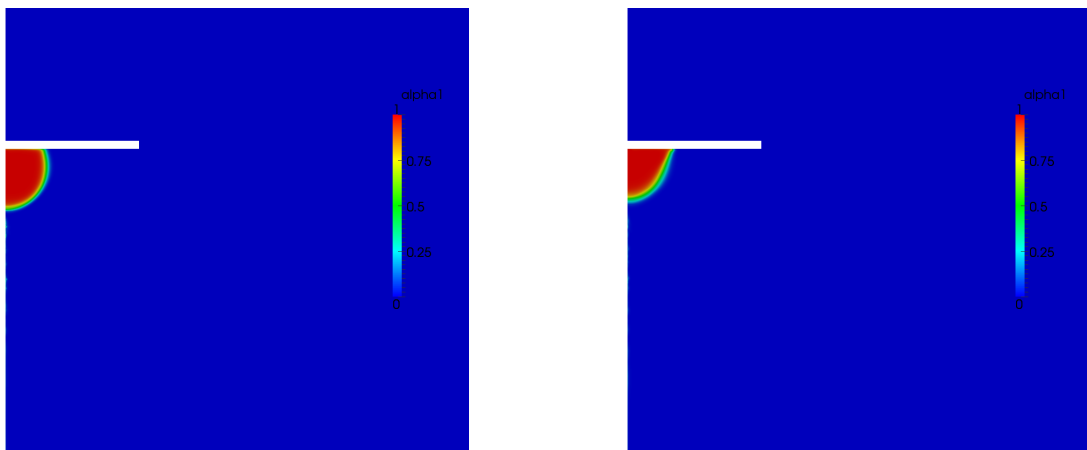


Figure 3.19: Bubble profile after: 8 ms (left); 15 ms (right)

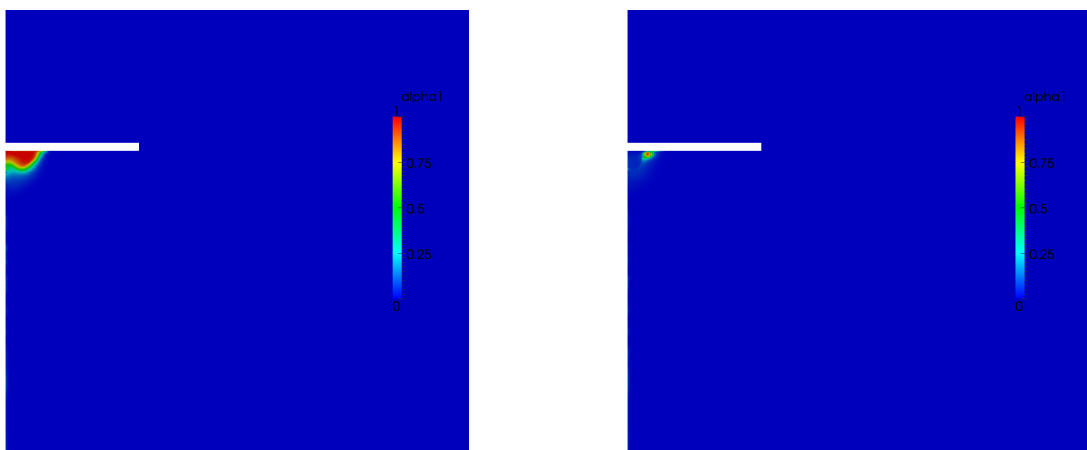


Figure 3.20: Bubble profile after: 18.5 ms (left); 20 ms (right)

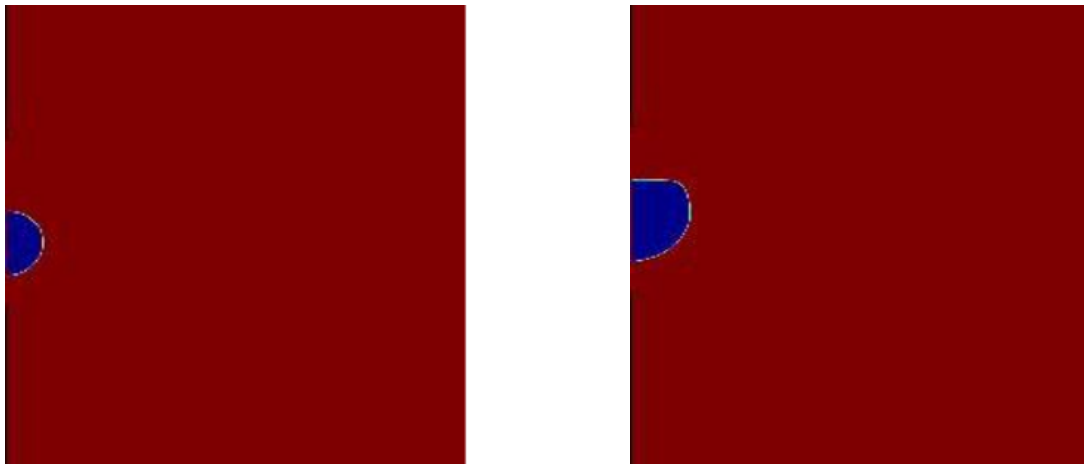


Figure 3.21: Bubble profile from [16] after: 1 ms (left); 8 ms (right)

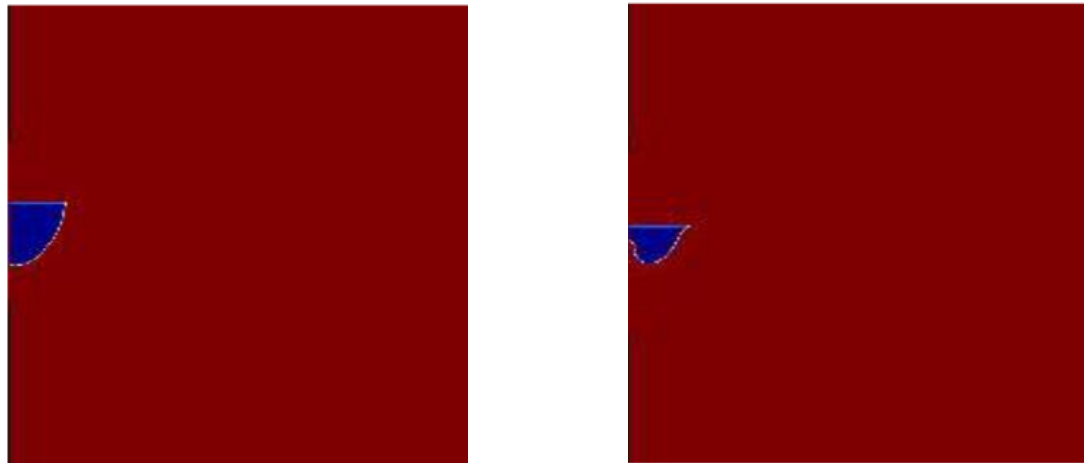


Figure 3.22: Bubble profile from [16] after: 11 ms (left); 12 ms (right)

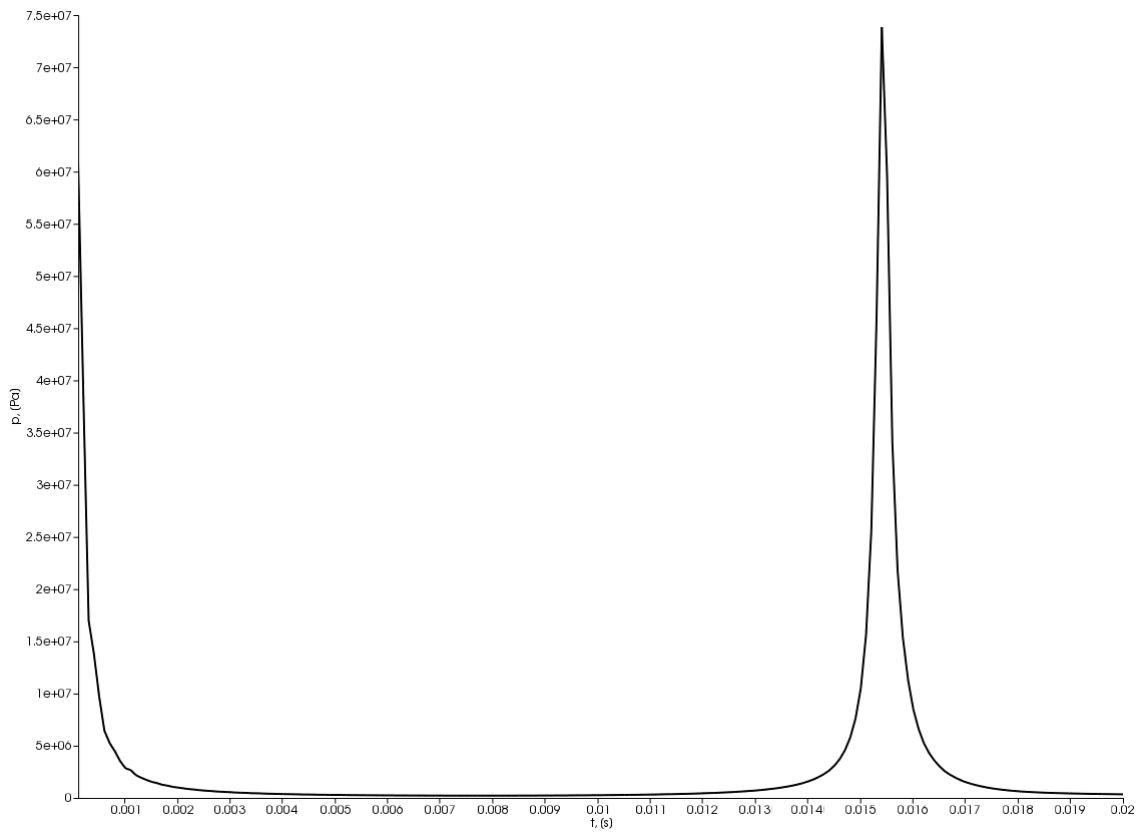


Figure 3.23: Pressure change in bubble centre.

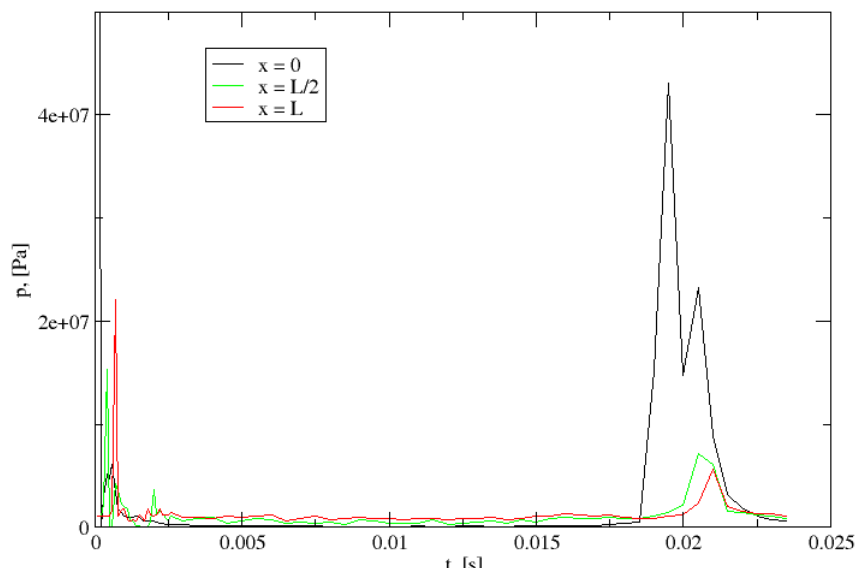


Figure 3.24: Pressure change under plate

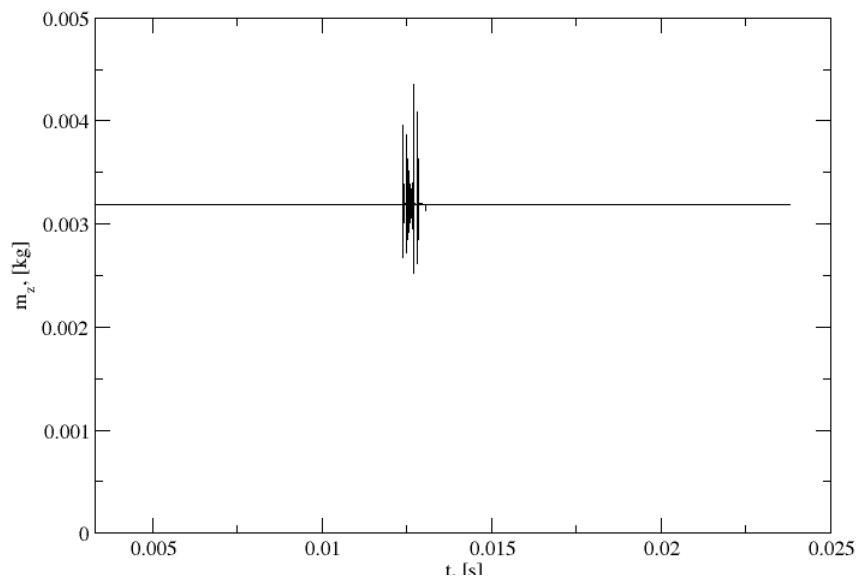


Figure 3.25: Gas mass change in time.

3.3. Underwater explosion near a free surface

A simulation of a 0.3 kg TNT charge at the depth of 6 m is conducted. Initial radius is $R_0 = 0.6$ m with the initial pressure inside the bubble $p_{G_0} = 72.7 \cdot 10^6$ Pa. Both fluids have the same properties as in the previous test cases. Again, the only exception is the reference water pressure, $p_0 = 101325$ Pa.

The computational domain is a wedge geometry with an angle of $\theta = 5^\circ$ as in case with the plate, Figure 3.26. Boundary conditions are listed in Table 3.7.

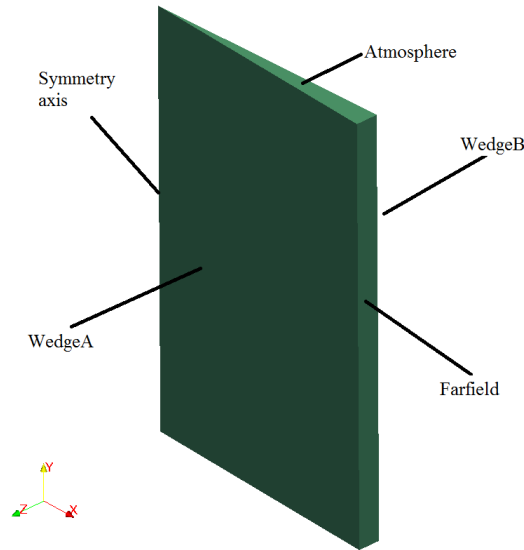


Figure 3.26: Computational domain.

Table 3.7: Boundary conditions.

Boundary	α_1	p_d	\mathbf{u}
Farfield	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient
WedgeA	wedge	wedge	wedge
WedgeB	wedge	wedge	wedge

Table 3.8: Simulation parameters.

Outer correctors number	4
Inner correctors number	2
Underrelaxation factor for p_d	—
Underrelaxation factor for \mathbf{u}	0.7
Max Courant number	6

Computational mesh is denser near a free surface. Around symmetry axis and freesurface cells are equally spaced but from there towards the domain edges they

gradually increase in size. Mesh consists of 129360 cells. Inside the initial bubble there are 11 cells in both directions. Cells dimensions under and above the surface are 0.053 m long in both directions.

Results

Figures 3.27-3.30 show bubble profile in the corresponding moment of time. Bubble and atmosphere are depicted with red color. The smearing of transitional area can be seen, especially after 0.25 s. It appears as soon as buoyancy starts to act and the lower parts of bubble start to lift. This is the obvious example of numerical diffusion. The possible reason lies in fact that the numerical scheme used for convection term in equation (2.13) is vanLeer01. Since this is the TVD scheme which is a combination of first and second order interpolation schemes, there is possibility that in this region first order scheme prevails and introduces the numerical diffusion. After the maximum radius is reached, free surface stays unbroken. However, the upward momentum of the fluid above the explosion will continue to carry fluid particles vertically. It is followed by the bubble contraction into toroidal shape, Figure 3.28 (left). Green area can be seen which is again, a consequence of numerical error. After the second bubble expansion, the water surface rises and surrounds the middle. At the about 1.5 s, the bubble is scattered into smaller parts. Every small bubble then contracts and expand for the third time. After the last expansion the "crowning" effect of the free surface can be seen. The number of expansions and the effects seen on the free surface are in good agreement with theoretical considerations.

Figure 3.31 shows pressure changes at two different locations. One is the bubble center (black color) and the other one is at the cross-section of the free surface and the axis of symmetry (red color). As expected, the largest pressure values are in the bubble centre. The peaks are showing in the moments of contraction. Figures 3.28 (left) and 3.29 (right) show the moments of contraction.

Figure 3.32 shows gas mass changes. Big mass value is due to atmosphere above the free surface. The fluctuations which are less than 0.005 % can be seen. As in the first case, sudden decrease in mass value occurs at the moment of the rapid pressure decrease.

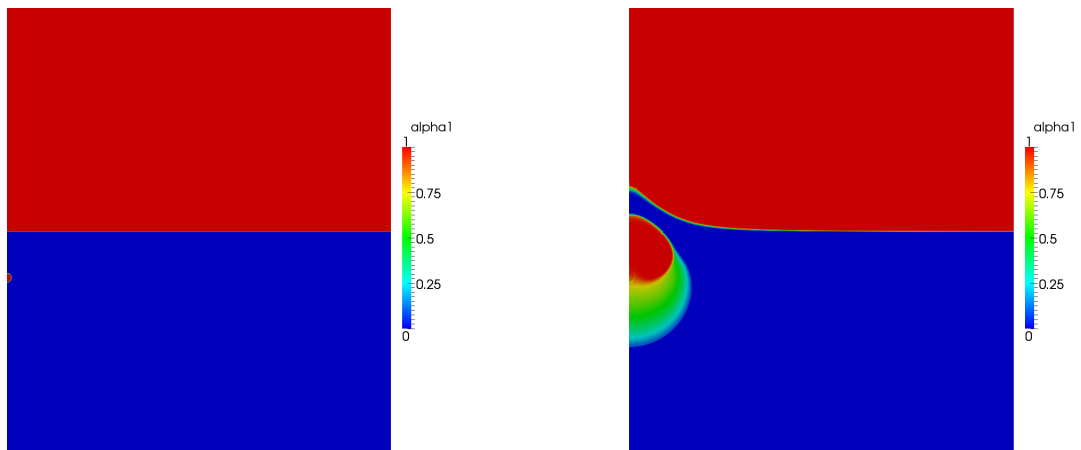


Figure 3.27: Bubble profile and free surface after: 0 s (left); 0.5 s (right)

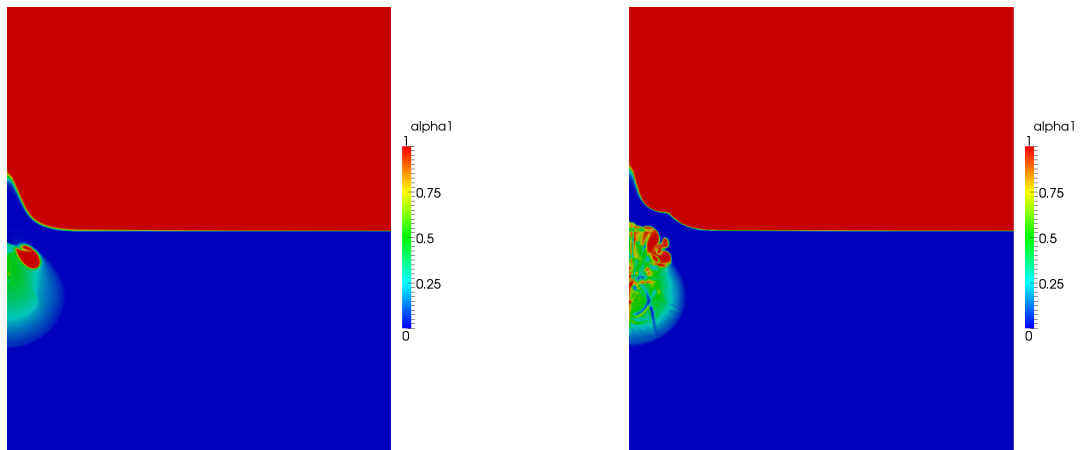


Figure 3.28: Bubble profile and free surface after: 0.75 s (left); 1 s (right)

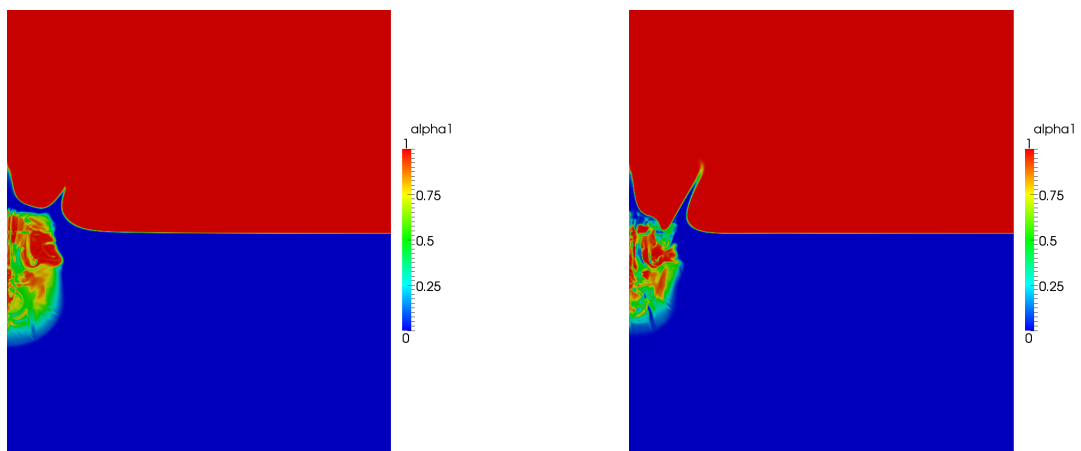


Figure 3.29: Bubble profile and free surface after: 1.25 s (left); 1.5 s (right)

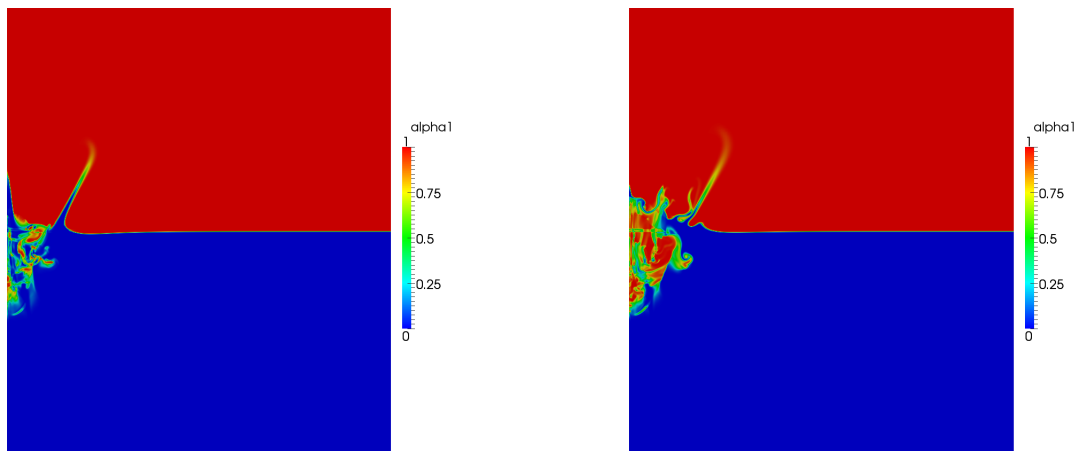


Figure 3.30: Bubble profile and free surface after: 1.75 s (left); 2 s (right)

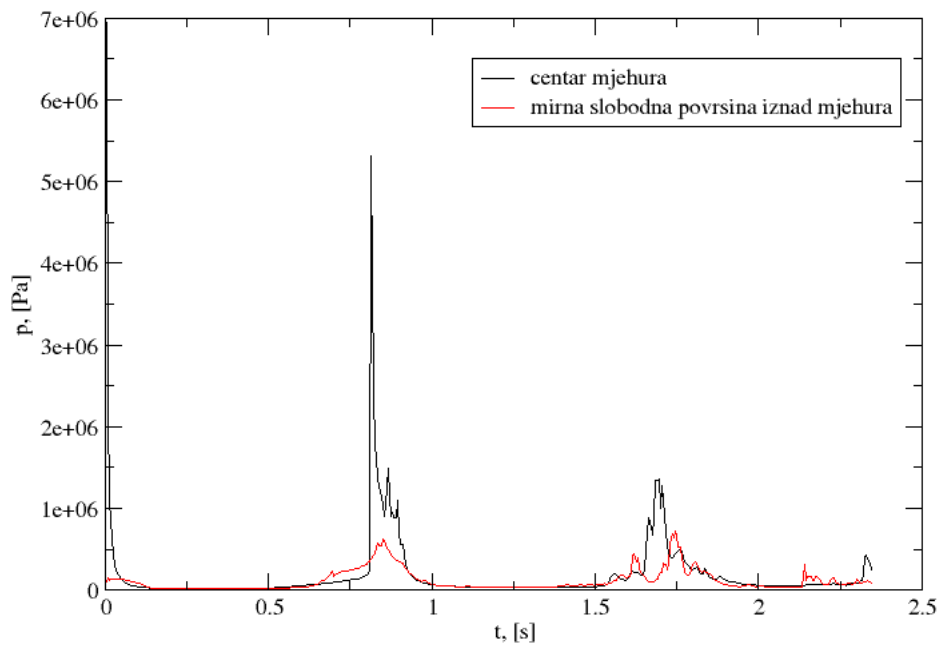


Figure 3.31: Pressure change in different points.

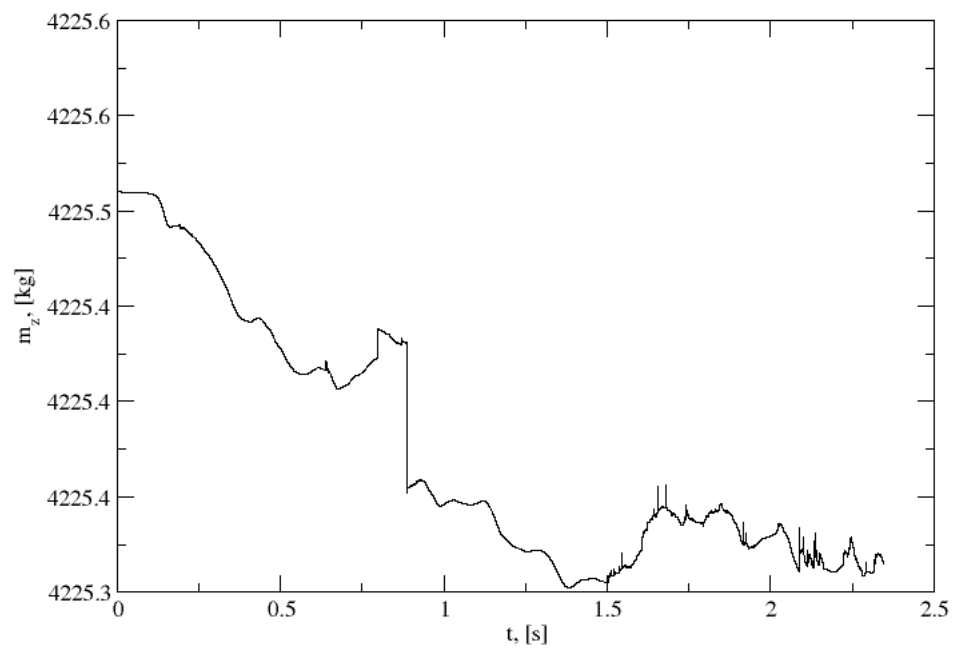


Figure 3.32: Gas mass change in time.

4. Liquid metal casting in closed mould

Liquid metal casting into a closed mould at high speed rates belongs to the class of fluid flows with free surface. Aluminum is chosen as a liquid fluid for simulations. The geometry is taken from [8]. Fluid properties are listed in Tables 4.1 and 4.2.

Table 4.1: Gas properties.

Kinematic viscosity, ν	$1.589 \cdot 10^{-5}$
Gas constant, R	300
Ratio of specific heats, γ	1.3
Density, ρ	1
Adiabatic constant, a_c	101325

Table 4.2: Aluminum properties.

Kinematic viscosity, ν	$4.62 \cdot 10^{-7}$
Initial density, ρ_0	2380
Initial pressure, p_0	101325
Aluminum compressibility, ψ	$2.568 \cdot 10^{-8}$
Temperature, T	933.47
Density, ρ	2380

Boundary conditions are listed in Table 4.3. Figures 4.1a and 4.1b show mould geometry with main dimensions $0.12 \times 0.16 \times 0.05$ m.

Table 4.3: Boundary conditions.

Boundary	α_1	p_d	\mathbf{u}
Inlet	fixedValue uniform 0	zeroGradient	fixedValue uniform (0 0 -0.26)
Wall	zeroGradient	zeroGradient	fixedValue uniform (0 0 0)

Figure 4.2 represents computational mesh which consists of 174227 cells with 102303 tetrahedral, 69167 hexahedral, 656 prismatic and 2101 pyramid elements.

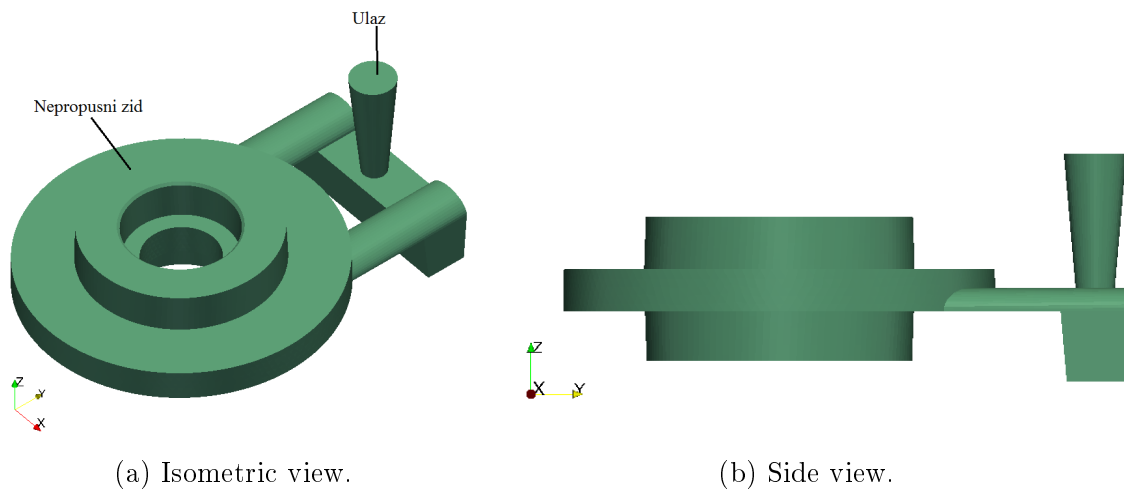


Figure 4.1: Mould geometry.

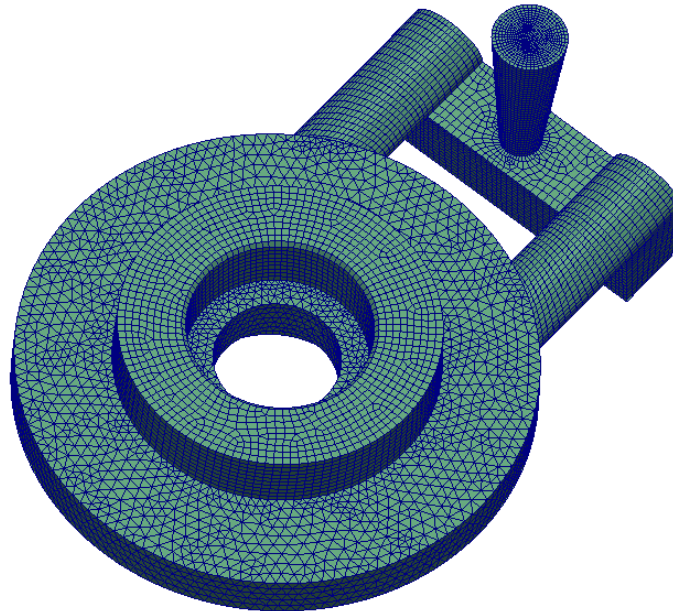


Figure 4.2: Computational mesh.

Results

If the results were to compare with those in [8], evident differences can be seen. However, the results show physical behavior and numerical settings cannot be blamed. One of the possible reasons is the use of pure liquid aluminum that behaves as a Newtonian fluid. Also, in [8] special software for casting simulations QuickCast [9] is used. It contains a wide material list with all necessary properties for casting simulation. In it mould cooling is also simulated which increases fluid viscosity and slows down the flow. Filling time in this work is ≈ 2 s less what

is expected considering above mentioned reasons. Also, the big disk filling begins from the opposite side than in [8]. It can be explained with the high filling velocities which achieved 1.5 m/s that cause high momentum jet.

Figures 4.3-4.7 show the mould filling. At the very beginning a small fraction of a funnel is occupied with aluminum. It stabilizes the beginning of the simulation. The part in which the funnel penetrates is filled first, then the small channels that enter the big disk. On figures that show intersection (0.003 m in x direction) a jet at the big disk inlet can be seen. This explains the fact that the big disk starts to fill from the further side. Afterwards, the disk is filled towards the fluid inlet.

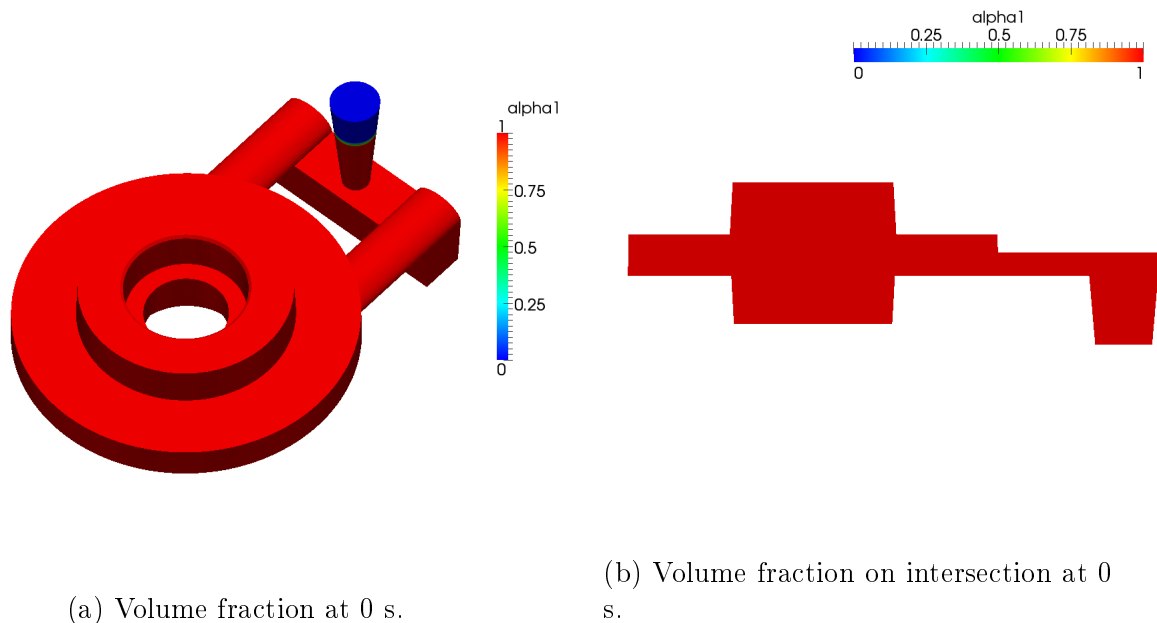


Figure 4.3: Casting at 0 s.

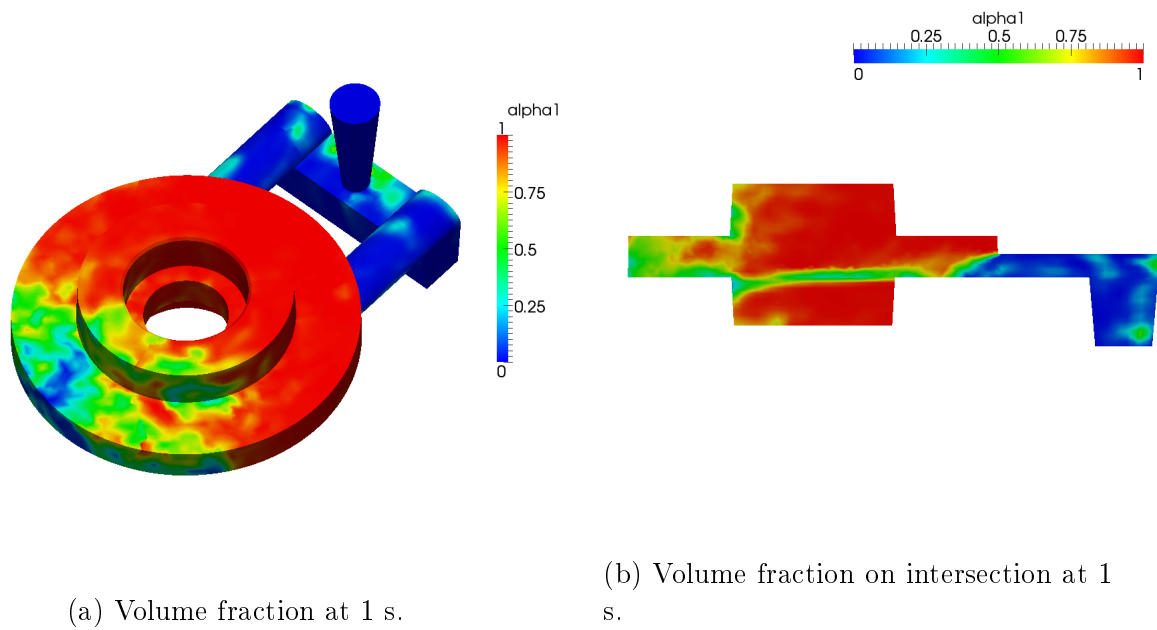


Figure 4.4: Casting at 1 s.

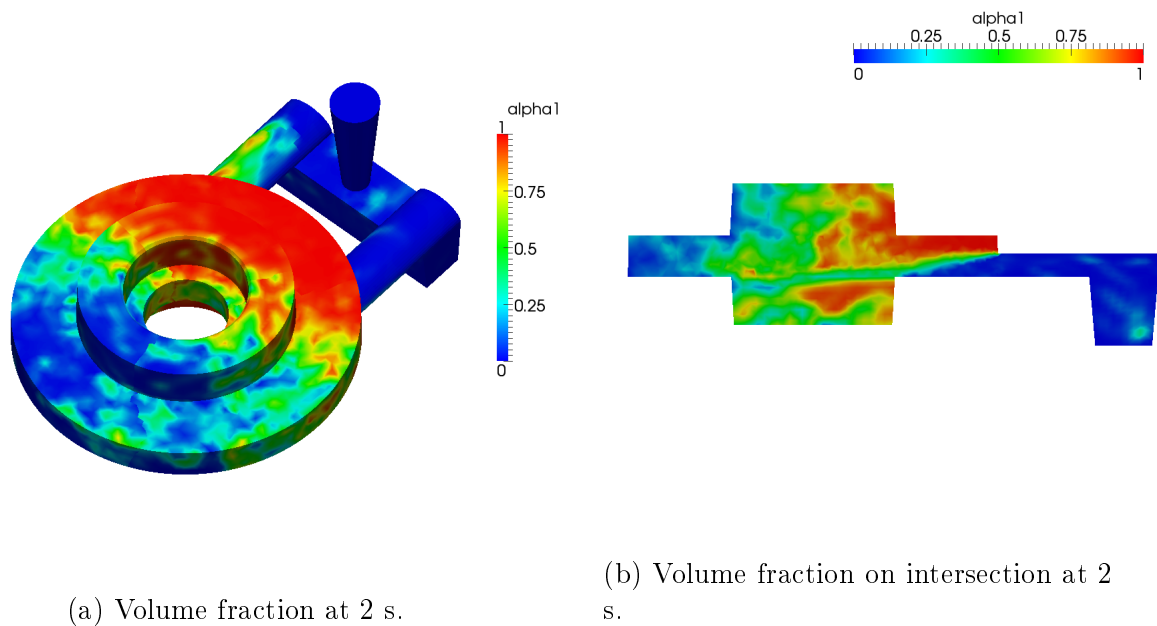


Figure 4.5: Casting at 2 s.

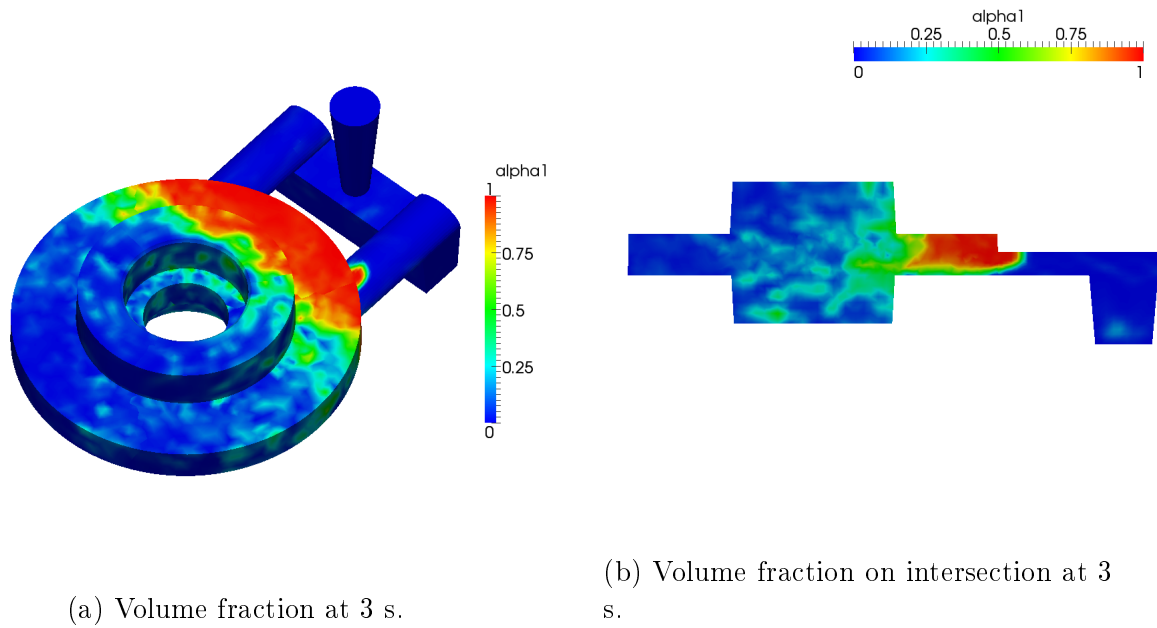


Figure 4.6: Casting at 3 s.

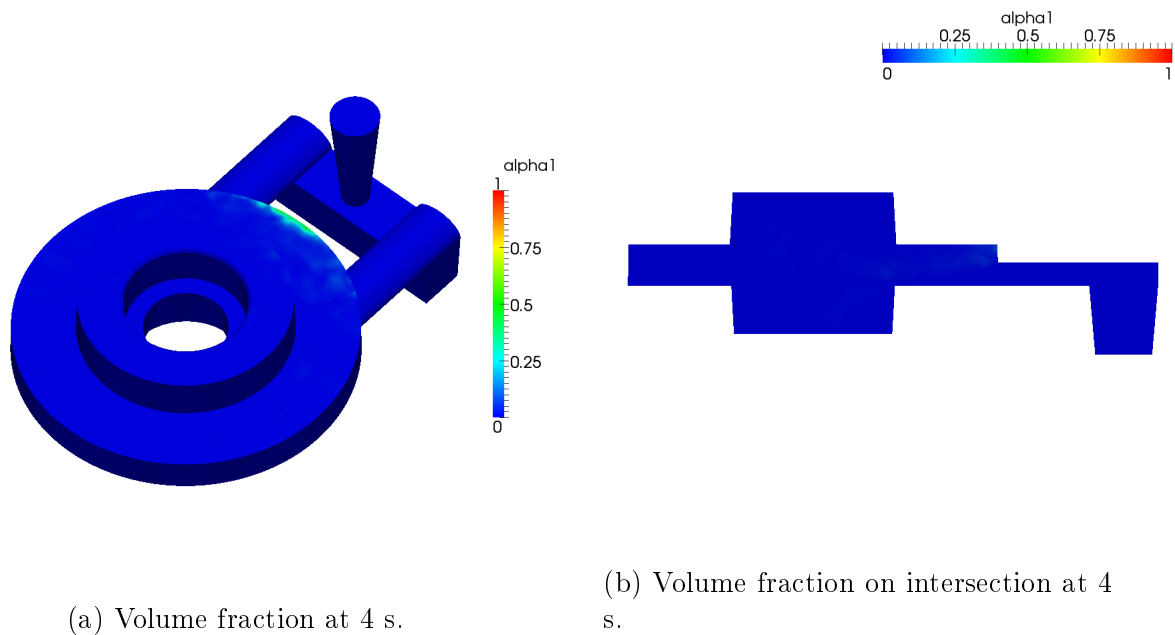
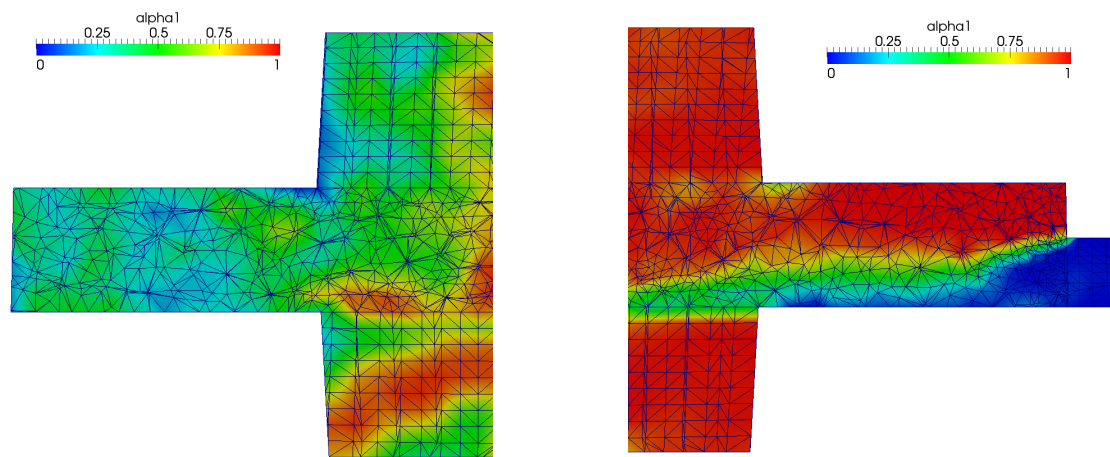


Figure 4.7: Casting at 4 s.

Figure 4.8 shows a smearing of the transitional area. The main reason is very coarse mesh. To reduce the smearing, mesh refinement is necessary. Due to lack of computational resources that was not considered in this work.



(a) Computational mesh on the left side disk.

(b) Computational mesh on the right side disk.

Figure 4.8: Computational mesh inside disk.

Figure 4.10 shows pressure changes in point depicted on Figure 4.9. This point is chosen since compressed air is trapped here as the filling progress. This is confirmed by the pressure curve. Figure 4.11 shows temperature which also increases at this point which is the result of increasing pressure.

Figure 4.12 shows the gas mass changes in time which almost never change. Fluctuations are probably the result of the forced simulation stopping and starting.

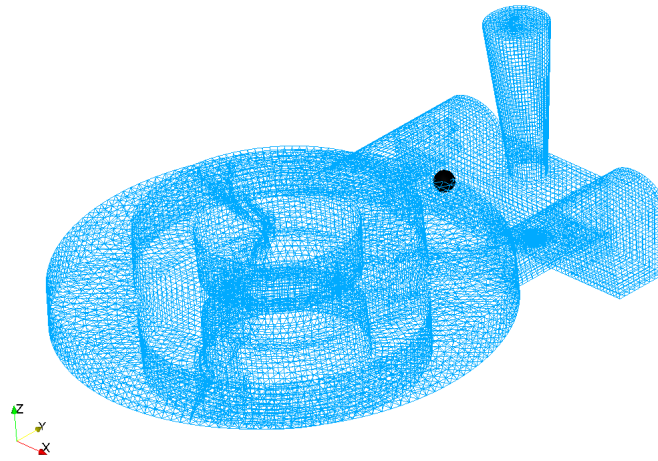


Figure 4.9: Point in which pressure and temperature are shown.

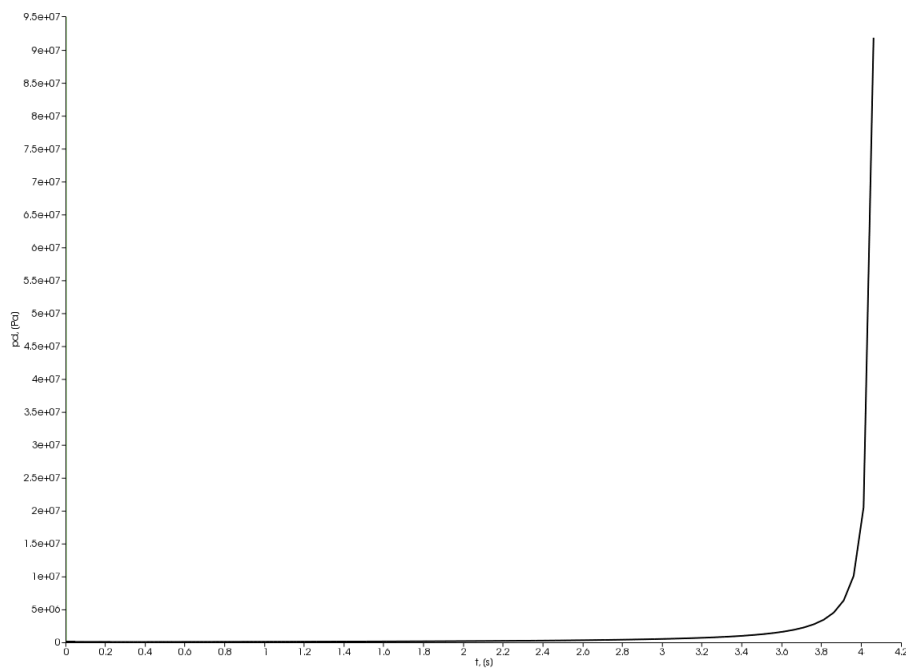


Figure 4.10: Pressure change in point.

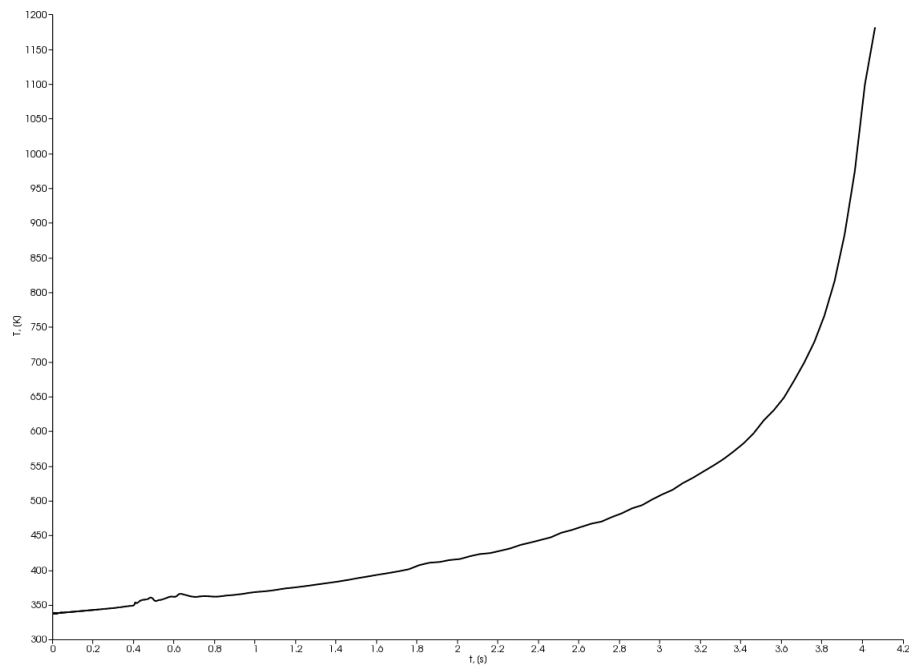


Figure 4.11: Temperature change in point.

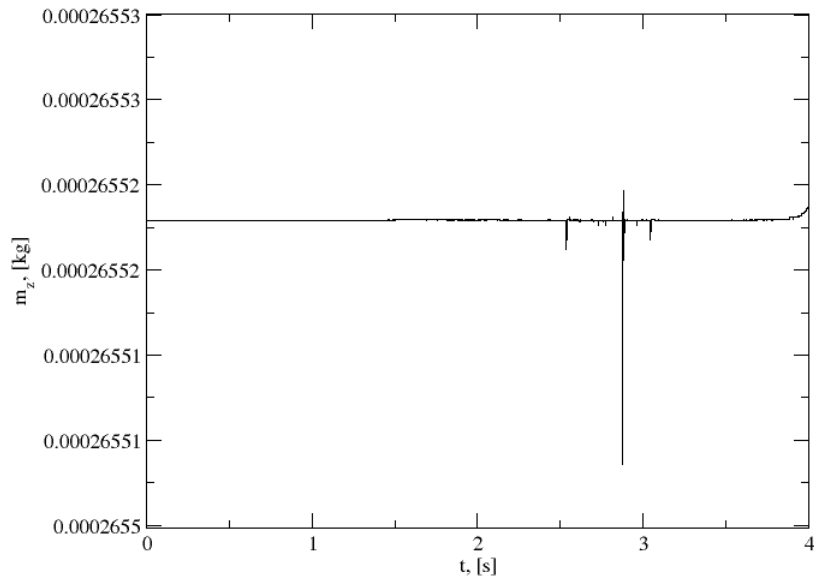


Figure 4.12: Gas mass change in time.

Conclusions

Novel numerical approach for homogeneous multiphase compressible flow simulations shows stable and good behavior, even in cases with high pressure ratios. Conducted simulations include underwater explosions and liquid metal casting.

Cases with underwater explosions show very good agreement with experiments and other numerical simulations. Bubble behavior in case with UNDEX deviates from theoretical solutions of Rayleigh-Plesset equation but the maximum radius ($R = 0.4 \text{ m}$) and the qualitative radius over time (Figure 3.3) show good agreement. Bubble profiles are also in good agreement with experiments. Disagreement with theoretical solution is not surprising considering that physical properties like fluid viscosity etc., are ignored in Rayleigh-Plesset equation. Actually, Rayleigh-Plesset equation doesn't consider real fluid flow.

Simulation results of the explosion under a plate are in good agreement with [7]. Possible reasons of differences are other equations of state and time discretization schemes used in [7]. Also, bubble jetting appears in simulations what is observed in experiments. Pressure values at different locations under the plate show expected behavior with the largest lying on the axis of symmetry.

In the simulations of the explosion near the free surface bubble behavior shows good agreement with theoretical considerations. Smearing of the transitional area is evident and could be improved. Weak coupling between primitive variables could be a possible reason for this. New method for coupling equations should resolve this.

Simulations of liquid metal casting give results which are not in good agreement with [8]. However, they have physical sense. These discrepancies could be resolved by inclusion of the transport models for broader list of materials. The cooling of the mould should be taken into a consideration because it increases fluid viscosity. The mesh refinement would also improve the results.

Gas mass conservation in every case is monitored. It is conserved in most of the simulation time with some fluctuations appearing. These are probably the result of the rapid pressure changes.

Some problems could be solved by the implementation of the energy transport equation instead of the equation of state for gas. This was attempted but was not successful. Stability and speed of the solver could be also improved by the implementation of the new method for coupling equations.

Bibliography

- [1] I. Džijan. *Računalna mehanika fluida*. unpublished, 2010.
- [2] H. Rusche. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two - Phase Flows at High Phase Fractions*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, 2002.
- [3] S.T. Miller, H. Jasak, D.A. Boger, E.G. Paterson, and A. Nedungadi. A pressure-based, compressible, two-phase flow finite volume method for underwater explosions. *Computers and Fluids*, 87:132–143, 2013.
- [4] O. Ubbink. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London, 1997.
- [5] S. A. Wilkerson. *Boundary Integral Technique for Explosion Bubble Collapse Analysis*. Army Research Laboratory, 1993.
- [6] M. C. Cinnamon. Modeling laser-generated cavitation bubbles. Master's thesis, The Pennsylvania State University, 2012.
- [7] S. Y. Kadioglu and M. Sussman. Adaptive solution techniques for simulating underwater explosions and implosions. *Journal of Computational Physics*, 227(3):2083–2104, 2008.
- [8] D. Brčić. Lijevanje dijela od aluminijske legure. Master's thesis, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, Zagreb, 2013.
- [9] ESI Group. Software and services. <https://www.esi-group.com/software-services/virtual-manufacturing/casting>.