

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

**METODA KONTROLNIH VOLUMENA
NA DOMENAMA PROMJENJIVOOG OBЛИKA**

DOKTORSKI RAD

Mentor:

Doc.dr.sc. HRVOJE JASAK

ŽELJKO TUKOVIĆ

ZAGREB, 2005

Podaci za bibliografsku karticu

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

Zahvala

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

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

Sadržaj

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

1.4 Pregled rada	48
2 Mathematical model	51
2.1 Introduction	51
2.2 Governing equation of fluid mechanics for arbitrary volume	52
2.3 Conditions a fluid interface	54
2.4 Surface tension and surfactants	58
2.5 Closure	60
3 Diskretizacija metodom kontrolnih volumena	61
3.1 Uvod	61
3.2 Diskretizacija domene rješavanja	62
3.3 Diskretizacija transportne jednadžbe	68
3.3.1 Diskretizacija prostornih integrala	68
3.3.2 Vremenska diskretizacija	75
3.3.3 Utjecaj pomicanja mreže	77
3.3.4 Primjena graničnih uvjeta	80
3.4 Sustav linearnih algebarskih jednadžbi	82
3.5 Postupak rješavanja na paralelnim računalima	85
3.6 Zaključak	88
4 Automatsko pomicanje mreže	89
4.1 Uvod	89
4.2 Definicija problema pomicanja mreže	90
4.3 Pregled matematičkih modela pomaka mreže	93
4.3.1 Analogija tlačno – vlačnih opruga	94
4.3.2 Analogija torzijskih opruga	97
4.3.3 Jednadžba ravnoteže elastičnog tijela	100
4.3.4 Laplaceova jednadžba	102
4.3.5 Biharmonička jednadžba	103
4.4 Nova automatska metoda pomicanja mreže	104
4.4.1 Odabir jednadžbe pomaka mreže	104

4.4.2	Prostorno promjenjivi koeficijent difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže	107
4.4.3	Diskretizacija jednadžbe pomaka mreže	108
4.4.3.1	Kompozitni poliedarski konačni element	109
4.4.3.2	Diskretizacija Laplaceove jednadžbe	111
4.4.3.3	Diskretizacija jednadžbe ravnoteže elastičnog tijela	115
4.4.3.4	Sastavljanje globalnog sustava jednadžbi	117
4.4.3.5	Primjena graničnih uvjeta	118
4.4.4	Postupak rješavanja	120
4.4.5	Postupak rješavanja na paralelnim računalima	121
4.5	Testiranje predložene metode pomicanja mreže	122
4.5.1	Usporedba Laplaceove jednadžbe pomaka s jednadžbom ravnoteže elastičnog tijela	122
4.5.2	Usporedba postupaka automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena	125
4.5.3	Testiranje učinkovitosti minimizacije distorzije mreže primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije	128
4.6	Zaključak	133
5	Finite area method	137
5.1	Introduction	137
5.2	Discretisation of spatial domain	138
5.3	Diskretizacija transportne jednadžbe	140
5.3.1	Diskretizacija prostornih integrala	142
5.3.2	Vremenska diskretizacija	147
5.3.3	Primjena graničnih uvjeta	148
5.3.4	Sustav linearnih algebarskih jednadžbi	148
5.4	Provjera numeričkog modela	149
5.4.1	Difuzijski transport	150
5.4.2	Konvekcijsko-difuzijski transport	151
5.4.3	Nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport	154
5.5	Zaključak	156

6 Numerical modelling of multiphase fluid flow with interface	157
6.1 Introduction	157
6.2 Discretisation of the Navier-Stokes system on a moving mesh	158
6.2.1 Derivation of the pressure equation	159
6.2.2 Boundary conditions	160
6.2.3 Solution procedure	162
6.3 Interface tracking method	164
6.3.1 Introduction of a modified pressure	165
6.3.2 Implementation of boundary conditions at the interface	166
6.3.3 Displacement of interface points	167
6.3.3.1 Maintaining interface smoothness	170
6.3.3.2 Analysis of accuracy and stability	171
6.3.4 Surface tension treatment	172
6.3.4.1 Calculation of vertex normals	175
6.3.4.2 Accuracy of calculation of surface tension forces . .	175
6.3.5 Solution procedure	178
6.3.6 Conservation of volume	179
6.4 Numerical modelling of free-rising bubble	180
6.5 Closure	183
7 Case studies	185
7.1 Introduction	185
7.2 Inviscid flow over 2-D ramp	186
7.3 Small amplitude sloshing in 2-D tank	188
7.3.1 Sloshing of one inviscid fluid phase due to gravity force . . .	190
7.3.2 Sloshing of a viscous fluid due to gravity force	191
7.3.3 Sloshing of one viscous fluid phase due to surface tension .	195
7.4 Rising bubble in a still liquid	196
7.4.1 2-D bubble	197
7.4.2 3-D bubble	201
7.5 Closure	210

8 Zaključak	211
8.1 Originalni znanstveni doprinos rada	213
8.2 Budući rad	214
A Reynoldsov transportni teorem	217
B Gaussov integralni teorem za zakrivljenu površinu	219
C Reynoldsov transportni teorem za deformabilnu površinu	221
D Normalno devijatorsko naprezanje na slobodnoj površini	223
E Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko–difuzijski transport na površini sfere	225
Bibliografija	229
Životopis	239
Biography	241

Predgovor

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

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

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

Sažetak rada

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

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

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

Abstract

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

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

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

Ključne riječi

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

Key words

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

Popis oznaka

Latinični znakovi

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

Oznaka	Opis	Jedinica
F_L	Sila uzgona	N
Fr	Froudeov broj	1
g	Gravitacijsko ubrzanje	m/s^2
I	Jedinični tenzor drugog reda	1
k_f	Neortogonalni dio jedinične normale na stranicu celije	1
k_e	Neortogonalni dio jedinične binormale na brid kontrolne površine	1
L	Duljina luka	m
L_e	Duljina brida kontrolne površine	m
L_{PN}	Geodetska udaljenost između težišta susjednih kontrolnih vršina	m
m	Jedinični vektor vanjske binormale	1
m_e	Jedinični vektor vanjske binormale na bridu kontrolne površine	1
\dot{m}_f	Apsolutni maseni tok fluida kroz stranicu celije	kg/s
N_i	Funkcija oblika	1
N_t	Broj trokuta koji čine poligonalnu stranicu celije	1
N_τ	Broj tetraedara koji čine poliedarsku celiju	1
n	Jedinični vektor vanjske normale	1
n_f	Jedinični vektor vanjske normale za stranicu celije	1
n_t	Jedinični vektor vanjske normale trokuta	1
n_i	Jedinični vektor normale u čvoru kontrolne površine	1
n_P	Jedinični vektor normale u težištu kontrolne površine	1
n_e	Jedinični vektor normale na bridu kontrolne površine	1
Pe	Pecletov broj	1
p	Tlak	N/m^2
p_m	Modificirani tlak	N/m^2
q	Toplinski tok	W/m^2
q_ϕ	Površinski izvor/ponor svojstva ϕ	
q_Φ	Difuzijski tok surfaktanta uzduž slobodne površine	$mol/(m s)$

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

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

Grčki znakovi

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

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

Gornji indeksi

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

Donji indeksi

Oznaka	Opis
\mathbf{v}_n	Normalna komponenta vektora

Oznaka Opis

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

Popis slika

1.1	Prostorno-vremenska mreža	40
2.1	With the description of conditions on the two-fluid interface.	55
3.1	Kontrolni volumen.	63
3.2	Postupci rastavljanja poligonalne stranice na trokute.	64
3.3	Interpolacija na stranicu f kontrolnog volumena.	70
3.4	Gamma shema diskretizacije u NVD dijagramu.	72
3.5	Vektori \mathbf{d}_f i \mathbf{n}_f na neortogonalnoj mreži.	74
3.6	Položaj i oblik kontrolnog volumen u dva uzastupna vremenska trenutka.	78
3.7	Volumen δV_t^n za stranicu f	79
3.8	Parametri granične stranice.	80
3.9	Dekompozicija domene za paralelni postupak rješavanja.	86
3.10	CG postupak s prekondicioniranjem za rješavanje linearног sustava alge- barskih jednadžbi $A \bullet x = b$	87
4.1	Uz definiciju problema pomicanja mreže.	91
4.2	Usporedba Dirichletovog i kliznog graničnog uvjeta na nepomičnoj granici.	93
4.3	Analogija tlačno – vlačnih opruga.	94
4.4	Oblici narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena. . . .	96
4.5	Trokut s pridruženim torzijskim oprugama.	98
4.6	Analiza utjecaja oblika raspodjele pomaka čvorova na svojstva pomaknute mreže.	105

4.7	Rasčlanjivanje poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre.	110
4.8	Linearni tetraedarski konačni element	113
4.9	Utjecaj oblika tetraedra na svojstva matrice sustava linearnih algebarskih jednadžbi.	115
4.10	Uz objašnjenje primjene graničnih uvjeta za jednadžbu pomaka mreže.	119
4.11	Početna mreža za pomicanje 2-D cilindra u kanalu.	123
4.12	Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra.	124
4.13	Pomaknuta mreža za pomak cilindra $0.15Di$. Boje predstavljaju raspodjelu gustoće distorzijske energije deformacije.	125
4.14	Početna mreža za numeričko modeliranje mjehurića primjenom pomične mreže.	127
4.15	Jedna osmina pomaknute mreže u području mjehurića. Boje definiraju raspodjelu gustoće energije deformacije.	129
4.16	Početna mreža oko oscilirajućeg NACA0012 profila.	130
4.17	Vremenska ovisnost maksimalne neortogonalnosti mreže u prvoj polovini perioda oscilacije NACA0012 profila.	131
4.18	Pomaknuta mreža u području izlaznog brida NACA0012 profila u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplace-ovojoj jednadžbi.	132
4.19	Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra uz različite raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovojoj jednadžbi pomaka mreže. Boje definiraju raspodjelu odgovarajućeg koeficijenta difuzije.	134
5.1	Smooth curved surface of time changing shape.	138
5.2	Odstupanje kontrolne površine od pripadajućeg dijela prostorne domene.	139
5.3	Kontrolne površine P i N.	140
5.4	Lokalni ortogonalni krivocrtni koordinatni sustav na bridu kontrolne površine.	143
5.5	Uz definiciju neortogonalnosti površinske mreže.	145
5.6	Uz definiciju geometrijskih parametara graničnog brida mreže.	148

5.7	Nestrukturirana površinska mreža za računanje difuzijskog transporta na površini sfere.	150
5.8	Rješenje osnosimetričnog difuzijskog transporta na površini sfere.	151
5.9	Strukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.	152
5.10	Nestrukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.	152
5.11	Rješenje osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	153
5.12	Pogreška rješenja osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	154
5.13	Nestrukturirana površinska mreža za računanje nestacionarnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere.	155
5.14	Rješenje nestacionarnog osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $Pe = 10$	156
6.1	Definition of the spatial domain for the moving mesh interface tracking method.	164
6.2	Representation of the interface with the mesh boundary faces.	165
6.3	Definition of the interface using control points.	168
6.4	Control area S_{Af}	173
6.5	With the definition of the procedure for calculation of normal vectors on the surface mesh.	176
6.6	Surface of rotational ellipsoid with the mesh of smallest resolution.	176
6.7	Spatial domain layout for the simulation of rising bubble in a non-inertial coordinate system.	181
7.1	Spatial domain definition for steady inviscid fluid flow over 2-D ramp.	186
7.2	Initial computational mesh for a steady inviscid fluid flow over 2-D ramp.	186
7.3	Final computational mesh for steady inviscid flow over a 2-D ramp.	187
7.4	Definition of spatial domain for small amplitude sloshing in 2-D tank.	189

7.5	Initial computation mesh for small amplitude sloshing in a 2-D tank with one inviscid fluid phase.	190
7.6	The free-surface height at the left wall of the tank as a function of time for different temporal discretisation methods.	191
7.7	Free-surface height at the left wall of the tank as a function of time for two types of boundary condition at the free-surface.	192
7.8	Interface height at the left wall of the tank as a function of time for different fluid density ratio.	193
7.9	Velocity vectors for small amplitude sloshing in a 2-D tank for fluid density ratio $\rho_B/\rho_A = 0.1$	194
7.10	Free-surface height at the left wall as a function of time for small amplitude sloshing under the action of surface tension force.	195
7.11	Initial computational mesh for the simulation of a 2-D air bubble rising through still water.	198
7.12	Rising velocity of a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm as a function of time for a clean and contaminated bubble surface.	199
7.13	Velocity vectors for a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm in still water with a clean and contaminated interface at $t = 0.4$ s.	200
7.14	Deformed computational mesh for a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm in still water with a clean and contaminated interface at $t = 0.4$ s. . .	200
7.15	The trajectory of a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean interface.	201
7.16	Velocity of the bubble centre as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean bubble surface.	202
7.17	Drag and lift coefficient as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean bubble surface.	203
7.18	Velocity vectors in the $x-z$ plane crossing the 3-D bubble centre. The case with clean bubble surface.	204
7.19	Path lines behind the rising 3-D air bubble in still water for clean bubble surface, at $t = 0.56$ s when the lift force equals zero ($C_{L,x-z} = 0$). .	205

7.20 Trajectory of a 3-D bubble of radius $r_b = 1$ mm with the surface occupied by surfactants.	206
7.21 Bubble centre velocity as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with contaminated surface.	207
7.22 Drag C_D and lift C_L coefficient as a function of time for a rising 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with contaminated surface.	207
7.23 Velocity vector in $x-z$ plane for a 3-D bubble with contaminated interface. The colours define surfactant concentration (C , mol/m ²) distribution on the bubble surface.	208
E.1 Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko-difuzijski transport na površini sfere.	226
E.2 "Točno" numeričko rješenje za osnosimetrični nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.	228

Popis tablica

4.1	Granični pomak cilindra i neortogonalnost pomaknute mreže za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.	123
4.2	Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja uz pomak cilindra $0.15D_i$ za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.	124
4.3	Granični pomak cilindra i odgovarajuća neortogonalnost mreže pri pomicanju u više koraka s pomakom $0.15D_i$ u jednom koraku.	125
4.4	Kvaliteta mreže i učinkovitost postupka rješavanja za predložene postupke automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre.	128
4.5	Maksimalna neortogonalnost mreže i proteklo vrijeme rješavanja problema pomicanja mreže u trenutku $t = 0.5$ s za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.	133
4.6	Granični pomak (Δ_{gr}) cilindra za različite raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže.	133
5.1	Točnost metode diskretizacije ovisno o vrsti mreže i shemi diskretizacije.	154
6.1	Curvature calculation error for the surface of a rotational ellipsoid. .	177
7.1	Comparison of calculated free-surface height (h_2) at the outlet boundary with the analytical one ($h_{a,2}$).	188
7.2	Comparison of computational time consumption for individual parts of the solution procedure.	209

Poglavlje 1

Uvod

1.1 Motivacija

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

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

oštrine pomične granice prostorne domene.

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

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

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

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

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

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

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

1.2 Pregled postojećih spoznaja

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

1.2.1 Metoda kontrolnih volumena na pomicnoj mreži

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

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

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

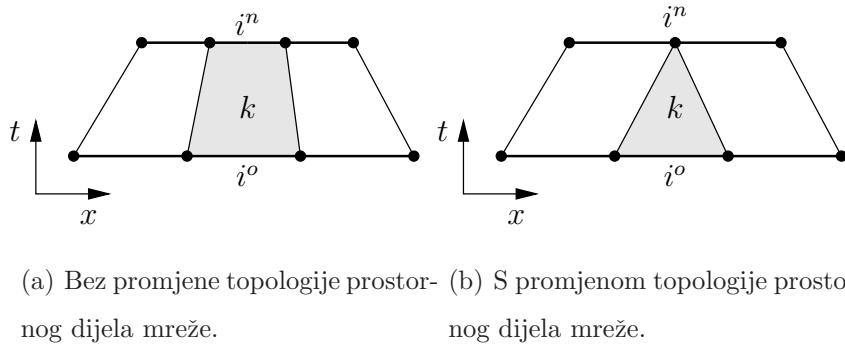
metode konačnih razlika, kao što su npr. implicitna Eulerova, Crank-Nicolsonova ili Ge-
arova metoda.

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

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

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

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



(a) Bez promjene topologije prostornog dijela mreže. (b) S promjenom topologije prostornog dijela mreže.

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

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

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

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

1.2.2 Pomicanje mreže

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

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

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

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

doživio širu primjenu.

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

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

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

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

1.2.3 Numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom

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

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

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

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

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

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

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

Postoji veliki broj metoda za simulaciju strujanja sa slobodnom površinom koje ko-

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

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

1.2.4 Metoda kontrolnih površina

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

Numeričko modeliranje utjecaja surfaktanata zahtijeva diskretizaciju površinske transportne jednadžbe na zakriviljenoj deformabilnoj površini (slobodnoj površini). Sličan se problem javlja kod simulacije tankog fluidnog filma, gdje se odgovarajući matematički

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

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

1.3 Hipoteza rada

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

- nepoznate varijable se računaju u težištu kontrolnog volumena (engl. “cell centered finite volume method”),
- mreža je nestrukturirana i sastavljena od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volu-

mena,

- podržan je postupak rješavanja na paralelnim računalima primjenom metode dekompozicije prostorne domene.

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

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

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

1.4 Pregled rada

Ostatak ovog rada organiziran je na sljedeći način.

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

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

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

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

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

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

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

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

Poglavlje 2

Mathematical model

2.1 Introduction

Ultimate goal of this study is numerical modelling of multiphase fluid flow with a free-surface using the Finite Volume method on a moving computational mesh. On each fluid phase one defines separate computational mesh which moves and deforms according to interface motion. Mathematical model governing the fluid flow is solved on each moving mesh separately and coupling is accomplished by the enforcement of proper boundary conditions at the interface. Within this study multiphase fluid flow with the interface/free-surface will be considered, where surface tension is one of dominated forces and where surface tension gradient occurs due to nonuniform distribution of surfactants at the interface.

As a starting point for the finite volume method (FVM) dealing with moving computation mesh, integral conservation laws for arbitrary volume are given in section 2.2. The laws are first defined for general continuum, and then for isothermal flow of incompressible Newtonian fluids. Conditions which must be satisfied at the interface between two immiscible fluids (kinematic and dynamic conditions) are described in section 2.3. The dynamic condition includes effects of fluid viscosity and variable surface tension. In section 2.4 surface tension and its dependence on concentration of surfactants is briefly described. Surface integral transport equation for an arbitrary surface element, which governs the transport of surfactants along a deformable surface is also given.

2.2 Governing equation of fluid mechanics for arbitrary volume

Motion of continuum is defined by following basic laws of classical physics:

- Mass conservation law;
- Linear momentum conservation law;
- Angular momentum conservation law;
- Energy conservation law;
- Entropy inequality.

The laws above are defined for a system (material volume), and have to be transformed for an arbitrary volume moving in space.

Conservation law for an intensive physical property ϕ in material volume V_M bounded by a closed surface S_M can be expressed by the following equation:

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

where ρ is the density, \mathbf{n} is the outward pointing unit normal on S_M , \mathbf{q}_ϕ and s_ϕ are surface and volume sources ϕ .

By applying the Reynolds transport theorem (A.3) on Eqn. (2.1), one obtains the integral conservation law of property ϕ for an arbitrary volume V bounded by closed surface S :

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

where \mathbf{v} is the velocity of a continuum, and \mathbf{v}_s is the velocity of surface S . Surface source \mathbf{q}_ϕ in Eqn. (2.2) usually represents a diffusion flux which can be expressed with the following relation:

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

where Γ_ϕ is diffusion coefficient. Substituting relation (2.3) into Eqn. (2.2), one obtains the final form of the integral conservation law of property ϕ for an arbitrary volume in space:

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

Basic laws of continuum mechanics for arbitrary volume V follow from Eqn. (2.2):

- Mass conservation law:

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

- Linear momentum conservation law:

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

- Angular momentum conservation law:

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

From Eqs. (2.6 and 2.7) it follows that the stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$ is a symmetric tensor:

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

- Energy conservation law:

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

- Entropy inequality:

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

where \mathbf{g} is the gravity, \mathbf{r} is the position vector, e is the total specific energy, \mathbf{q} is the heat flux, Q is the energy source, s is the specific entropy, and T is the temperature.

When spatial domain changes its shape with time, the *space conservation law* must be satisfied:

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

This "law" expresses the relation between the rate of change of spatial domain volume and the velocity of its boundary.

Isothermal flow of incompressible Newtonian fluids

In this study only isothermal flow of incompressible Newtonian fluid will be considered.

Stress tensor for incompressible Newtonian fluids is defined by a generalised Newton's law of viscosity:

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

where p is the pressure, μ is the dynamic viscosity of a fluid, and \mathbf{I} is the second rank unit tensor. In the case of incompressible fluid flow ($\rho = \text{const.}$), and assuming constant dynamic viscosity ($\mu = \text{const.}$), laws of conservation of mass and linear momentum, Eqs. (2.5 and 2.6), can be transformed into the following form:

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

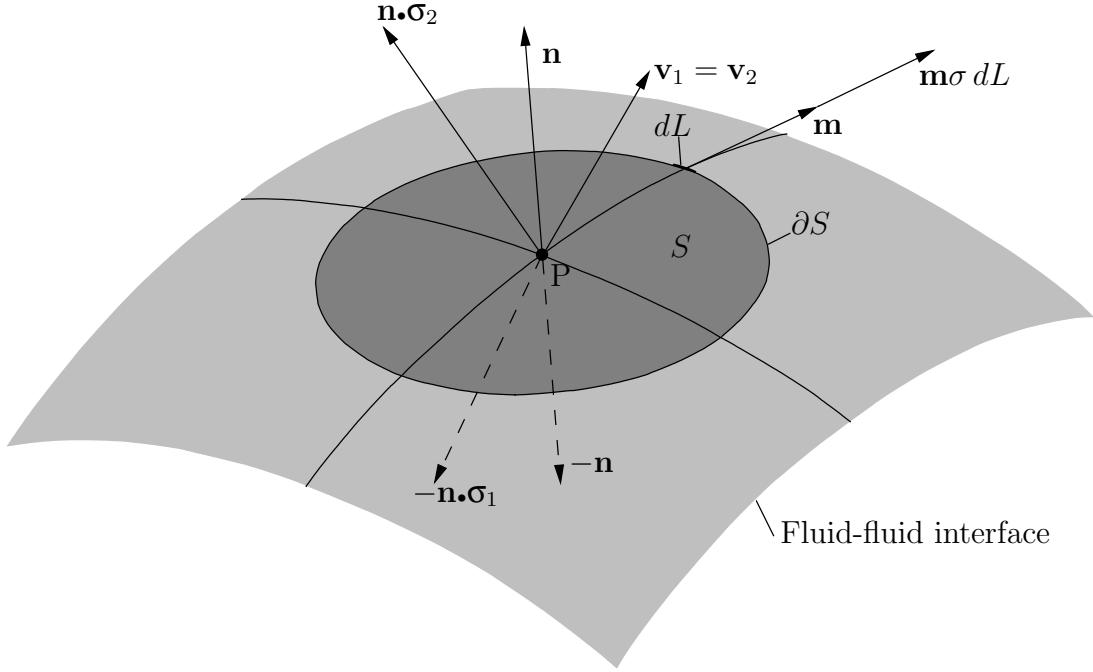
$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} \, dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) \, dS + \int_V \rho \mathbf{g} \, dV - \int_V \nabla p \, dV. \quad (2.14)$$

Equation Eqn. (2.14) represents the integral form of the Navier-Stokes equation for isothermal flow of incompressible Newtonian fluid, which together with the continuity equation, Eqn. (2.13), initial and boundary conditions makes a closed system of equations.

2.3 Conditions a fluid interface

Fluid flow Eqs. (2.13 and 2.14) are valid under the continuum assumption. Since physical properties changes discontinuously across the fluid interface, special attention is required. If the fluid phases are immiscible, fluid flow equations can be applied for each phase separately, while on the interface the proper boundary conditions must be applied.

The boundary between two immiscible Newtonian fluids (interface/free-surface) is shown on Fig. 2.1. One needs to determine relation between the velocity \mathbf{v} , its surface normal derivative $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}$ and the pressure p on the two sides of the interface.



Slika 2.1: With the description of conditions on the two-fluid interface.

Relation between fluid velocities on the two sides is determined by the *kinematic condition* (Batchelor [4]), according to which the normal velocity component must be continuous across the interface¹:

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

where \mathbf{v}_1 and \mathbf{v}_2 are fluid velocities on the two sides of the interface and \mathbf{n} is a unit normal vector at the interface which points from fluid 1 to fluid 2, see Fig. 2.1. Additionally, if one assumes that the interface allows transport of momentum through the molecular interaction, tangential component of velocity also must be continuous across the interface:

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

From equations (2.15) i (2.16) follows:

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

¹This condition is valid if there is no mass flux across the interface.

at the interface.

From the momentum conservation law follows the *dynamic condition*, which states that forces acting on the fluid at the interface are in equilibrium. The equilibrium equation is derived considering an interface region S , bounded by the closed curve ∂S , Fig. 2.1. The integral form of the equilibrium equation reads:

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

where $\boldsymbol{\sigma}_1$ and $\boldsymbol{\sigma}_2$ are the stress tensors on the two sides of the interface, σ is the surface tension, \mathbf{m} is the outward pointing unit bi-normal vector on the curve ∂S , and L is the arc length measured along the curve ∂S . Using the surface Gauss' theorem (see Appendix B), the line integral in Eqn. (2.18) can be transformed into a surface integral:

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

where $\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}$ is twice the mean curvature of the interface and $\nabla_s \sigma$ is the surface gradient of the surface tension. Letting the surface S converge to a point, one obtains the differential equilibrium equation which holds for any point on the interface:

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

Considering that the stress tensor can be expressed as the sum of its isotropic and deviatoric component ($\boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$), Eqn. (2.20) reads:

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

where p_1 and p_2 are pressures on the two sides of the interface, and $\boldsymbol{\tau}_1$ and $\boldsymbol{\tau}_2$ are the corresponding deviatoric stress tensors. Taking the dot-product of Eqn. (2.21) with unit normal \mathbf{n} , one obtains the *normal stress force balance equation* on the interface:

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

while the tangential stress force balance equation is obtained by subtracting Eqn. (2.22) multiplied by \mathbf{n} , from equation (2.21):

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

In Eqs. (2.22 and 2.23) there exist a term $\mathbf{n}\mathbf{n}:\boldsymbol{\tau}$ which represents the normal deviatoric stress force on the interface. For a rigid no-slip surface and incompressible fluid flow, the deviatoric stress force $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau}$ is tangential to the rigid surface, *i.e.* the normal deviatoric stress force is identically zero [4]. Chen, Saric and Stone [14] have shown that for a deformable slip surface and incompressible flow the normal deviatoric stress force has a finite value defined by the following equation:

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

Here, μ is the dynamic viscosity of fluid, \mathbf{v} is the fluid velocity on the interface, and $\nabla_s \cdot \mathbf{v}$ is the surface divergence of velocity. Derivation of Eqn. (2.24) is shown in Appendix D.

Substituting equation Eqn. (2.24) into equation Eqn. (2.22) one obtains the final form of normal stress force balance on the interface:

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

where μ_1 i μ_2 are the dynamic viscosities of fluids on the two sides. Equation (2.25) represents the *pressure jump condition* across the interface, from which one can see that pressure jump occurs due to surface tension and a difference in fluid viscosities on the two sides of the interface.

It remains to derive the relation between the normal velocity derivatives ($\mathbf{n}\cdot\nabla\mathbf{v}$) on the two sides of the interface. For that purpose, Equation (2.23) will be further simplified using the relation between the deviatoric stress tensor and the rate-of-strain tensor for an incompressible Newtonian fluid:

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

and the expression for the velocity gradient at the interface:

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

Using Eqs. (2.26 and 2.27), expression $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau}$ can be expressed in terms of the velocity gradient:

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

where following identities are used:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_s \mathbf{v} = 0, \quad (2.29)$$

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

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

Substituting Eqn. (2.28) into Eqn. (2.23), one obtains the wanted relation which connects the normal velocity derivative on the two sides of the interface:

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

One can see from Eqn. (2.32) that the jump in the normal velocity derivative across the interface occurs due to the surface tension gradient and fluid viscosity difference across the interface.

2.4 Surface tension and surfactants

Surface tension σ is a material property of an interface between two immiscible fluids, defined as the energy needed to extend the interface by a unit area. An interface line element dL will feel the force σdL which is perpendicular to the considered line element and tangential to the interface. For the free-surface between clean water and air at 20°C, surface tension equals 0.0728 N/m.

In general, surface tension depends on both the temperature and concentration of surface-active agents (surfactants) at the interface. Surfactants are substances whose molecules possess a bipolar structure, *i.e.* polar (hydrophilic) head and apolar (hydrophobic) tail. Because of such structure, surfactant molecules adsorb on the interface between the polar (aqueous) and apolar (nonaqueous) fluid phases. Presence of surfactants reduces the surface tension. This phenomena is the base for application of the surfactants in the industry: stabilisation of emulsions and foams, spraying, atomisation, distillation *etc..* Typical surfactant substances are fatty acids and alcohols, but the role of surface-active agents may also be played by polymeric molecules, proteins and small solid particles.

Dependence of surface tension on surfactant concentration at the interface is determined by the surface equation of state. The nonlinear Frumkin-Langmir equation of state is often used in calculations (Cuenot, Magnaudet and Spennato [16]):

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

where σ_0 is the surface tension of a clean interface, Φ is the surfactant concentration at the interface, Φ_∞ is the saturated surfactant concentration, \mathcal{R} is the universal gas constant and T is the temperature.

Generally, in flow conditions there will occur a nonuniform distribution of adsorbed surfactants on the interface due to convective and diffusive transport along the interface. On the other hand, nonuniform surfactant distribution will cause the gradient of surface tension called the Marangoni stress which acts on the fluid near the interface with tendency to restore uniform surfactant concentration. In the case of a rising bubble, surfactant molecules adsorbed at the interface are generally swept to the trailing side of the bubble. The resulting fore-to-aft surface tension gradient results in a Marangoni stress that resists surface motion, and so rigidifies the bubble surface.

In order to take into account the effect of surfactants on the multiphase fluid flow with the interface, one has to include the conservation law of surfactant at the interface into the overall mathematical model. Integral form of the surfactant conservation law for a material surface¹ S_M bounded by closed a curve ∂S_M reads:

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

where \mathbf{m} is the outward pointing unit bi-normal on ∂S_M , L is the arc length measured along ∂S_M , \mathbf{q}_Φ is the diffusion flux of surfactant along the interface and s_Φ is the source/sink of surfactant per unit area due to adsorption and desorption. Diffusion flux of the surfactant along the interface can be expressed by Fick law:

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

where Γ_Φ is the diffusion coefficient of the surfactant along the surface, and $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla$ is the surface gradient operator. If one assumes there is no adsorption and desorption of the surfactant from and into the surrounding fluids ($s_\Phi = 0$), the conservation

¹The interface is the material surface if there is no mass flux across it.

law (2.34) takes the following form:

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

Applying Reynolds' transport theorem for a deforming surface (C.7), conservation law (2.36) can be transformed to be valid for an arbitrary surface S bounded by a closed curve ∂S :

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

where $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}$ is the tangential component of fluid velocity at the interface and $\mathbf{b}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \mathbf{b}$ is the tangential velocity component of curve ∂S . The arbitrary surface S is attached to the material surface S_M by the conditions (C.1).

Coupling between fluid flow and surfactant transport along the interface is visible from the corresponding mathematical models. Convective term in Eqn. (2.37) contains fluid velocity at the interface, and surfactant concentration at the interface is included in fluid flow Eqs. (2.13 and 2.14) through the equation of state (2.33) and boundary conditions (2.25) i (2.32).

2.5 Closure

In this chapter, integral form of basic continuum mechanics equations for arbitrary volume are given as starting point for the finite volume method on moving mesh. The corresponding equations for isothermal flow of an incompressible Newtonian fluid are given. Conditions for velocity, pressure and normal derivative of the velocity at the interface between the two immiscible fluids are derived. Surface tension and its dependence on surfactant concentration at the interface is described. The mathematical model which governs the transport of surfactant along the interface is defined as a prerequisite for numerical modelling of Marangoni effect due to nonuniform distribution of surfactant at the interface.

Poglavlje 3

Diskretizacija metodom kontrolnih volumena

3.1 Uvod

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

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

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

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

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

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

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

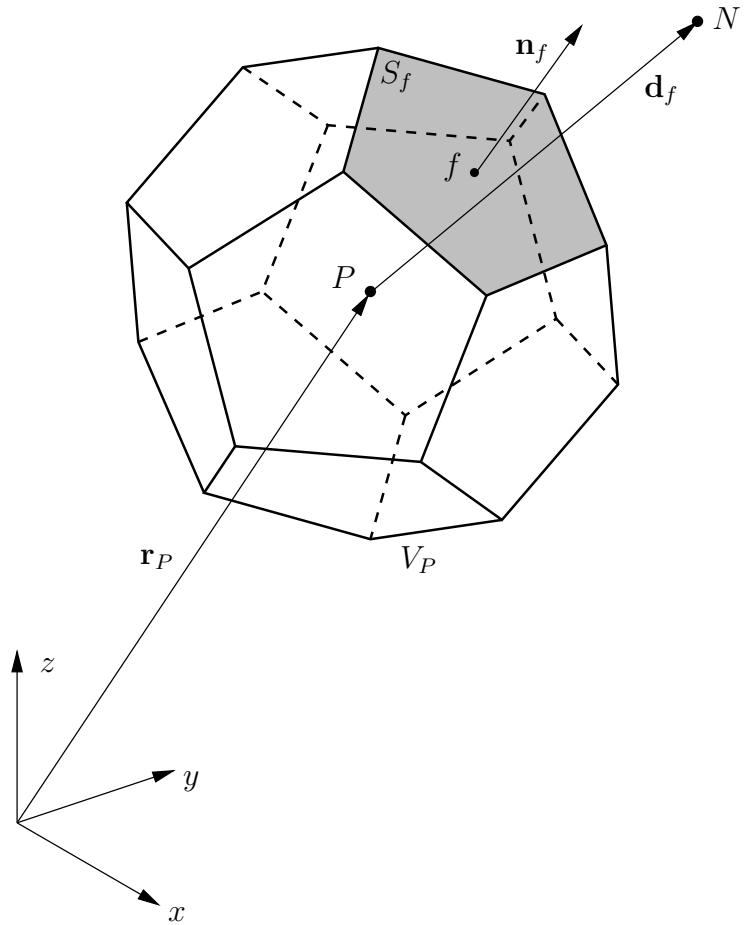
Ostatak poglavlja strukturiran je na sljedeći način. U odjeljku 3.2 opisana je prostorna diskretizacija, uključujući definiciju računske mreže, postupke računanja svojstava mreže, te kriterije provjere valjanosti. U odjeljku 3.3 opisana je diskretizacija opće transportne jednadžbe na pomicnoj nestrukturiranoj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

3.2 Diskretizacija domene rješavanja

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

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

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



Slika 3.1: Kontrolni volumen.

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

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

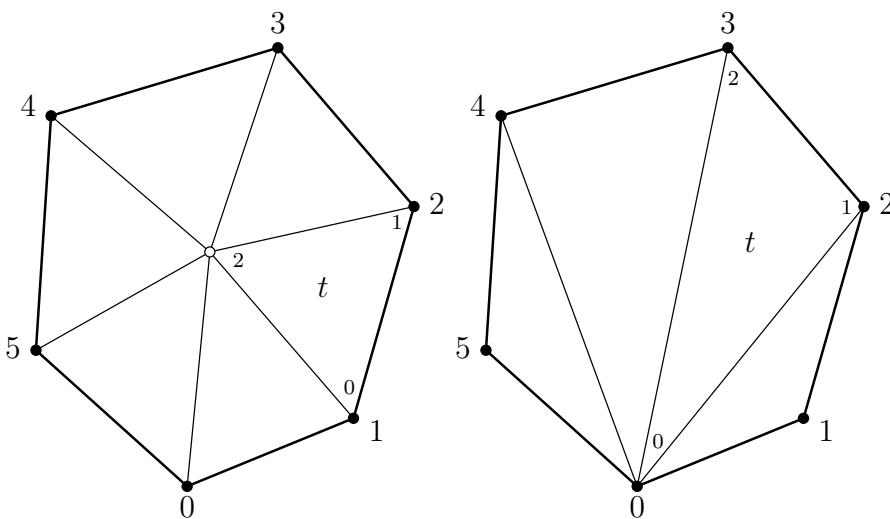
oznakom istaknuto težište. Težište kontrolnog volumena predstavlja *prostornu računsku točku* i zadovoljava sljedeći uvjet:

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

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

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

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



(a) Pomoću centralnog čvora.

(b) Pomoću postojećih čvorova.

Slika 3.2: Postupci rastavljanja poligonalne stranice na trokute.

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

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

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

gdje je N_t broj trokuta koji čine stranicu;

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

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

Izraz (3.4) zadovoljava uvjet (3.2);

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Valjanost topologije mreže provjerava se prema sljedećim kriterijima:

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

¹Ova tema je detaljno obrađena u 4. poglavlju.

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

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

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

Geometrijska valjanost mreže provjerava se prema sljedećim kriterijima:

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

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

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

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

3.3 Diskretizacija transportne jednadžbe

Integralni oblik transportne jednadžbe za intenzivno skalarno svojstvo ϕ glasi:

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

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

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

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{V_P} \rho\phi \, dV}_{\text{Vremenski član}} + \underbrace{\oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)\phi \, dS}_{\text{Konvekcijski član}} - \underbrace{\oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot (\rho\Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS}_{\text{Difuzijski član}} = \underbrace{\int_{V_P} s_\phi \, dV}_{\text{Izvorski član}}, \quad (3.10)$$

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

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

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

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

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

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

3.3.1 Diskretizacija prostornih integrala

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Konvekcijski član

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

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

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

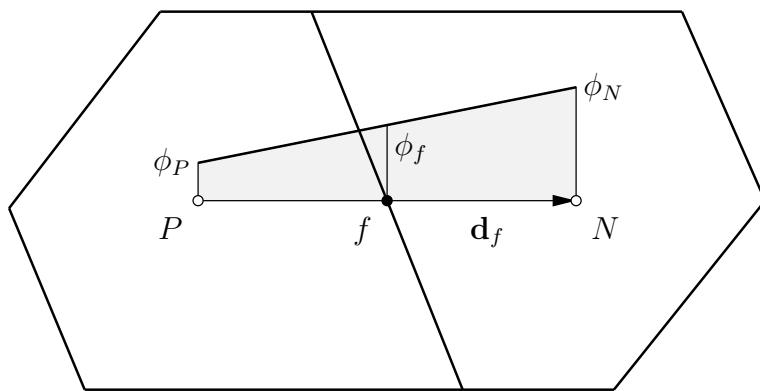
Vrijednost zavisne varijable ϕ na stranicama kontrolnih volumena računa se iz vrijednosti u težištima susjednih kontrolnih volumena primjenom sheme diskretizacije.

Sheme diskretizacije konvekcijskog člana

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

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

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



Slika 3.3: Interpolacija na stranicu f kontrolnog volumena.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ili

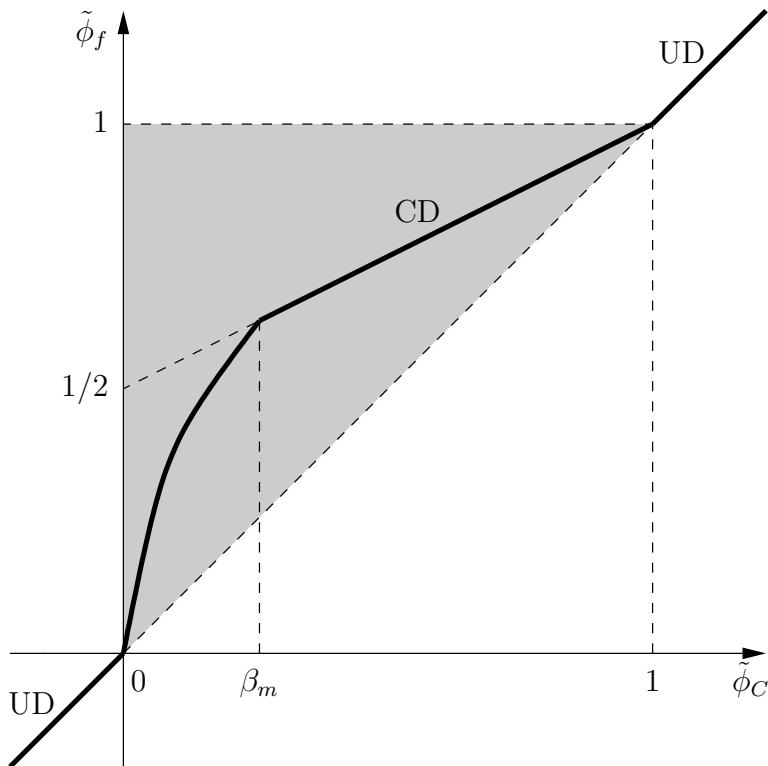
$$\begin{aligned} \phi_f = & [(1 - \gamma_f) \max(\operatorname{sgn}(\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f), 0) + \gamma_f f_x] \phi_P \\ & + [(1 - \gamma_f) \min(\operatorname{sgn}(\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f), 0) + \gamma_f (1 - f_x)] \phi_N, \end{aligned} \quad (3.22)$$

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

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

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

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



Slika 3.4: Gamma shema diskretizacije u NVD dijagramu.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Difuzijski član

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

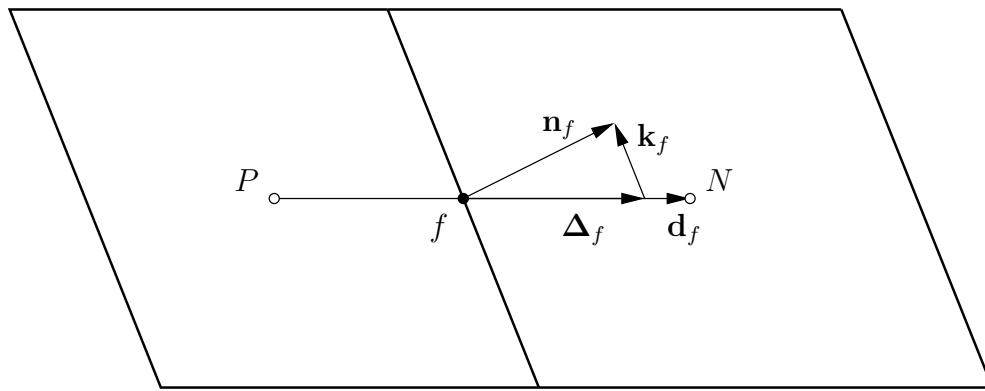
$$\oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dS = \sum_f \mathbf{n}_f \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)_f S_f = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f S_f \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \phi)_f, \quad (3.26)$$

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Izvorski član

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

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

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

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

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

3.3.2 Vremenska diskretizacija

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

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

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

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

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

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

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

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

Ova metoda je uvjetno stabilna i prvog reda točnosti.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.3.3 Utjecaj pomicanja mreže

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

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

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

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

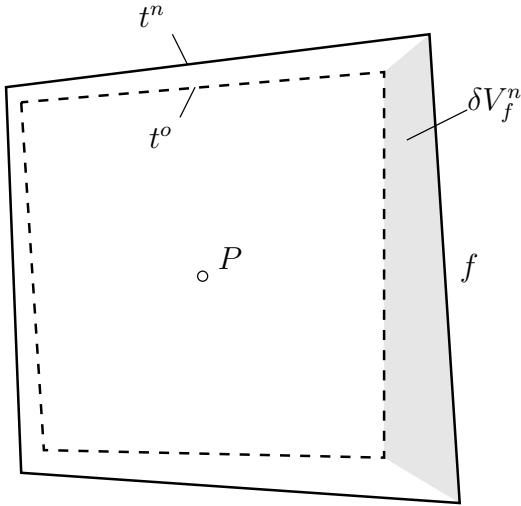
$$\frac{d}{dt} \int_V dV - \oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s \, dS = 0.$$

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

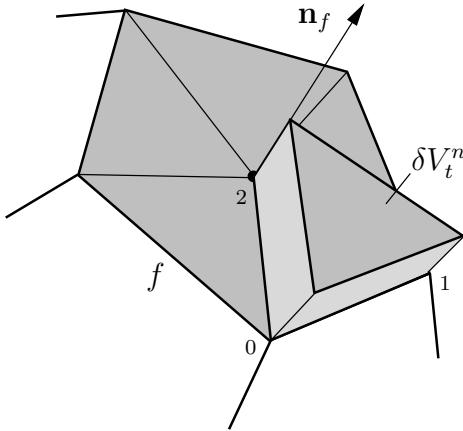
i to garantira egzaktno zadovoljavanje zakona održanja prostora u diskretiziranom obliku.

Ukoliko se koristi Crank–Nicolsonova metoda vremenske diskretizacije, volumni tok stranica mreže računa se prema sljedećem izrazu:

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

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

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



Slika 3.7: Volumen δV_t^n za stranicu f .

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

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

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

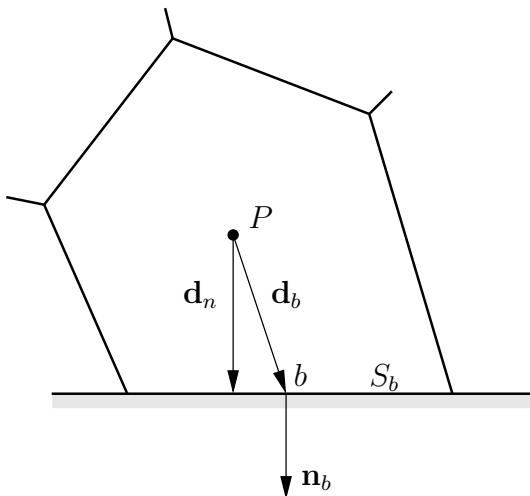
$$\begin{aligned} \delta V_t^n = & \frac{1}{6} (\mathbf{r}_{t0}^n - \mathbf{r}_{t0}^o) \cdot [(\mathbf{r}_{t1}^o - \mathbf{r}_{t0}^o) \times (\mathbf{r}_{t2}^o - \mathbf{r}_{t0}^o)] \\ & + \frac{1}{6} (\mathbf{r}_{t1}^n - \mathbf{r}_{t1}^o) \cdot [(\mathbf{r}_{t2}^o - \mathbf{r}_{t1}^o) \times (\mathbf{r}_{t0}^n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

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

3.3.4 Primjena graničnih uvjeta

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

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



Slika 3.8: Parametri granične stranice.

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

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

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

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

- **Dirichletov granični uvjet**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- **Neumannov granični uvjet**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.4 Sustav linearnih algebarskih jednadžbi

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

zadovoljen uvjet:

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

Dodatno, ako za barem jednu jednadžbu vrijedi da je

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

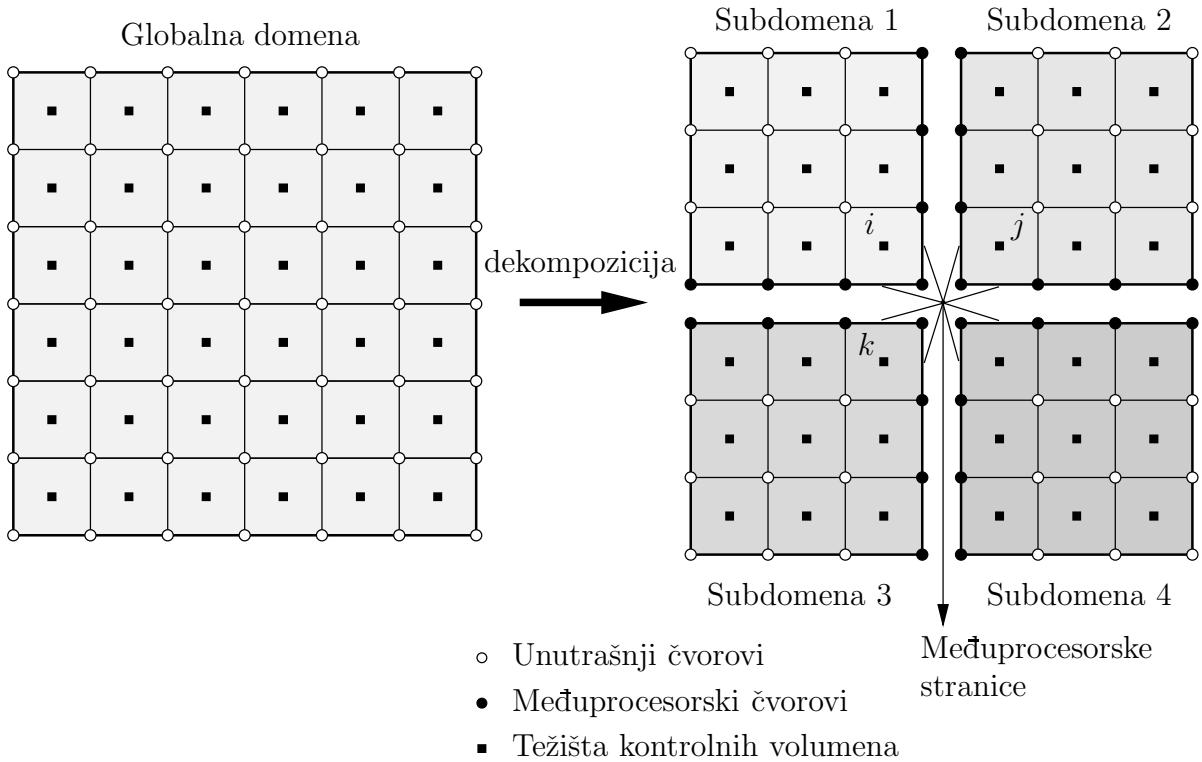
odnosno

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

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

3.5 Postupak rješavanja na paralelnim računalima

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



Slika 3.9: Dekompozicija domene za paralelni postupak rješavanja.

Paralelizaciju postupka rješavanja potrebno je provesti na dvije razine. Prva razina je gradnja jednadžbi na pojedinim procesorima. Naime, na toj razini je potrebno imati na raspolaganju geometrijske podatke, ali i vrijednosti nepoznatica za one susjedne kontrolne volumene koji se nalaze na drugim procesorima. Tako npr. računanje dijagonalnog koeficijenta koji odgovara kontrolnom volumenu i na procesoru 1 (slika 3.9) zahtijeva poznavanje geometrije kontrolnog volumena j koji se nalazi na procesoru 2 i kontrolnog volumena k koji se nalazi na procesoru 3. Kod nepomične mreže, te se geometrijske informacije razmjenjuju samo jednom na početku računa; međutim kod pomicne mreže potrebno je tu razmjenu provesti nakon svakog pomicanja. Za računanje svih vrsta eksplicitnih korekcija koje idu u desnu stranu diskretizirane jednadžbe potrebno je imati na raspolaganju vrijednosti nepoznatih varijabli iz prethodne iteracije za one susjedne kontrolne volumene koji se nalaze na drugim procesorima.

Informacije vezane uz kontrolne volumene na pojedinim procesorima čuvaju se u lokalnim vektorima. Međuprocesorskoj granici se dodjeljuju tzv. međuprocesorski vektori, koji čuvaju međuprocesorske članove lokalnih vektora sa susjednih subdomena (procesora). Obnavljanje međuprocesorskih vektora zahtijeva razmjenu informacija (komunikacija).

ciju) između procesora.

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

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

```

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

```

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

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

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

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

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

3.6 Zaključak

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

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

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

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

Poglavlje 4

Automatsko pomicanje mreže

4.1 Uvod

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

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

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

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

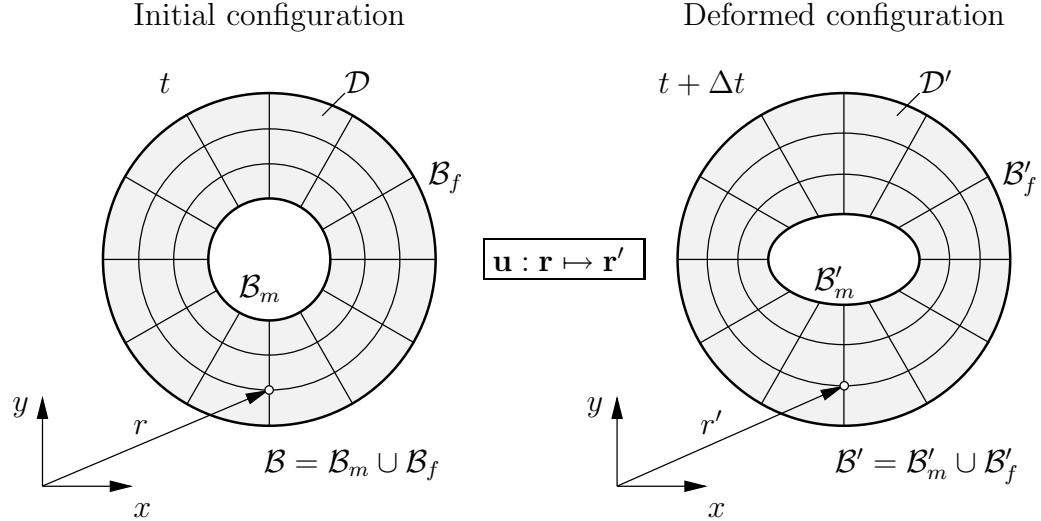
Ostatak poglavlja strukturiran je na sljedeći način. U odjeljku 4.2 definiran je problem pomicanja mreže, a u odjeljku 4.3 dan je pregled postojećih jednadžbi pomaka. Nova automatska metoda pomicanja mreže opisana je u odjeljku 4.4. Testiranje predložene automatske metode pomicanja mreže provedeno je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

4.2 Definicija problema pomicanja mreže

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

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

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



Slika 4.1: Uz definiciju problema pomicanja mreže.

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

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

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

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

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

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

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

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

Tipovi graničnih uvjeta koji se mogu koristiti uz jednadžbu pomaka ovise o vrsti jednadžbe. Najčešće se kao jednadžba deformacije koristi eliptična parcijalna diferencijalna

jednadžba drugog reda, pa će se ovdje razmotriti granični uvjeti koji odgovaraju tom tipu jednadžbe, a svojstveni su za problem pomicanja mreže.

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

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

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

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

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

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

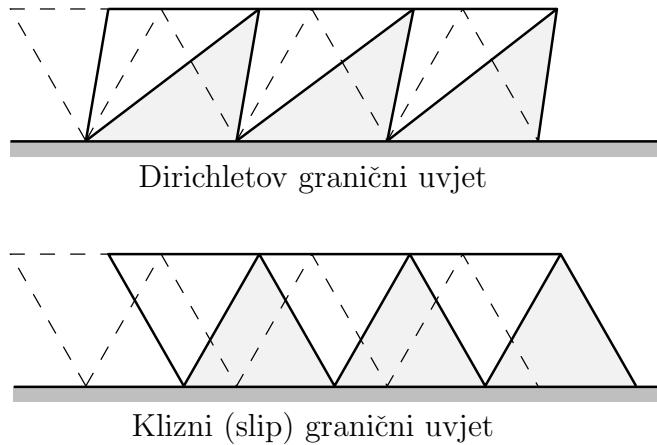
$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{na } \mathcal{B}_f, \quad (4.6)$$

dok se za tangencijalnu komponentu koristi Neumannov granični uvjet:

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

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

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



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

4.3 Pregled matematičkih modela pomaka mreže

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

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

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

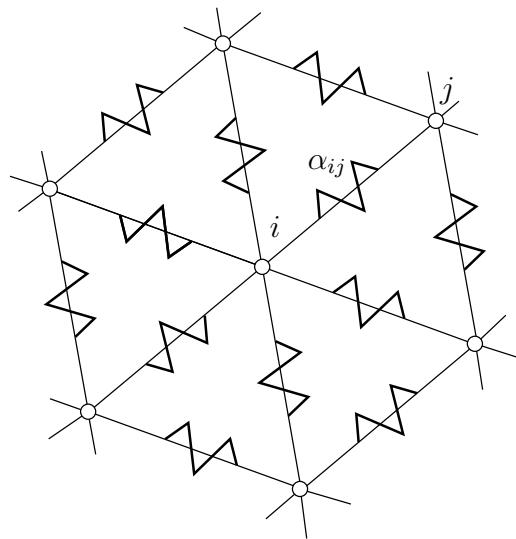
Navedeni matematički modeli pomaka mreže detaljnije su opisani u sljedećim odjelj-

cima.

4.3.1 Analogija tlačno – vlačnih opruga

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

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



Slika 4.3: Analogija tlačno – vlačnih opruga.

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

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

gdje je α_{ij} krutost opurge, a \mathbf{r}_i i \mathbf{r}_j su vektori položaja čvorova i i j . Da bi sustav bio u

ravnoteži, mora suma svih sila u svakom čvoru i biti jednaka nuli, tj.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

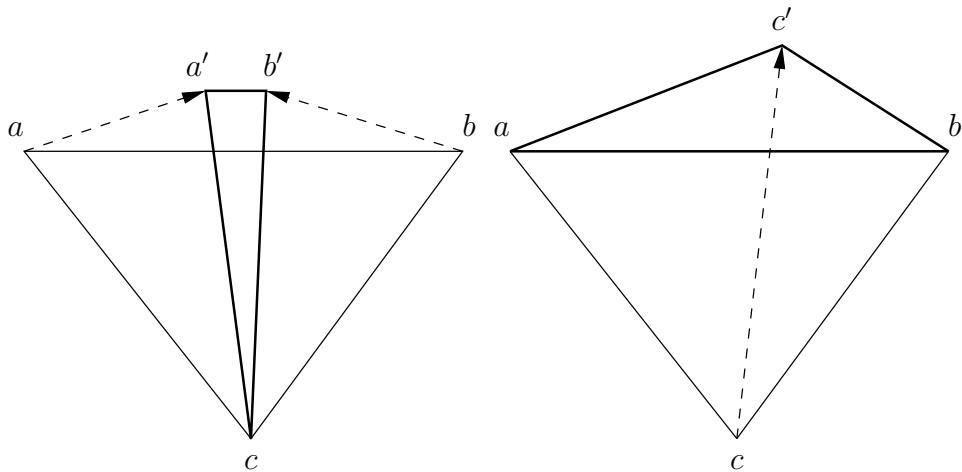
Budući da je krutost opruge konstantna tijekom pomicanja mreže između dva vremenska trenutka nestacionarne simulacije, sustavi algebarskih jednadžbi (4.9) i (4.11) su linearni.

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

- Računanje koeficijenata sustava linearnih algebarskih jednadžbi je jednostavno i učinkovito. Dovoljno je poznavati samo vektore položaja čvorova i susjedne čvorove

svakog čvora. To ujedno znači da teorijski nema ograničenja s obzirom na vrstu kontrolnog volumena koji se smije koristiti;

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



(a) Sudaranje čvorova.

(b) Prolazak čvora kroz nasuprotnu stranicu.

Slika 4.4: Oblici narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena.

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

koraku nestacionarne simulacije. Ovo ograničenje je posljedica eksplicitnog tretiranja izraza za računanje krutosti opruge (4.12).

Može se pokazati da analogija tlačno – vlačnih opruga s krutošću koja je definirana izrazom (4.12) ne može spriječiti narušavanje valjanosti kontrolnog volumena do kojeg dolazi prolazom čvora kroz nasuprotnu stranicu, slika 4.4(b). Razlog je u tome, što krutost opruge neće težiti u beskonačnost s približavanjem čvora c stranici ab , jer u takvoj situaciji duljine stranica ac i bc ne teže nužno nuli. To znači da se takav način inverzije kontrolnih volumena ne može spriječiti niti smanjenjem vremenskog koraka nestacionarne simulacije.

4.3.2 Analogija torzijskih opruga

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

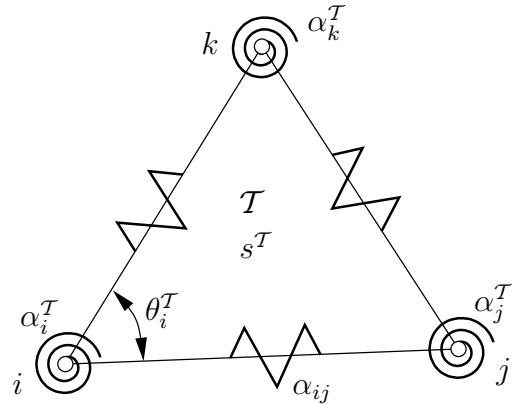
$$\alpha_i^{\mathcal{T}} = \frac{1}{(1 + \cos \theta_i^{\mathcal{T}})(1 - \cos \theta_i^{\mathcal{T}})} = \frac{1}{\sin^2 \theta_i^{\mathcal{T}}}, \quad (4.13)$$

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

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

Matematička formulacija analogije torzijskih opruga izvedena je pod pretpostavkom malih deformacija mreže. To omogućava korištenje linearne ovisnosti promjene kuteva između stranica trokuta $\Delta\theta^{\mathcal{T}}$ o pomaku čvorova trokuta $\mathbf{u}^{\mathcal{T}}$:

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



Slika 4.5: Trokut s pridruženim torzijskim oprugama.

gdje je

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

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

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

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

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

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

gdje je

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

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

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

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

gdje je

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

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

Farhat *et al.* [27] na nekoliko primjera pokazuju da kombinacija aksijalnih i torzijskih opruga uspješno sprečava sve oblike narušavanja valjanosti trokutnog kontrolnog volumena (slika 4.4). Treba voditi računa da se izraz (4.13) za računanje krutosti torzijskih opruga tretira eksplisitno, jer koristi kuteve između stranica trokuta u početnoj konfiguraciji mreže. To znači da se ovakvim pristupom narušavaju valjanosti trokutnih

kontrolnih volumena može spriječiti samo uz dovoljno mali vremenski korak nestacionarne simulacije.

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

4.3.3 Jednadžba ravnoteže elastičnog tijela

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Chiandussi, Bugeda i Onate [15] pokušavaju pomoću prostorno promjenjivog modula elastičnosti postići jednoliku distorziju elemenata mreže. Oni deformaciju mreže provode u dva koraka. U prvom se koraku rješava jednadžba (4.20) s konstantnim modulom elastičnosti. Na osnovi dobivenog tenzora deformacije, izračunava se novi prostorno promjenjivi modul elastičnosti, s kojim se u drugom koraku još jednput rješava jednadžba (4.20), te se dobiva konačni pomak mreže, u kojoj bi elementi trebali biti jednoliko deformirani. Ovakav pristup minimizaciji distorzije elemenata mreže pokazao je jako dobre rezultate. Međutim, veliki mu je nedostatak što se jednadžba deformacije mora rješavati dva puta u jednom koraku nestacionarne simulacije.

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

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

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

Prvi pribrojnik u jednadžbi (4.22) ne uvodi ovisnost između komponenata pomaka, pa ga se nakon diskretizacije može tretirati implicitno, a drugi pribrojnik, koji tu vezu uvodi, nakon diskretizacije se tretira eksplicitno. Iako ovaj pristup u većini slučajeva daje dobre

rezultate, postoje situacije kada on izaziva probleme s konvergencijom. O čemu se u stvari radi najbolje se vidi ako se jednadžba (4.22), odnosno njezin drugi pribrojnik, preoblikuje na sljedeći način:

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

Može se uočiti da drugi pribrojnik jednadžbe (4.22) između ostalog sadrži antisimetrični dio tenzora gradijenta pomaka, tj. tenzor zakreta $\Omega = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T]$. To znači da će u slučajevima u kojima tenzor zakreta dominira u ukupnom tenzoru gradijenta pomaka (rotacija prostorne domene) drugi dio jednadžbe (4.22), koji se nakon diskretizacije tretira eksplicitno, nositi značajan dio informacije, te na taj način izazivati probleme s konvergencijom rješenja.

4.3.4 Laplaceova jednadžba

Ako se u jednadžbi (4.23) ukine rotacija i prepostavi da je Laméov koeficijenti λ konstantan dobiva se Laplaceova jednadžba:

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

gdje je \mathbf{u} vektor pomaka, a γ je koeficijent difuzije. Prema tome, jednadžba ravnoteže linearne elastičnosti tijela na Laplaceovu jednadžbu dodaje rotaciju.

Laplaceova jednadžba (4.24) karakteristična je po tome, da ne uvodi ovisnost između komponenata pomaka, kao što je slučaj kod jednadžbe ravnoteže linearne elastičnosti tijela, a to znači da se može rješavati odvojeno, komponentu po komponentu.

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

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

gdje je V volumen promatranog elementa mreže, a V_{min} i V_{max} su volumeni najmanjeg i najvećeg elementa mreže. Iz izraza (4.25) se vidi da kada $V \rightarrow 0$ onda $\gamma \rightarrow \infty$, a $\nabla \mathbf{u} \rightarrow 0$, što znači da će se odgovarajući element mreže pomaknuti bez deformacije (distorzije). Prema tome, elementi koji su na granici inverzije ($V \rightarrow 0$) pomicati će se bez deformacije, tj. inverzija tih elemenata je spriječena. Ovakav način definiranja koeficijenta

difuzije pozitivno djeluje na pouzdanost odgovarajuće metode deformacije mreže, jer će spriječiti daljnju distorziju elemenata koji su na granici inverzije, ali neće bitno utjecati na minimiziranje distorzije elemenata mreže.

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

4.3.5 Biharmonička jednadžba

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

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

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

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

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

4.4 Nova automatska metoda pomicanja mreže

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

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

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

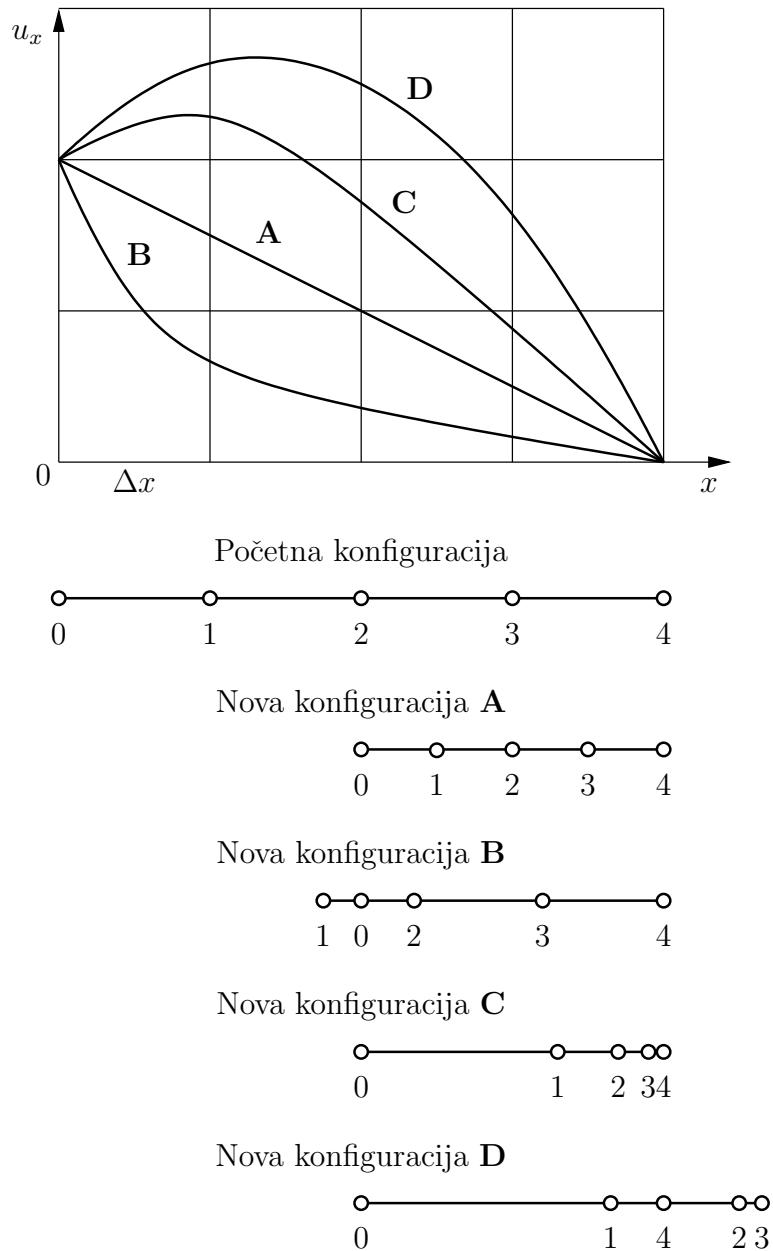
4.4.1 Odabir jednadžbe pomaka mreže

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

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

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

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



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

Iz ove se jednostavne analize mogu izvesti sljedeći zaključci:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.4.2 Prostorno promjenjivi koeficijent difuzije u Laplaceovoј jednadžbi pomaka mreže

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

Ovisnost koeficijenta difuzije o udaljenosti od pomične granice

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

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

- inverzna linearna ovisnost:

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

- inverzna kvadratična ovisnost:

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

- eksponencijalna ovisnost:

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

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

Ovisnost koeficijenta difuzije o gustoći energije deformacije

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

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

koristi se i gustoća distorzijske energije deformacije,

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

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

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

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

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

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

4.4.3 Diskretizacija jednadžbe pomaka mreže

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

Diskretizacijom jednadžbe pomaka dobit će se sustav linearnih algebarskih jednadžbi,

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

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

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

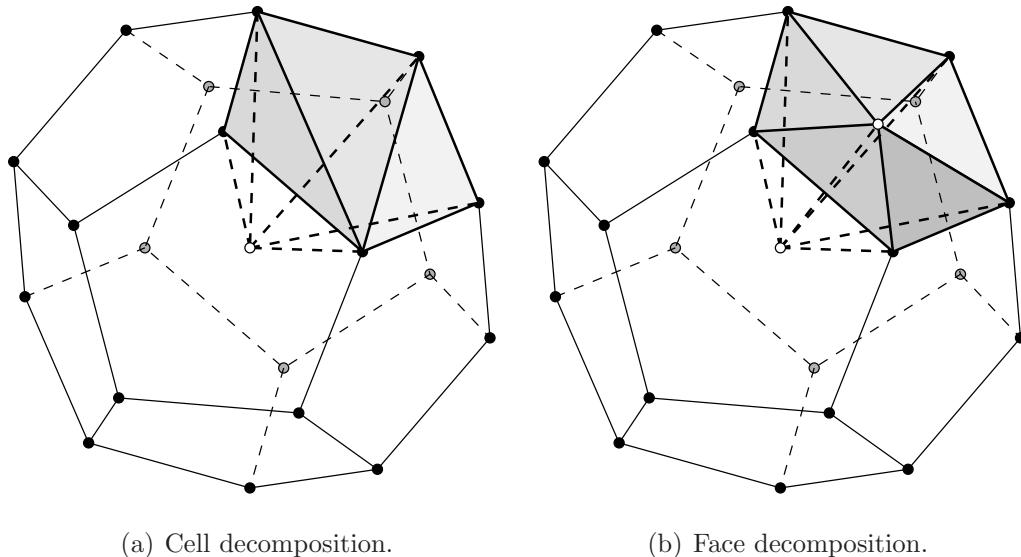
Primjena postojeće metode kontrolnih volumena koja je opisana u 3. poglavlju nije prihvatljiva za diskretizaciju jednadžbe pomaka jer se pomaci računaju u težištima kontrolnih volumena, a diskretizirana Laplaceova jednadžba je bezuvjetno ograničena samo u slučaju ortogonalne mreže. Na neortogonalnoj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

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

4.4.3.1 Kompozitni poliedarski konačni element

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

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



Slika 4.7: Rasčlanjivanje poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre.

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

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

Diskretizacijom jednadžbe deformacije na dobivenoj tetraedarskoj mreži dobiva se sustav jednadžbi s proširenim brojem nepoznanica, koje odgovaraju dodanim čvorovima. Iako pomaci dodanih čvorova nisu nužni za pomicanje mreže, ipak ih se mora riješiti. Na

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

taj se način narušava učinkovitost čitavog postupka pomicanja mreže.

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

4.4.3.2 Diskretizacija Laplaceove jednadžbe

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

gdje je w neka funkcija prostornih koordinata. Ako je broj nepoznatih parametara \mathbf{a}_j jednak n , onda je potrebno odabratи n linearne nezavisne funkcije w_i da bi se dobio sustav od n jednadžbi:

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

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

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

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

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

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

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

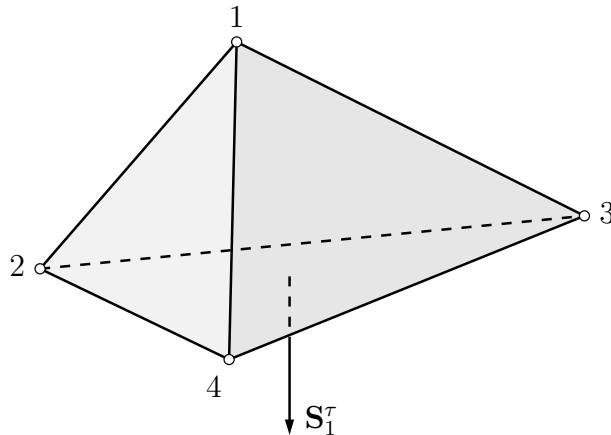
Da bi se sustav jednadžbi (4.42) mogao integrirati (analitički ili numerički) potrebno je definirati funkcije oblika N_j^e . Njihov matematički oblik ovisi o tipu konačnog elementa. Budući da se u ovom radu koristi kompozitni poliedarski konačni element koji je sastavljen od tetraedarskih konačnih elemenata, razmotrit će se samo funkcije oblika za tetraedarski element. Funkcija oblika za prvi čvor tetraedarskog konačnog elementa (slika 4.8) ima sljedeći oblik [89]:

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

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

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

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



Slika 4.8: Linearni tetraedarski konačni element

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Može se pokazati da vrijedi sljedeći identitet:

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

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

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

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

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

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

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

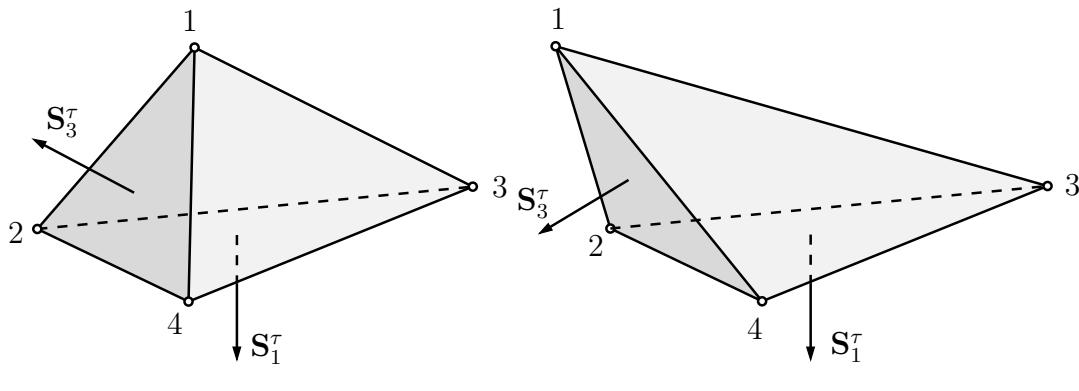
Budući da za tetraedar vrijedi identitet

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

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

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

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



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

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

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

4.4.3.3 Diskretizacija jednadžbe ravnoteže elastičnog tijela

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

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

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

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

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

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

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

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

odnosno, uvažavajući izraz (4.18), dobiva se:

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

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

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

Uzimajući u obzir izraz (4.51) jednadžba (4.59) se može integrirati, nakon čega se dobiva diskretizirana jednadžba statičke ravnoteže linearne elastičnog tijela za tetraedarski

konačni element τ :

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

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

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

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

4.4.3.4 Sastavljanje globalnog sustava jednadžbi

U prethodnom je odjeljku provedena diskretizacija Laplaceove jednadžbe i jednadžbe statičke ravnoteže linearno elastičnog tijela pomoću metode konačnih elemenata na tetraedarskom konačnom elementu. Kao rezultat dobiven je "lokralni" sustav linearnih algebarskih jednadžbi¹, koji se može zapisati u sljedećem obliku:

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

gdje je $[A]^\tau$ matrica koeficijenata 4×4 , koja je identična za sve tri komponente pomaka, a njezin član $[A]_{ij}^\tau$ je u slučaju diskretizirane Laplaceove jednadžbe jednak $\frac{\tilde{V}_\tau}{9V_\tau} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$. Vektor

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

nepoznanica $\{\mathbf{u}\}_k^\tau$ sadrži k -komponente vektora pomaka čvorova tetraedra. Desna strana $\{\mathbf{r}\}_k^\tau$ sustava je u slučaju diskretizirane Laplaceove jednadžbe jednaka nuli.

Kao konačni rezultat diskretizacije potrebno je dobiti globalni sustav jednadžbi,

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

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

4.4.3.5 Primjena graničnih uvjeta

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

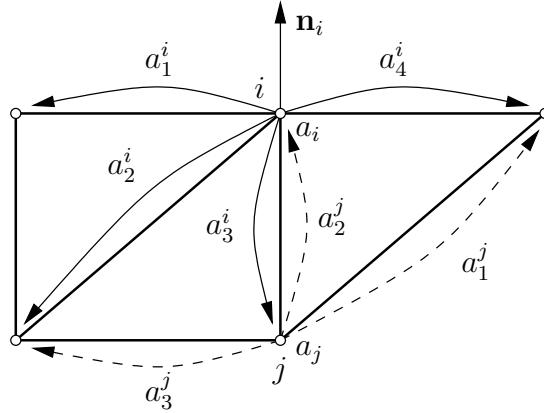
Globalni sustav jednadžbi (4.63) se može zapisati u sljedećem obliku:

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

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

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

Kod **Dirichletovog graničnog uvjeta** zadani su pomaci u graničnim čvorovima. Neka je u graničnom čvoru i zadan pomak \mathbf{u}_b . Ovaj se granični uvjet uvodi eliminacijom jednadžbe koja odgovara promatranom čvoru i . Eliminacija jednadžbe provodi se tako,



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

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

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

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

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

jednadžbi (4.65) dijeli se u dva dijela:

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

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

4.4.4 Postupak rješavanja

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

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

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

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

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

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

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

4.4.5 Postupak rješavanja na paralelnim računalima

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

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

4.5 Testiranje predložene metode pomicanja mreže

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

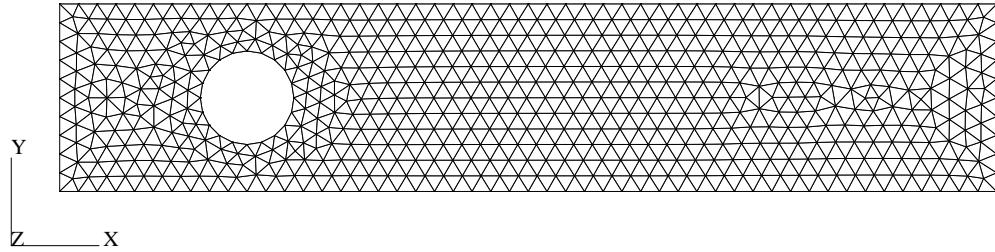
Najprije je provedena usporedba Laplaceove jednadžbe pomaka s jednadžbom ravnoteže linearne elastičnosti tijela na primjeru pomicanja 2-D mreže za cilindar koji se pomiče u kanalu. Nakon toga slijedi usporedba pomicanja mreže za predložene postupke rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre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

4.5.1 Usporedba Laplaceove jednadžbe pomaka s jednadžbom ravnoteže elastičnog tijela

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

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

Najprije je za obje metode (jednadžbe) određen granični pomak cilindra, koji se može ostvariti u jednom koraku, a da ne dođe do inverzije elemenata mreže. Koeficijent difuzije



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

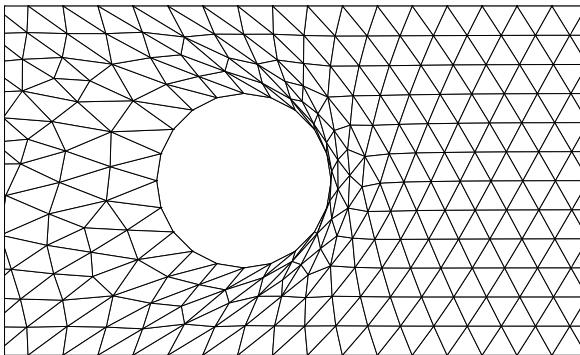
u Laplaceovoј jednadžbi i Laméovi koeficijenti u jednadžbi elastičnosti su konstantni, a Poissonov omjer je $\nu = 0.25$. Na svim granicama kanala mreža je fiksirana, a za čvorove na površini cilindra zadaje se pomak $\Delta_{gr}\mathbf{i}$ kojeg treba odrediti metodom pokušaja. Kvaliteta mreže ocjenjuje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

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

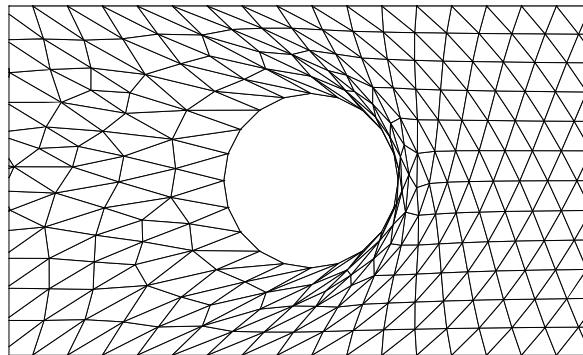
Tablica 4.1: Granični pomak cilindra i neortogonalnost pomaknute mreže za Laplaceovu jednadžbu i jednadžbu elastičnosti.

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

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



(a) Laplaceova jednadžba.



(b) Jednadžba elastičnosti.

Slika 4.12: Pomaknuta mreža za granični pomak cilindra.

pomoću proteklog vremena rješavanja problema pomicanja mreže¹.

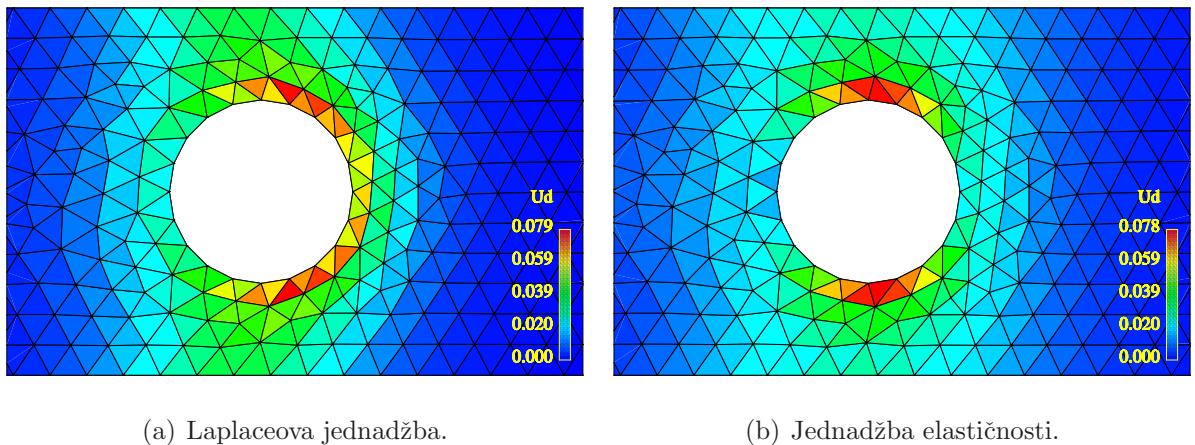
Rezultati proračuna prikazani su u tablici 4.2. Rješavanje jednadžbe elastičnosti provedeno je s tri vanjske iteracije, pri čemu se u svakoj vanjskoj iteraciji reziduali reduciraju za dva reda veličine. Veći broj vanjskih iteracija ne doprinosi značajnije kvaliteti pomaknute mreže. Može se vidjeti da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

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

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

Na kraju, određeni su maksimalno dozvoljeni pomak cilindra prije inverzije kontrolnih volumena i odgovarajuća kvaliteta mreže, za slučaj kada se pomicanje provodi u više koraka s pomakom $0.15D_i$ po koraku. U tablici 4.3 prikazani su rezultati proračuna. Zanimljivo je da na ovaj način Laplaceova jednadžba daje čak nesto veći granični pomak

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



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

nego jednadžba elastičnosti.

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

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

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

4.5.2 Usporedba postupaka automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena

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

automatskog rasčlanjivanja poliedarskog kontrolnog volumena na tetraedre:

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

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

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

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

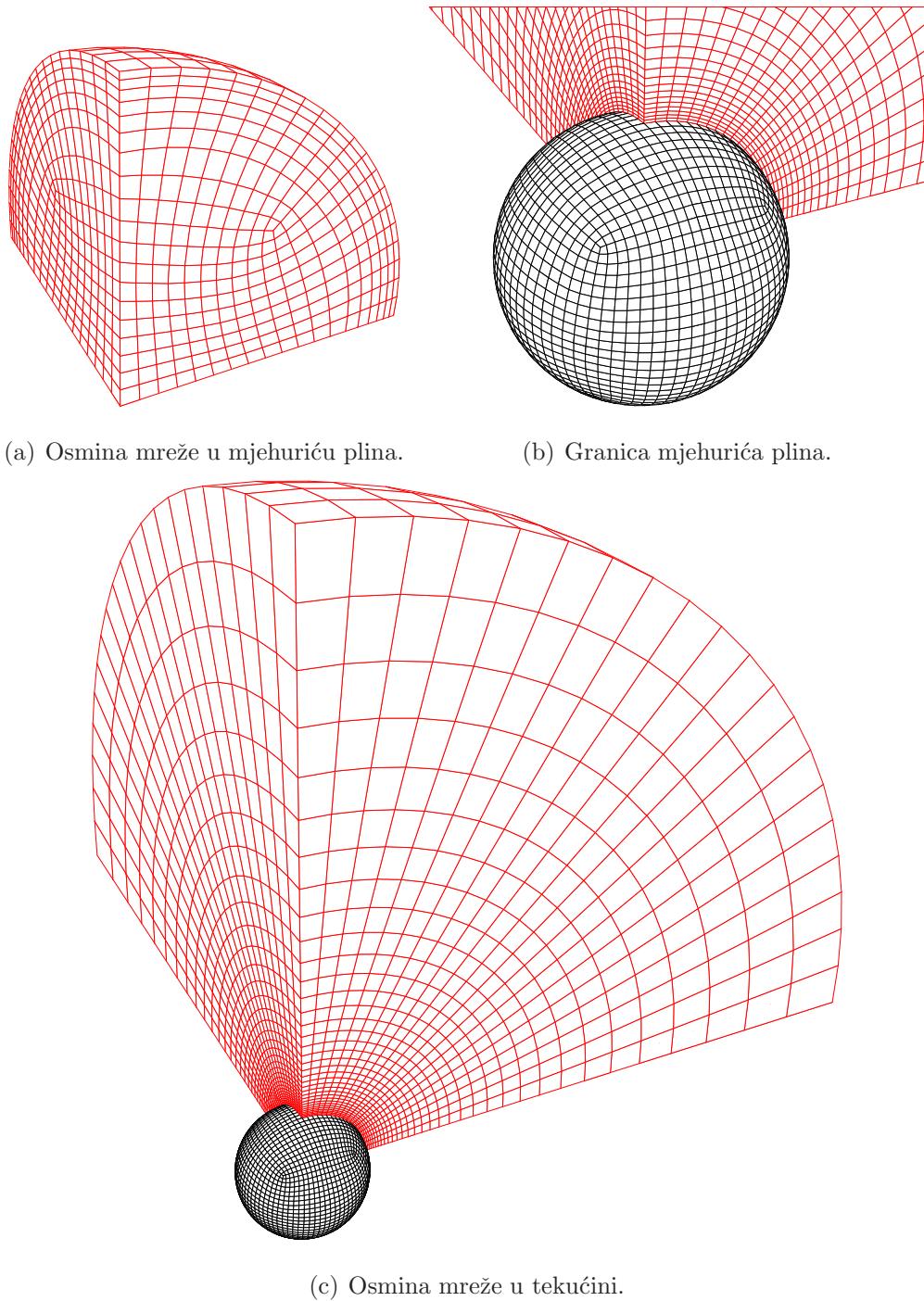
Pomicanje mreže posljedica je promjene oblika mjehurića, od sfernog ($r_b = 1 \text{ mm}$) prema obliku spljoštenog rotacionog elipsoida:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1,$$

$$c = r_b - 0.2 \text{ mm},$$

$$a = \sqrt{\frac{4V_b}{\pi c}}, \quad b = a,$$

$$V_b = \frac{4}{3}\pi r_b^3.$$



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

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

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

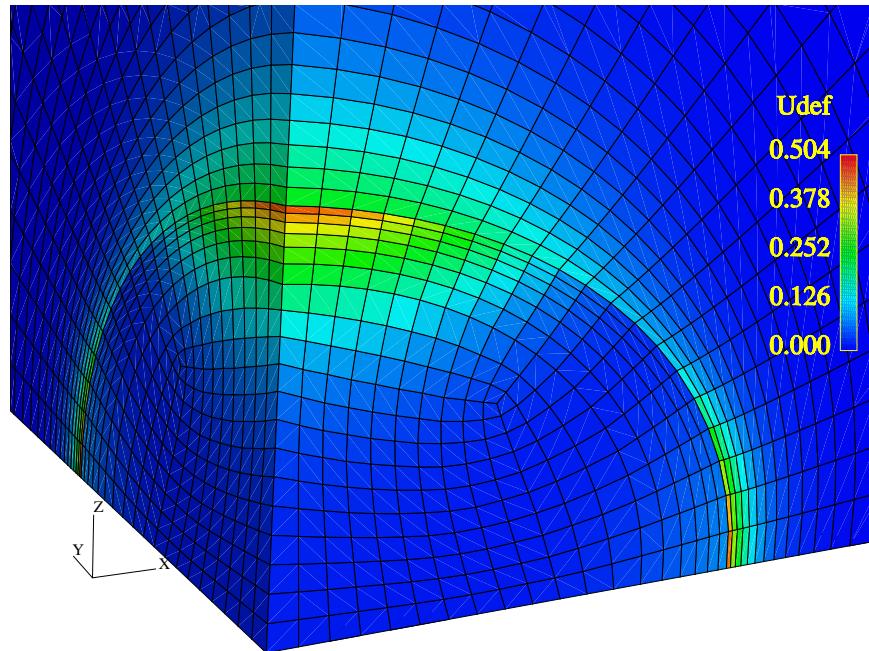
	$\alpha_{f,max}$	$\alpha_{f,sr}$	$T, \text{ s}$
Postupak 1	26.45°	3.69°	57.73
Postupak 2	26.45°	3.69°	154.71

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

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

4.5.3 Testiranje učinkovitosti minimizacije distorzije mreže primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije

U prethodna dva primjera pomicanja mreže može se uočiti da kontrolni volumeni uz pomičnu granicu doživljavaju najveću deformaciju, tj. da deformacija nije jednoliko raspodijeljena po mreži. Jednolikost deformacije kontrolnih volumena se može postići primjenom prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka. S



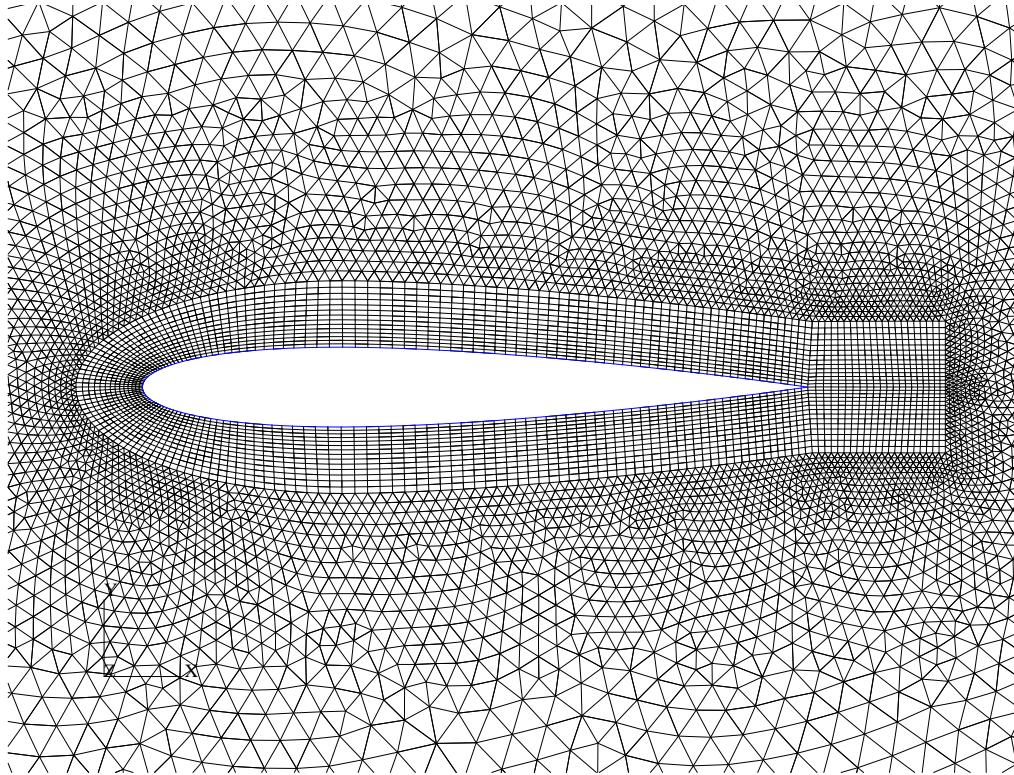
Slika 4.15: Jedna osmina pomaknute mreže u području mjeđurića. Boje definiraju raspodjelu gustoće energije deformacije.

tim su ciljem u odjeljku 4.4.2 predložena dva osnovna pristupa za definiranje prostorno promjenjivog koeficijenta difuzije. Kod jednog je koeficijent difuzije obrnuto proporcionalan udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, a kod drugog je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći ukupne i distorzijske energije deformacije. U ovom je odjeljku testirana učinkovitost predloženih zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u minimizaciji distorzije kontrolnih volumena tijekom pomicanja mreže.

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

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

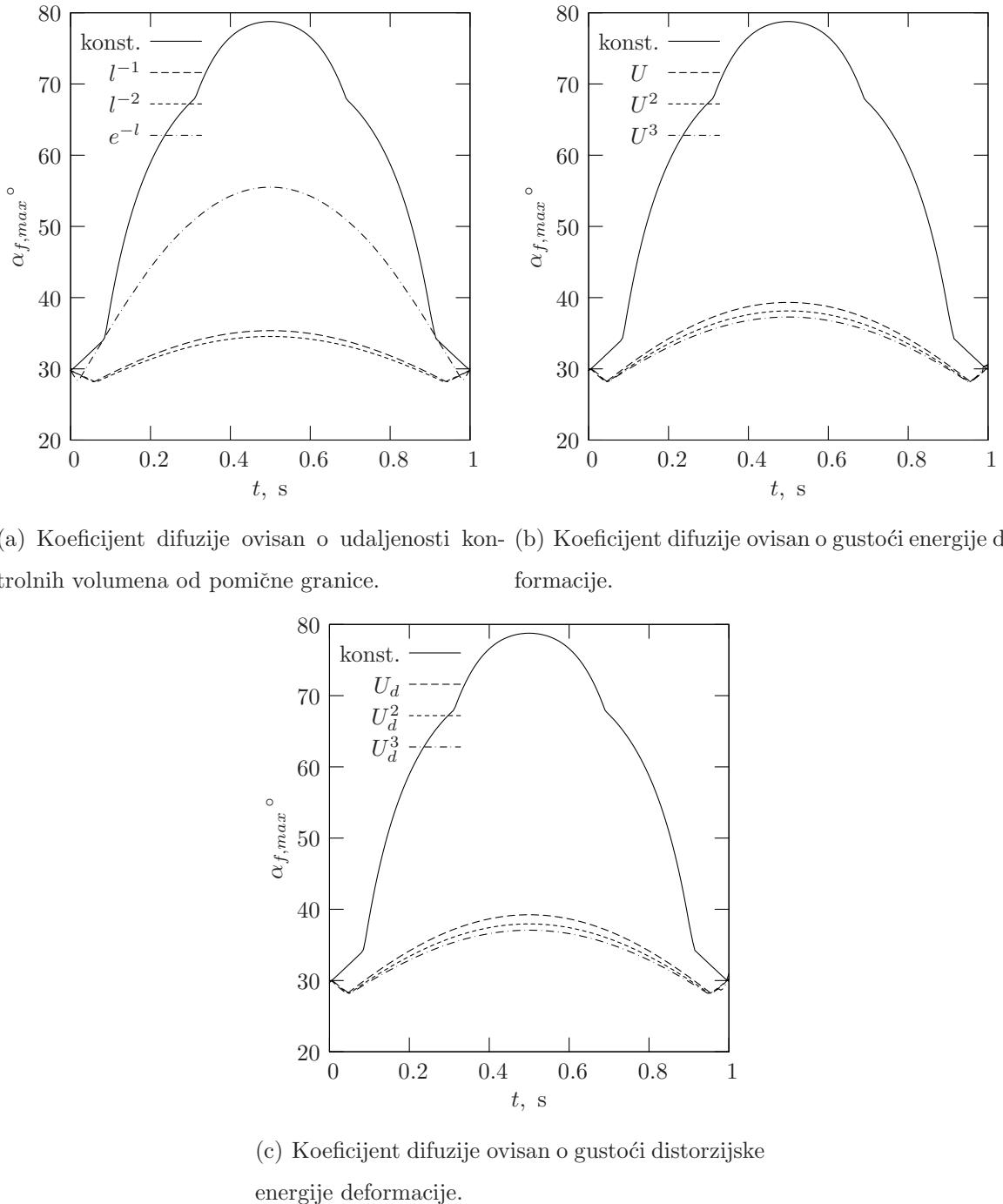
Mreža se pomiče postupno, s vremenskim korakom $\Delta t = 0.005 \text{ s}$. Dijagrami na slici 4.17 prikazuju vremensku ovisnost maksimalne neortogonalnosti ($\alpha_{f,max}$) mreže u prvoj polovini perioda oscilacije za različite zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u Laplaceovoј jednadžbi. Treba primjetiti da je, uz konstantni koeficijent difuzije, maksimalna



Slika 4.16: Početna mreža oko oscilirajućeg NACA0012 profila.

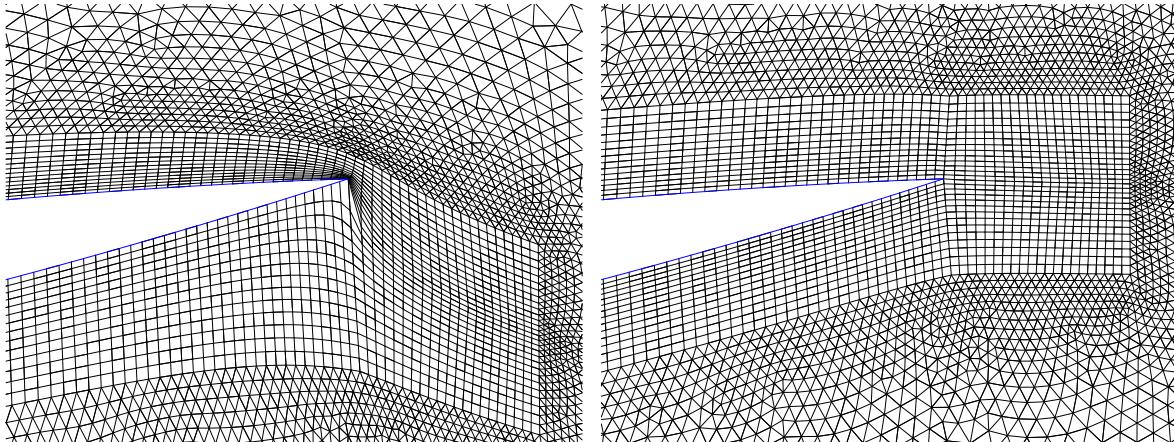
neortogonalnost mreže u trenutku $t = 0.5$ s na granici dozvoljene. Koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan kvadratu udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, u usporedbi sa svim ostalim zakonitostima, daje najmanju maksimalnu neortogonalnost mreže. Međutim, gotovo jednako dobre rezultate daje i koeficijent difuzije proporcionalan trećoj potenciji gustoće ukupne i distorzijske energije deformacije.

Na slici 4.18 prikazane su pomaknute mreže u području izlaznog brida profila u trenutku $t = 0.5$ s, a vrijednosti maksimalne neortogonalnosti za iste mreže prikazane su u tablici 4.5. Na slicama 4.18(a), 4.18(b) i 4.18(c) prikazana je mreža za konstantni koeficijent difuzije. Iako je u tom slučaju nastupila ekstremna distorzija mreže, nije došlo do inverzije kontrolnih volumena. Na slikama 4.18(d) i 4.18(e) prikazane su mreže za najpovoljnije zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije u pojedinim grupama. Mreže su u sva tri slučaja gotovo identične. Neznatno veća distorzija kontrolnih volumena u odnusu na slučaj s koeficijentom difuzije koji obrnuto proporcionalan udaljenosti od pomične granice, javlja se u slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije, jer u tom slučaju najprije mora doći do deformacije mreže da bi se mogla prepoznati mesta



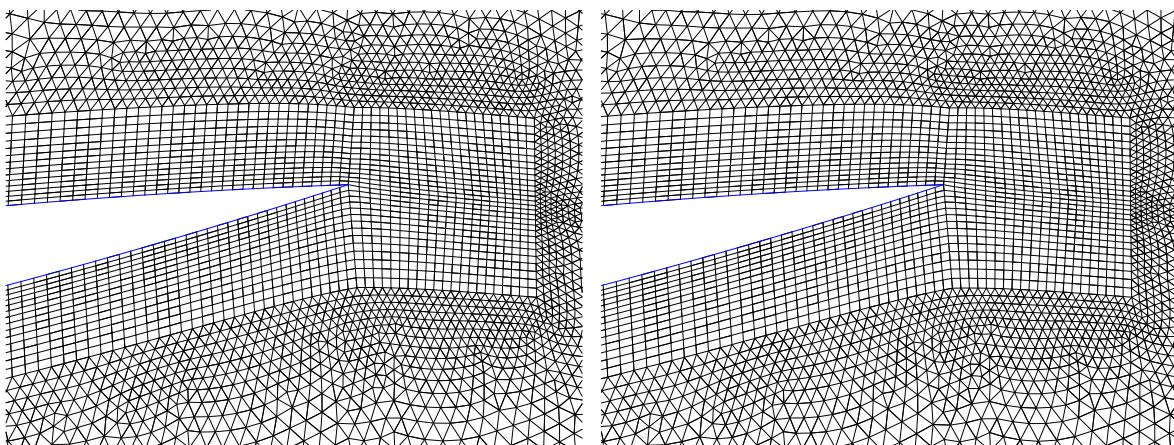
Slika 4.17: Vremenska ovisnost maksimalne neortogonalnosti mreže u prvoj polovini perioda oscilacije NACA0012 profila.

povećane deformacije.



(a) Konstantan koeficijent difuzije.

(b) Koeficijent difuzije ovisan o udaljenosti od pomične granice, $\gamma(l) = l^{-2}$.



(c) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći energije deformacije, $\gamma(U) = U^3$. (d) Koeficijent difuzije ovisan o gustoći distorzija de- energije deformacije, $\gamma(U_d) = U_d^3$.

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

U tablici 4.5 prikazano je i proteklo vrijeme rješavanja problema pomicanja mreže u trenutku $t = 0.5$ s za konstantni koeficijent difuzije i tri najpovoljnije zakonitosti raspodjele koeficijenta difuzije. Najučinkovitiji postupak rješavanja pomicanja mreže je za koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan kvadratu udaljenosti kontrolnih volumna od pomične granice. Učinkovitost postupka rješavanja u slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije nešto je lošija, ali je još uvijek bo-

lja nego u slučaju konstantnog koeficijenta difuzije. Iz prikazanih se podataka vidi kako očuvanje kvalitete mreže znatno utječe na efikasnost postupka pomicanja mreže.

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

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

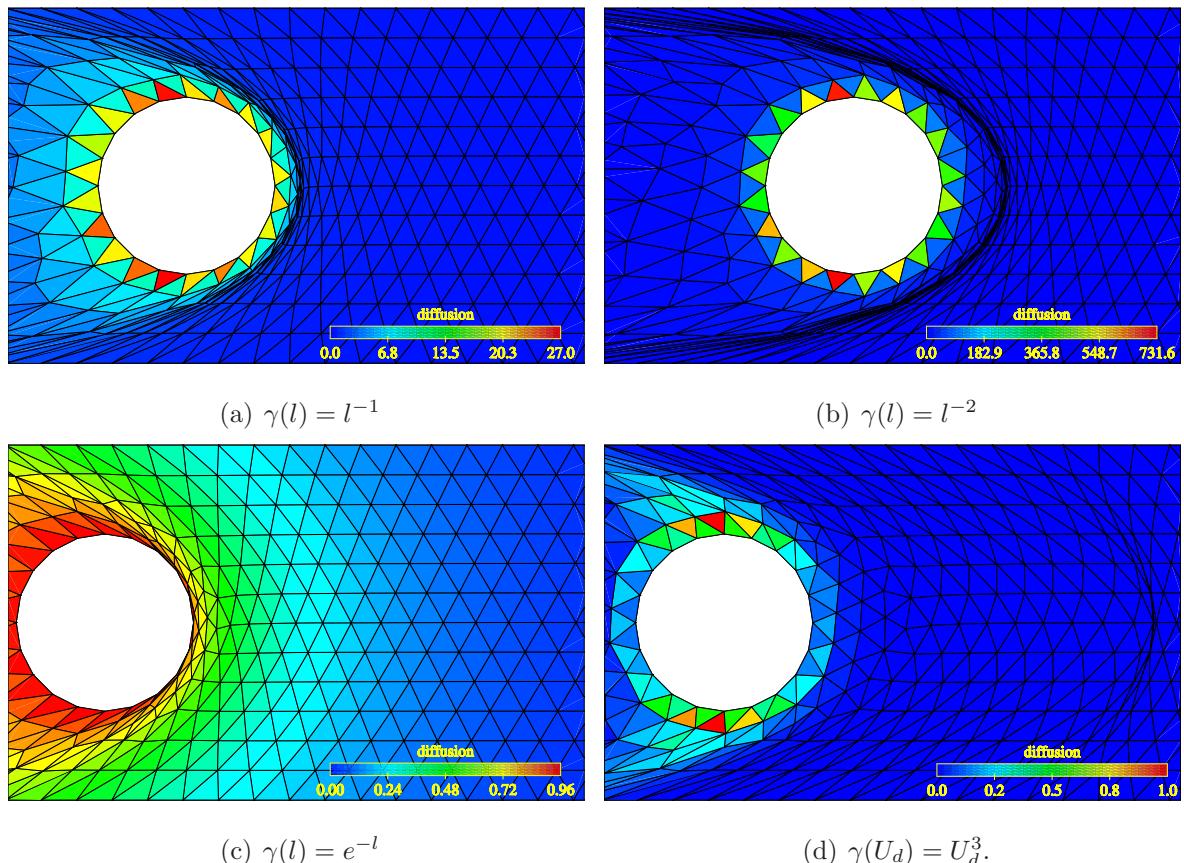
Na kraju su različite raspodjele koeficijenta difuzije uspoređene na primjeru pomicanja 2-D cilindra koji je korišten u odjeljku 4.5.1. Određeni su granični pomaci cilindra po jednom koraku pomicanja. U slučaju kada je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći distorzijske energije deformacije, Laplaceova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

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

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

4.6 Zaključak

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



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

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

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

Poglavlje 5

Finite area method

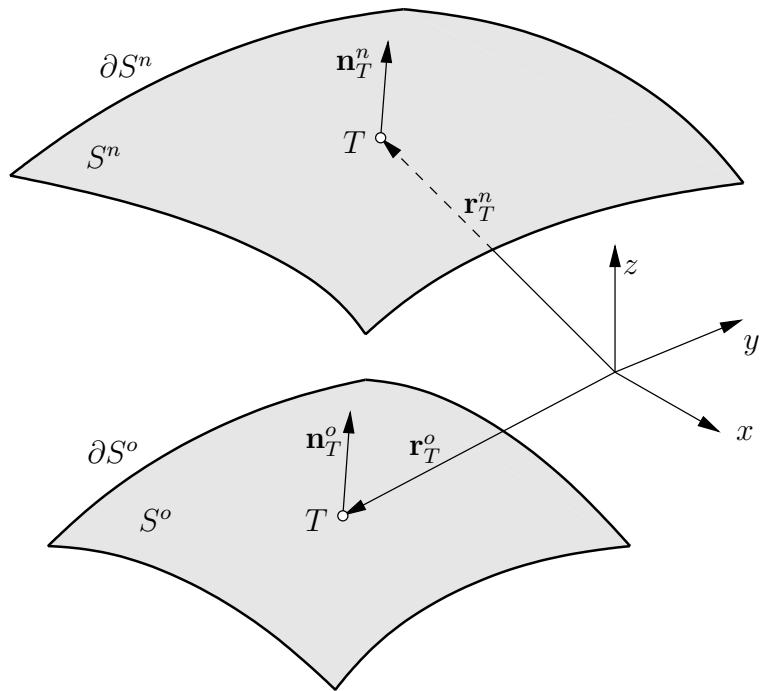
5.1 Introduction

The method for discretisation of transport equations on curved deformable surfaces is described in this chapter. The computational mesh which discretises the spatial domain, consists of control areas of arbitrary polygonal shape with the spatial computational points in their centres. Integral transport equation is discretised on each control area in the mesh using the basic principles of the classical cell-centred finite volume method. In such a way, the discretisation method explicitly ensures conservation property on local and global level. In the limiting case when the spatial domain converges to the flat plane, the proposed discretisation method converges to the 2-D variant of the finite volume method described in chapter 3.

In the following section the discretised spatial domain is described. Discretisation of scalar transport equation on a surface unstructured mesh is presented in section 5.3. In section 5.4, the proposed finite area method is verified on the three test cases: diffusive transport, convective-diffusive transport and unsteady convective-diffusive transport of scalar property along the surface of sphere. The conclusions of this chapter are given in section 5.5.

5.2 Discretisation of spatial domain

The spatial domain is smooth curved surface whose shape is changing with time, see Fig. 5.1.



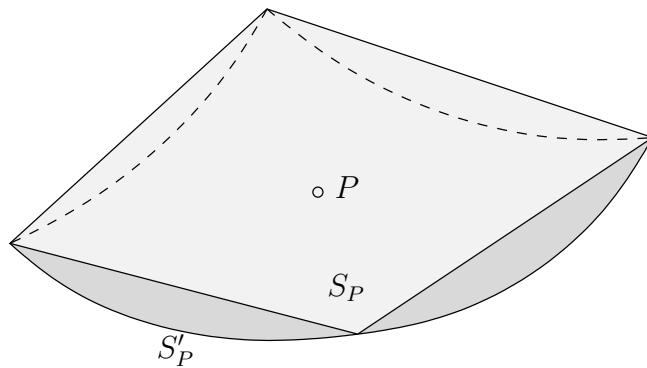
Slika 5.1: Smooth curved surface of time changing shape.

By discretisation of the spatial domain one obtaines the surface computation mesh consisting of a finite number of control areas which do not overlap. The control area can be convex polygon bounded by the arbitrary number of straight edges. The spatial computational point is placed in the centre of the conrol area.

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

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

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



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

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

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

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

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

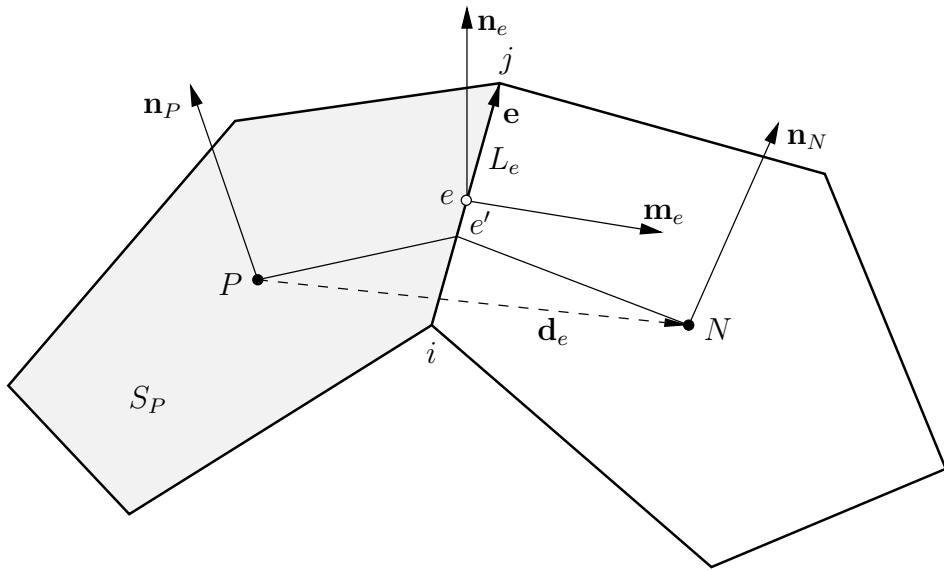
gdje je \$\hat{\mathbf{e}}\$ jedinični vektor paralelan s bridom \$e\$.

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

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

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

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



Slika 5.3: Kontrolne površine P i N.

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

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

5.3 Diskretizacija transportne jednadžbe

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

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

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

je uvjetom (C.1):

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5.3.1 Diskretizacija prostornih integrala

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

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

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

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

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

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

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

Konvekcijski član

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

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

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

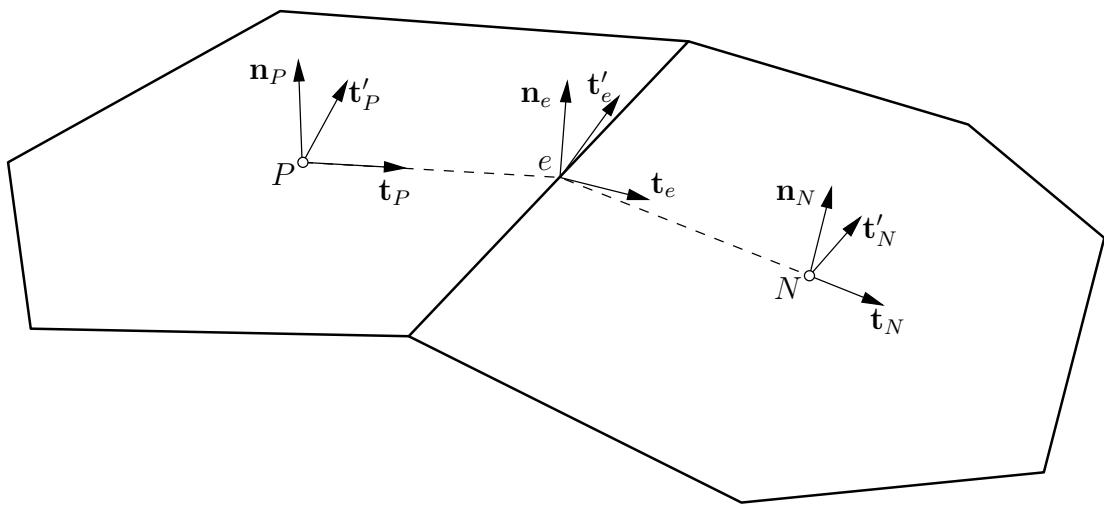
Vrijednost varijable ψ na bridu e računa se iz vrijednosti varijable u težištima susjednih kontrolnih površina primjenom sheme diskretizacije konvekcijskog člana. U slučaju kada se interpolira skalarna varijabla mogu se primijeniti sheme diskretizacije opisane u odjeljku 3.3.1 uz uvjet da se umjesto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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Difuzijski član

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

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

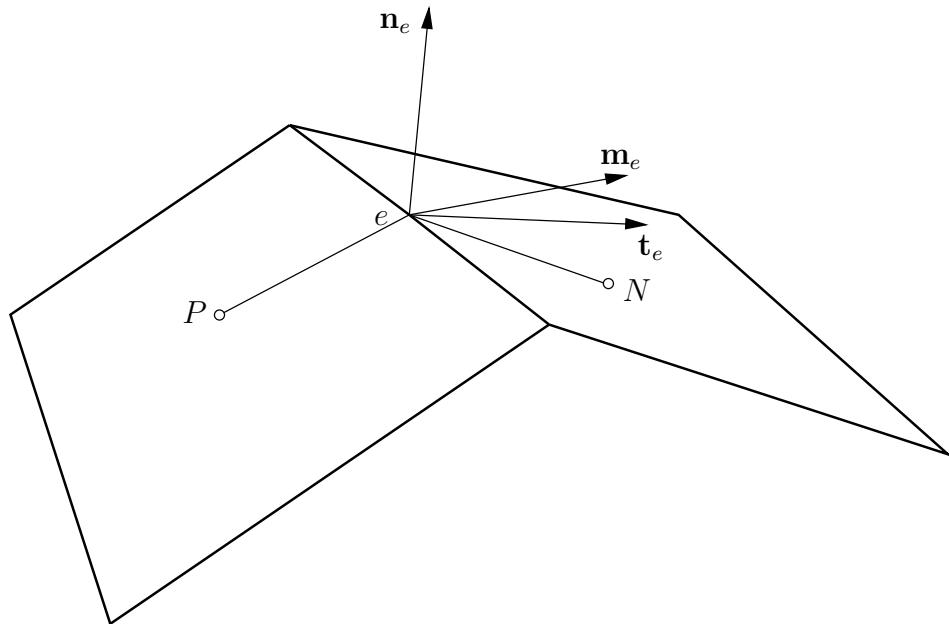
gdje je $\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e$ normalni površinski gradijent varijable ψ na bridu e .

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

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

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

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



Slika 5.5: Uz definiciju neortogonalnosti površinske mreže.

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

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

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

$$\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e = \underbrace{|\Delta_e| \frac{\psi_N - \psi_P}{L_{PN}}}_{\text{Ortogonalni doprinos}} + \underbrace{\mathbf{k}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e}_{\text{Neortogonalna korekcija}}, \quad (5.24)$$

gdje se vektori \mathbf{k}_e i Δ_e računaju u skladu s nadrelaksacijskom ortogonalnom korekcijom [46], na sljedeći način:

$$\mathbf{k}_e = \mathbf{m}_e - \Delta_e, \quad (5.25)$$

$$\Delta_e = \frac{\mathbf{t}_e}{\mathbf{t}_e \cdot \mathbf{m}_e}. \quad (5.26)$$

Neortogonalna korekcija u jednadžbi (5.24) tretira se eksplisitno. Površinski gradijent $(\nabla_s \psi)_e$ računa se interpolacijom gradijenata u težistima susjednih kontrolnih površina primjenom centralne sheme diskretizacije, tj. jednadžbe (5.18). Površinski gradijent u težištu kontrolne površine računa se primjenom Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu (jednadžba (B.8) u dodatku B):

$$(\nabla_s \psi)_P = \frac{1}{S_P} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \sum_e \mathbf{m}_e \psi_e L_e, \quad (5.27)$$

gdje je ψ_e vrijednost varijable ψ na bridu kontrolne površine iz prethodne vanjske iteracije, koja se računa pomoću jednadžbe (5.13), (5.18) ili (5.19).

Zbog primjene kontrolnih površina čija se granica sastoji od ravnih linija, geodetska udaljenost između težišta kontrolnih površina manja je od geodetske udaljenosti odgovarajućih točaka na stvarnoj površini prostorne domene. Za očekivati je da će se zbog toga narušiti točnost računanja normalnog gradijenta pomoću izraza (5.23) i (5.24). Da bi se to smanjenje točnosti poništilo, na desnu stranu jednadžbe (5.24) dodaje se sljedeća eksplisitna korekcija:

$$D_k = \frac{1}{15} \left[|\Delta_e| \frac{\psi_N - \psi_P}{L_{NP}} - \Delta_e \cdot (\nabla_s \psi)_e \right], \quad (5.28)$$

Ovu je korekciju za metodu kontrolnih volumena izveo Jasak [45], s ciljem postizanja diskretizacije difuzijskog člana 4. reda točnosti.

5.3.2 Vremenska diskretizacija

Nakon diskretizacije prostornih integrala transportna jednadžba (5.7) dobiva sljedeći poludiskretizirani oblik:

$$\frac{d}{dt}(\psi_P S_P) = - \sum_e \dot{s}_e \psi_e + \sum_e (\Gamma_\psi)_e L_e \mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e + s_{\psi u} S_P + s_{\psi p} S_P \psi_P. \quad (5.29)$$

Ovisno o primjenjenoj metodi vremenske diskretizacije, potpuno diskretizirana transportna jednadžba za kontrolnu površinu S_P ima sljedeći oblik:

- Implicitna Eulerova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_P^n S_P^n - \psi_P^o S_P^o}{\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n \\ &= \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n, \end{aligned} \quad (5.30)$$

- Gearova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{3\psi_P^n S_P^n - 4\psi_P^o S_P^o + \psi_P^{oo} S_P^{oo}}{2\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n \\ &= \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n, \end{aligned} \quad (5.31)$$

- Crank-Nicolsonova metoda,

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_P^n S_P^n - \psi_P^o S_P^o}{\Delta t} + \frac{1}{2} \sum_e \dot{s}_e^n \psi_e^n + \frac{1}{2} \sum_e \dot{s}_e^o \psi_e^o \\ &= \frac{1}{2} \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n + \frac{1}{2} \sum_e (\Gamma_\psi)_e^o L_e^o \mathbf{m}_e^o \cdot (\nabla_s \psi)_e^o \\ &+ \frac{1}{2} (s_{\psi u}^n S_P^n + s_{\psi p}^n S_P^n \psi_P^n) + \frac{1}{2} (s_{\psi u}^o S_P^o + s_{\psi p}^o S_P^o \psi_P^o). \end{aligned} \quad (5.32)$$

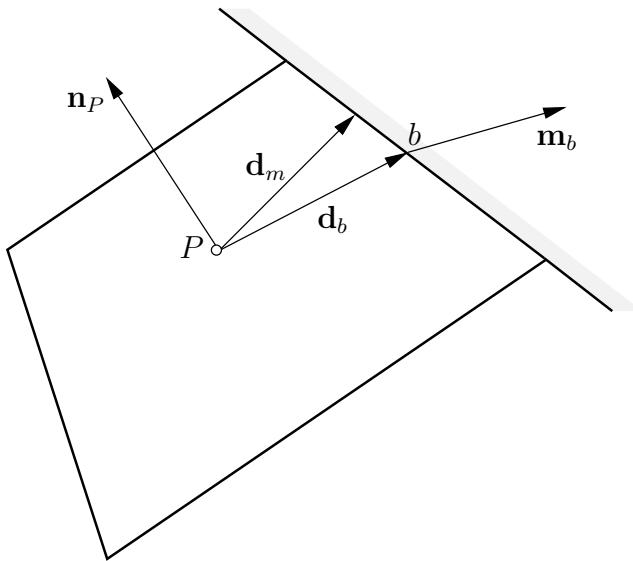
Pri vremenskoj diskretizaciji transportne jednadžbe uzeto je u obzir pomicanje mreže, tj. uvaženo je da se kontrolna površina S_P , binormala \mathbf{m}_e i duljina brida L_e mijenjaju s vremenom. Treba napomenuti da je ovako jednostavno i eksplicitno obuhvaćanje pomicanja površinske mreže kod diskretizacije transportne jednadžbe posljedica prepostavke da se čvorovi mreže pomiču u smjeru normale na površinu.

5.3.3 Primjena graničnih uvjeta

Na slici 5.6 prikazana je kontrolna površina P , kojoj se brid b nalazi na granici prostorne domene. Vektor \mathbf{d}_b definiran je na isti način kao u odjeljku 3.3.4, tj. njegova početna točka je u težištu kontrolne površine P , a krajnja u težištu graničnog brida b . Duljina vektora \mathbf{d}_m , koji odgovara vektoru \mathbf{d}_n u odjeljku 3.3.4, računa se na sljedeći način:

$$|\mathbf{d}_m| = \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \mathbf{m}_b}{|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_P \mathbf{n}_P) \cdot \mathbf{m}_b|} \cdot \mathbf{d}_b. \quad (5.33)$$

Uz ovako definirane geometrijske parametre graničnih bridova mreže, veličine ψ_e i $\mathbf{m}_e \cdot (\nabla_s \psi)_e$ na graničnim bridovima određuju se na isti način kako je to opisano u odjeljku 3.3.4 za metodu kontrolnih volumena.



Slika 5.6: Uz definiciju geometrijskih parametara graničnog brida mreže.

5.3.4 Sustav linearnih algebarskih jednadžbi

Uzimajući u obzir da ψ_e^n i $\mathbf{m}_e^n \cdot (\nabla_s \psi)_e^n$ ovise o vrijednostima varijable ψ u težištima susjednih kontrolnih površina u trenutku t^n , jednadžbe (5.30), (5.31) i (5.32) u konačnici se svode na linearnu (ili lineariziranu) algebarsku jednadžbu:

$$a_P \psi_P^n + \sum_N a_N \psi_N^n = r_P, \quad (5.34)$$

gdje je a_P dijagonalni (centralni) koeficijent, a_N susjedni koeficijent, a r_P desna strana jednadžbe koja sadrži one članove diskretizirane transportne jednadžbe koji se tretiraju

eksplicitno. U slučaju primjene kombinirane sheme diskretizacije konvekcijskog člana i Gearove metode vremenske diskretizacije, koeficijenti a_P i a_N , te desna strana jednadžbe r_P definirani su sljedećim izrazima:

$$\begin{aligned} a_P &= \frac{3S_P^n}{2\Delta t} + \sum_e \dot{s}_e^n [(1 - \gamma_f^n) \max(\operatorname{sgn}(\dot{s}_e^n), 0) + \gamma_e^n e_x^n] \\ &\quad + \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \frac{|\Delta_e^n|}{|\mathbf{d}_e^n|} - s_{\psi p}^n S_P^n, \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$a_N = \dot{s}_e^n [(1 - \gamma_e^n) \min(\operatorname{sgn}(\dot{s}_e^n), 0) + \gamma_e^n (1 - e_x^n)] - (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \frac{|\Delta_e^n|}{|\mathbf{d}_e^n|}, \quad (5.36)$$

$$r_P = \frac{4S_P^o \psi_P^o - S_P^{oo} \psi_P^{oo}}{2\Delta t} + \sum_e (\Gamma_\psi)_e^n L_e^n \mathbf{k}_e^n \cdot (\nabla \psi)_e^n + s_{\psi u}^n S_P^n, \quad (5.37)$$

gdje je γ_e^n faktor kombinacije centralne i uzvodne skeme diskretizacije konvekcijskog člana.

Budući da se jednadžba (5.34) dobiva za svaku kontrolnu površinu u mreži, konačni rezultat diskretizacije transportne jednadžbe je sustav linearnih (lineariziranih) jednadžbi. Matrica sustava je rijetka, a struktura popunjenošću kao i kod metode kontrolnih volumena ovisi o redoslijedu označavanja kontrolnih površina u mreži.

Matrica sustava jednadžbi je kao i kod metode kontrolnih volumena sigurno pozitivno definitna. Da li će matrica biti i dijagonalno dominantna ovisit će o korištenoj shemi interpolacije i kvaliteti površinske mreže. Sustav jednadžbi rješava se ICCG iterativnim postupkom ako se radi o simetričnoj matrici sustava, odnosno Bi-CGSTAB postupkom ako se radi o nesimetričnoj matrici sustava.

5.4 Provjera numeričkog modela

Slijedi provjera predložene metode diskretizacije na tri numerička primjera. Najprije se provjerava točnost rješavanja difuzijskog člana na neortogonalnoj površinskoj mreži. Nakon tog slijedi provjera točnosti rješenja konvekcijsko-difuzijske jednadžbe, te provjera točnosti nestacionarne konvekcijsko-difuzijske jednadžbe. U sva je tri primjera prostorna domena rješavanja površina sfere, na kojoj je definirana strukturirana ili nestrukturirana površinska mreža. U prva su dva primjera odabrani takvi granični uvjeti, koji odgovaraju osnosimetričnom transportu skalarnog svojstva na površini sfere, za koji je izvedeno analitičko rješenje. U trećem se primjeru numeričko rješenje uspoređuje s numeričkim

rješenjem parcijalne diferencijalne jednadžbe koja definira osnosimetrični nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.

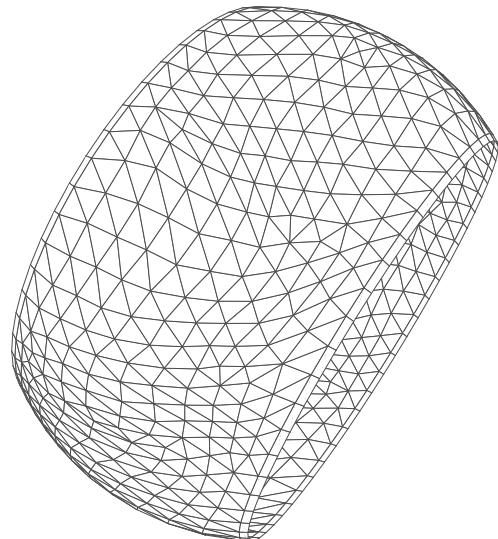
Testiranje predložene metode diskretizacije na površinskoj mreži koja se mijenja s vremenom bit će provedeno u sklopu 7. poglavlja, na primjeru transporta surfaktanata na površini mjeđurića.

5.4.1 Difuzijski transport

Potrebno je riješiti difuzijski transport skalarnog svojstva ψ na površini sfere radijusa $R = 1$ u području polarnog kuta $60^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$. Zadani su sljedeći granični uvjeti: $\psi_0 = 0$ za $\theta_0 = 60^\circ$ i $\psi_1 = 1$ za $\theta_1 = 120^\circ$. Koeficijent difuzije jednak je jedinici, $\Gamma_\psi = 1$.

U dodatku E izvedeno je analitičko rješenje ovog problema. Raspodjela svojstva ψ po površini sfere je osnosimetrična, a definirana je jednadžbom (E.6).

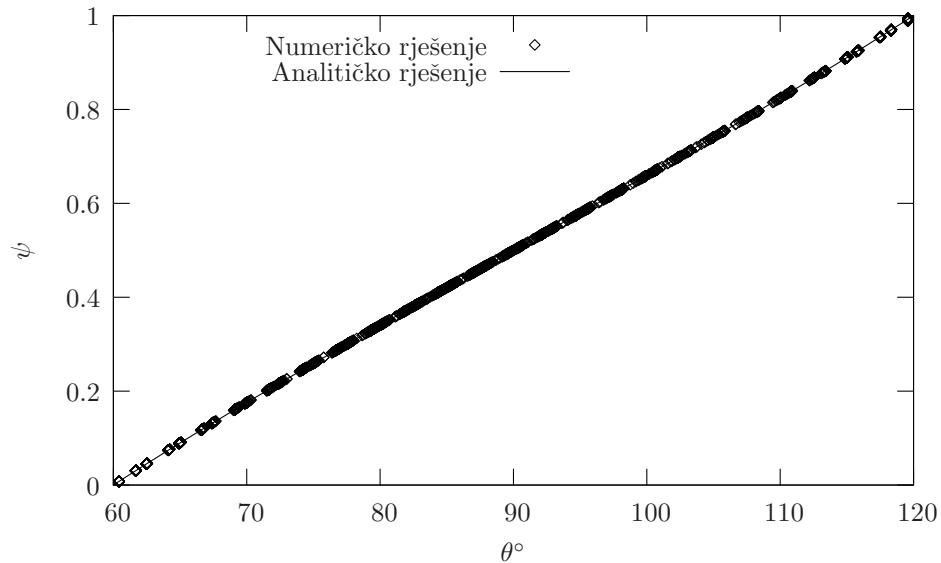
Na zadanoj prostornoj domeni definirana je nestrukturirana površinska mreža, koja se sastoji od trokutnih i četverokutnih kontrolnih površina, slika 5.4.1. Mreža sadrži 1408 kontrolnih površina (KP) prosječne dimenzije¹ $L = 0.062$. Maksimalni kut neortogonalnosti² mreže je 50° , a prosječni 15° .



Slika 5.7: Nestrukturirana površinska mreža za računanje difuzijskog transporta na površini sfere.

¹Prosječna dimenzija kontrolnih površina izračunata je kao prosječna vrijednost geodetskih udaljenosti težišta susjednih kontrolnih površina.

²Kut neortogonalnosti bridova kontrolnih površina definira je jednadžbom (5.21).



Slika 5.8: Rješenje osnosimetričnog difuzijskog transporta na površini sfere.

Dijagram na slici 5.8 prikazuje numeričko rješenje gore definiranog problema koje je dobiveno primjenom predložene metode kontrolnih površina. Vrijednosti varijable ψ , koje su izračunate za težišta kontrolnih površina, prikazane su kao funkcija polarnog kuta θ . Unatoč nejednolikoj rezoluciji i povećanoj neortogonalnosti mreže, numeričko se rješenje vrlo dobro slaže s analitičkim. Prosječna apsolutna pogreška¹ je $E = 0.001$.

5.4.2 Konvekcijsko-difuzijski transport

Na prostornoj domeni iz prethodnog problema je, uz iste rubne uvjete, potrebno riješiti konvektivno-difuzijski transport skalarnog svojstva ψ . Polje brzine definirano je sljedećim izrazom:

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_0}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta, \quad (5.39)$$

gdje je \mathbf{e}_θ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava, θ polarni kut, a v_0 veličina vektora brzine za polarni kut $\theta = \pi/2$. Površinski divergens ovog osnosimetričnog polja

¹Prosječna apsolutna pogreška računa se prema sljedećem izrazu:

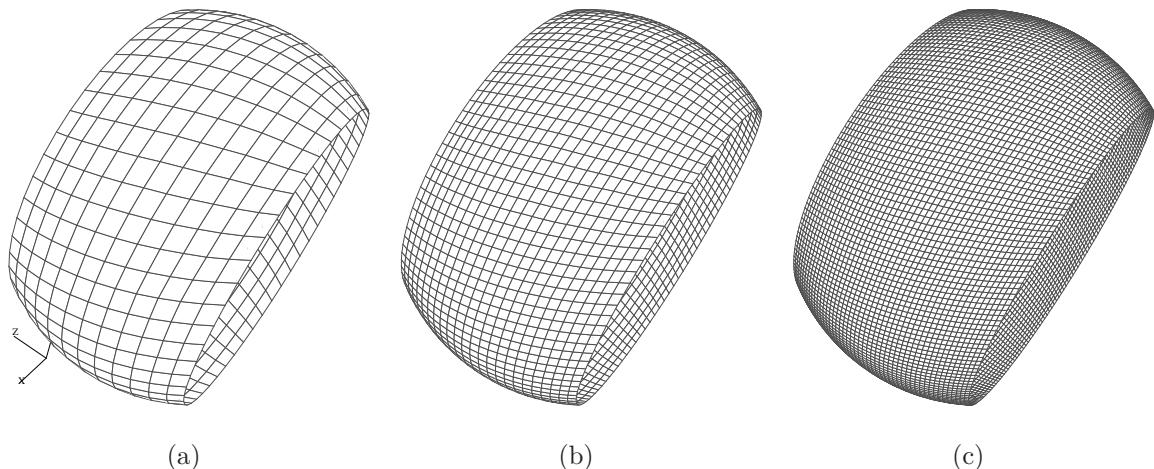
$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\psi_{ai} - \psi_i|, \quad (5.38)$$

gdje je ψ_i numeričko rješenje u težištu kontrolne površine i , ψ_{ai} analitičko rješenje na istom mjestu, a N broj kontrolnih površina u mreži.

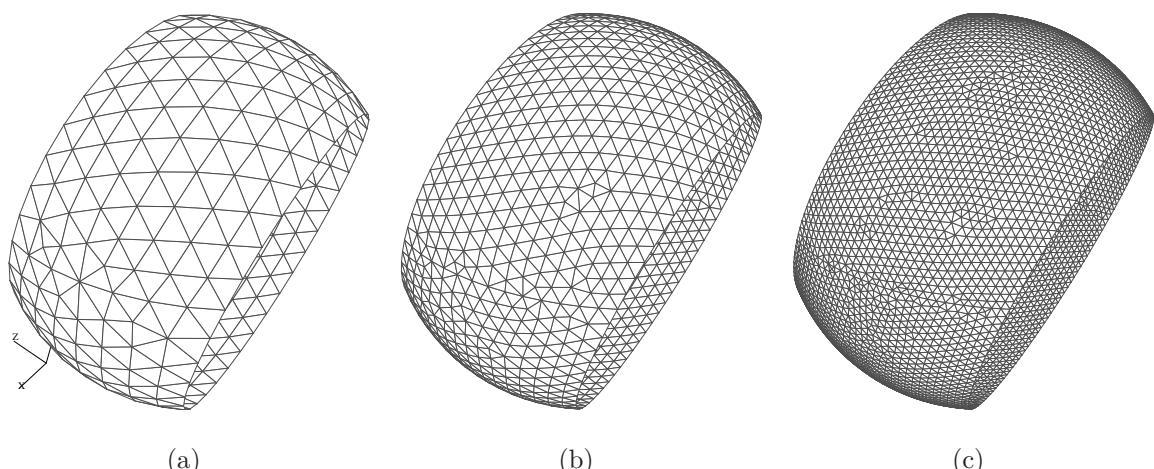
brzine jednak je nuli.

Funkcija (E.5) u dodatku E predstavlja analitičko rješenje ovog problema. Raspodjela varijable ψ je osnosimetrična i ovisi o Pecletovom broju, koji je definiran jednadžbom (E.4).

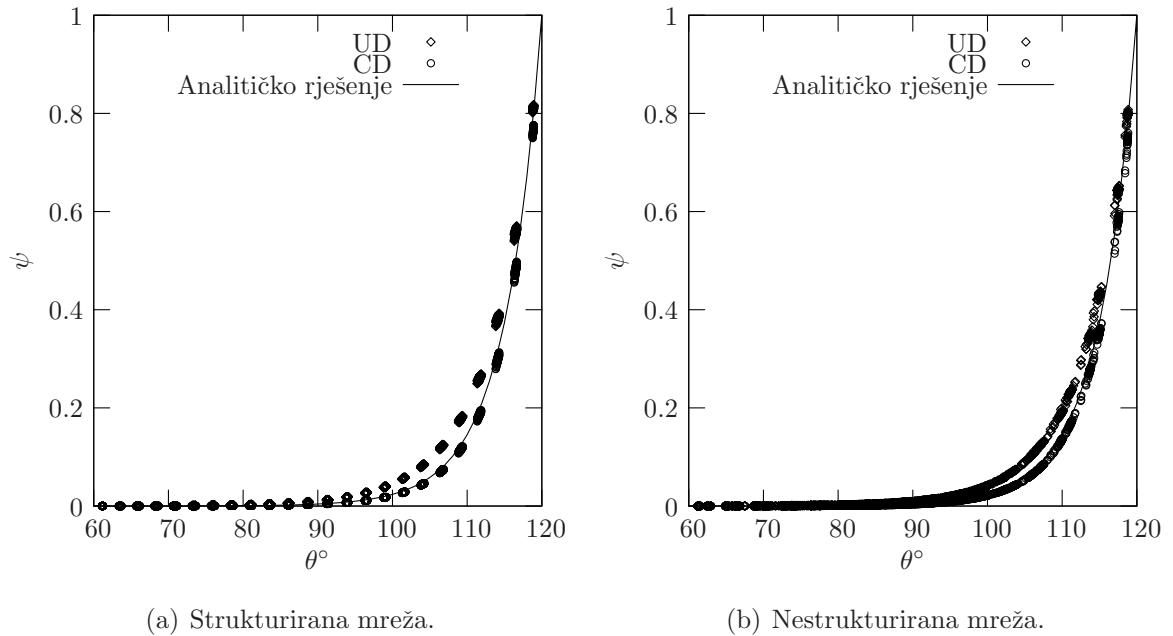
Za rješavanje ovog problema definirane su dvije vrste površinske mreže: strukturirana mreža, slika 5.9, i nestrukturirana mreža, slika 5.10. Svaka od ovih mreža izvedena je u tri rezolucije: 600 KP, 2400 KP i 9600 KP. Maksimalna i prosječna neortogonalnost strukturirane mreže je 30° i 17° , a nestrukturirane mreže 30° i 3° .



Slika 5.9: Strukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.



Slika 5.10: Nestrukturirana mreža za rješavanje konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere; (a) 600 KP, (b) 2400 KP, (c) 9600 KP.



Slika 5.11: Rješenje osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $\text{Pe} = 10$.

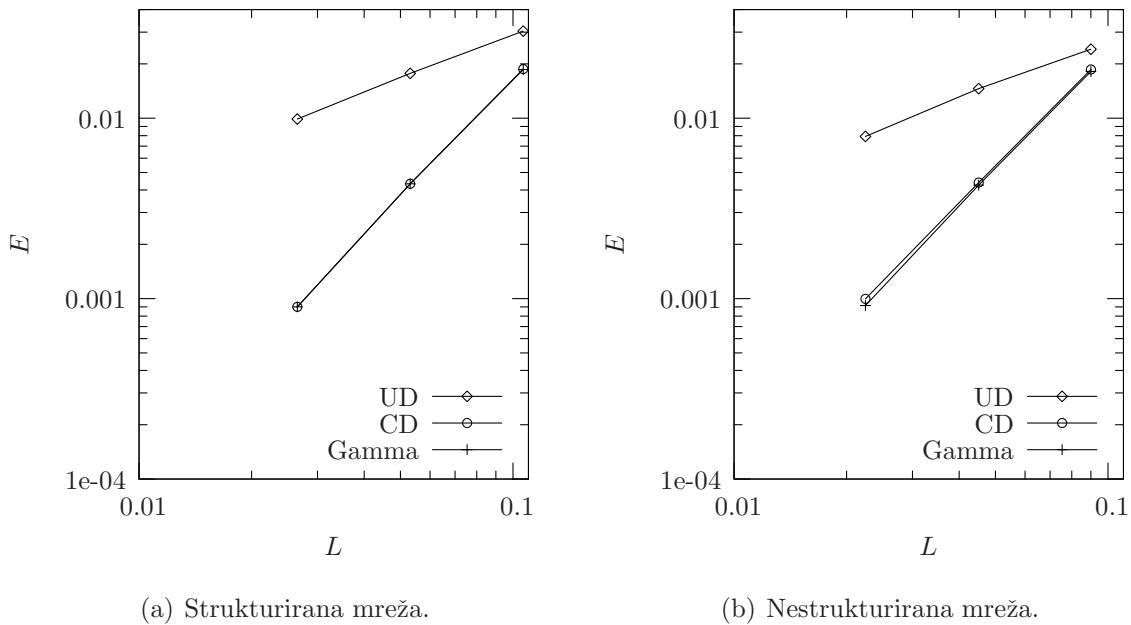
Površinski tok kroz bridove kontrolnih površina, tj. varijabla \dot{s}_e u izrazu (5.12), računa se numeričkim rješavanjem integrala $\int_{L_e} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v}_t dL$ primjenom Simpsonovog pravila. Vrijednost zavisne varijable na bridovima kontrolnih površina računa se primjenom uzvodne (UD), centralne (CD) i Gamma sheme interpolacije.

Slika 5.11 prikazuje numeričko rješenje osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $\text{Pe} = 10$. Dijagram na slici 5.11(a) prikazuje rješenje na strukturiranoj mreži za uzvodnu i centralnu shemu diskretizacije, dok dijagram na slici 5.11(b) prikazuje isto na nestrukturniranoj mreži.

Dijagrami na slici 5.12 prikazuju prosječnu apsolutnu pogrešku rješenja konvekcijsko-difuzijskog transporta za $\text{Pe} = 10$ u ovisnosti o prosječnoj dimenziji kontrolnih površina. Iz ovih podataka moguće je odrediti red točnosti primijenjene numeričke metode pomoću sljedećeg izraza (vidjeti npr. Ferziger i Perić [28]):

$$p = \frac{\log \frac{E_1}{E_2}}{\log \frac{L_1}{L_2}}, \quad (5.40)$$

gdje su E_1 i E_2 prosječne apsolutne pogreške na mrežama s prosječnim dimenzijama kontrolnih površina L_1 i L_2 . U tablici 5.1 prikazani su rezultati izračuna reda točnosti za strukturiranu i nestrukturnirano mrežu, ovisno o primjenjenoj shemi interpolacije.



Slika 5.12: Pogreška rješenja osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $\text{Pe} = 10$.

Predložena metoda diskretizacije daje rješenje 2. reda točnosti i na strukturiranoj i na nestrukturiranoj mreži, za slučaj kada se kod diskretizacije konvekcijskog člana koristi centralna shema diskretizacije. Primjenom uzvodne sheme diskretizacije rješenje je ispod 1. reda točnosti. Primjenom Gamma sheme diskretizacije dobiva se rješenje čija je točnost jednaka točnosti rješenja dobivenog uz primjenu centralne sheme diskretizacije.

Tablica 5.1: Točnost metode diskretizacije ovisno o vrsti mreže i shemi diskretizacije.

	UD	CD	Gamma
Strukturirana mreža	0.839	2.261	2.261
Nestrukturirana mreža	0.875	2.128	2.204

5.4.3 Nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport

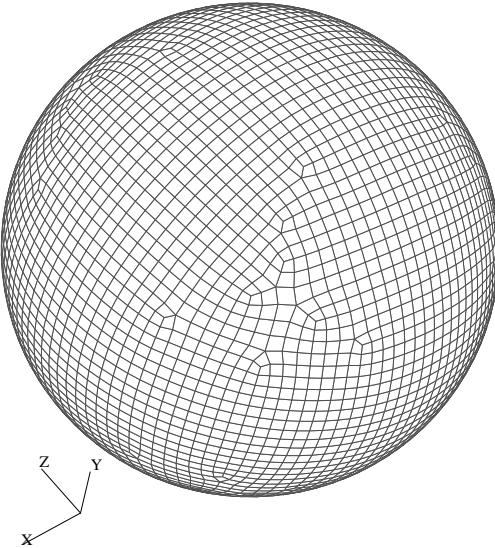
Svrha ovog numeričkog primjera je provjera točnosti rješavanja nestacionarnog površinskog transporta pomoću predložene metode kontrolnih površina. Potrebno je riješiti nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva ψ na površini sfere poljmjera $R = 1$. U početnom je trenutku raspodjela zavisne varijable jednolika, $\psi = 1$.

Koeficijent difuzije jednak je jedinici, $\Gamma_\psi = 1$, a površinsko polje brzine je osnosimetrično i definirano sljedećim izrazom,

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_\infty}{4} \sin \theta \mathbf{e}_\theta, \quad (5.41)$$

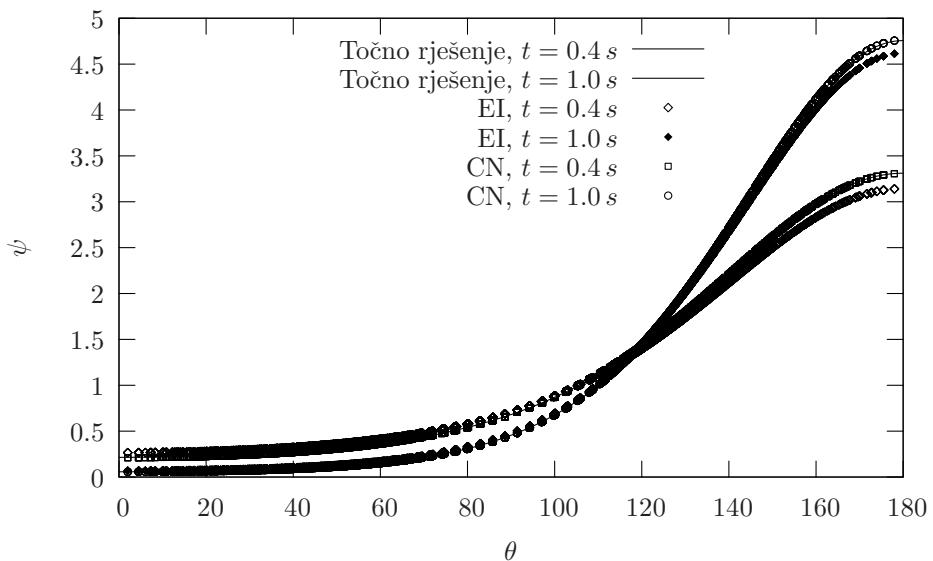
gdje je θ polarni kut, a \mathbf{e}_θ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Prema [86] izraz (5.41) definira polje brzine na površini kapljice sfernog oblika koja pada u smjeru z koordinatne osi kroz fluid jednake viskoznosti, brzinom v_∞ . Ovaj je nestacionarni osnosimetrični problem u dodatku E riješen numeričkim putem, primjenom metode konačnih razlika. Primjenjena prostorna i vremenska diskretizacija je 2. reda točnosti. Rješenje koje se u ovom primjeru koristi za usporedbu kao "točno" rješenje dobiveno je uz sljedeću diskretizaciju prostora i vremena: $\Delta\theta = (1/8)^\circ$, $\Delta t = 1 \times 10^{-4} s$.

Na površini sfere definirana je nestrukturirana površinska mreža koja se sastoji od četverokutnih kontrolnih površina, slika 5.4.3. Mreža sadrži 10600 kontrolnih površina prosječne dimenzije $L = 0.049$. Maksimalna neortogonalnost mreže je 16° , a prosječna 2° .



Slika 5.13: Nestrukturirana površinska mreža za računanje nestacionarnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere.

Kod numeričkog rješavanja ovog problema pomoću metode kontrolnih površina za diskretizaciju konvekcijskog člana je korištena centralna shema diskretizacije, a vremenska diskretizacija je provedena primjenom implicitne Eulerove metode (EI) i Crank-Nicolsonove metode (CN). Na slici 5.14 prikazano je rješenje za $Pe = 10$ u dva vremenska



Slika 5.14: Rješenje nestacionarnog osnosimetričnog konvekcijsko-difuzijskog transporta na površini sfere za $\text{Pe} = 10$.

trenutka: 0.4 s i 1.0 s. Korišteni vremenski korak je u svim slučajevima bio $\Delta t = 0.1$ s. Primjenom Crank-Nicolsonove metode i uz prilično veliki vremenski korak dobiva se izvrsno poklapanje s “točnim” rješenjem. Prema očekivanjima, implicitna Eulerova metoda daje nešto lošije rješenje. Ukupni sadržaj svojstva ψ se tijekom simulacije ne mijenja što znači da je primijenjena metoda diskretizacije konzervativna.

5.5 Zaključak

Predložena je metoda kontrolnih površina koja omogućava numeričko rješavanje površinske transportne jednadžbe na pomicnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži. Prostorna domena je diskretizirana kontrolnim površinama, koje mogu biti proizvoljnog poligonalnog oblika. Definicija nestrukturirane površinske mreže temelji se na adresiranju po bridovima kontrolnih površina. Diskretizacija difuzijskog člana je 2. reda točnosti na neortogonalnoj mreži. Isto vrijedi i za konvekcijski član ako se primjenjuje centralna ili Gamma shema diskretizacije. Vremenska diskretizacija transportne jednadžbe provedena je primjenom implicitne metode 2. reda točnosti.

Poglavlje 6

Numerical modelling of multiphase fluid flow with interface

6.1 Introduction

Chapter 3 describes the finite volume method of discretisation for transport equations on 3-D arbitrary unstructured moving meshes. The mesh motion procedure described in chapter 4 supports arbitrary unstructured meshes and preserves mesh validity and quality for a substantial deformation of the spatial domain.

The goal of this chapter is to define a procedure which will enable accurate numerical simulation of surface tension dominated 3-D multiphase fluid flow with a sharp interface. The amplitude of the interface deformation is limited only by the mesh motion procedure. Improvement in mesh motion would enable greater amplitudes of the interface deformation.

Discretisation and solution procedure for the Navier-Stokes system on a moving computational mesh are described in section 6.2. The segregated solution procedure is used for the coupled system of equation, while coupling between the fluid velocity and the pressure is accomplished by the SIMPLE procedure. The solution procedure is defined for the case where shape of the spatial domain is specified in advance.

In section 6.3, the moving mesh interface tracking method is described. The method is based on the procedure proposed by Muzaferija and Perić [59]: free-surface is attached to the a boundary with fixed pressure boundary conditions and is moved during the SIMPLE

procedure in order to reach the zero net mass flux condition at the end of each time step. The method is extended to enable the fluid flow solution in both phases separated by the interface. The implementation of dynamic condition at the interface includes nonuniform surface tension and effect of fluid viscosity. Special attention is devoted to the accurate and efficient calculation of surface tension forces.

An example of surface tension dominated multiphase fluid flow with the interface is free-rising air bubble in water (Tomiyama [77]). This is a demanding case because of strong coupling between the interface shape and the flow. Section 6.4 describes the application of the moving mesh interface tracking method for the numerical simulation of the rising bubble.

6.2 Discretisation of the Navier-Stokes system on a moving mesh

Isothermal flow of incompressible Newtonian fluid of constant viscosity is considered. This problem is mathematically defined by the Navier-Stokes system which consists of the continuity equation (2.13) and the momentum equation (2.14):

$$\oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dS = 0,$$

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

Since fluid velocity \mathbf{v} is dominant dependent variable in both above equation, one has to derive the equation for the pressure when a segregated solution procedure is used.

Discretisation of momentum equation follows the procedure described in section 3.3. A special approach is needed only for the discretised convection term, where direct discretisation would result in a nonlinear system of equations. To avoid this, linearisation must be performed.

Using Eqn. (3.16) convective term in Eqn. (2.14) is discretised as follows:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial V_P} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} \, dS &= \sum_f \mathbf{n}_f \cdot [\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)]_f S_f \mathbf{v}_f \\ &= \sum_f [\rho_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_f) S_f - \rho_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{sf}) S_f] \mathbf{v}_f \\ &= \sum_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f) \mathbf{v}_f, \end{aligned} \quad (6.1)$$

where absolute mass flux \dot{m}_f depends on velocity field \mathbf{v} . Equation (6.1) is linearised using Picard method (see *e.g.* Ferziger and Perić [28]), such that absolute mass flux through cell faces is used from the previous outer iteration.

After discretising Eqn. (2.14) in space and time for cell P of volume V_P^n , the following linearised algebraic equation is obtained:

$$a_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f a_N \mathbf{v}_N^n = r_P - (\nabla p)_P^n V_P^n, \quad (6.2)$$

where coefficients a_P and a_N depend on the velocity field \mathbf{v} . Equation (6.2) represents the so-called semi-discretised form of the momentum equation, in which the pressure gradient $(\nabla p)_P^n$ is left undiscretised. Fully discretised momentum equation has the following form:

$$a_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f a_N \mathbf{v}_N^n = r_P - \sum_f \mathbf{n}_f^n p_f^n S_f^n, \quad (6.3)$$

where p_f^n is face pressure obtained by the linear interpolation of the neighbouring cells values.

6.2.1 Derivation of the pressure equation

After dividing Eqn. (6.2) by the cell volume V_P^n , the following expression is obtained:

$$A_P \mathbf{v}_P^n + \sum_f A_N \mathbf{v}_N^n = R_P - (\nabla p)_P^n, \quad (6.4)$$

where $A_P = a_P/V_P^n$, $A_N = a_N/V_P^n$, $R_P = r_P/V_P^n$. Division is performed in order to enable the face interpolation of the coefficients. Defining a function:

$$\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n) = - \sum_f A_N \mathbf{v}_N^n + R_P, \quad (6.5)$$

Eqn. (6.4) takes following form:

$$A_P \mathbf{v}_P^n = \mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n) - (\nabla p)_P^n. \quad (6.6)$$

Discretised form of the continuity equation (2.13) for cell P reads:

$$\sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \mathbf{v}_f^n S_f^n = 0. \quad (6.7)$$

From Eqn. (6.6) one can express fluid velocity \mathbf{v}_P^n at the centre of cell P :

$$\mathbf{v}_P^n = \frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} - \frac{1}{A_P} (\nabla p)_P^n. \quad (6.8)$$

Using an interpolation procedure similar to that proposed by Rhie and Chow [68], velocity at the cell face is obtained by interpolation of the left hand side terms of Eqn. (6.8) written for the owner (P) and neighbour (N) cell of face f :

$$\mathbf{v}_f^n = \left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f - \left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n. \quad (6.9)$$

When Eqn. (6.9) is substituted into Eqn. (6.7), the following discretised form of pressure equation is obtained:

$$\sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left[\left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n \right] S_f^n = \sum_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f S_f^n. \quad (6.10)$$

The absolute mass flux \dot{m}_f^n through the cell face f is calculated using Eqn. (6.9) as follows:

$$\dot{m}_f^n = \rho_f (\mathbf{n}_f^n \cdot \mathbf{v}_f^n) S_f^n = \rho_f \mathbf{n}_f^n \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{v}^n)}{A_P} \right)_f - \left(\frac{1}{A_P} \right)_f (\nabla p)_f^n \right] S_f^n. \quad (6.11)$$

Mass flux calculated in this manner will satisfy the continuity equation if the pressure field satisfies the pressure equation (6.10).

6.2.2 Boundary conditions

Implementation of boundary conditions described in section 3.3.4 is also valid for the Navier-Stokes system. Only boundary conditions specific for incompressible fluid flow will be described here.

- **Inlet boundary condition.** Velocity \mathbf{v}_b and mass flux $\dot{m}_b = \rho_b \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b S_b$ are specified at the inlet boundary faces. In order to ensure the zero mass flux correction, the normal pressure derivative is set to zero¹, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla p)_b = 0$.

¹If there exists a body force, zero normal pressure derivative is specified for the modified pressure. Introduction of modified pressure is given in detail in section 6.3.1.

- **Outlet boundary condition.** When defining the outlet boundary condition, the conservation of mass at global level must be ensured. This can be accomplished by manipulating the velocity field on outlet faces in two ways:

- The pressure value p_b is specified and the normal velocity derivative is set to zero, $\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = 0$. In order to satisfy global continuity, it is sufficient to satisfy the pressure equation;
- The normal derivative of pressure and velocity is set to zero,

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla p)_b = 0, \quad (6.12)$$

$$\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b = 0. \quad (6.13)$$

Velocity at the outlet boundary faces is first approximated by extrapolation from inside the computational domain, and scaled such that total mass flux through the outlet boundary is equal to the total mass flux through the inlet boundary. Special attention is needed in cases where the fluid enters the domain through the outlet boundary, as this may cause numerical instability.

- **Non-penetrating moving wall.** Tangential component of fluid velocity is equal to the tangential component of the wall velocity, $(\mathbf{v}_t)_b = (\mathbf{v}_t)_w$. In order to achieve zero net mass flux through the wall faces, the normal component of the fluid velocity is calculated according to the following expression:

$$(\mathbf{v}_n)_b = \mathbf{n}_b \frac{\dot{V}_b}{S_b}. \quad (6.14)$$

The wall normal pressure derivative is set to zero. Normal component of the deviatoric stress force is equal to zero¹, while its tangential component is calculated using the following expression:

$$[(\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot (\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau})]_b = \mu \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b\mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.15)$$

Using Eqs. (2.28 and 6.15), one can express the deviatoric stress force at the wall as follows:

$$\begin{aligned} (\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau})_b &= \mu (\mathbf{I} + \mathbf{n}_b\mathbf{n}_b) \cdot [\mathbf{n}_b \cdot (\nabla \mathbf{v})_b] + \mu (\nabla_s \mathbf{v})_b \cdot \mathbf{n}_b \\ &= \mu \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b\mathbf{n}_b) \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

¹Normal component of the deviatoric stress force can be determined using Eqs. (D.6 and B.7): $\mathbf{n}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} = -2\mu \nabla_s \cdot \mathbf{v}_t = -2\mu \frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt} = 0$.

In the case of wall motion without deformation, the term $(\nabla_s \mathbf{v})_b \bullet \mathbf{n}_b$ is equal to zero.

From Eqn. (6.16) follows expression for the normal velocity derivative for a moving wall:

$$\mathbf{n}_b \bullet (\nabla \mathbf{v})_b = \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \bullet (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.17)$$

- **Symmetry plane.** On a symmetry plane, normal derivatives of all scalar quantities (pressure, temperature, *etc.*) are zero. The normal component of velocity is also equal to zero. The tangential component of deviatoric stress force equals zero, and its normal component is calculated using Eqn. (D.6) as follows:

$$(\mathbf{n} \bullet \boldsymbol{\tau})_b = -2\mu(\nabla_s \bullet \mathbf{v}_t)_b. \quad (6.18)$$

Using Eqs. (2.28 and 6.18), one can express the deviatoric stress force at the symmetry plane as follows:

$$(\mathbf{n} \bullet \boldsymbol{\tau})_b = \mu (\mathbf{I} + \mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \bullet [\mathbf{n}_b \bullet (\nabla \mathbf{v})_b] = -2\mu(\nabla_s \bullet \mathbf{v}_t)_b \mathbf{n}_b, \quad (6.19)$$

From Eqn. (6.19) follows the expression for the normal velocity derivative for boundary faces at a symmetry plane:

$$\mathbf{n}_b \bullet (\nabla \mathbf{v})_b = -(\nabla_s \bullet \mathbf{v}_t)_b \mathbf{n}_b, \quad (6.20)$$

or

$$\mathbf{n}_b \bullet (\nabla \mathbf{v})_b = \frac{(\mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \bullet (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_P)}{|\mathbf{d}_n|} = -\frac{(\mathbf{n}_b \mathbf{n}_b) \bullet \mathbf{v}_P}{|\mathbf{d}_n|}. \quad (6.21)$$

6.2.3 Solution procedure

The coupled system of discretised Navier-Stokes equations, Eqs. (6.3 and 6.10), is solved using segregated solution procedure, where the momentum equation is solved separately from the pressure equation. Coupling between velocity and pressure is realised using the SIMPLE procedure (Patankar [61]).

We shall continue with a description of the solution procedure of fluid flow inside a spatial domain of time varying shape. For now, it is assumed that shape of the spatial domain is known in advance. The solution procedure can be described as follows:

1. Start with the new time instance $t = t^n$, where all dependent variables are initialised with corresponding values from previous time instance $t = t^o$;
2. Using the new position of the boundary, displacements of the boundary mesh points are calculated and used as the boundary conditions for the mesh motion problem. The mesh motion problem is solved, using the procedure described in section 4.4.4, and mesh points are moved to the new position. The volume fluxes of cell faces are calculated using the procedure described in section 3.3.3;
3. The SIMPLE procedure consists of the following steps:
 - (a) Assemble the system of linear algebraic equations corresponding to the discretised momentum equation (6.3), where pressure field and mass fluxes are used from previous iteration. Implicit under-relaxation is applied on the linear algebraic equation system before the solution, with under-relaxation factor α_v .
 - (b) Assemble the system of linear algebraic equations corresponding to the discretised pressure equation (6.10), using approximate velocity field from the previous time step. If necessary, the pressure equation can be solved two or more times, in order to converge the explicit non-orthogonal correction (3.30). The new approximate pressure field p obtained by the solution of the discretised pressure equation is used for the calculation of the new mass fluxes using Eqn. (6.11), and for the calculation of velocity field using Eqn. (6.8). Explicit under-relaxation is applied on the pressure field before it is used in the next outer iteration¹:

$$p^n = p^p + \alpha_p(p - p^p), \quad (6.22)$$

where p^p is pressure field from previous outer iteration, p is solution of pressure equation and α_p is under-relaxation factor ($0 \leq \alpha_p \leq 1$);

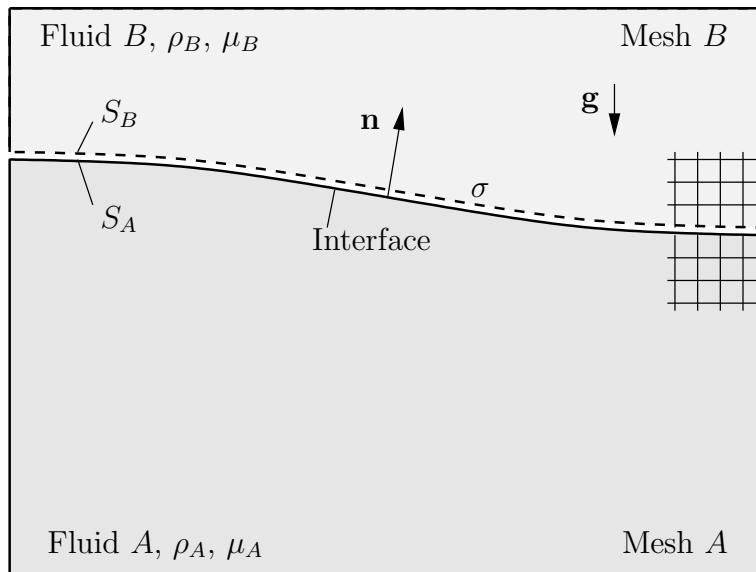
- (c) One *outer iteration* ends here. The convergence of the solution is checked and if residuals levels are above the wanted values, the procedure is returned on point (a), *i.e.* on the beginning of next outer iteration;
4. If the finale time instance is not reached, the procedure is returned to the point 1.

¹One can not apply the implicit under-relaxation on the pressure equation because that would have the effect of introduction of the unsteady term, what would change the nature of the pressure equation.

6.3 Interface tracking method

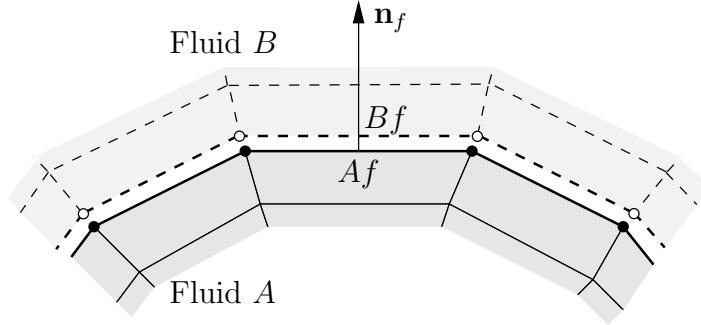
Solution procedure for the Navier-Stokes system on a moving mesh described in previous section is applied on numerical modelling of two-phase fluid flow with an interface (free-surface). The computational mesh consists two separate parts, where each of the meshes covers only one of considered fluid phases, see Fig. 6.1. Two meshes are in contact over two geometrically equal surfaces, S_A and S_B , at the boundary between the phases, *i.e.* the interface. Each surface is defined by a set of boundary faces, see Fig. 6.2, where each face Af on the surface S_A has a corresponding geometrically equal face Bf on the surface S_B . The matching of the two meshes at the interface is assumed in order to make easier the explanation of the interface tracking method, and is not required in general. If there is no matching between the meshes, surface-to-surface interpolation must be used.

Boundary faces which represent the A side of the interface, make the finite area mesh used in the calculation of surface derivatives and the solution of a surfactant transport equation along the interface, using the finite area method described in chapter 5.



Slika 6.1: Definition of the spatial domain for the moving mesh interface tracking method.

With such definition, the solution of a two-phase fluid flow with an interface is reduced to the solution of single-phase fluid flow in two spatial domains of varying shape. Coupling of two flows is conducted through the boundary conditions on the interface, what will be explained in detail in section 6.3.2.



Slika 6.2: Representation of the interface with the mesh boundary faces.

6.3.1 Introduction of a modified pressure

When two-phase flow with the interface is considered, the gravity force usually has dominant influence. In that case, absolute pressure p always contains a hydrostatic component $\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}$ which is in equilibrium with the gravity force. Consequently, the absolute pressure can be expressed as follows:

$$p = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + p_m, \quad (6.23)$$

where \mathbf{r} is the position vector and p_m is the *modified pressure* which is non-zero only in the case of fluid flow (Batchelor [4]).

Taking the gradient of Eqn. (6.23), the absolute pressure gradient for incompressible fluid flow reads:

$$\nabla p = \rho \mathbf{g} + \nabla p_m, \quad (6.24)$$

because $\nabla \mathbf{r} = \mathbf{I}$. When Eqn. (6.24) is substituted into Eqn. (2.14), the term which contains gravity is eliminated and instead of absolute pressure, the modified pressure remains:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \mathbf{v} dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) dS - \int_V \nabla p_m dV. \quad (6.25)$$

In that case, the pressure equation (6.10) is formulated in terms of modified pressure.

On the boundary where absolute pressure is specified, (*e.g.* at the interface), modified pressure can be used if it is in agreement with Eqn. (6.23). Specifically, if absolute pressure is given at the boundary, corresponding modified pressure will be:

$$p_m = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}, \quad (6.26)$$

where \mathbf{r} is the position vector of considered boundary points.

6.3.2 Implementation of boundary conditions at the interface

In order to fully define the problem, one has to define the adequate boundary conditions at boundary faces which define the A and B side of the interface. At the A side the pressure p_A and normal velocity derivative $\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v})_A$ are specified, while at the B side the velocity \mathbf{v}_B is specified and normal derivative of pressure is set to zero, $\mathbf{n} \cdot (\nabla p_m)_B = 0$. The boundary conditions are calculated using conditions described in section 2.3, as follows:

1. The value of modified pressure specified on the face Af (see Fig. 6.2) is calculated from modified pressure at the face Bf using condition (2.25) as follows:

$$(p_m)_{Af} = (p_m)_{Bf} - (\rho_A - \rho_B) \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_{Af} - (\sigma\kappa)_{Af} - 2(\mu_A - \mu_B) (\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af}, \quad (6.27)$$

where $(p_m)_{Bf}$ is the modified pressure at the face Bf calculated by extrapolation from the fluid B , and \mathbf{r}_{Af} is the position vector of the face centre Af . Surface divergence of the velocity vector $(\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af}$ at Af is calculated using Eqn. (B.5). The procedure for calculation of surface force $(\sigma\kappa)_{Af}$ is described in section 6.3.4.

2. The normal velocity derivative specified at Af is calculated from the normal velocity gradient at Bf using Eqn. (2.32), as follows:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Af} &= \frac{\mu_B}{\mu_A} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_f \mathbf{n}_f) \cdot \left[\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Bf} \right] \\ &+ \left[\frac{1}{\mu_A} (\nabla_s \sigma)_{Af} - \mathbf{n}_f (\nabla_s \cdot \mathbf{v})_{Af} + \frac{(\mu_B - \mu_A)}{\mu_A} (\nabla_s \mathbf{v})_{Af} \cdot \mathbf{n}_f \right], \end{aligned} \quad (6.28)$$

where $\mathbf{n}_f = \mathbf{n}_{Af} = -\mathbf{n}_{Bf}$ is unit normal of the face Af . Equation (6.28) is derived using identity $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \mathbf{n} (\nabla_s \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})$. Surface gradient of velocity $(\nabla_s \mathbf{v})_{Af}$ at Af is calculated using the surface Gauss integral theorem, Eqn. (5.27). Calculation of the tangential surface force $(\nabla_s \sigma)_{Af}$ is described in section 6.3.4.

3. According to the kinematic condition (2.16), the tangential velocity component specified on Bf is transferred from Af :

$$(\mathbf{v}_t)_{Bf} = (\mathbf{v}_t)_{Af}. \quad (6.29)$$

Normal velocity component specified on Bf is calculated from the condition of zero net mass flux, $(\dot{m}_{Bf} - \rho_B \dot{V}_{Bf}) = 0$, *i.e.*

$$(\mathbf{v}_n)_{Bf} = -\frac{\dot{V}_{Bf}}{S_{Bf}} \mathbf{n}_f, \quad (6.30)$$

where \dot{V}_{Bf} is the volume flux of the face Bf . Since the displacement of mesh points on the B side are equal to the displacement on the A side of the interface, $\mathbf{u}_{Bi} = \mathbf{u}_{Ai}$, the same is valid for the volume fluxes of faces Af and Bf :

$$\dot{V}_{Bf} = \dot{V}_{Af}. \quad (6.31)$$

If the density of fluid A is greater than the density of fluid B , combination of the interface boundary conditions described above will ensure stability of the coupling procedure between the flows of considered fluid phases.

Correction of interface boundary conditions using the above is done at the beginning of each outer iteration. In general, at the end of an outer iteration, the net mass flux through the boundary side A is different from zero, *i.e.*

$$(\dot{m}_{Af}^p - \rho_A \dot{V}_{Af}^p) \neq 0, \quad (6.32)$$

where \dot{m}_{Af}^p is the mass flux through the face Af and \dot{V}_{Af}^p is the volume face flux. In order to correct the net mass flux, the interface must be moved to accomplish the following volume flux corrections:

$$\dot{V}'_{Af} = (\dot{V}_{Af}^n - \dot{V}_{Af}^p) = \frac{\dot{m}_{Af}^p}{\rho_A} - \dot{V}_{Af}^p. \quad (6.33)$$

Using the calculated displacements of the interface as a boundary condition for the mesh motion problem, displacement of internal points is calculated and mesh is moved to fit the new interface position. The new face volume fluxes \dot{V}_f^n are calculated as is described in section 3.3.3.

The SIMPLE procedure stops when the net mass flux through the interface is reduced below given level and the kinematic and dynamic condition at the interface are satisfied.

6.3.3 Displacement of interface points

At the end of each outer iteration the interface is moved in order to cancel the net mass flux. The motion procedure is based on the procedure proposed by Muzaferija and Perić [59], similar in form to Apsley i Hu [1].

A control point Ac is attached to face Af at the side A , see Fig. 6.3. At the end of each outer iteration displacement of control points is calculated using the kinematic condition, and the new position of the interface is calculated by linear interpolation.

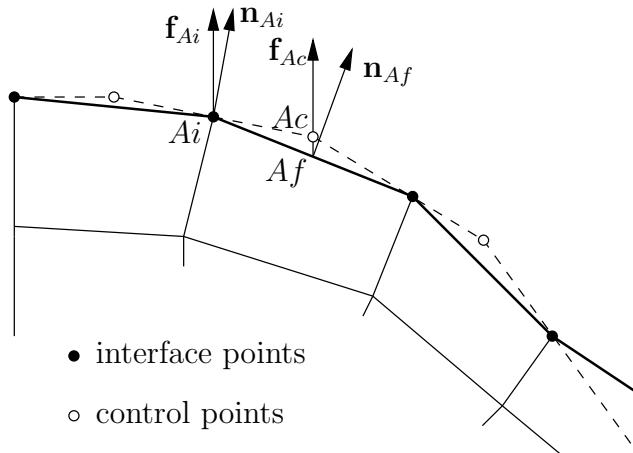
Direction of displacement of the control points and the interface mesh points must be specified in advance for each time instance. It is defined by the unit vector \mathbf{f}_{Ac} , and the interface displacement direction is defined by the unit vector \mathbf{f}_{Ai} . Two variants are used in this work:

- In the direction of gravity:

$$\mathbf{f}_{Ac} = \mathbf{f}_{Ai} = \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|}; \quad (6.34)$$

- In the direction of the interface normal from the previous time instance:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{Ac} &= \mathbf{n}_{Af}^o, \\ \mathbf{f}_{Ai} &= \mathbf{n}_{Ai}^o. \end{aligned} \quad (6.35)$$



Slika 6.3: Definition of the interface using control points, Muzaferija i Perić [59].

The procedure for the calculation of the new interface position, performed at the end of each outer iteration, consists of the following steps:

1. Calculate the volume $\delta V'_{Af}$ which face Af sweeps on the way from the current to the corrected position in order to cancel the net mass flux. Depending on the temporal discretisation scheme used, the volume $\delta V'_{Af}$ is calculated as follows:

- Euler implicit scheme:

$$\delta V'_{Af} = \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.36)$$

- Gear's scheme:

$$\delta V'_{Af} = \frac{2}{3} \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.37)$$

- Crank-Nicolson scheme:

$$\delta V'_{Af} = \frac{1}{2} \dot{V}'_{Af} \Delta t; \quad (6.38)$$

where \dot{V}'_{Af} is the volume flux correction for face Af , Eqn. (6.33).

2. Using the above, displacement of control points in the direction \mathbf{f}_{Ac} is:

$$h'_{Ac} = \frac{\delta V'_{Af}}{S_{Af}^p \mathbf{n}_{Af}^p \cdot \mathbf{f}_{Ac}}, \quad (6.39)$$

where S_{Af}^p and \mathbf{n}_{Af}^p are the area and unit normal of the face Af in the current iteration. The new position of control points is calculated according to the following expression:

$$\mathbf{r}_{Ac}^n = \mathbf{r}_{Ac}^p + h'_{Ac} \mathbf{f}_{Ac}, \quad (6.40)$$

where \mathbf{r}_{Ac}^p is the position vector of the control point Ac before correction.

3. New interface position is calculated using the new control points by applying linear interpolation proposed by Muzaferija and Perić [59]:

$$\mathbf{r}_{Ai}^n = \mathbf{r}_{Ai}^p - \mathbf{f}_{Ai} \mathbf{f}_{Ai} \cdot \left(\mathbf{r}_{Ai}^p - \sum_{Af} w_{Af} \mathbf{r}_{Ac}^n \right), \quad (6.41)$$

where \mathbf{r}_{Ai}^p is the position vector of the interface point Ai before correction, and w_{Af} is the weighting factor:

$$w_{Af} = \frac{\frac{1}{|\mathbf{r}_{Ai}^p - \mathbf{r}_{Ac}^n|}}{\sum_{Af} \frac{1}{|\mathbf{r}_{Ai}^p - \mathbf{r}_{Ac}^n|}}. \quad (6.42)$$

Summation in Eqs. (6.41 and 6.42) is performed over the neighbour faces of the point Ai .

Along with the described procedure for the calculation of the new interface position, an alternative procedure is proposed which gives somewhat better results when the interface is represented by an unstructured surface mesh. The interface mesh point A_i is moved up to a plane which is laid over the corresponding control points using the least square method. The new interface mesh points position is calculated using the following expression:

$$\mathbf{r}_{Ai}^n = \mathbf{r}_{Ai}^p + \frac{\mathbf{N}_{Ai} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{r}_{Ai}^p)}{\mathbf{N}_{Ai} \cdot \mathbf{f}_{Ai}} \mathbf{f}_{Ai}, \quad (6.43)$$

where \mathbf{N}_{Ai} is the unit normal vector on the plane

$$\mathbf{N}_{Ai} = \frac{\mathbf{G}^{-1} \cdot \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}}{|\mathbf{G}^{-1} \cdot \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}|}, \quad (6.44)$$

and \mathbf{p} is the position of the points at the plane,

$$\mathbf{p} = \frac{\sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac}}{\sum_{Af} w_{Af}^2}. \quad (6.45)$$

Tensor \mathbf{G} is defined by the following expression:

$$\mathbf{G} = \sum_{Af} w_{Af}^2 \mathbf{r}_{Ac} \mathbf{r}_{Ac}. \quad (6.46)$$

Special attention must be devoted to the motion of the interface mesh points which are in contact with other spatial boundaries, *e.g.* walls, symmetry planes, inlet and outlets. Namely, position of such points is calculated by extrapolation of the neighbouring control points using Eqn. (6.41). On the inlet and outlet boundary one can not apply a unique approach because interface displacement procedure will depend on flow conditions.

6.3.3.1 Maintaining interface smoothness

Definition of an interface with control points is crucial to maintain interface smoothness during the simulation. Zwart, Raithby and Raw [90] have calculated interface displacement by solving a system of linear algebraic equations derived by enforcing the kinematic condition directly for the interface mesh points instead for the control points. During the simulation, undulation of the interface occurs, having the same frequency as the

mesh. In order to maintain the simulation, the interface must be smoothed out after each displacement.

When the procedure for the interface points displacement described in this work is applied on the 2-D cases, undulations do not occur. However, with 3-D cases where the interface is represented by the unstructured quadrilateral surface mesh, undulation of the interface still occurs, and leads to the break up of the simulation. Analysis has shown that undulation occurs due to bending of quadrilateral faces over their diagonals. This problem arises because the proposed procedure for the interface mesh points displacement do not ensure preservation of the face flatness.

The problem of the interface undulation is solved in this study by performing smoothing of the interface at the beginning of the time step when undulations are detected, using the following procedure:

- Move the control points into the centres of the corresponding faces;
- Move the interface mesh points in order to correspond to the new position of control points;
- Calculate the volume swept by the interface faces in the previous step;
- Move the control points and the interface points in such a way to cancel the swept volume calculated in the previous step.

6.3.3.2 Analysis of accuracy and stability

The previous studies (Sung, Choi and Yoo [73], Apsley and Hu [1]) show that reasonable time accuracy of a moving mesh interface tracking method can be achieved if both fluid flow equations and the equation which governs interface motion must be discretised in space and time with second order accuracy.

The accuracy of the described procedure for interface point displacement theoretically depends only on the number of outer iterations performed. Namely, from iteration to iteration, control point displacement defined by Eqn. (6.39) converges to zero, *i.e.* interface points converge to their exact position. Thus, accuracy of the interface tracking method developed in this work depends only on the accuracy of the time and space discretisation of the fluid flow equations.

If displacement of the interface in the one time step is too large, the described procedure can cause instability of the simulation. Muzaferija and Perić [59] mitigate the instability problem by under-relaxation of Eqn. (6.39):

$$h'_{Ac} = \alpha_h \frac{\delta V'_{Af}}{S^p_{Af} \mathbf{n}^p_{Af} \cdot \mathbf{f}_{Ac}}, \quad (6.47)$$

where α_h is under-relaxation factor ($0 < \alpha_h < 1$).

The cause of the potential instability is in explicit treatment of the area S_{Af} and the unit normal vector \mathbf{n}_{Af} in Eqn. (6.39), *i.e.* the values of these quantities are used from previous iteration. One can show that the area correction $S' = S^n - S^p$ and the normal vector correction $\mathbf{n}' = \mathbf{n}^n - \mathbf{n}^p$ depend on the displacement h' , as follows:

$$S' = S^p [(\nabla_s h') \cdot \mathbf{f} + h' \nabla_s \cdot \mathbf{f}], \quad (6.48)$$

$$\mathbf{n}' = -(\nabla_s h') (\mathbf{n}^p \cdot \mathbf{f}) - h' (\nabla_s \mathbf{n}^p) \cdot \mathbf{f}, \quad (6.49)$$

where \mathbf{f} is the direction vector for the interface displacement. Thus, if area S_{Af} and normal vector \mathbf{n}_{Af} are treated implicitly in Eqn. (6.39), one would obtain a system of linear algebraic equations. This would probably solve the instability problem and allow the usage of greater time step value, but would considerably complicate the procedure.

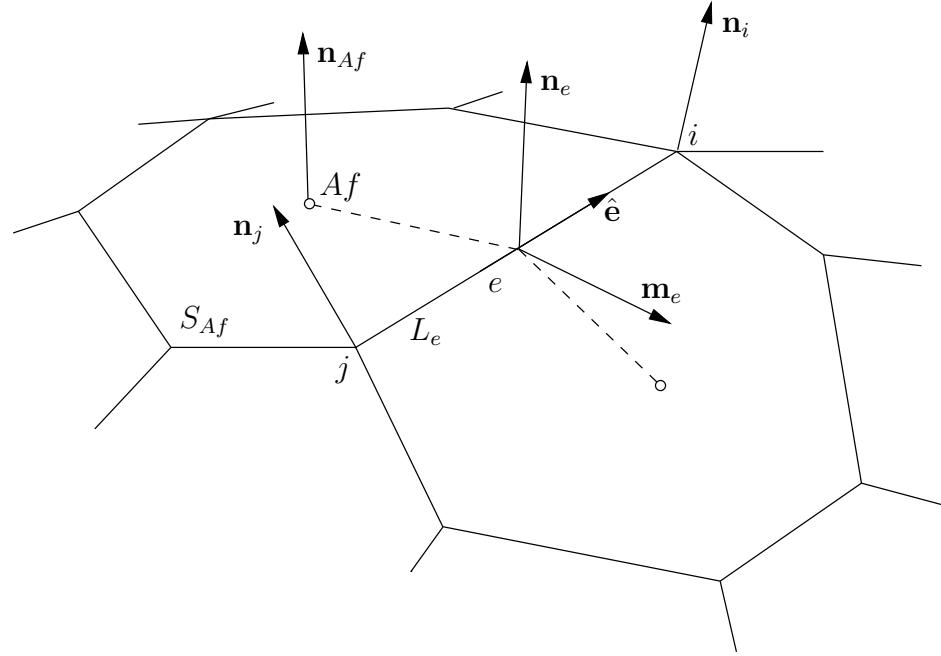
6.3.4 Surface tension treatment

Regardless of the approach used for the tracking the interface between the phases in a multiphase fluid flow, implementation of surface tension is always demanding. Unphysical fluid flow called "parasitic currents" will arise around the interface as a consequence of inaccuracy in the calculation of surface tension forces. Parasitic currents may be so strong to destroy the interface and break the calculation.

Total surface tension force on a closed surface must be exactly zero. This condition has served as starting point for defining a procedure for calculation of surface tension forces. Let us assume the interface is discretised with unstructured surface mesh consisting of arbitrary polygonal control areas. Surface tension force acting on the control area S_{Af} (see Fig. 6.4) can be expressed by the following equation:

$$\mathbf{F}_{Af}^\sigma = \oint_{\partial S_{Af}} \mathbf{m} \sigma \, dL = \sum_e \int_{Le} \mathbf{m} \sigma \, dL = \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.50)$$

where σ_e and \mathbf{m}_e are the surface tension and binormal unit vector at the centre of the edge e and L_e is the length of the edge e . If the total surface tension force for each control area in the mesh is calculated using Eqn. (6.50), then the total surface tension force for a closed surface will be exactly zero if unit binormals \mathbf{m}_e for two control areas sharing the edge e are parallel and have opposite direction.



Slika 6.4: Control area S_{Af} .

It remains to decompose the surface tension force \mathbf{F}_{Af}^σ into the tangential component $(\nabla_s \sigma)_{Af}$ used in Eqn. (6.28), and the normal component $(\kappa \sigma)_{Af} \mathbf{n}_{Af}$ used in Eqn. (6.27). Using Eqn. (B.8), surface tension force acting on the control area S_{Af} can be expressed by the following equation:

$$\mathbf{F}_{Af}^\sigma = \int_{S_{Af}} \nabla_s \sigma \, dS + \int_{S_{Af}} \kappa \sigma \mathbf{n} \, dS. \quad (6.51)$$

When the right hand side of Eqn. (6.51) is discretised using the mid point rule and the result of the discretisation is equalised with the right hand side of Eqn. (6.50), the following expression is obtained:

$$(\nabla_s \sigma)_{Af} + (\kappa \sigma)_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e. \quad (6.52)$$

Hence, the tangential component of the surface tension force acting on the control area

S_{Af} is equal to the tangential component of the right hand side of Eqn. (6.52):

$$(\nabla_s \sigma)_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{Af} \mathbf{n}_{Af}) \cdot \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.53)$$

and its normal component is equal to the respective normal component:

$$(\kappa \sigma)_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} (\mathbf{n}_{Af} \mathbf{n}_{Af}) \cdot \sum_e \sigma_e \mathbf{m}_e L_e. \quad (6.54)$$

In the case when the surface tension is constant ($\sigma = \text{const.}$), Eqn. (6.53) will give zero tangential component of the surface tension force if the normal unit vector of the control area S_{Af} satisfies the following equation:

$$\kappa_{Af} \mathbf{n}_{Af} = \frac{1}{S_{Af}} \sum_e \mathbf{m}_e L_e, \quad (6.55)$$

or,

$$\mathbf{n}_{Af} = \frac{\sum_e \mathbf{m}_e L_e}{\left| \sum_e \mathbf{m}_e L_e \right|}, \quad (6.56)$$

if $\kappa_{Af} \neq 0$.

With Eqs. (6.53, 6.54 and 6.55) we shall formulate a procedure for calculation of surface tension force which ensures that total surface tension force on a closed surface will be exactly zero. Unfortunately, fulfilment of this condition is not sufficient for successful application of surface tension forces in the calculation. Specifically, unphysical fluid flow near the interface arise due to local (and not global) inaccuracy in the calculation of surface tension forces.

From Eqn. (6.50) one can see that the accuracy of surface tension force calculation depends on the accuracy of calculation of binormal unit vector \mathbf{m}_e , or normal unit vector \mathbf{n}_e [see Eqn. (5.2)]. In the first attempt, the normal unit vector \mathbf{n}_e was calculated by interpolation of the normal unit vectors at the centres of control areas which share the edge e . Such surface tension forces had spatial oscillations so strong that it was not possible to start the calculation. Therefore, a new approach is proposed in which the binormal \mathbf{m}_e is calculated using the following expression:

$$\mathbf{m}_e = \hat{\mathbf{e}} \times \frac{\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j}{2}, \quad (6.57)$$

where $\hat{\mathbf{e}}$ is the unit vector parallel with edge e , and \mathbf{n}_i and \mathbf{n}_j are the interface normal unit vectors in points i and j (see Fig. 6.4). Using Eqs. (6.55 and 6.57) one obtains the

exact value of curvature of the control area S_{Af} if points of the control area lie on the surface of the sphere.

6.3.4.1 Calculation of vertex normals

Normal unit vector at the surface (interface) mesh point i is calculated using the following procedure:

1. All control areas which share the point i must be decomposed into triangles such that first (0) point of each triangle is the point i , Fig. 6.5;
2. The normal unit vector \mathbf{n}_t for each triangle t is calculated using the following exact expression:

$$\mathbf{n}_t = \frac{(\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0) \times (\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^1)}{|(\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0) \times (\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^1)|}; \quad (6.58)$$

3. The normal unit vector \mathbf{n}_i at the point i is calculated as a weighted average of the unite normals of all triangles which share the point i :

$$\mathbf{n}_i = \frac{\sum_t w_t \mathbf{n}_t}{|\sum_t w_t \mathbf{n}_t|}, \quad (6.59)$$

where the weighting factor w_t for triangle t is calculated according the proposal of Max [58]:

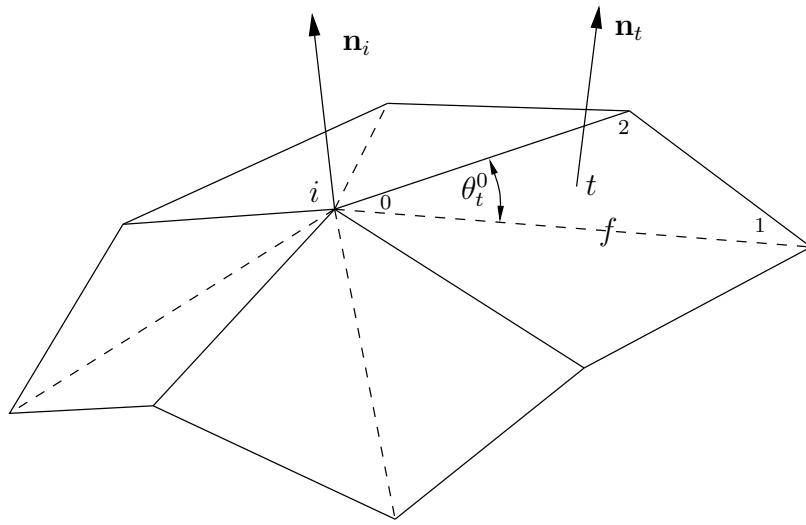
$$w_t = \frac{\sin \theta_t^0}{|\mathbf{r}_t^1 - \mathbf{r}_t^0| |\mathbf{r}_t^2 - \mathbf{r}_t^0|}, \quad (6.60)$$

where θ_t^0 is angle between the edge $0 - 1$ and the edge $0 - 2$ of the triangle t .

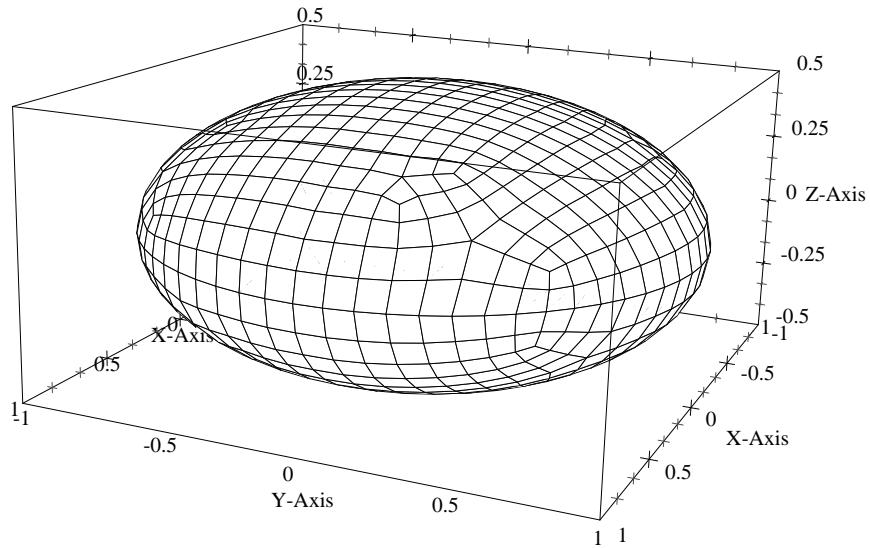
In the case when the points of the surface mesh lie on the surface of a sphere, this procedure gives exact normal vector regardless of the surface mesh resolution.

6.3.4.2 Accuracy of calculation of surface tension forces

As the accuracy indicator of the surface tension force calculation, one can use the accuracy of the curvature calculated using Eqn. (6.55). This will be checked using the surface of a rotational ellipsoid shown on Fig. 6.6. The ellipsoid has semi-axis of the following lengths: 1, 1 i 0.5. The ellipsoid surface is discretised by unstructured quadrilateral surface mesh



Slika 6.5: With the definition of the procedure for calculation of normal vectors on the surface mesh.



Slika 6.6: Surface of rotational ellipsoid with the mesh of smallest resolution.

(finite area mesh) of three different resolution. The average element size on three meshes are: $\Delta = 0.1, 0.05 \text{ i } 0.025$. The mesh with smallest resolution is shown on Fig. 6.6.

Results of calculation are compared in respect to relative error of curvature calculation,

$$\frac{\delta\kappa}{\kappa_a} = \frac{\kappa - \kappa_a}{\kappa_a}, \quad (6.61)$$

where $\delta\kappa$ is the absolute curvature error, and κ_a is its exact value. Maximum and average relative error of the curvature calculation for the three meshes is shown in table 6.1. One can see that average relative error is low even for the coarse mesh, and with increased resolution the error is quickly decreased.

Tablica 6.1: Curvature calculation error for the surface of a rotational ellipsoid.

Δ	$(\delta\kappa/\kappa_a)_{max}$	$(\delta\kappa/\kappa_a)_{sr}$
0.1	0.0622	0.0217
0.05	0.0175	0.0067
0.025	0.0067	0.0026

Analysing the results of 2-D bubble simulation, Lafaurie *et al.* [52] and Ubbink [80] have shown that the amplitude of parasitic currents is proportional to the ratio of surface tension and dynamic viscosity:

$$v_{max} = \frac{\sigma}{\mu}. \quad (6.62)$$

The influence of fluid viscosity can be explained by the fact that viscous forces damp the parasitic flow. However, when influence of surface tension σ is considered one should note that parasitic currents will be proportional to the product of the surface tension σ and the error in the calculation of curvature. Error in interface curvature calculation has spatially oscillatory character with the frequency depending on mesh resolution. Let the curvature error has the amplitude $\delta\kappa$. The corresponding interface pressure which arises due to curvature error has the amplitude of $\delta p = \delta\kappa \sigma$. This interface pressure cause the emergence of parasitic currents.

When rising bubbles are considered, influence of parasitic currents on the numerical solution will be inversely proportional to the total buoyancy force acting on the bubble

surface. This influence can be expressed by the following dimensionless number:

$$\frac{\sigma}{\mu\sqrt{2D|\mathbf{g}|}} = (\text{Mo Eo})^{-\frac{1}{4}}, \quad (6.63)$$

where D is bubble diameter, Mo is the Morton number and Eo is the Eötvös number.

6.3.5 Solution procedure

Based on the described interface tracking method, one can now define the solution procedure for Navier-Stokes system on a moving mesh, which may be used for simulation of two-phase fluid flow with the interface. The procedure consists of the following steps:

1. For the new time instance $t = t^n$ initialise the values of all dependent variables with the corresponding values from the previous time instance;
2. Define the displacement directions for the interface mesh points and the control points. Position of control points is corrected in order to correspond to the new displacement direction;
3. Start of SIMPLE procedure:
 - (a) Update pressure and velocity boundary conditions at the interface;
 - (b) Assemble and solve the discretised momentum equation (6.3) on the mesh defined with the current shape of the interface. The pressure field, face mass fluxes and volume fluxes are used from the previous (outer) iteration;
 - (c) The velocity field obtained in the previous step is used for the assembly of discretised pressure equation (6.10). After the pressure equation is solved, the new absolute mass fluxes through the cell faces are calculated. Net mass flux through the interface is generally different from zero;
 - (d) In order to compensate the net mass flux obtained in the previous step, the interface displacement is calculated using the procedure described in section 6.3.3.
 - (e) The interface points displacement is used as a boundary condition for the solution of the mesh motion problem. After mesh displacement, the new face

volume fluxes are calculated using the current points positions and the position from the previous time instance;

- (f) Convergence is checked and if the residual levels and the net mass flux through the interface do not satisfy the prescribed accuracy, the procedure is returned on step (a).
4. If the finale time instance is not reached, the procedure is returned on step 1.

The efficiency of the above described solution procedure can be substantially increased if only the interface mesh points are moved in step (e) instead of moving all mesh points. In that case, the entire mesh is moved before the start of SIMPLE procedure, according to the total interface mesh points displacement obtained in the previous time step. Thus, the mesh motion procedure is performed only once in each time step, and overall procedure is more stable because the volume fluxes of the cell faces which are not in contact with the interface remains constant during the SIMPLE procedure. This approach is possible in the case when the magnitude of the interface mesh points displacement is less than the thickness of the cells near the interface. This condition is usually satisfied when time accuracy of the results is required.

6.3.6 Conservation of volume

Volume conservation condition of the considered incompressible fluid phases depends on the satisfaction of kinematic condition at the interface. For the interface tracking procedure used in this study, volume conservation depends on the condition of zero net mass flux through the interface. Net mass flux through the interface can be reduced to an arbitrary level if a sufficient number of outer iterations is performed.

When the incompressible fluid phase B (see Fig. 6.1) is bounded by a closed boundary (without inlets or outlets), gradual reduction of the interface net mass flux during iterations can cause problems with the solution of the pressure equation. Specifically, on the B side of the interface belonging to phase B , the normal derivative of modified pressure is zero and the velocity and mass flux are specified to ensure zero net mass flux through the B side of the interface, *i.e.*

$$\dot{m}_{Bf} = \rho_B \dot{V}_{Bf}. \quad (6.64)$$

Here, \dot{V}_{Bf} is volume flux of the face Bf at the B side of the interface. Since fluid B is incompressible, in order to solve the pressure equation, the total mass flux through the B side of the interface $\sum_{Bf} \dot{m}_{Bf}$ must be exactly zero. While this total mass flux will converge to zero during the SIMPLE procedure, it will never be exactly zero. Therefore, the corrected mass flux through the B side of the interface is used in the pressure equation (6.10) as follows:

$$\dot{m}_{Bf}^c = \dot{m}_{Bf}^p - w_{Bf} \sum_{Bf} \dot{m}_{Bf}^p, \quad (6.65)$$

where \dot{m}_{Bf}^p is the mass flux through the face Bf obtained in the previous outer iteration and w_{Bf} is the weighting factor defined to ensure the mass flux correction distribution proportional to the mass fluxes distribution at side B ,

$$w_{Bf} = \frac{|\dot{m}_{Bf}^p|}{\sum_{Bf} |\dot{m}_{Bf}^p|}. \quad (6.66)$$

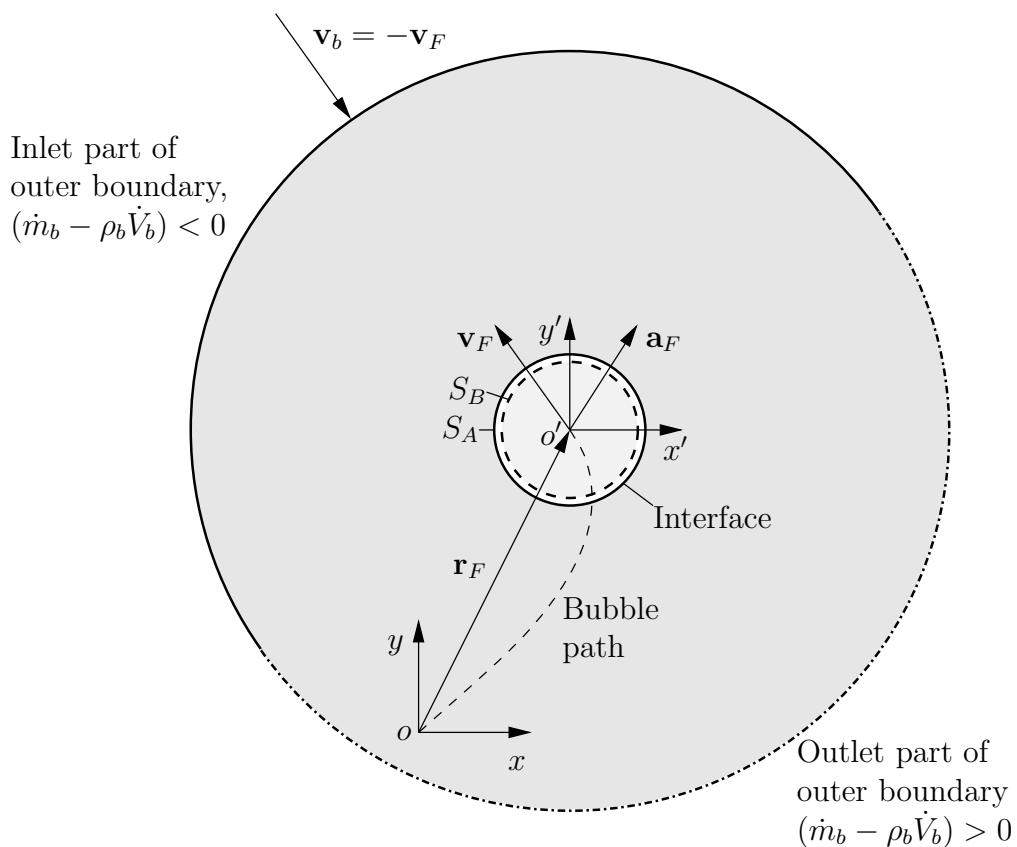
As the SIMPLE procedure advances, mass flux correction converges to zero and it does not influence the solution.

6.4 Numerical modelling of free-rising bubble

The method for numerical modelling of two-phase fluid flow with a sharp interface is defined with the final goal to simulate free-rising air bubbles in water, in the range of bubble diameter 1.3 – 6 mm. This is the flow regime where surface forces have dominant influence as described by Tomiyama [77]. The bubble motion along a zig-zag and/or a helicoidal path is accompanied by a change of bubble shape.

The above interface tracking method is limited to problems where moderate change of interface shape occurs and there is no need to change mesh topology. This implies that the bubble must stay approximately in the centre of the spatial domain during the simulation. To accomplish this, approach proposed by Rusche [69] is used, where the calculation is performed in a moving non-inertial coordinate system whose origin is attached to the centre of the bubble.

The spatial domain consisting of the bubble volume and the volume of surrounding liquid is shown on Fig. 6.7. The origin of the non-inertial coordinate system o' is placed in the centre of the bubble volume. Its position with respect to the origin o of the



Slika 6.7: Spatial domain layout for the simulation of rising bubble in a non-inertial coordinate system.

inertial coordinate system is determined by the vector \mathbf{r}_F . Velocity and acceleration of the non-inertial coordinate system are defined by the following expressions:

$$\mathbf{v}_F = \frac{d\mathbf{r}_F}{dt}, \quad (6.67)$$

$$\mathbf{a}_F = \frac{d\mathbf{v}_F}{dt}. \quad (6.68)$$

The switch away from a fixed to a moving coordinate system requires a correction of the momentum equation and its boundary conditions. One has to introduce the term which consists of the acceleration of the non-inertial coordinate system, see Batchelor [4]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) \mathbf{v} \, dS + \int_V \rho \mathbf{a}_F \, dV = \\ \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) \, dS - \int_V \nabla p_m \, dV, \end{aligned} \quad (6.69)$$

where \mathbf{v} is fluid velocity in the non-inertial coordinate system.

If a bubble is rising through a still liquid, the value of fluid velocity specified on the outer boundary of the spatial domain is equal to the negative value of the moving coordinate system velocity, $\mathbf{v}_b = -\mathbf{v}_F$. The velocity is specified only on the part of the outer boundary through which the fluid enters the domain; on the outlet part of the boundary the zero normal derivative is specified for pressure and velocity. This implies that conservation of mass at the global level must be ensured as shown in section 6.2.2.

Retaining of the moving coordinate system origin position in the bubble centre depends on the method used for the calculation of velocity and acceleration of the moving coordinate system. The procedure proposed by Rusche [69] is used in this study, where the velocity of moving coordinate system is corrected at the beginning of each time step using the following correction:

$$\Delta \mathbf{v}_F^n = (\mathbf{v}_F^n - \mathbf{v}_F^o) = \lambda_{Ff} \frac{\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_c^f}{\Delta t} + \lambda_{Fo} \frac{\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_c^o}{\Delta t}, \quad (6.70)$$

where \mathbf{r}_c is the current position vector of the bubble centre, \mathbf{r}_c^f is the position vector of the bubble centre at the beginning of simulation, \mathbf{r}_c^o is the position vector of the bubble centre from the previous time step, and λ_{Ff} and λ_{Fo} are the under-relaxation factors ($\lambda_{Ff} = \lambda_{Fo} = 0.1$, Rusche [69]). The new position and acceleration of the moving coordinate system are calculated using Eqn. (6.70) according to the following expressions:

$$\mathbf{a}_F^n = \frac{\Delta \mathbf{v}_F^n}{\Delta t}, \quad (6.71)$$

$$\mathbf{r}_F^n = \mathbf{r}_F^o + \left(\mathbf{v}_F^o + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{v}_F^n \right) \Delta t. \quad (6.72)$$

Equations (6.70 and 6.72) are at the same time used for the calculation of velocity and trajectory of the bubble centre.

Simulation of an air bubble in the water is performed assuming the incompressibility of both phases. Since air is a compressible fluid, the question about correctness of this simulation arise. One can show that air bubble which is 1 m below the water free-surface at the atmospheric conditions, increases its volume for 1 % by rising for 0.1 m. Since only "steady" motion of the bubble is considered, rise for 0.1 m is sufficient to determine the path and the velocity of the bubble and the forces which acts on the bubble surface. On the other hand, modification of the solution procedure to take into account the compressibility of the bubble is straightforward.

In the case when the effect of surfactants is considered, the surface transport equation for surfactant concentration (2.37) is solved at the beginning of each outer iteration. Newly obtained surfactant concentration field is used for calculation of new surface tension field by applying the surface equation of state (2.33).

6.5 Closure

The methodology for simulation of two-phase fluid flow with a sharp interface using the finite volume method on a moving computational mesh is described in this chapter. Solution of incompressible flow equations on moving mesh is performed using a segregated solution procedure and the SIMPLE algorithm couples the pressure and velocity. Enforcement of the kinematic and dynamic condition at the interface is performed during the SIMPLE procedure. Implementation of the dynamic condition includes the effect of variable surface tension and fluid viscosity. The dynamic condition is applied as the boundary condition on the interface. Implementation of surface tension satisfies the condition of zero total surface force on the closed surface. The kinematic condition is enforced by interface motion to maintain zero net mass flux through the interface. If at the end of SIMPLE procedure the kinematic and dynamic conditions are satisfied the accuracy of the overall solution procedure depends only on the accuracy of time and space discretisation of the governing equations.

In section 6.4, the solution procedure for two-phase fluid flow with a sharp interface is customised for numerical modelling of free-rising bubble flow. In order to maintain the bubble in the centre of the spatial domain, calculation is performed in the moving coordinate system whose origin follows the bubble centre.

Poglavlje 7

Case studies

7.1 Introduction

In previous chapters, numerical modelling methodology for simulation of two-phase fluid flow with a sharp interface. This methodology will now be tested on several 2-D and 3-D cases.

The accuracy of the free-surface shape calculation for steady inviscid fluid flow over 2-D ramp is checked in the first example. The test case is solved for both sub-critical and super-critical flow conditions, and numerical solution is compared with the analytical solution.

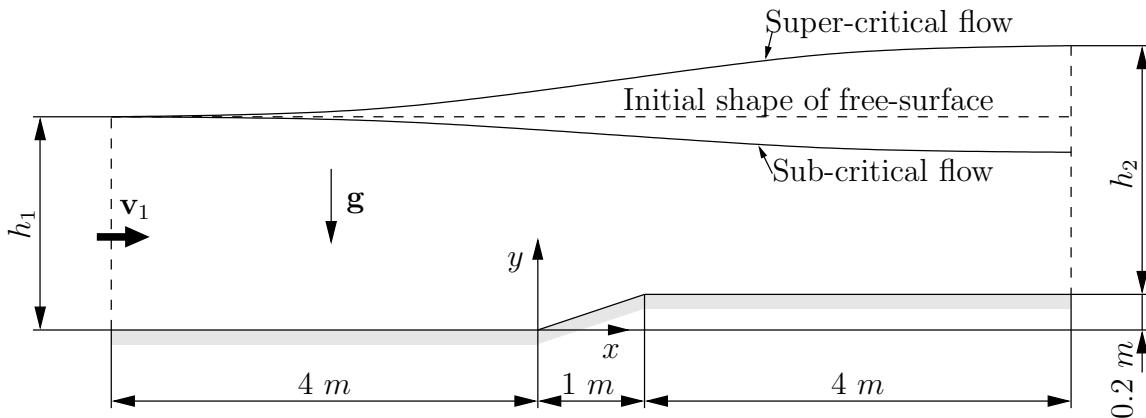
Small amplitude sloshing in a 2-D tank is used for testing the time accuracy of the methodology. Inviscid and viscous one- and two-phase fluid flow due to gravity or surface tension force is considered. The numerical solution is again compared with the analytical solution.

Finally, numerical modelling of a single free-rising air bubble in still water with clean or contaminated interface is performed. First of all, a 2-D bubble is considered. For this case there is no experimental data but mesh sensitivity study is performed and it is established that the obtained solution does not change with further mesh refinement. Simulation results for a 3-D bubble with a clean interface are compared with the latest experimental results of free-rising air bubble in purified water performed by de Vries [19]. For the case where the bubble surface is covered by surfactant molecules there are no published experimental data, but the effect of surfactants can be evaluated by comparison

with the case of clean bubble. The consumption of computational time between individual parts of the solution procedure are compared for the 3-D bubble simulation.

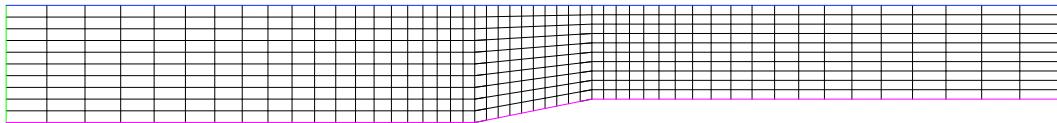
7.2 Inviscid flow over 2-D ramp

A steady inviscid fluid flow over a 2-D ramp is a standard test case for fluid flow with a free-surface. Definition of the spatial domain is shown in Fig. 7.1. Two basic flow conditions are possible: sub-critical, where the Froude number ($\text{Fr} = |\mathbf{v}_1| / \sqrt{|\mathbf{g}| h_1}$) is less than 1, and super-critical, where $\text{Fr} > 1$. Using the Bernoulli and the continuity equation, one can calculate analytically the fluid depth h_2 at the exit plane, providing that fluid velocity \mathbf{v}_1 and fluid depth h_1 are known at the inlet plane.



Slika 7.1: Spatial domain definition for steady inviscid fluid flow over 2-D ramp.

The test case is solved for the same initial and boundary conditions used in [59]: density $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$, gravity $\mathbf{g} = [0, -9.81, 0] \text{ m/s}^2$, fluid depth at the inlet plane $h_1 = 1 \text{ m}$, fluid velocity at the inlet plane for sub-critical flow $\mathbf{v}_1 = [1, 0, 0] \text{ m/s}$ ($\text{Fr} = 0.32$), and fluid velocity at the inlet plane for super-critical flow $\mathbf{v}_1 = [6, 0, 0] \text{ m/s}$ ($\text{Fr} = 1.92$). Initial velocity is equal to the inlet velocity.



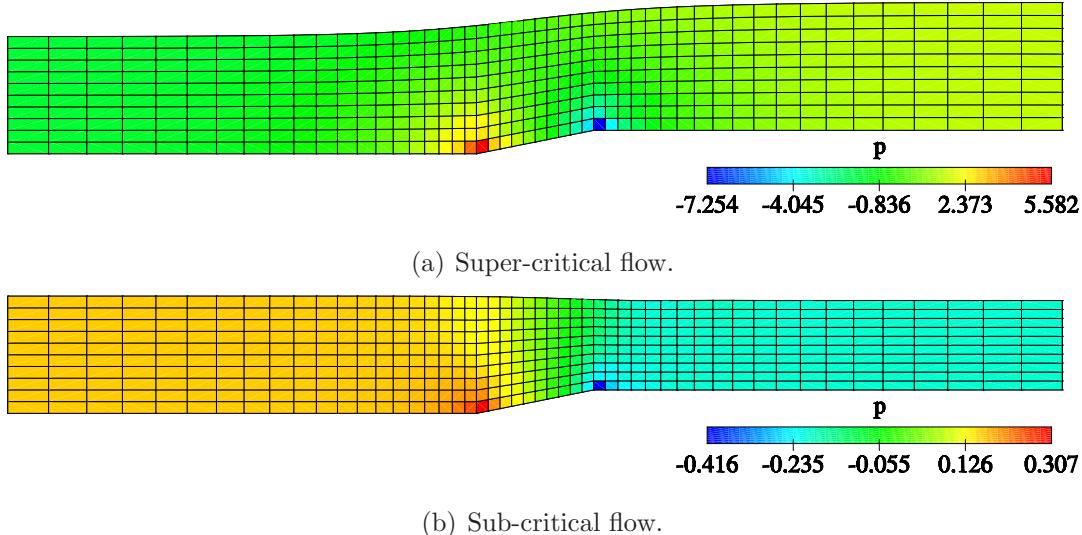
Slika 7.2: Initial computational mesh for a steady inviscid fluid flow over 2-D ramp.

The initial computational mesh is shown in Fig. 7.2. The mesh is structured and

consists of 50×10 quadrilateral cells. The mesh sensitivity study is not performed. The streamwise mesh resolution is twice as large as the one used in [59]. One should notice that the mesh actually consists one layer of hexahedral cells. The time step is set to $\Delta t = 0.05$ s for sub-critical flow, and $\Delta t = 0.01$ s for super-critical flow.

At the outlet boundary of the spatial domain, zero normal derivative is specified both for the pressure and velocity. For super-critical flow, the free-surface mesh is fixed at the inlet boundary. For sub-critical flow, the inlet free-surface points are moved according to a non-reflecting boundary condition. In order to maintain the specified fluid depth at the inlet boundary, the free-surface mesh points are moved uniformly at the end of each time step to compensate for the displacement due to the non-reflecting boundary condition.

For sub-critical flow the Gamma differencing scheme with $\beta_m = 0.25$ [49] is used for the discretisation of convection term in momentum equation. For super-critical flow, the steady state is obtained using a blended differencing scheme with the blending factor $\gamma = 0.7$.



Slika 7.3: Final computational mesh for steady inviscid flow over a 2-D ramp.

The final shape of the computational mesh (free-surface) for sub-critical and super-critical flow is shown in Fig. 7.3. The pressure distribution is shown together with the corresponding mesh. Comparison of calculated fluid depths at the outlet boundary with the corresponding analytical values is shown in table 7.1. Somewhat better agreement in comparison with the results in [59] is due to larger mesh resolution in the streamwise

direction.

Tablica 7.1: Comparison of calculated free-surface height (h_2) at the outlet boundary with the analytical one ($h_{a,2}$).

Flow conditions	$h_{a,2}$	h_2	Difference
Super-critical flow	1.08973 m	1.09019 m	0.04 %
Sub-critical flow	0.76354 m	0.76284 m	0.09 %

7.3 Small amplitude sloshing in 2-D tank

2-D tank sloshing is one of standard test cases for unsteady fluid flow with an interface/free-surface. Domain definition is shown in Fig. 7.4. The initial shape of the interface is defined by the following expression:

$$y(x) = 1 + a_0 \sin[\pi(0.5 - x)], \quad (7.1)$$

where a_0 is initial wave amplitude equal to 0.01 m in present calculations. Since small amplitude sloshing is considered, linear theory gives the analytical solution for some special conditions.

The sloshing test case is considered for three basic flow conditions:

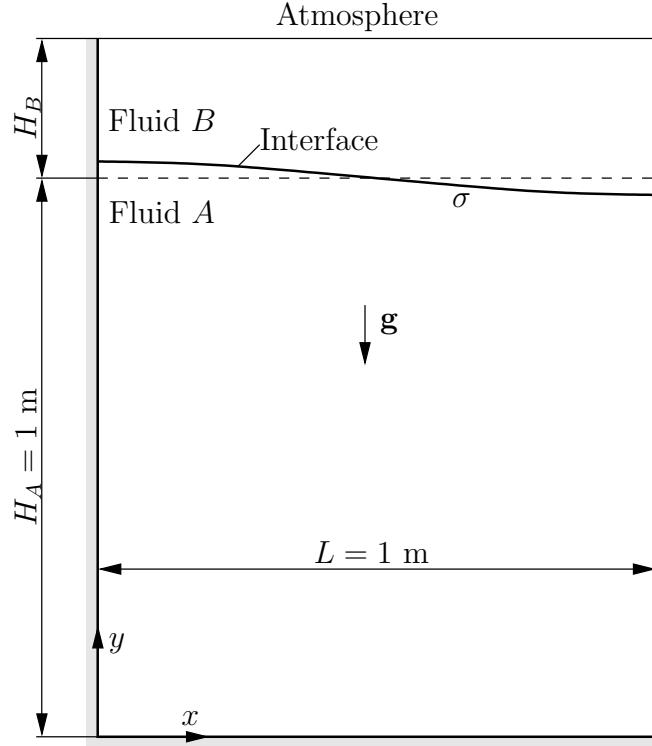
- Flow of one inviscid fluid phase due to gravity force. In this case, linear theory gives the following analytical expression for the natural period of wave oscillation:

$$T = \sqrt{\frac{4\pi^2}{|\mathbf{g}|k \tanh(kH)}}, \quad (7.2)$$

where $k = \frac{2\pi}{2L}$ is wave number.

- Flow of two viscous fluid phases due to gravity force. For the case when kinematic viscosities of the two fluid phases are equal ($\nu = \nu_A = \nu_B$), Prosperetti [66] has derived the analytical expression which determines the time dependence of wave amplitude:

$$\begin{aligned} a(t) = & \frac{4(1-4\beta)\nu^2 k^4}{8(1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\sqrt{\nu k^2 t}) \\ & + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \exp[(z_i^2 - \nu k^2)t] \operatorname{erfc}(z_i \sqrt{t}), \end{aligned} \quad (7.3)$$



Slika 7.4: Definition of spatial domain for small amplitude sloshing in 2-D tank.

where z_i are the four roots of the following algebraic equation:

$$\begin{aligned} z^4 - 4\beta\sqrt{k^2\nu}z^3 + 2(1-6\beta)k^2\nu z^2 \\ + 4(1-3\beta)\sqrt{(k^2\nu)^3}z + (1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0, \end{aligned} \quad (7.4)$$

and $Z_1 = (z_2-z_1)(z_3-z_1)(z_4-z_1)$, with Z_2, Z_3 i Z_4 obtained by circular permutation of indices. Dimensionless factor β is defined by the expression

$$\beta = \frac{\rho_A \rho_B}{(\rho_A + \rho_B)^2}, \quad (7.5)$$

and inviscid natural frequency is defined as:

$$\omega_0^2 = \left[\frac{\rho_A - \rho_B}{\rho_A + \rho_B} |\mathbf{g}| k + \frac{\sigma}{\rho_A + \rho_B} k^3 \right] \tanh(kH). \quad (7.6)$$

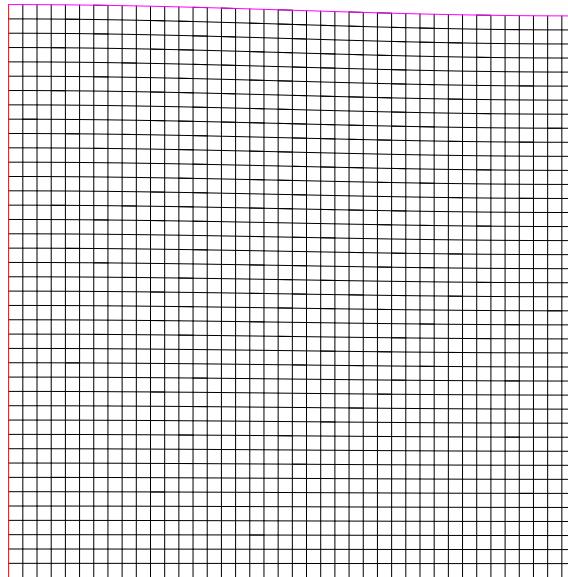
- Flow of one viscous fluid phase due to surface tension. For this case, time dependence of wave amplitude is also defined by Prosperetti's analytical expression.

In all cases, the slip boundary condition is used for the velocity and zero normal derivative for the pressure at tank walls. Mesh motion is performed using the Laplace mesh motion equation with constant diffusivity.

7.3.1 Sloshing of one inviscid fluid phase due to gravity force

Since the fluid phase is considered inviscid, the wave amplitude must stay constant in time, *i.e.* the wave should not be damped. Because of that, this test case is useful for the validation of numerical method in respect to numerical diffusion introduced into the solution due to inaccuracy of the applied temporal and spatial discretisation.

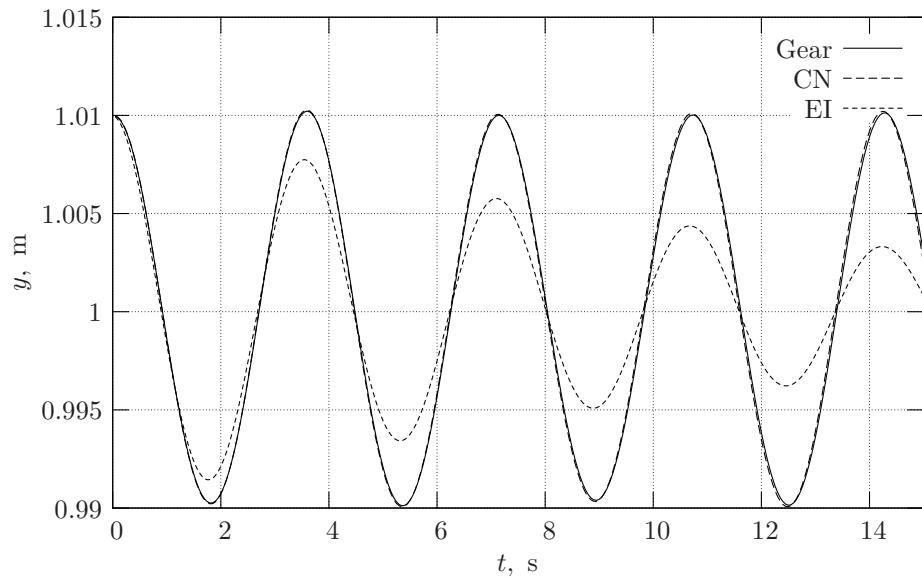
The test case is solved for gravity $\mathbf{g} = [0, -1, 0]$ m/s², which corresponding to the natural period of wave oscillation 3.55 s according to Eqn. (7.2). The convection term is discretised using the Gamma discretisation scheme with $\beta_m = 0.25$ [49]. Temporal discretisation is performed using Crank-Nicolson (CN), Gear and implicit Euler (EI) method.



Slika 7.5: Initial computation mesh for small amplitude sloshing in a 2-D tank with one inviscid fluid phase.

Fig. 7.5 shows the initial computational mesh consisting of 40×40 quadrilateral cells. With this mesh resolution, the numerical solution does not significantly react on further mesh refinement. For different time discretisation method, the calculation is performed with the time step $\Delta t = 0.05$ s, meaning that one period of wave oscillation is split into 71 time steps.

The free-surface height at the left wall as a function of time is shown in Fig. 7.6 for three temporal discretisation methods. When implicit Euler method is used, wave amplitude decays significantly with time. Only when the Gear or Crank-Nicolson method is used the



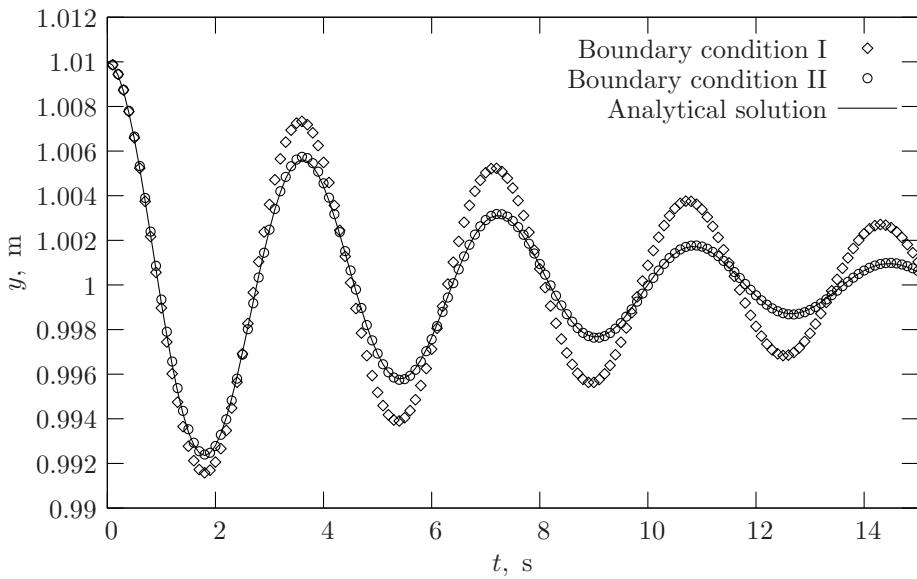
Slika 7.6: The free-surface height at the left wall of the tank as a function of time for different temporal discretisation methods.

amplitude of wave oscillation remains constant. The Crank-Nicolson method gives almost identical results as the Gear method. The calculated natural period of wave oscillation is for all three temporal discretisation methods 3.56 s, which corresponds to the error of 0.3 %.

7.3.2 Sloshing of a viscous fluid due to gravity force

The case with one viscous fluid phase is analysed for two types of boundary condition at the free-surface. For the first type of boundary condition (I), the constant pressure and zero normal velocity derivative are specified at the free-surface, while for the second type (II), the modified pressure and normal velocity derivative are calculated according to Eqs. (6.27 and 6.28). The computational mesh and discretisation of the convection term are the same as in the previous case, while temporal discretisation is performed using the Gear method with the time step of $\Delta t = 0.02$ s. Kinematic viscosity of the fluid phase is $\nu_A = 0.01$ m²/s, and gravity is specified as $\mathbf{g} = [0, -1, 0]$ m/s².

Figure 7.7 shows the comparison of calculated free-surface height at the left wall of the tank and the corresponding analytical value obtained according to Prosperetti's analytical expression [66]. When the viscosity effect is not included in the free-surface boundary condition, there is significant discrepancy between the calculated value of free-surface



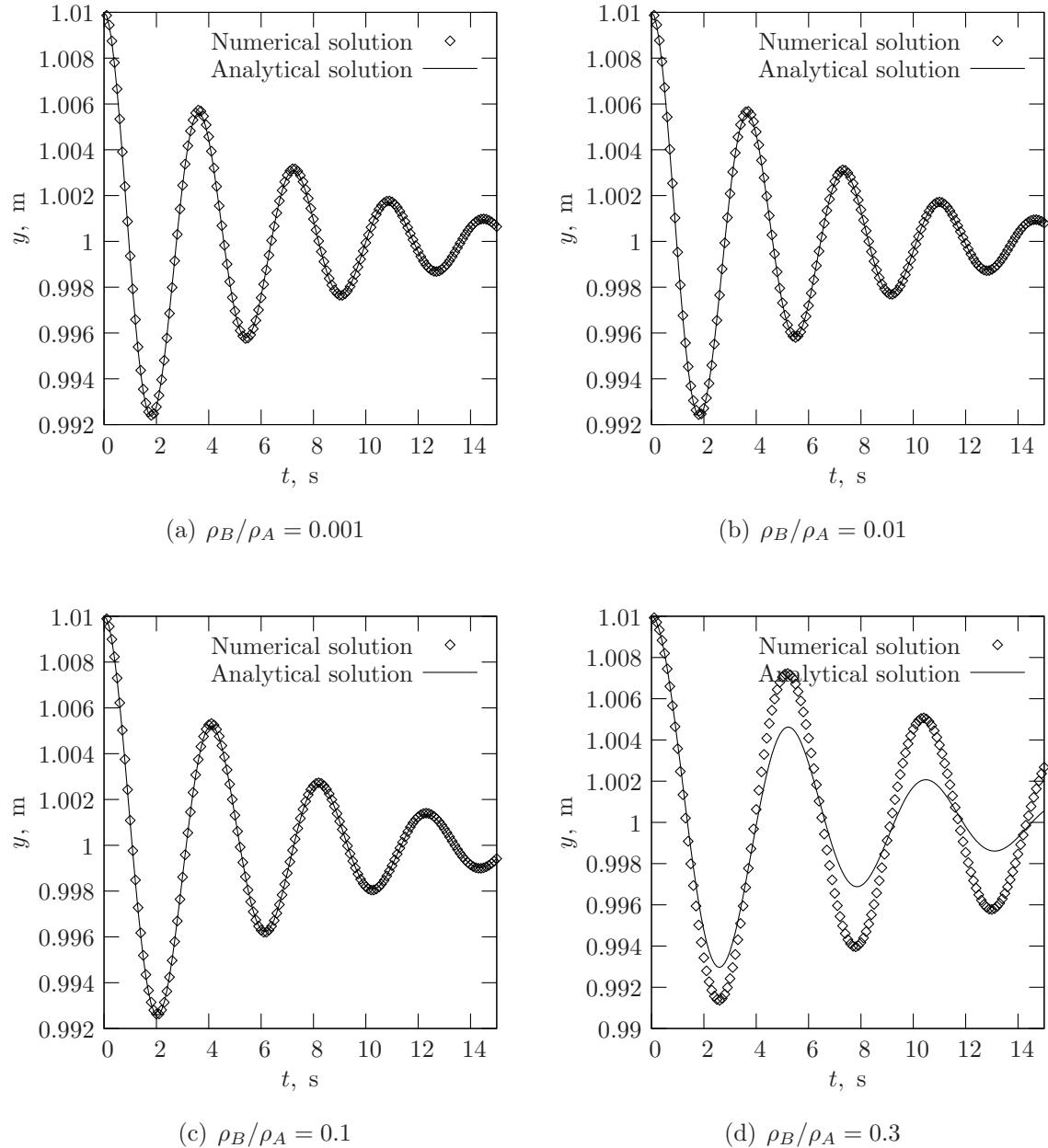
Slika 7.7: Free-surface height at the left wall of the tank as a function of time for two types of boundary condition at the free-surface.

height and the analytical value. The influence on wave oscillation frequency is somewhat smaller.

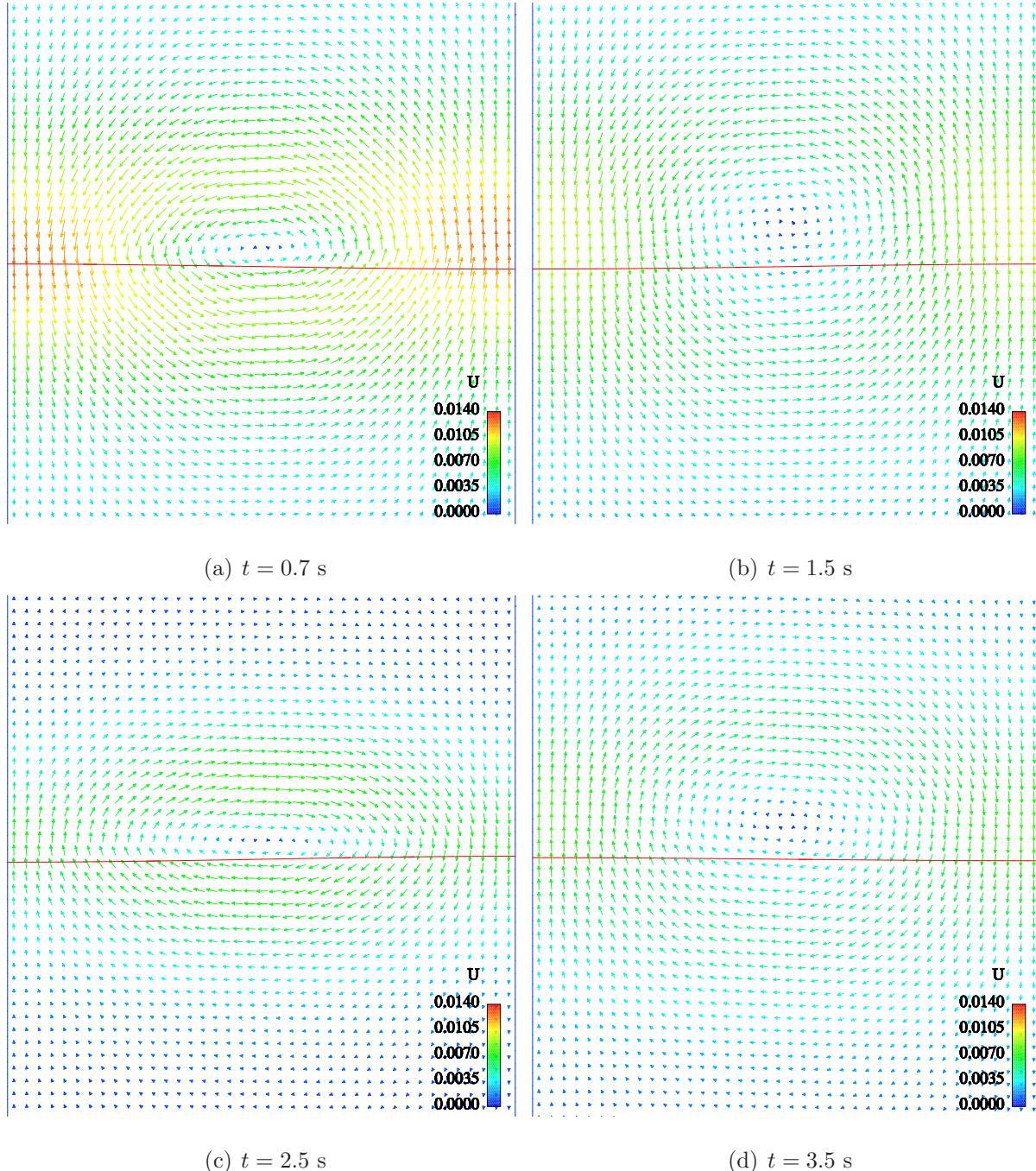
We shall continue with the analysis of small amplitude sloshing in 2-D tank with the two viscous fluid phases of equal kinematic viscosities ($\nu_A = \nu_B = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$), for different density ratios ρ_B/ρ_A . The height of the fluid phase B is same as the height of the fluid phase A ($H_B = H_A$). The computational mesh in the fluid phase B consists 40×40 quadrilateral cells, same as the mesh in the fluid phase A , shown in Fig. 7.5.

Comparison of calculated and analytical [66] value of the interface height at the left wall of the tank for different density ratio is shown in Fig. 7.8. One can deduce that applied explicit coupling between the phases flows produces satisfactory results for density ratio $\rho_B/\rho_A \leq 0.1$. Figure 7.9 shows the velocity vectors near the interface for density ratio $\rho_B/\rho_A = 0.1$, at four time instances in the first period of wave oscillation.

Fig. 7.8(d) shows that there is a significant discrepancy between numerical and analytical solution, when density ration is $\rho_B/\rho_A = 0.3$. One should look for reason for this discrepancy in the coupling procedure between the phases. The value of the modified pressure specified on side A of the interface is transferred from side B , while the pressure at side B is calculated according to zero normal pressure derivative boundary condition. When density ratio approaches 1, the normal pressure derivative on the two sides of the



Slika 7.8: Interface height at the left wall of the tank as a function of time for different fluid density ratio.

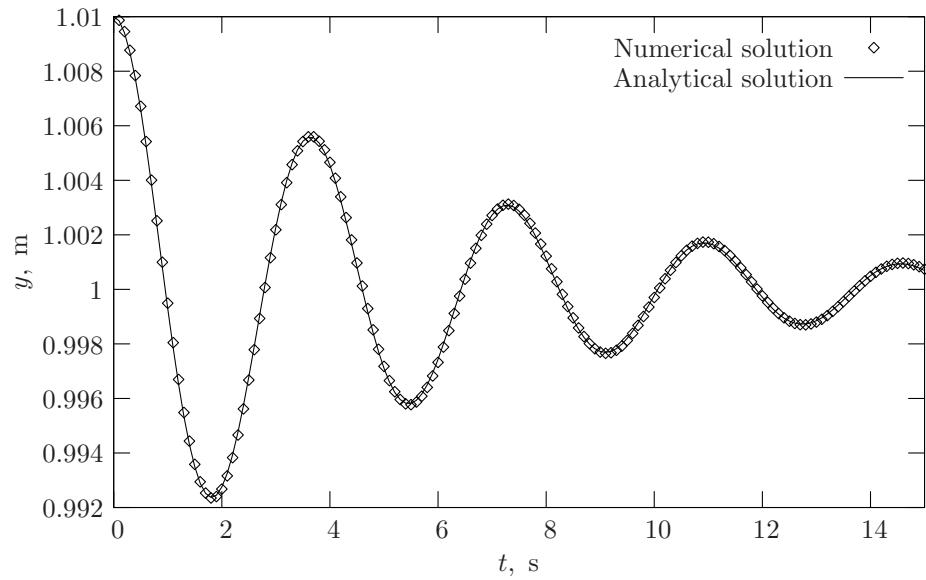


Slika 7.9: Velocity vectors for small amplitude sloshing in a 2-D tank for fluid density ratio $\rho_B/\rho_A = 0.1$.

interface converges to the same value, generally different from zero. Thus, the poor results obtained for increased density ratios are a consequence of incorrect assumption of zero normal pressure derivative at side B of the interface. From the results obtained for smaller density ratio, $\rho_B/\rho_A \leq 0.1$, one can deduce the assumption of zero normal pressure derivative at side B of the interface is justified. When larger density ratios are considered, the problem of solution convergence also arise: with the increase of density ratio, the dynamic influence of fluid phase B is increasing causing convergence problems when explicit coupling is used.

7.3.3 Sloshing of one viscous fluid phase due to surface tension

In this section, small amplitude sloshing of one viscous fluid phase in 2-D tank due to surface tension alone is considered. Computational mesh and discretisation of the convection term are the same as above, while the Gear method with time step $\Delta t = 0.02$ s is used for temporal discretisation. The kinematic viscosity is set to $\nu_A = 0.01$ m²/s, and surface tension is $\sigma = 0.1$ N/m.



Slika 7.10: Free-surface height at the left wall as a function of time for small amplitude sloshing under the action of surface tension force.

Figure 7.10 shows comparison of calculated and analytical (Prosperetti [66]) value of free-surface height at the left wall as a function of time. Agreement between numerical and analytical solution is satisfactory.

Rabier and Medale [67] have implemented the surface tension force with the local curvature of the free-surface calculated using quadratic approximation. The results of the same test case shows that their approach in surface tension implementation requires much larger mesh resolution along the free-surface than the approach used in this study. This is because the proposed curvature calculation procedure generates smooth surface tension force without spatial oscillations, regardless of mesh resolution along the interface/free-surface. Thus, the problem of free-surface instability due to "parasitic currents" is significantly reduced.

7.4 Rising bubble in a still liquid

Direct numerical simulation of 2-D and 3-D air bubble rising through still water is performed using the methodology described in chapter 6. Two basic cases are considered:

- The bubble surface is clean during the simulation;
- The bubble surface is polluted by the molecules of insoluble surfactant. Total amount of surfactant on the bubble surface is kept constant during the simulation.

In reality, the total amount of surfactant on the gas-liquid interface will not be constant. Surfactant is adsorbed or desorbed on the interface from the surrounding liquid phase. The adsorption/desorption process is often mathematically described by the Langmuir kinetic law (see Cuenot, Magnaudet and Spennato [16]). In order to take into account all surfactant transport processes, one would also have to solve the surfactant transport equation in the bulk. The adsorption/desorption process is included into the surface transport equation through surface source/sink term, while in the volume transport equation the balance of the surfactant is defined through the boundary condition at the interface. In this study, the surfactant is assumed to be insoluble and transport of the surfactant is neglected in the bulk. The case of insoluble surfactant corresponds to the physical situation where the time scale for surfactant adsorption is very slow compared to convection time scale.

The properties of water and air at 20 °C are used. Gravity force is set to $\mathbf{g} = [0, -9.81, 0]$ m/s² for the 2-D case and $\mathbf{g} = [0, 0, -9.81]$ m/s² for the 3-D case. Surfactant

has the following properties: saturated concentration $\Phi_\infty = 5 \times 10^{-6} \text{ mol/m}^2$ and surface diffusivity $\Gamma_\Phi = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Uniform surfactant concentration at the beginning of the simulation is $\Phi = 1 \times 10^{-7} \text{ mol/m}^2$. The surfactant with these properties is used by Cuenot, Magnaudet and Spennato [16] in their numerical experiment. Surface tension is calculated from surfactant concentration according to Eqn. (2.33).

The surface transport equation of surfactant is solved using the finite area method described in chapter 5. The convection term in surface transport equation is discretised using the Gamma scheme with $\beta_m = 0.25$ [49], and temporal discretisation is performed using Gear method.

In section 6.4 the mathematical model and interface tracking method are customised for numerical modelling of a free-rising bubble. The spatial domain is shown in Fig. 6.7. In all analysed cases, radius of the outer boundary is ten times greater than the bubble radius. Such outer boundary radius is a compromise between mesh size and influence of the outer boundary position on the solution. The initial bubble shape is circular in 2-D and spherical in 3-D.

Interface mesh points are moved in the direction of the interface normal vector from the previous time step. The mesh motion during the bubble deformation is performed using the Laplace mesh motion equation with variable diffusion coefficient defined by Eqn. (4.29).

The convection term in the momentum equation is discretised using the Gamma scheme with $\beta_m = 0.25$ [49]. The temporal discretisation is performed using the Gear method, and time step size is selected such to ensure Courant number lower than 0.5 when steady state is reached.

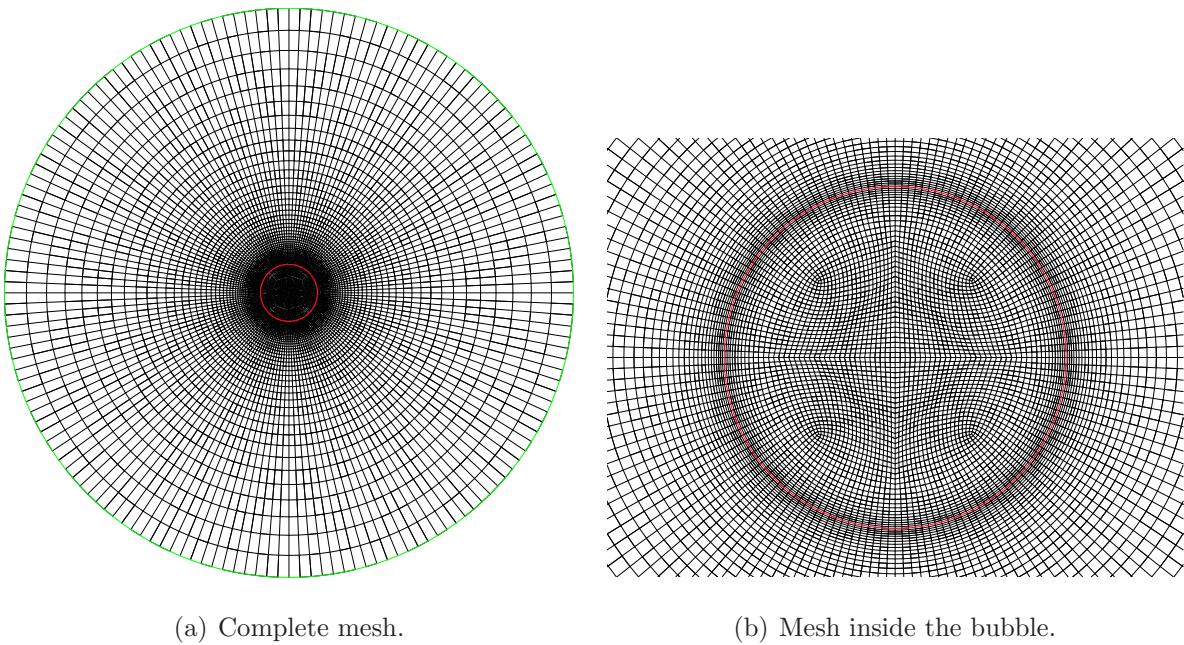
7.4.1 2-D bubble

Simulation of a 2-D bubble with a clean and contaminated surface is performed. The bubble radius $r_b = 0.75 \text{ mm}$ is selected to ensure steady state deformation which is comparable with the deformation of 3-D bubble for which the results of the simulation will be presented in the next section.

The 2-D bubble, of course, is not physical because it is not possible to achieve the stable cylindrical shape of the bubble. This unreal physical situation is chosen for several

reasons:

- The same physical process is taking place as in the case of a 3-D bubble. During the acceleration of the bubble, the bubble shape deforms until balance between viscous, inertial and surface tension forces is reached. The effect of surfactants is also comparable with the 3-D case, since in both cases the gradient of the surface tension arises due to nonuniform distribution of surfactants on the interface;
- The size of the computational mesh is much smaller in the 2-D case and testing of the solution procedure is much faster.

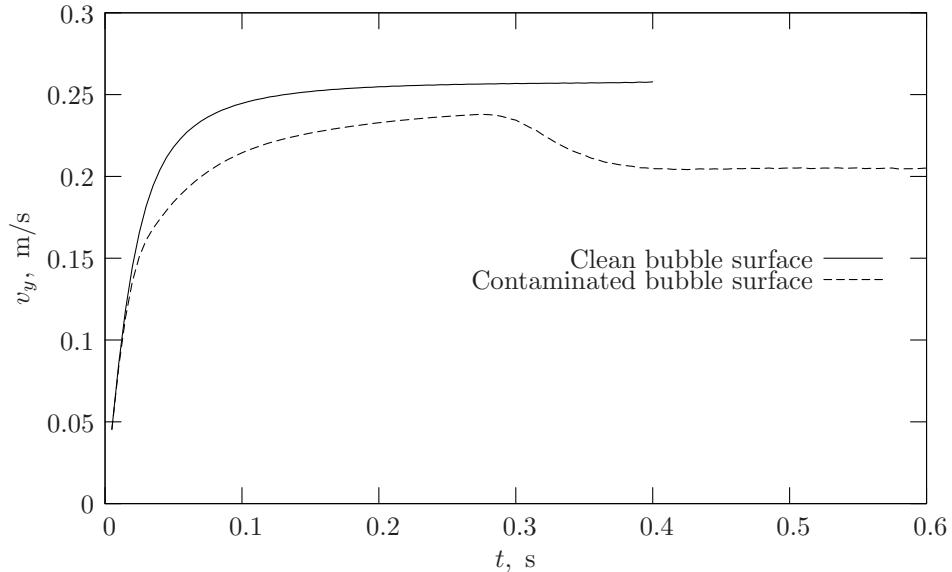


Slika 7.11: Initial computational mesh for the simulation of a 2-D air bubble rising through still water.

The initial computational mesh is shown in Fig. 7.11. The mesh consists 12 500 quadrilateral cells. The size of the cells near the interface is $0.01 r_b$ normal to the interface and $0.04 r_b$ along the interface. The mesh sensitivity study has shown that further increase of mesh resolution does not cause significant change of the numerical results.

While rising, the bubble changes its shape until steady state rising velocity is reached. For two considered cases the rising velocity of the 2-D bubble as a function of time is shown in Fig. 7.12. In the case of clean bubble surface, the shape of the bubble becomes

unstable approximately after $t = 0.4$ s, as opposed to the case with the bubble surface occupied by the surfactant. Presence of the surfactant results in a decreased rising velocity compared with the case where the bubble surface is clean.

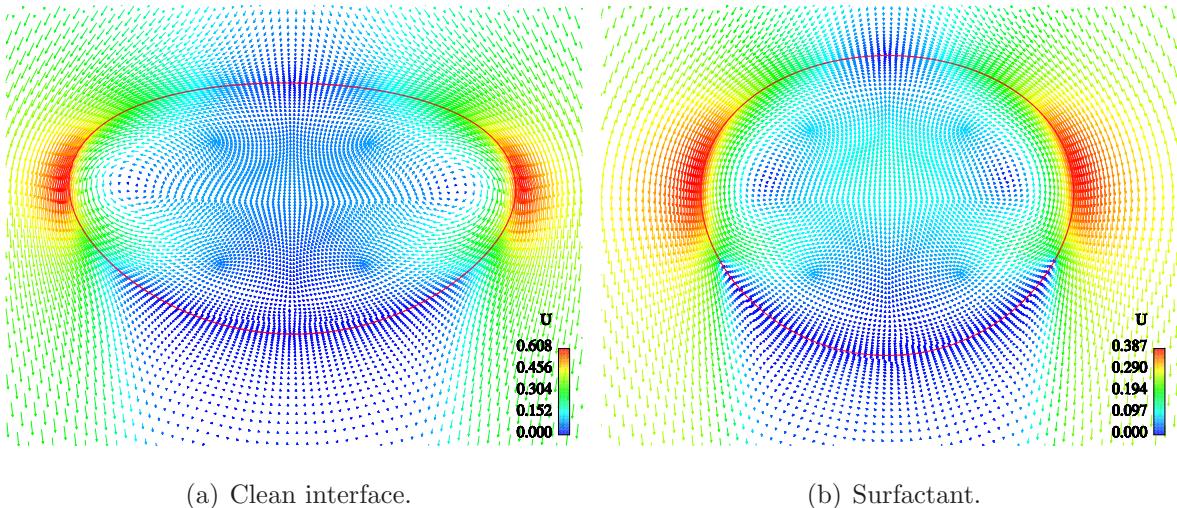


Slika 7.12: Rising velocity of a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm as a function of time for a clean and contaminated bubble surface.

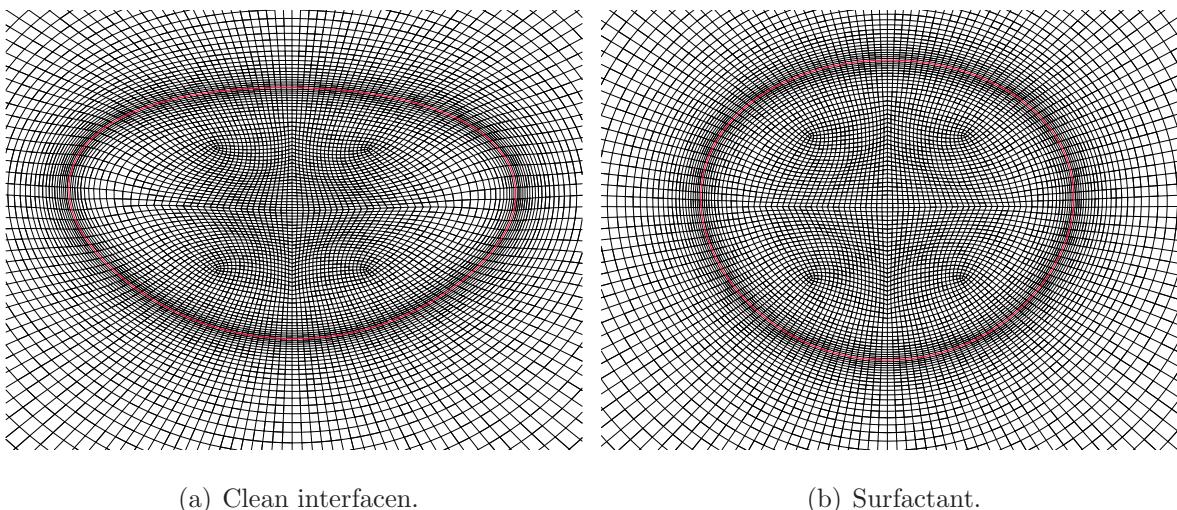
Velocity vectors outside and inside of the bubble are shown in Fig. 7.13 at time instance $t = 0.4$ s, when in both cases the steady rising velocity is reached. The red line represents the bubble surface. Ratio of major and minor semi-axes of the bubble is 1.75 for the clean bubble surface and 1.24 for the bubble surface occupied by the surfactant. In both cases one can see the two counter-rotating vortices behind the bubble, meaning that separation of the boundary layer occurs at the bubble surface. As expected, earlier separation occurs in the case with bubble surface occupied with the surfactant because the rear part of the bubble behaves as a solid wall.

From the difference in rising velocity for a clean and contaminated bubble surface one can see the significant influence of surfactants on bubble motion, what is in agreement with the experimental results (Zhang and Finch [87]).

Figure 7.14 shows the deformed computational meshes at $t = 0.4$ s for two bubbles. One can notice that the thickness of the cells near the interface is preserved during the simulation. This is accomplished by the variable diffusion coefficient in the mesh motion equation, which is inversely proportional to the distance from the moving boundary.

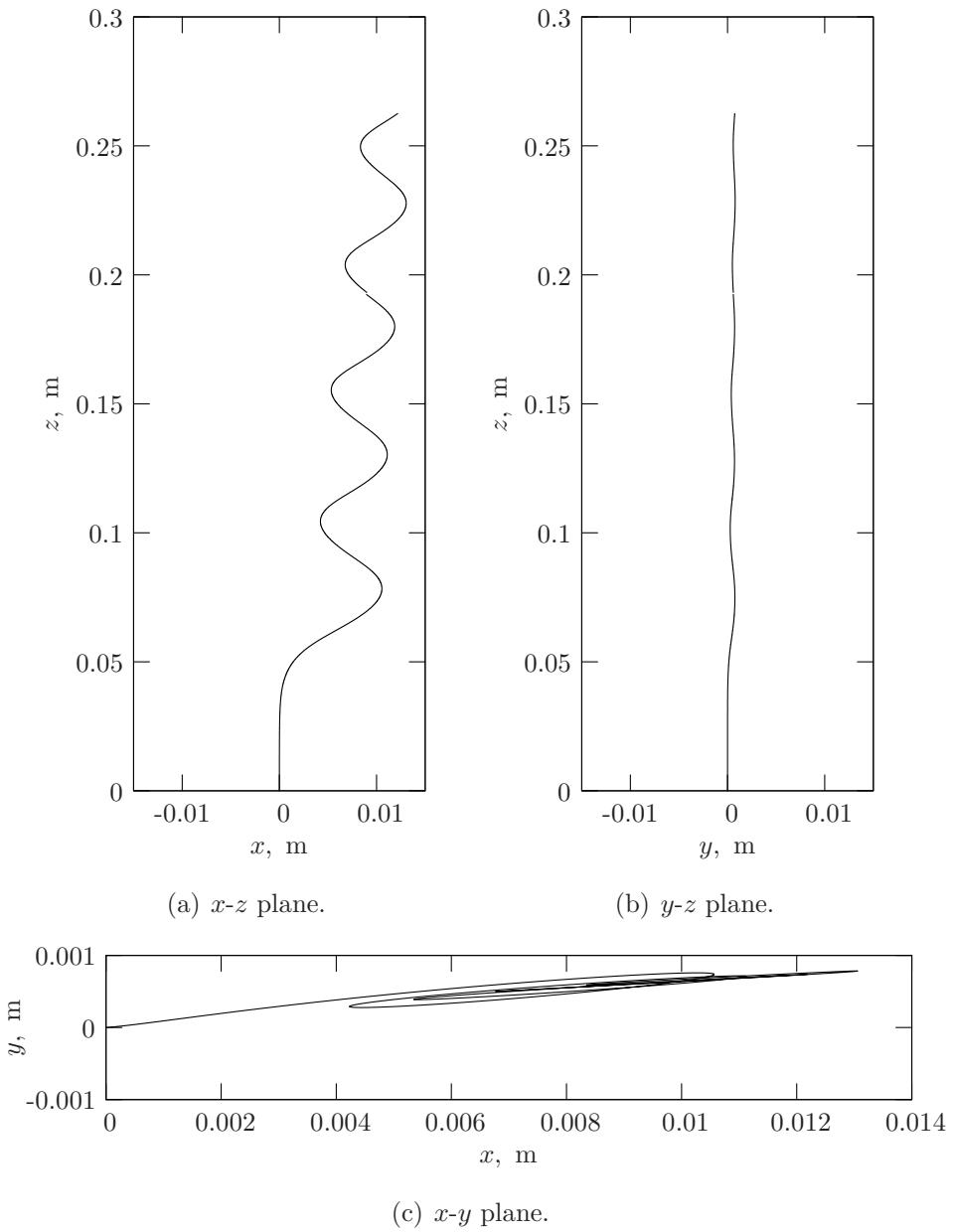


Slika 7.13: Velocity vectors for a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm in still water with a clean and contaminated interface at $t = 0.4$ s.



Slika 7.14: Deformed computational mesh for a 2-D air bubble of radius $r_b = 0.75$ mm in still water with a clean and contaminated interface at $t = 0.4$ s.

7.4.2 3-D bubble



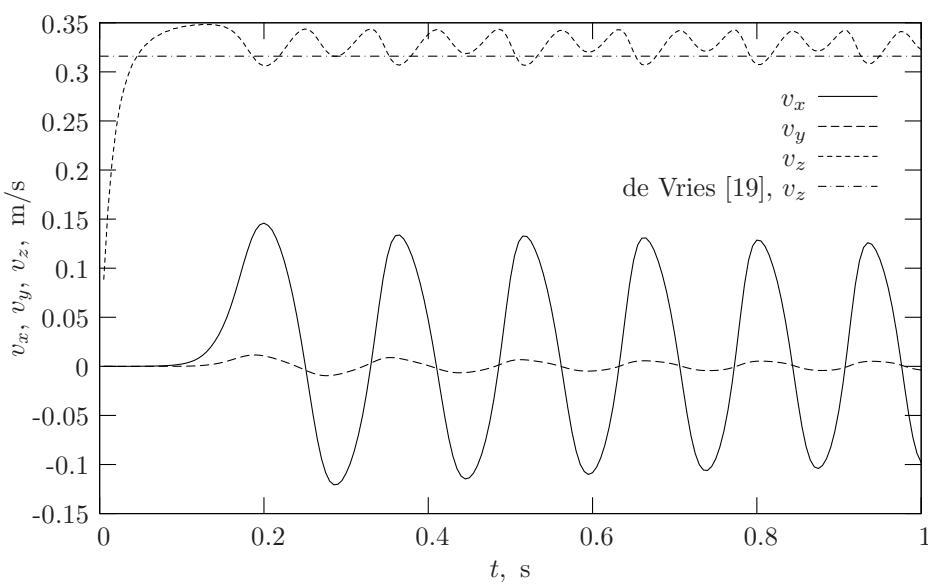
Slika 7.15: The trajectory of a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean interface.

Direct numerical simulation is performed for the rising 3-D air bubble in still water with a clean and contaminated interface. Radius of undeformed bubble is $r_b = 1$ mm.

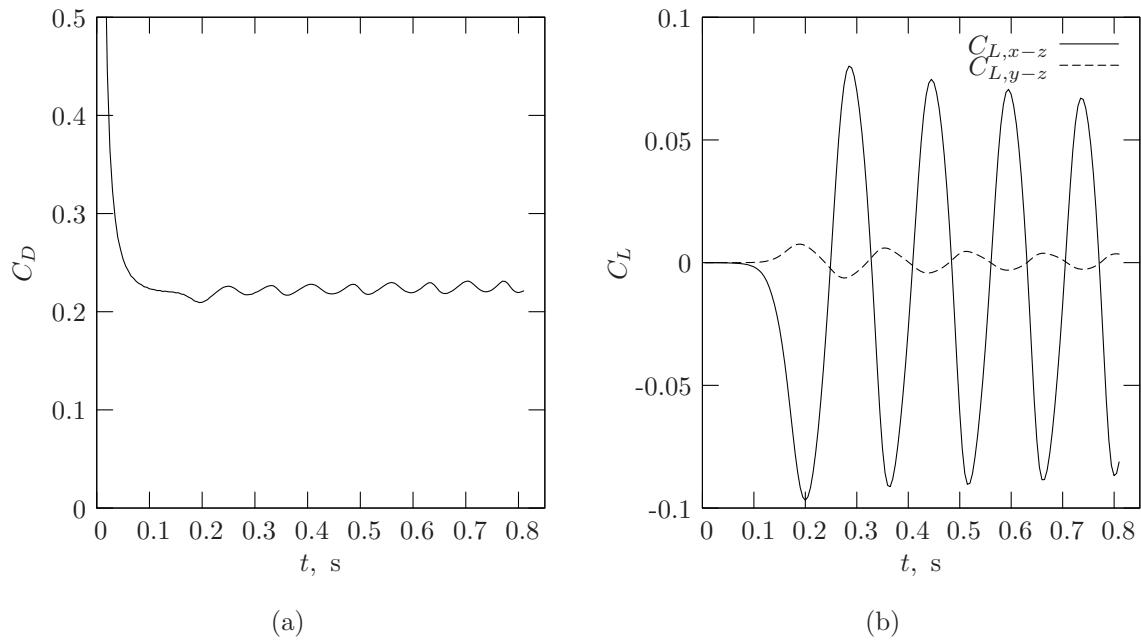
The computational mesh is shown in Fig. 4.14 in section 4.5.2. The size of cells near the interface is $0.02 r_b$ in the normal direction and $0.08 r_b$ along the interface. The mesh consists of 113 600 hexahedral cells, and the surface mesh on the interface consists of 2400

quadrilateral finite areas. Blanco and Magnaudet [9] have performed a mesh sensitivity study for numerical modelling of axisymmetric bubble of fixed shape in the range of Reynolds number $\text{Re} < 1000$. The analysis has shown that the thickness of the cells near the interface must be lower than $0.01 r_b$, in order to reduce the drag calculation error to less than 1 %. The mesh which satisfies these conditions has been considered and consists 561 920 cells. Because of limited computational resources, the mesh with lower resolution is used. During the simulation, constant time step size $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s is used.

Figure 7.15 shows the bubble trajectory in three coordinate planes. The bubble moves along a zig-zag trajectory in the plane which approximately coincides with the x - z coordinate plane. This is in agreement with the experimental results obtained by de Vries [19]. Rusche [69] has simulated the rising bubble using the interface capturing method similar to that developed by Ubbink [80]. One can see from the results obtained by Rusche [69] that a bubble of radius $r_b = 1$ mm moves along a zig-zag trajectory but there is a constant deflection of the bubble perpendicular to the plane of zig-zag motion. This is because in the applied interface capturing method one can not satisfy the zero total surface force condition on the closed surface. Because of that, there exist a resultant side force acting on the bubble, which is not real and which do not exist when interface tracking method and corresponding surface tension implementation developed in this study is used.



Slika 7.16: Velocity of the bubble centre as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean bubble surface.



Slika 7.17: Drag and lift coefficient as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water with a clean bubble surface.

Components of bubble centre velocity as a function of time is shown in Fig. 7.16. One can see that steady state motion of the bubble is reached. The average raising velocity of the bubble is $v_z = 0.325$ m/s. De Vries [19] (see de Vries, Biesheuvel i Wijngaarden [20]) performed the experiment with the air bubble of radius $r_b = 1$ mm in purified water. In the typical experiment the measured average raising velocity is $v_z = 0.316$ m/s. The maximal lift force is estimated on $F_L = 2.4 \times 10^{-5}$ N, which corresponds to the lift coefficient¹ $C_L = 0.12$. Figure 7.17 shows the drag and lift coefficient as a function of time for the simulated bubble. The maximal value of lift coefficient differs approximately 30 % from the value obtained experimentally by de Vries [19]. One of the reasons for this disagreement is surely in insufficient mesh resolution. However the value of lift force obtained experimentally is also questionable because it is not directly measured but

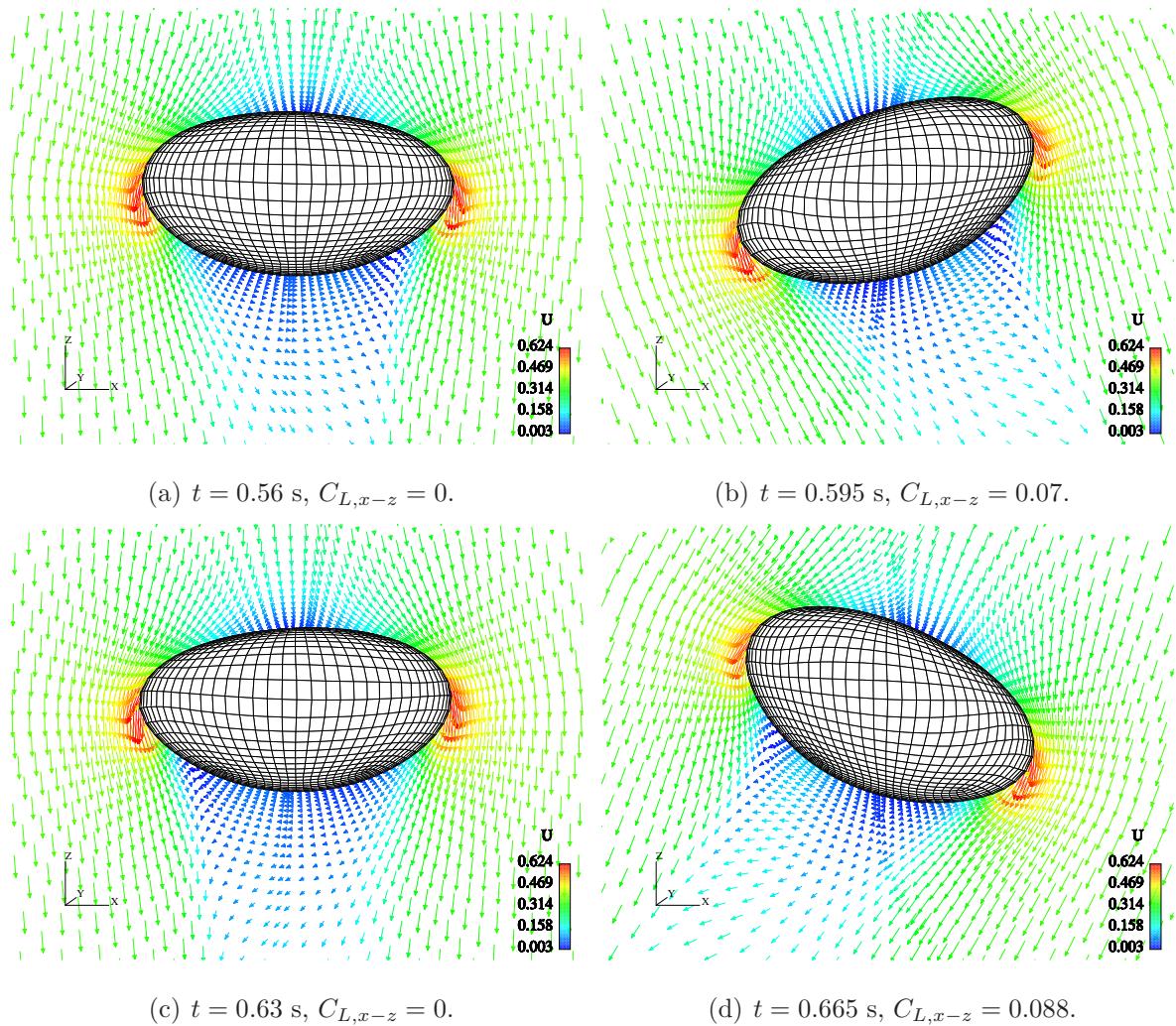
¹The drag and lift coefficients are calculated according the following expressions:

$$C_L = \frac{F_L}{0.5\rho_A v_b^2 r_b^2 \pi}, \quad (7.7)$$

$$C_D = \frac{F_D}{0.5\rho_A v_b^2 r_b^2 \pi}, \quad (7.8)$$

where F_L is the lift force, F_D is the drag force, v_b is the magnitude of bubble centre velocity, and r_b is the undeformed bubble radius. The lift force is perpendicular to the bubble motion direction and the drag force is parallel to it.

estimated from wake visualisation. The average value of drag coefficient is $C_D = 0.22$, approximately 20 % higher value than the value of the drag coefficient calculated by Blanco i Magnaudet [9], for the same Reynolds number but for an axisymmetric bubble of fixed ellipsoidal shape. This difference could partially be a consequence of insufficient mesh resolution used in the present calculation, indicated by the preliminary results obtained on the finer mesh.

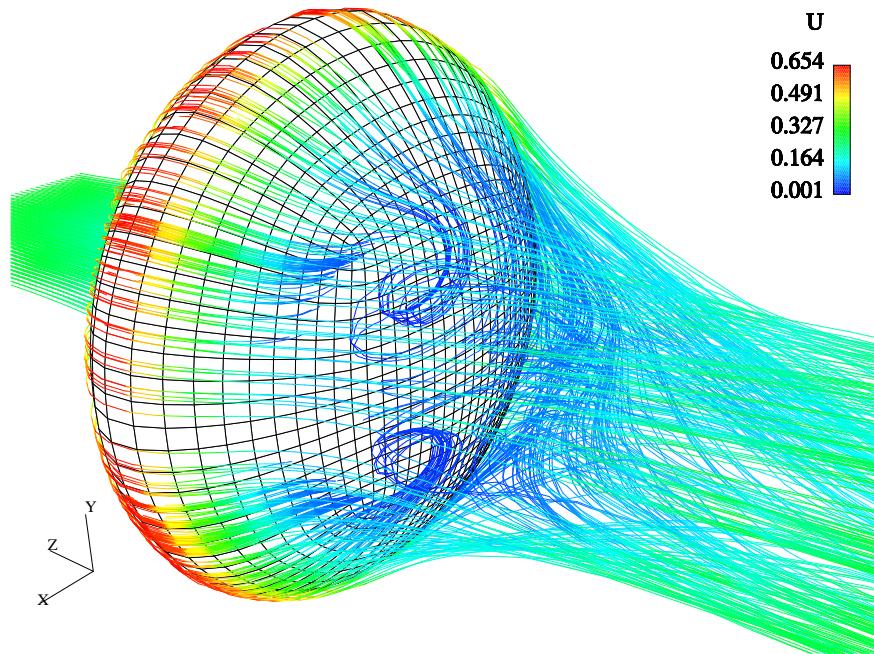


Slika 7.18: Velocity vectors in the $x-z$ plane crossing the 3-D bubble centre. The case with clean bubble surface.

Figure 7.18 shows the bubble shape and velocity vectors in the $x-z$ plane crossing the bubble centre, for extremes of lift force. One should notice that the lift force is maximal when the curvature of bubble trajectory equals zero. The bubble shape is approximately axisymmetric but deviates from the shape of an axisymmetric ellipsoid.

The path lines behind the bubble are shown in Fig. 7.19. One can notice the existence of a double-threaded wake which is symmetric across the $y-z$ plane crossing the bubble centre. This phenomenon is demonstrated by the visualisation of bubble wake performed by de Vries [19].

In Figs. 7.18 and 7.19 one can also notice the insufficient mesh resolution particularly on the part of the bubble surface where the curvature is maximal. This should be taken into account when the analysis of the numerical results are performed.

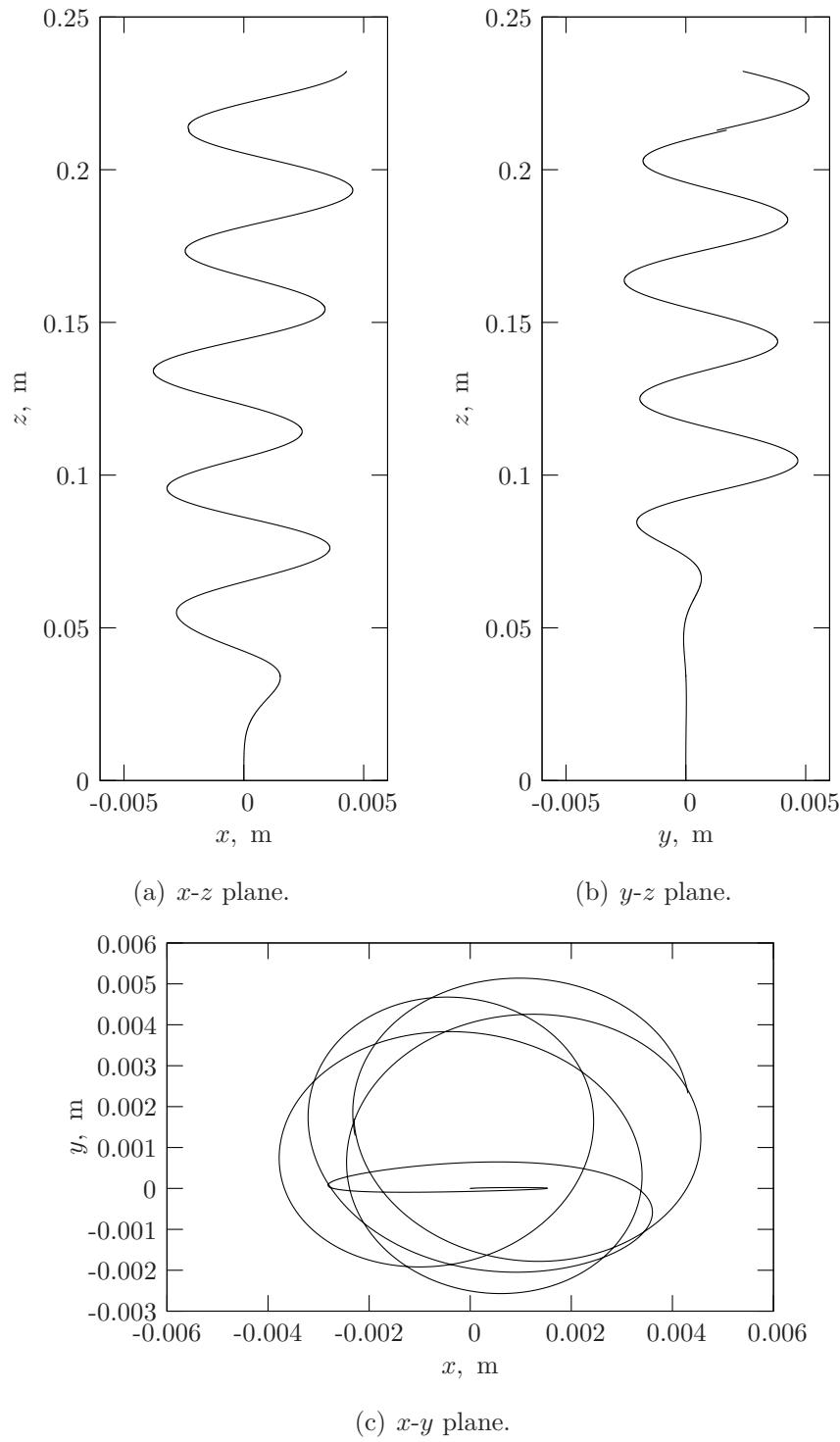


Slika 7.19: Path lines behind the rising 3-D air bubble in still water for clean bubble surface, at $t = 0.56$ s when the lift force equals zero ($C_{L,x-z} = 0$).

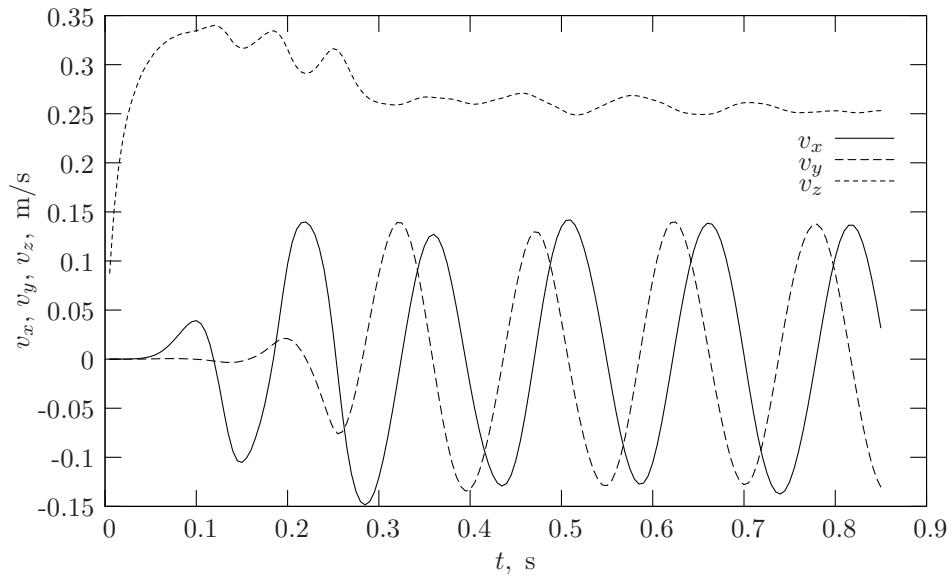
The effect of surfactants

A simulation is performed for the rising 3-D air bubble of radius $r_b = 1$ mm in still water, with the bubble surface covered by insoluble surfactant. At the beginning of calculation the surfactant is uniformly distributed along the surface, with the concentration $\Phi = 1 \times 10^{-7}$ mol/m². According to the insolubility assumption, the amount of surfactant on the bubble surface is constant during the simulation, *i.e.* adsorption/desorption does not occur.

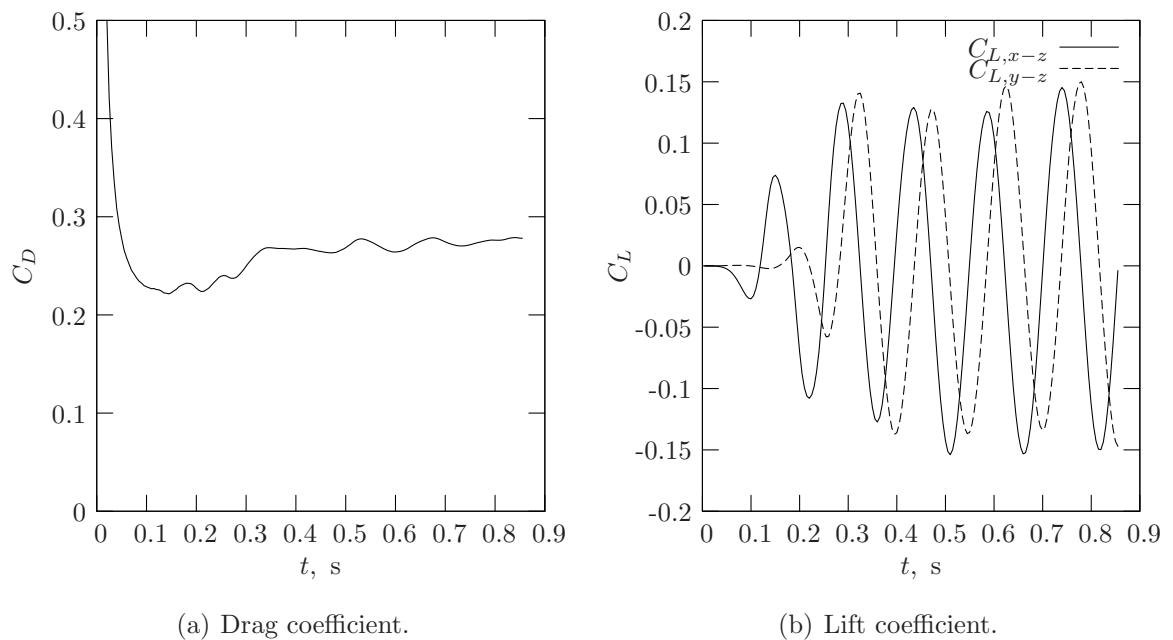
As shown in Fig. 7.20, the bubble moves along a helicoidal trajectory. The rising



Slika 7.20: Trajectory of a 3-D bubble of radius $r_b = 1$ mm with the surface occupied by surfactants.

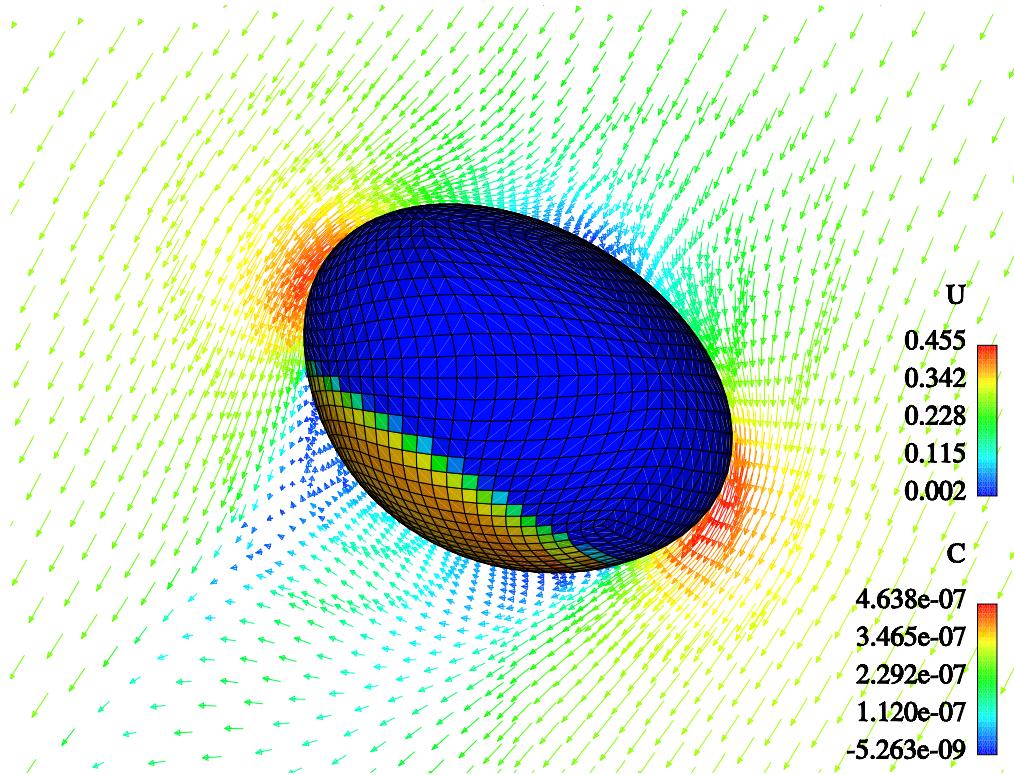


Slika 7.21: Bubble centre velocity as a function of time for a 3-D air bubble of radius $r_b = 1 \text{ mm}$ in still water with contaminated surface.



Slika 7.22: Drag C_D and lift C_L coefficient as a function of time for a rising 3-D air bubble of radius $r_b = 1 \text{ mm}$ in still water with contaminated surface.

velocity is approximately constant with time and amounts to $v_z = 0.25$ m/s, 15 % less than the average rising velocity with a clean surface. Figure 7.22 shows the drag and lift coefficient on the bubble. As one could expect, the value of the drag and lift coefficient are higher than in the case with clean bubble surface.



Slika 7.23: Velocity vector in $x-z$ plane for a 3-D bubble with contaminated interface.

The colours define surfactant concentration (C , mol/m^2) distribution on the bubble surface.

The velocity field in the $x-z$ plane crossing the bubble centre are shown in Fig. 7.23. The surfactant concentration (C , mol/m^2) distribution is shown on the bubble surface. One can see that all surfactant molecules are transported towards the rear side of the bubble. As a result of application of a conservative discretisation method for the surface transport equation, the total amount of surfactant on the bubble surface is conserved with the time.

As in the case of 2-D bubble, the deformation of the 3-D bubble with surfactant on its surface is significantly smaller than in the case with clean bubble surface. The ratio between major and minor semi-axis of the bubble is 1.38 for the contaminated bubble, and 1.95 for the clean bubble.

Computational efficiency of solution procedure

It remains to compare the computational time consumption for the individual parts of the solution procedure with respect to the total computational time. For typical time step where overall mesh motion is done only once at the beginning of the time step, and where the SIMPLE procedure consists of 6 outer iteration, the relative computational time consumption for the individual parts of solution procedure is shown in table 7.2. The computer used for the calculation has following properties: Intel Pentium 4, CPU 2.80 GHz. The total computational time per time step is 32 s, meaning that 180 hours of computational time is needed for 1 s of simulated time.

Tablica 7.2: Comparison of computational time consumption for individual parts of the solution procedure.

Operation	Total computational time
Mesh motion	25 %
Update of boundary condition at the interface	5 %
Remainder	70 %

With higher mesh resolution (561 920 CV), the computational time per time step is 174 s, meaning that 80 days of computational time would be needed for 1 s of simulated time ($\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$ s). The parallel computer with 8 processors and speed up of 7.2, has been used to establish preliminary performance result. It would need 11 days of computational time for 1 s of simulated time. Unfortunately this resource was not available for a complete simulation.

7.5 Closure

The methodology for numerical modelling of two-phase fluid flow with the interface using finite volume method and moving computational mesh is verified in this chapter. In all considered test cases it is demonstrated that there is good agreement between the obtained numerical results and available theoretical and experimental data.

With numerical modelling of inviscid fluid flow over 2-D ramp the accuracy of the methodology is verified in the calculation of steady state shape of the free-surface for sub-critical and super-critical flow. Particularly demanding is the sub-critical flow regime where one must ensure the transmission of the upstream travelling wave disturbances at the inlet free-surface points.

Small amplitude sloshing in 2-D tank test case has served to validate several properties of the numerical methodology. Firstly, in the case when one inviscid fluid phase is considered it is demonstrated that applied numerical methodology introduces insignificant level of false diffusion into the numerical solution since wave amplitude stays undamped during the simulation. When sloshing of viscous fluid phases is considered it is shown that implementation of boundary conditions at the free-surface/interface which take into account the effect of fluid viscosity is correct. It is also demonstrated that explicit coupling of fluid phases produces reasonable results for density ratio lower than $\rho_B/\rho_A \leq 0.1$. When wave oscillation is due to surface tension only, the results show that surface tension implementation is performed in correct way.

The results of direct numerical simulation of 3-D bubble has shown that developed methodology can be used for numerical modelling of two-phase fluid flow with the interface when there is strong coupling between the interface shape and the flow, when there is dominant influence of the surface tension force on the flow.

Poglavlje 8

Zaključak

U ovom je radu opisana metodologija za numeričko modeliranje problema mehanike kontinuma kod kojih se oblik prostorne domene mijenja u vremenu. Primjenjuje se diskretizacija metodom kontrolnih volumena koja podržava proizvoljnu nestrukturiranu pomicnu mrežu. Mreža se prilagođava promjenjivom obliku prostorne domene pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije mreže. Definirana je automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Metoda kontrolnih volumena je u kombinaciji s predloženim postupkom pomicanja mreže primijenjena pri numeričkom modeliranju strujanja nestlačivog višefaznog fluida sa slobodnom površinom. Postupak praćenja slobodne površine definiran je tako, da na kraju svakog vremenskog koraka simulacije bude zadovoljen kinematički i dinamički uvjet koji vrijedi na granici između dva nestlačiva fluida koji se ne miješaju. Dinamički uvjet uključuje utjecaj viskoznih sila i promjenjive površinske napetosti.

Dodatni fizikalni proces koji znatno utječe na ponašanje višefaznog sustava sa slobodnom površinom je tzv. Marangonijev učinak uzrokovani nejednolikom raspodjelom surfaktanata na slobodnoj površini. Molekule surfaktanta se adsorbiraju na slobodnoj površini modificirajući površinsku napetost. Nejednolika raspodjela molekula surfaktanta na slobodnoj površini uzrokuje pojavu gradijenta površinske napetosti, odnosno tangencijalnih sila, koje mogu značajno utjecati na dinamičko ponašanje sustava. To posebno dolazi do izražaja u slučajevima kada površinska napetost ima prevladavajući utjecaj, npr. kod malih mjeđurića zraka u vodi. Da bi se omogućila numerička analiza utje-

caja surfaktanata na strujanje sa slobodnom površinom, razvijena je metoda kontrolnih površina koja omogućava diskretizaciju površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj nestrukturiranoj pomičnoj mreži koja se sastoji od proizvoljnih poligonalnih kontrolnih površina.

Iz provedenog se istraživanja mogu izvesti sljedeći zaključci:

- Metoda kontrolnih volumena primjenjena je na pomičnoj nestrukturiranoj mreži tako, da volumni tokovi stranica kontrolnih volumena egzaktno zadovoljavaju diskretizirani zakon održanja prostora. Izvedeni su izrazi za računanje volumnih tokova stranica kontrolnih volumena, ovisno o primjenjenoj metodi vremenske diskretizacije transportne jednadžbe. Numeričko modeliranje oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku za slučaj neviskoznog fluida pokazalo je da tijekom simulacije ne dolazi do prigušenja amplitude vala kada je prostorna i vremenska diskretizacija drugog reda točnosti. To ujedno govori da nije došlo do pojave numeričkih izvora/ponora mase, do čega inače dolazi u slučajevima kada nije zadovoljen diskretizirani zakon održanja prostora.
- Predložena je automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava nestrukturiranu mrežu sastavljenu od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Laplaceova jednadžba pomaka, diskretizirana metodom konačnih elemenata na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu, osigurava očuvanje valjanosti kontrolnih volumena, ali ne i minimizaciju distorzije. Minimizacija distorzije kontrolnih volumena temeljena je na primjeni promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoј jednadžbi. Uz koeficijent difuzije koji je obrnuto proporcionalan udaljenosti kontrolnih volumena od pomične granice, predložen je i pristup koji ne zahtijeva nikakvu intervenciju od strane korisnika, a kod kojeg je koeficijent difuzije proporcionalan gustoći energije deformacije mreže. Oba su pristupa dala vrlo dobre rezultate na primjeru pomicanja mreže oko oscilirajućeg NACA0012 profila i 2-D cilindra u kanalu.
- Primjenjena je metoda kontrolnih površina za zakriviljenu pomičnu površinu, koja koristi nestrukturiranu poligonalnu pomičnu površinsku mrežu. Provjera predložene metode kontrolnih površina na nekoliko primjera za koje postoji analitičko rješenje pokazala je da je metoda konzervativna i drugog reda točnosti.

- Vrlo dobro poklapanje numeričkog i analitičkog rješenja za sve primjere oscilacije slobodne površine u 2-D spremniku dokazuje korektnost primijenjenog postupka praćenja slobodne površine. To se posebno odnosi na primjenu dinamičkog uvjeta koji uključuje utjecaj viskoznih sila i promjenjivu površinsku napetost. Eksplicitno povezivanje strujanja pojedinih faza fluida daje dobre rezultate za odnos gustoća dvaju fluida manji od 0.1.
- Rezultati simulacije fiktivnog 2-D mjehurića u tekućini uspoređeni su u slučaju čiste slobodne površine i slučaju kada se na slobodnoj površini nalaze molekule netopivog surfaktanta. Prema očekivanju, mjehurić sa surfaktantom na slobodnoj površini manje se deformira i ima manju brzinu podizanja. Raspodjela surfaktanta odgovara nestacionarnom konvekcijsko-difuzijskom transportu na zakriviljenoj površini. Automatski postupak pomicanja mreže obavlja svoju zadaću pouzdano i kvalitetno, bez intervencije korisnika.
- Rezultati simulacije 3-D mjehurića s čistom slobodnom površinom dobro se slažu s eksperimentalnim rezultatima. To se posebno odnosi na računski dobivenu sliku strujanja iza mjehurića, gdje kao i u eksperimentu postoji dvostruki vrtložni trag. Rezultati simulacije 3-D mjehurića sa surfaktantom na slobodnoj površini kvalitativno su očekivani, tj. mjehurić se manje deformira i ima manju brzinu podizanja u odnosu na mjehurić s čistom slobodnom površinom.

Može se zaključiti da metodologija koja je opisana u ovom radu omogućava numeričko modeliranje strujanja višefaznog fluida sa slobodnom površinom u posebno zahtjevnim uvjetima, kada površinska napetost ima prevladavajući utjecaj. Direktna numerička simulacija mjehurića može se smatrati ravnopravnom eksperimentalnom pristupu.

8.1 Originalni znanstveni doprinos rada

Ovaj rad daje sljedeći originalni doprinos u području tehničkih znanosti:

- Predložena je nova automatska metoda pomicanja mreže, koja podržava primjenu nestrukturirane mreže sastavljene od proizvoljnih poliedarskih kontrolnih volumena. Pomicanje unutrašnjih čvorova mreže određuje se automatski iz zadanog pomaka

granice. Minimizacija distorzije mreže provodi se primjenom promjenjivog koeficijenta difuzije u Laplaceovoj jednadžbi pomaka mreže. Predložen je originalni postupak računanja promjenjivog koeficijenta difuzije, koji se temelji na trenutnom stanju deformacije mreže.

- Definirana je i primijenjena metoda kontrolnih površina koja omogućava rješavanje površinskih transportnih jednadžbi na deformabilnoj nestrukturiranoj površinskoj mreži koja se sastoji od proizvoljnih poligonalnih kontrolnih površina. Metoda je konzervativna i drugog reda točnosti.
- Definiran je postupak praćenja slobodne površine koji omogućava primjenu metode kontrolnih volumena i pomicne mreže pri numeričkom modeliranju strujanja višefaznih fluida sa slobodnom površinom. Granični uvjeti na slobodnoj površini uključuju viskozne učinke i promjenjivu površinsku napetost.
- Rezultati simulacije mjehurića pokazuju da metodologija definirana u ovom radu omogućava direktnu numeričku simulaciju mjehurića sa i bez prisustva molekula surfaktanta na slobodnoj površini.

8.2 Budući rad

Jasno je da obnova mreže pomicanjem unutrašnjih čvorova bez promjene topologije, dozvoljava samo ograničene promjene oblika prostorne domene tijekom simulacije. Predložena automatska metoda pomicanja mreže samo povećava dozvoljenu deformaciju prostorne domene uz očuvanje valjanosti i kvalitete mreže. U graničnom slučaju, kada metoda pomicanja više ne može osigurati zadovoljavajuću razinu kvalitete elemenata mreže, mora se mijenjati topologija mreže. Jedan od mogućih pristupa tom zadatku je da se provodi lokalna ograničena promjena topologije mreže tako, da se kontrolni volumeni po potrebi dodaju ili izbacuju iz mreže na način da bude zadovoljen zakon održanja prostora. Prvi koraci u tom smjeru već su napravljeni primjenom mogućnosti uvođenja i brisanja ćelije, te dodavanja i uklanjanja slojeva ćelija iz mreže. Za sada nije jasno da li će se ovaj postupak moći automatizirati.

Metoda kontrolnih površina u ovom je radu primijenjena samo za rješavanje skalarne

transportne jednadžbe. U sljedećem će koraku biti potrebno definirati i usporediti vezani i odvojeni postupka rješavanja vektorske transportne jednadžbe na zakriviljenoj površini.

Diskretizacijom jednadžbe pomaka mreže na kompozitnom poliedarskom konačnom elementu uvedeni su dodatni čvorovi, a s njima i dodatne nepoznanice koje nisu potrebne za pomicanje mreže. U sljedećem koraku treba pokušati eliminirati jednadžbe koje odgovaraju dodanim čvorovima, te ispitati kako to utječe na učinkovitost rješavanja modificiranog sustava linearnih algebarskih jednadžbi.

Iskustvo je pokazalo da opisani postupak pomicanja čvorova slobodne površine ne garantira da će slobodna površina tijekom simulacije ostati glatka. Zbog toga je definiran pojednostavljeni postupak izravnavanja slobodne površine koji nije selektivan već djeluje po svim stranicama na slobodnoj povšini bez obzira da li je na njima došlo do oscilacije. U sljedećem bi koraku trebalo definirati kriterij prema kojem bi bilo moguće izdvajati samo one stranice na kojima je stvarno potrebno primijeniti postupak izravnavanja.

Direktna numerička simulacija 3-D mjehurića provedena je samo za jedan polumjer mjehurića i uz nedostatnu rezoluciju mreže. U sljedećem bi koraku trebalo provesti niz računa s mrežom odgovarajuće rezolucije i za različite polumjere mjehurića. Iz dobivenih bi se rezultata mogle izvesti korelacije za brzinu podizanja mjehurića, te koeficijente otpora i uzgona mjehurića, pa iste usporediti sa sličnim korelacijama iz drugih izvora.

Dodatak A

Reynoldsov transportni teorem

Zakoni održanja su definirani za sustav materijalnih čestica odnosno materijalni volumen. Da bi se mogli primijeniti na proizvoljni volumen potrebna je relacija koja povezuje brzinu promjene sadržaja tenzorskog svojstva u materijalnom i proizvoljnem volumenu.

Brzina promjene sadržaja intenzivnog fizikalnog svojstva ϕ u proizvoljnem volumenu V ograničenom zatvorenom površinom S definirana je Reynoldsovim transportnim teoremom (Bird, Lightfoot i Stewart [8]):

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\phi \, dV = \int_V \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v}_s \phi \, dS, \quad (\text{A.1})$$

gdje je \mathbf{n} vanjska jedinična normala na S , a \mathbf{v}_s brzina točaka površine S .

Reynoldsov transportni teorem (A.1) može se primijeniti na materijalni volumen V_M ograničen materijalnom površinom S_M uvažavajući da je u tom slučaju brzina \mathbf{v}_s jednaka brzini fluida \mathbf{v} :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_M} \rho\phi \, dV = \int_{V_M} \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} \, dV + \oint_{S_M} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \phi \, dS. \quad (\text{A.2})$$

Ako se u odabranom vremenskom trenutku materijalni volumen V_M poklopi s proizvoljnim volumenom V , tada je volumni integral $\int_V \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} \, dV$ u jednadžbi (A.1) jednak volumnom integralu $\int_{V_M} \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} \, dV$ u jednadžbi (A.2). Izjednačavanjem ove dvije jednadžbe po zajedničkom članu dobiva se tražena relacija koja povezuje brzinu promjene sadržja svojstva ϕ u materijalnom i proizvoljnem volumenu:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_M} \rho\phi \, dV = \frac{d}{dt} \int_V \rho\phi \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)\phi \, dS. \quad (\text{A.3})$$

Dodatak B

Gaussov integralni teorem za zakrivljenu površinu

Polazeći od Stokesovog teorema (Hildebrand [39]) Edwards, Brenner i Wasan [26] pokazuju da vrijedi integralna jednadžba:

$$\int_S \nabla_s \cdot [(\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \otimes \mathbf{T}] dS = \oint_{\partial S} \mathbf{m} \otimes \mathbf{T} dL, \quad (\text{B.1})$$

gdje je S zakrivljena površina ograničena zatvorenom krivuljom ∂S , \mathbf{T} opće tenzorsko polje, \mathbf{n} jedinična normala na S , \mathbf{m} vanjska jedinična binormala na ∂S , L duljina luka mjerena uzduž krivulje ∂S , $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla$ operator površinskog gradijenta, a \mathbf{I} jedinični tenzor drugog rada. Simbol \otimes označava operator množenja (skalarni, vektorski, tenzorski) dvije tenzorske veličine.

Nakon dalnjeg raspisivanja desne strane jednadžbe (B.1) slijedi konačan oblik Gaussovog integralnog teorema za zakrivljenu površinu:

$$\int_S \nabla_s \otimes \mathbf{T} dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \otimes \mathbf{T} dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \otimes \mathbf{T} dS, \quad (\text{B.2})$$

gdje je κ dvostruka srednja zakrivljenost površine S , definirana sljedećim izrazom:

$$\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}. \quad (\text{B.3})$$

Ako se u jednadžbi (B.2) operator \otimes zamjeni skalarnim operatorom množenja, dobiva se tzv. teorem divergensa za zakrivljenu površinu (Weatherburn [83]):

$$\int_S \nabla_s \cdot \mathbf{T} dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{T} dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dS. \quad (\text{B.4})$$

Ako se dopusti da površina S teži u točku jednadžba (B.4) dobiva sljedeći oblik:

$$\nabla_s \cdot \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{T} \, dL}{dS} - \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}. \quad (\text{B.5})$$

Jednadžba (B.5) predstavlja definiciju površinskog divergensa tenzorskog polja. Vidljivo je da $\nabla_s \cdot \mathbf{T}$ ne ovisi o izboru koordinatnog sustava.

Jednadžba (B.5) može poslužiti za interpretaciju površinskog divergensa brzine točaka materijalne površine. Ako se u jednadžbu (B.5) uvrsti zamjena $\mathbf{T} = \mathbf{v}$, gdje je \mathbf{v} brzina čestica promatrane zakriviljene materijalne površine, slijedi:

$$\nabla_s \cdot \mathbf{v} = \lim_{S_M \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S_M} \mathbf{m} \cdot \mathbf{v} \, dL}{dS_M} - \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{B.6})$$

Desna strana jednadžbe (B.6) predstavlja relativnu brzinu promjene površine beskonačno malog elementa materijalne površine, tj. $\frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt}$. Prema tome površinski je divergens vektora brzine točaka materijalne površine jednak relativnoj brzini promjene veličine te površine:

$$\nabla_s \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{dS_M} \frac{d(dS_M)}{dt}. \quad (\text{B.7})$$

Ako se u jednadžbi (B.2) operator \otimes zamjeni tenzorskim operatorom množenja dobiva se tzv. teorem gradijenta za zakriviljenu površinu:

$$\int_S \nabla_s \mathbf{T} \, dS = \int_{\partial S} \mathbf{m} \mathbf{T} \, dL - \int_S \kappa \mathbf{n} \mathbf{T} \, dS, \quad (\text{B.8})$$

Puštajući da površina S teži u točku, slijedi definicija površinskog gradijenta tenzorskog polja:

$$\nabla_s \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \mathbf{T} \, dL}{dS} - \kappa \mathbf{n} \mathbf{T}. \quad (\text{B.9})$$

Ako se u jednadžbi (B.9) stavi $\mathbf{T} = \text{konst.}$, slijedi definicija zakriviljenosti κ :

$$\kappa \mathbf{n} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \, dL}{dS}. \quad (\text{B.10})$$

Ako se u jednadžbi (B.5) umjesto tenzora \mathbf{T} stavi tenzor $\nabla_s \mathbf{T}$, slijedi definicija površinskog Laplaceovog operatora za tenzorsko polje \mathbf{T} :

$$\nabla_s^2 \mathbf{T} = \nabla_s \cdot \nabla_s \mathbf{T} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\int_{\partial S} \mathbf{m} \cdot \nabla_s \mathbf{T} \, dL}{dS}, \quad (\text{B.11})$$

pri čemu je korištena jednakost $\mathbf{n} \cdot \nabla_s \mathbf{T} = \mathbf{0}$.

Dodatak C

Reynoldsov transportni teorem za deformabilnu površinu

Potrebitno je izvesti relaciju koja će povezati brzinu promjene sadržaja površinskog svojstva ψ na materijalnoj i proizvoljnoj površini. Promatra se slučaj proizvoljne površine koja se giba unutar materijalne površine.

Prije svega, treba definirati kretanje ovih dviju površina. Čestice materijalne površine S_M kreću se brzinom \mathbf{v} , dok se točke proizvoljne površine S kreću brzinom \mathbf{b} . Veza između navedenih brzina definirana je sljedećim uvjetom:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{C.1})$$

gdje je \mathbf{n} zajednička jedinična normala na S_M i S .

Neka je ψ neko površinsko svojstvo koje je definirano na promatranoj materijalnoj površini S_M . Materijalna derivacija tog svojstva može se izraziti sljedećim izrazom (Edwards, Brenner i Wasan [26]):

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_s \psi. \quad (\text{C.2})$$

Najprije će se izvesti Reynoldsov transportni teorem za materijalnu površinu. Brzina promjene sadržja svojstva ψ na materijalnoj površini S_M može se izraziti na sljedeći način:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \left(\frac{d\psi}{dt} \, dS + \psi \frac{d(dS)}{dt} \right). \quad (\text{C.3})$$

Uvrštavanjem izraza (B.7) i (C.2) u jednadžbu (C.3) dobiva se:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS + \int_{S_M} \nabla_s \cdot (\mathbf{v} \psi) \, dS. \quad (C.4)$$

Primjenom Gaussovog teorema (B.4) na drugi površinski integral na desnoj strani jednadžbe (C.4) dobiva se:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \int_{S_M} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS - \int_{S_M} \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \psi \, dS + \oint_{\partial S_M} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v} \psi) \, dL, \quad (C.5)$$

gdje je ∂S_M krivulja koja ograničava površinu S_M , κ dvostruka srednja zakrivljenost površine S_M , \mathbf{n} jedinična normala na površinu S_M , a \mathbf{m} vanjska jedinična binormala na krivulju ∂S_M . Jednadžbe (C.4) i (C.5) predstavljaju dva oblika Reynoldsovog transportnog teorema za materijalnu površinu.

Reynoldsov transportni teorem (C.5) se može primijeniti na proizvoljnu površinu S koja je ograničena zatvorenom krivuljom ∂S , tako da se umjesto brzine \mathbf{v} koristi brzina \mathbf{b} :

$$\frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS = \int_S \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dS - \int_S \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \psi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{b} \psi) \, dL. \quad (C.6)$$

Ako se u odabranom vremenskom trenutku materijalna i proizvoljna površina poklope, tada su površinski integrali na desnoj strani jednadžbe (C.5) i (C.6) međusobno jednaki. Izjednačavanjem tih jednadžbi po zajedničkim članovima dobiva se tražena relacija koja povezuje brzinu promjene sadržaja svojstva ψ na materijalnoj i proizvoljnoj površini:

$$\frac{d}{dt} \int_{S_M} \psi \, dS = \frac{d}{dt} \int_S \psi \, dS + \oint_{\partial S} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v}_t - \mathbf{b}_t) \psi \, dL, \quad (C.7)$$

gdje je $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}$ tangencijalna komponenta brzine čestica materijalne površine S_M , a $\mathbf{b}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \mathbf{b}$ je tangencijalna komponenta brzine točaka proizvoljne površine S .

Dodatak D

Normalno devijatorsko naprezanje na slobodnoj površini

Primjenjujući postupak koji su koristili Chen, Saric i Stone [14], izvest će se izraz za računanje normalne komponente sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini.

Razmatra se strujanje nestlačivog newtonovskog fluida u prisutnosti slobodne površine. Normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja na jednoj strani slobodne površine je $2\mu\mathbf{n}\mathbf{n}:\mathbf{D}$, gdje je \mathbf{n} jedinična normala na slobodnu površinu, $\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T]$ tenzor brzine deformacije, μ dinamička viskoznost fluida, a $:$ operator skalarnog množenja dva tensora drugog reda.

Operator gradijenta ∇ može se na slobodnoj površini izraziti na sljedeći način:

$$\nabla = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla + \mathbf{n}\mathbf{n} \cdot \nabla = \nabla_s + \mathbf{n}\mathbf{n} \cdot \nabla, \quad (\text{D.1})$$

gdje je $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla$ operator površinskog gradijenta. Prema tome, gradijent brzine na slobodnoj površini je

$$\nabla\mathbf{v} = \nabla_s\mathbf{v} + \mathbf{n}\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v}. \quad (\text{D.2})$$

Trag jednadžbe (D.2) daje:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla_s \cdot \mathbf{v} + \mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{v}. \quad (\text{D.3})$$

Budući da je $\mathbf{n}\mathbf{n} : \mathbf{D} = \mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{v}$, slijedi da je

$$\mathbf{n}\mathbf{n} : \mathbf{D} = \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla_s \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{D.4})$$

Za strujanje nestlačivog fluida ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) vrijedi $\mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D} = -\nabla_s \cdot \mathbf{v}$, pa je normalna komponenta sile devijatorskog naprezanja na slobodnoj površini:

$$2\mu \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D} = -2\mu \nabla_s \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{D.5})$$

Korištenjem definicije površinskog divergensa (B.5), jednadžba (D.5) se može zapisati u nešto drugčijem obliku:

$$2\mu \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D} = -2\mu (\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t - \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}), \quad (\text{D.6})$$

gdje je $\mathbf{v}_t = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}$ tangencijalna komponenta brzine na slobodnoj površini, a κ dvostruka srednja zakrivljenost slobodne površine ($\kappa = -\nabla_s \cdot \mathbf{n}$).

Dodatak E

Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko–difuzijski transport na površini sfere

Stacionarni transport

Stacionarni konvekcijsko–difuzijski transport površinskog skalarnog svojstva ψ uzduž ne-pokretne zakrivljene površine definiran je sljedećom parcijalnom diferencijalnom jednadžbom:

$$\nabla_s \cdot (\mathbf{v}_t \psi) - \nabla_s \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) = 0, \quad (\text{E.1})$$

gdje je \mathbf{v}_t vektor brzine koji je tangencijalan na promatranu površinu, a Γ_ψ koeficijent difuzije.

Traži se analitičko rješenje jednadžbe (E.1) na površini sfere u području polarnog kuta $\theta_0 \leq \theta \leq \theta_1$, uz sljedeće granične uvjete: $\psi = \psi_0$ za $\theta = \theta_0$, $\psi = \psi_1$ za $\theta = \theta_1$. Koeficijent difuzije Γ_ψ je konstantan, a vektor brzine \mathbf{v}_t je osnosimetričan i definiran tako, da bude $\nabla_s \cdot \mathbf{v}_t = 0$, tj.

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_0}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta, \quad (\text{E.2})$$

gdje je v_0 konstanta, θ je polarni kut, a \mathbf{e}_θ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Uz ovako definiran problem, jednadžba (E.1) prelazi u običnu diferencijalnu jednadžbu

drugog reda:

$$\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} - \frac{\text{Pe}}{\sin \theta} \right) \frac{d\psi}{d\theta} = 0, \quad (\text{E.3})$$

gdje je Pe Pecletov broj, definiran na sljedeći način:

$$\text{Pe} = \frac{v_0 R}{\Gamma_\psi}, \quad (\text{E.4})$$

a R je polumjer sfere.

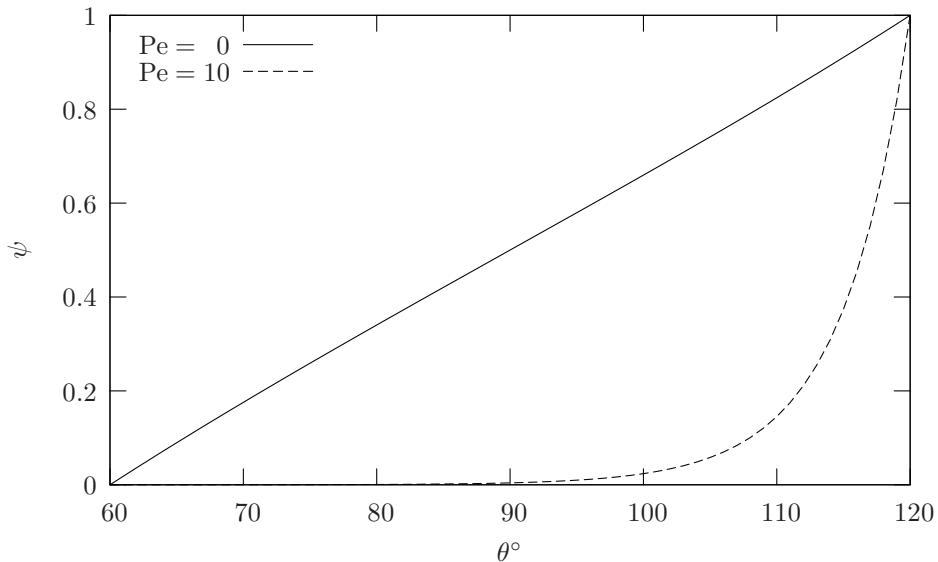
Uz gore definirane granične uvjete jednadžba (E.3) ima sljedeće rješenje:

$$\psi(\theta) = \psi_0 + \frac{\tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta}{2}\right) - \tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)}{\tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_2}{2}\right) - \tan^{\text{Pe}}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)} (\psi_1 - \psi_0). \quad (\text{E.5})$$

U graničnom slučaju kada je $\text{Pe} = 0$ jednadžba (E.5) ima sljedeći oblik:

$$\psi(\theta) = \psi_0 + \frac{\ln \left[\tan \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] - \ln \left[\tan \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right]}{\ln \left[\tan \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \right] - \ln \left[\tan \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right]} (\psi_1 - \psi_0). \quad (\text{E.6})$$

Dijagram na slici E.1 prikazuje analitičko rješenje jednadžbe (E.3) za Pecletove brojeve 0 i 10 u području polarnog kuta $60^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$.



Slika E.1: Analitičko rješenje za osnosimetrični konvekcijsko-difuzijski transport na površini sfere.

Nestacionarni transport

Nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport površinskog skalarnog svojstva ψ uzduž nepokretne zakrivljene površine definiran je sljedećom parcijalnom diferencijalnom jednadžbom:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\mathbf{v}_t \psi) - \nabla_s \cdot (\Gamma_\psi \nabla_s \psi) = 0. \quad (\text{E.7})$$

Traži se rješenje jednadžbe (E.7) na cijeloj površini sfere radijusa $R = 1$, uz početni uvjet $\psi(\theta, 0) = 1$. Koeficijent difuzije Γ_ψ je konstantan, a polje brzine \mathbf{v}_t je osnosimetrično i definirano sljedećim izrazom:

$$\mathbf{v}_t = \frac{v_\infty}{4} \sin \theta \mathbf{e}_\theta, \quad (\text{E.8})$$

gdje je v_∞ konstanta, θ polarni kut, a \mathbf{e}_θ jedinični vektor sfernog koordinatnog sustava. Površinski divergens polja brzine (E.8) različit je od nule. Uz ovako definiran problem jednadžba (E.7) prelazi u jednodimenziju (osnosimetričnu) parcijalnu diferencijalnu jednadžbu:

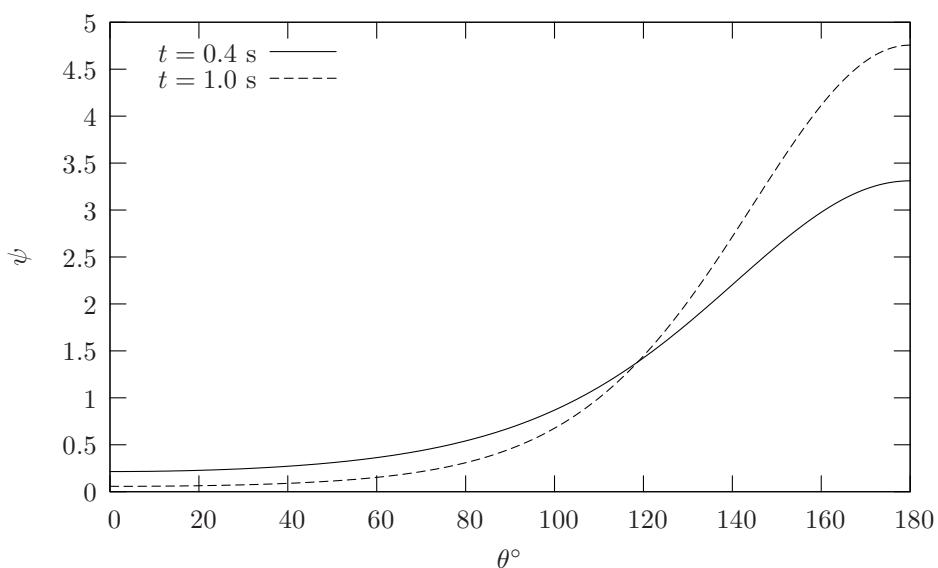
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\Gamma_\psi}{R^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{\Gamma_\psi}{R^2} \left(\frac{\text{Pe} \sin \theta}{4} - \cot \theta \right) \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{\text{Pe} \Gamma_\psi \cos \theta}{2R^2} \psi = 0, \quad (\text{E.9})$$

gdje je Pe Pecletov broj, definiran sljedećim izrazom:

$$\text{Pe} = \frac{v_\infty R}{\Gamma_\psi}. \quad (\text{E.10})$$

Jednadžba (E.9) riješena je numeričkim putem, primjenom metode konačnih razlika. Prostorne derivacije su diskretizirane s 2. redom točnosti, a za diskretizaciju vremenskih integrala korištena je Crank-Nicolsonova metoda, koja je također 2. reda točnosti. Trodiagonalni sustav linearnih algebarskih jednadžbi riješen je pomoću Thomasovog postupka.

Na slici E.2 prikazano je numeričko rješenje jednadžbe (E.9) za $\text{Pe} = 10$ u trenutku $t = 0.4$ s i $t = 1.0$ s. Na 1-D prostornoj domeni ($0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$) definirana je mreža s jednolikom podjelom ($\Delta\theta = (1/8)^\circ$) koja osigurava rješenje neovisno o rezoluciji mreže. Isto je osigurano u vremenskoj domeni s konstantnim vremenskim korakom $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ s. Na granicama prostorne domene korišteni su sljedeći granični uvjeti: $\frac{dy}{d\theta} = 0$ za $\theta = 0^\circ$ i za $\theta = 180^\circ$.



Slika E.2: "Točno" numeričko rješenje za osnosimetrični nestacionarni konvekcijsko-difuzijski transport skalarnog svojstva na površini sfere.

Bibliografija

- [1] D. Apsley and W. Hu. CFD simulation of two- and three-dimensional free-surface flow. *International journal for numerical methods in fluids*, 42:465–491, 2003.
- [2] N. Ashgriz and J.Y. Poo. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics*, 93:449–468, 1991.
- [3] T.J. Baker. Mesh modification for solution adaptation and time evolving domains. In *7th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*, Whistler, British Columbia, Canada, September 2000.
- [4] F.R. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- [5] J.T. Batina. Unsteady Euler airfoil solutions using unstructured dynamic meshes. *AIAA Journal*, 28(8):1381–1388, 1990.
- [6] M. Behr and F. Abraham. Free-surface flow simulations in the presence of inclined walls. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:5467–5483, 2002.
- [7] M. Behr and T.E. Tezduyar. Finite element solution strategies for large-scale flow simulations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 112:3–24, 1994.
- [8] R.B. Bird, E.N. Lightfoot, and W.E. Stewart. *Transport phenomena*. John Wiley, 1960.
- [9] A Blanco and J. Magnaudet. The structure of the axisymmetric high-Reynolds number flow around an ellipsoidal bubble of fixed shape. *Physics of fluids*, 7(6):1265–1274, 1995.

- [10] F.J. Blom. Considerations on the spring analogy. *International journal for numerical methods in fluids*, 32:647–669, 2000.
- [11] J.U. Brackbill, D.B Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modelling surface tension. *Journal of computational physics*, 100:335–354, 1992.
- [12] H. Braess and P. Wriggers. Arbitrary Lagrangian Eulerian finite element analysis of free surface flow. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190:95–109, 2000.
- [13] R.A. Cairncross, P.R. Schunk, T.A. Baer, R.R. Rao, and P.A. Sackinger. A finite element method for free surface flows of incompressible fluids in three dimensions. Part I. Boundary fitted mesh motion. *International journal for numerical methods in fluids*, 33:375–403, 2000.
- [14] K.P. Chen, W. Saric, and H.A. Stone. On the deviatoric normal stress on a slip surface. *Physics of fluids A*, 12(12):3280–3281, 2000.
- [15] G. Chiandussi, G. Bugeda, and E. Oñate. A simple method for automatic update of finite element meshes. *Communications in numerical methods in engineering*, 16:1–19, 2000.
- [16] B. Cuenot, J. Magnaudet, and B. Spennato. The effects of slightly soluble surfactants on the flow around a spherical bubble. *Journal of fluid mechanics*, 339:25–53, 1997.
- [17] M.S. Darwish. A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation. *Numerical heat transfer, Part B*, 24:253–371, 1993.
- [18] G.A. Davis and O.O. Bendiksen. Unsteady transonic two-dimensional Euler solutions using finite elements. *AIAA Journal*, 31(6):1051–1059, 1993.
- [19] A.W.G de Vries. *Path and wake of a rising bubble*. PhD thesis, University of Twente, 2001.
- [20] A.W.G. de Vries, A. Biesheuvel, and L. van Wijngaarden. Notes on the path and wake of a gas bubbles rising in pure water. *International journal of multiphase flow*, 28:1823–1835, 2002.

- [21] C. Degan and C. Farhat. A three-dimensional torsional spring analogy method for unstructured dynamic meshes. *Computers and structures*, 80:305–316, 2002.
- [22] I. Demirdžić and S. Muzaferija. Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 125:235–255, 1995.
- [23] I. Demirdžić, S. Muzaferija, and M. Perić. Advances in computation of heat transfer, fluid flow and solid body deformation using finite volume approaches. In W.J. Minckowycz and E.M. Sparrow, editors, *Advances in numerical heat transfer*, volume 1, chapter 2, pages 59–96. Taylor & Francis, 1997.
- [24] I. Demirdžić and M. Perić. Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. *International journal for numerical methods in fluids*, 8:1037–1050, 1988.
- [25] I. Demirdžić and M. Perić. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. *International journal for numerical methods in fluids*, 10:771–790, 1990.
- [26] D.A. Edwards, H. Brenner, and D.T. Wasan. *Interfacial transport processes and rheology*. Butterworth-Heinemann, 1991.
- [27] C. Farhat, C. Degan, B. Koobus, and M. Lesoinnen. Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 163:231–245, 1998.
- [28] J.H. Ferziger and M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Verlag, Berlin-New York, 1995.
- [29] G.H. Golub and C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. John Hopkins University Press, Baltimore, 1996.
- [30] W. Gropp, E. Lusk, N. Doss, and A. Skjellum. A high performance, portable implementation of the MPI message passing interface standard. *Parallel computing*, 22:789–828, 1996.

- [31] D. Gueyffier, J. Li, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of computational physics*, 152:423–456, 1999.
- [32] I. Güler, M. Behr, and T.E. Tezduyar. Parallel finite element computation of free-surface flows. *Computational mechanics*, 23:117–123, 1999.
- [33] 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.
- [34] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics*, 49:357–393, 1983.
- [35] A. Harten, B. Enquist, S. Osher, and S. Cuakravarthy. Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes III. *Journal of computational physics*, 71:231–303, 1987.
- [36] O. Hassan, E.J. Probert, and K. Morgan. Unstructured mesh procedures for the simulation of three-dimensional transient compressible inviscid flows with moving boundary components. *International journal for numerical methods in fluids*, 27:41–55, 1998.
- [37] B.T Helenbrook. Mesh deformation using the biharmonic operator. *International journal for numerical methods in engineering*, 56:1007–1021, 2003.
- [38] H.R. Hestens and E.L. Steifel. Method of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of research*, 29:409–436, 1952.
- [39] F.B. Hildebrand. *Advanced calculus for applications*. Prentice-Hall, 1962.
- [40] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*. John Willey & Sons, 1991.
- [41] C.W. Hirt, A.A. Amsden, and J.L. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *Journal of computational physics*, 14(3):227–253, 1972.
- [42] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39:201–225, 1981.

- [43] D.A.H. Jacobs. Preconditioned Conjugate Gradient methods for solving systems of algebraic equations. Technical Report RD/L/N193/80, Central Electricity Research Laboratories, 1980.
- [44] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using pahase-field modeling. *Journal of computational physics*, 155:96–, 1999.
- [45] H. Jasak. Osobna komunikacija.
- [46] H. Jasak. *Error analysis and estimation for finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1996.
- [47] H. Jasak and A. Gosman. Automatic resolution control for the finite volume method. Part 1: A-posteriori error estimates. *Numerical heat transfer, Part B*, 38:237–256, 2000.
- [48] H. Jasak and H.G Weller. Application of the finite volume method and unstructured meshes to linear elasticity. *International journal for numerical methods in engineering*, 48:267–287, 2000.
- [49] H. Jasak, H.G Weller, and Gosman A.D. High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. *International journal for numerical methods in fluids*, 31:431–449, 1999.
- [50] A.A. Johnson and T.E. Tezduyar. Mesh update stategies in parallel finite element computations of flow problems with moving boundaries and interfaces. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 119:73–94, 1994.
- [51] B. Kaluđerčić. *Parallelisation of Eulerian and Lagrangian CFD Algorithms*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2000.
- [52] B Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of computational physics*, 113:134–147, 1994.

- [53] B.P. Leonard. The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 88:17–74, 1991.
- [54] X. Li and C. Pozrikidis. The effect of surfactants on drop deformation and on the rheology of dilute emulsions in Stokes flow. *Journal of fluid mechanics*, 341:165–194, 1997.
- [55] R. Löhner and C. Yang. Improved ALE mesh velocities for moving bodies. *Communications in numerical methods in engineering*, 12:599–608, 1996.
- [56] D.R. Lynch and K. O'Neill. Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change. *International journal for numerical methods in engineering*, 17:81–96, 1981.
- [57] A. Masud and T.J.R. Hughes. A space-time Galerkin/least-square finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 146:91–126, 1997.
- [58] N. Max. Weights for computing vertex normals from facet normals. *J. Graphics Tools*, 4(2):1–6, 1999.
- [59] S. Muzaferija and M. Perić. Computation of free-surface flows using the finite-volume method and moving grids. *Numerical heat transfer, Part B*, 32:369–384, 1997.
- [60] S. Osher and R.P. Fedkiw. Level set methods: an overview and some recent results. *Journal of computational physics*, 169:463–502, 2001.
- [61] S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [62] M. Perić. *A Finite Volume method for the prediction of three-dimensional flow in complex ducts*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1986.
- [63] B. Perot and R. Nallapati. A moving unstructured staggered mesh method for the simulation of incompressible free-surface flows. *Journal of computational physics*, 184:192–214, 2003.

- [64] R.C. Peterson, P.K. Jimack, and A. Kelmanson. The solution of two-dimensional free-surface problems using automatic mesh generation. *International journal for numerical methods in fluids*, 31:937–960, 1999.
- [65] S. Piperno. Explicit/implicit fluid/structure staggered procedures with a structural predictor and fluid subcycling for 2D inviscid aeroelastic simulations. *International journal for numerical methods in fluids*, 25:1207–1226, 1997.
- [66] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Physics of fluids*, 24(7):1217–1223, 1981.
- [67] S. Rabier and M. Medale. Computation of free surface flows with a projection FEM in a moving mesh framework. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192:4703–4721, 2003.
- [68] C.M. Rhie and W.L. Chow. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21:1525–1532, 1983.
- [69] H. Rusche. *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2002.
- [70] P.A. Sackinger, P.R. Schunk, and R.R Rao. A Newton Raphson pseudo-solid domain mapping technique for free and moving boundary problems: a finite element implementation. *Journal of computational physics*, 125:83–103, 1996.
- [71] M. Souli and J.P. Zolesio. Arbitrary Lagrangian–Eulerian and free surface methods in fluid mechanics. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:451–466, 2001.
- [72] STAR-CD. <http://www.cd-adapco.com>.
- [73] J. Sung, H.G. Choi, and J.Y. Yoo. Time-accurate computation of unsteady free surface flows using an ALE-segregated equal-order FEM. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190:1425–1440, 2000.
- [74] T.E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal, and Liou J. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – The deforming-

- spatial-domain/space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 94:353–371, 1992.
- [75] T.E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal, and J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – The deforming-spatial-domain/space-time procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 94:339–352, 1992.
- [76] P.D. Thomas and C.K. Lombard. Geometric conservation law and its application to flow computations on moving grids. *AIAA Journal*, 17:1030–1037, 1979.
- [77] A. Tomiyama, G.P. Celata, S. Hosokawa, and S. Yoshida. Terminal velocity of single bubbles in surface tension force dominant regime. *International journal of multiphase flow*, 28:1497–1519, 2002.
- [78] A. Tomiyama, I. Kataoka, I. Žun, and T. Sakaguchi. Drag coefficients of single bubbles under normal and microgravity conditions. *JSME Int. J., Ser. B: Fluids Thermal Eng.*, 41:472–479, 1998.
- [79] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of computational physics*, 169:708–759, 2001.
- [80] O. Ubbink. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1997.
- [81] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, 100:25, 1992.
- [82] H.A. Van Der Vorst. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Scientific Computing*, 13(2):631–644, 1992.
- [83] C.E. Weatherburn. *Differential geometry in three dimension*. Cambridge University Press, London, 1972.

- [84] H.G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques. *Computers in physics*, 12(6):620–631, 1998.
- [85] S. Yon and C. Pozrikidis. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. *Computers and fluids*, 27(8):879–902, 1998.
- [86] S. Yon and C. Pozrikidis. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. *Computers and fluids*, 27(8):879–902, 1998.
- [87] Y. Zhang and J.A. Finch. A note on single bubble motion in surfactant solutions. *Journal of fluid mechanics*, 429:63–66, 2001.
- [88] Y. Zhao, J. Tai, and F. Ahmed. Simulation of micro flows with moving boundaries using high-order upwind FV method on unstructured grids. *Computational mechanics*, 28:66–75, 2002.
- [89] O.C. Zienkiewicz. *The finite element method in engineering science*. McGraw Hill, London, 1971.
- [90] P.J. Zwart, G.D Raithby, and M.J. Raw. The integrated space-time finite volume method and its application to moving boundary problems. *Journal of computational physics*, 154:497–519, 1999.

Životopis

Željko Tuković je rođen 27. veljače 1972. godine u Pakracu. Osnovno je obrazovanje završio u Daruvaru, a srednje u Centru za odgoj i usmjereno obrazovanje također u Daruvaru, gdje je stekao zvanje strojarskog tehničara.

Školske godine 1990/91. upisao se na Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu. Redoviti studij strojarstva, smjer procesno–energetski, završio je početkom 1996. godine. Diplomski rad pod nazivom “Regulacija temperature svježe pare u termoenergetskom bloku snage 320 MW”, obranio je s odličnim uspjehom, a opći uspjeh studija je vrlo dobar.

Na Fakultetu strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu radi od 1996. godine u Zavodu za energetska postrojenja kao znanstveni novak na Katedri za turbostrojeve. Školske godine 1996/97. upisao je poslijediplomski studij smjera Energetika 2, te je 21. rujna 2001. godine obranio magistarski rad pod naslovom “Strujne karakteristike aerodinamski optimalnih rešetki aksijalnih turbina”. U svojstvu istraživača je sudjelovao na sljedećim znanstveno–istraživačkim projektima: Istraživanje karakteristika rotacijskog strujanja fluida (2-08-340), Poboljšanja energetskih pretvorbi u turbostrojevima (1-20-011).

Bavi se numeričkim modeliranjem prijenosa topline i mase kod različite strojarske opreme, te sudjeluje u izvođenju nastave. Objavio je devet znanstvenih radova. Govori i piše engleski jezik. Oženjen je i otac je dvoje djece.

Biography

Željko Tuković was born on February 27, 1972 in Pakrac, Croatia. He has completed elementary school in Daruvar, and graduated from Mechanical Engineering Secondary School in Daruvar.

In 1990/91, he commenced his studies at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, majoring in Power Engineering. He earned his B.SC. M.E. at the beginning of 1996. For his Bachelor thesis "Control of the dry steam temperature in thermal power plant 320 MW" he earned excellent grade. Average grade of his studies is very good.

Since 1996, he is employed as a research assistant at the Power Engineering Department, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb. In 1996/97, he commenced his postgraduate studies at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb. He defended his Master thesis "Flow characteristics of aerodynamically optimal axial turbines cascades" on September 21, 2001. As research assistant he has participated on the following research projects: Investigation of rotational fluid flow characteristics (2-08-340), Improvement of energy conversions in turbomachineries (1-20-001).

His research interests are numerical simulations of the heat and mass transport phenomena in the mechanical engineering equipment. He has authored nine scientific papers. He is married and has two children.