

# ***EQUAZIONI DELLA FLUIDODINAMICA E METODOLOGIA CFD***

## **Le equazioni fondamentali della fluidodinamica**

Gli aspetti fisici di qualsiasi flusso di un fluido sono governati dai seguenti tre principi fondamentali: la conservazione della massa, la seconda legge di Newton ( $\vec{F} = m\vec{a}$ ) e la conservazione dell'energia. Questi principi fondamentali possono essere espressi in termini di equazioni matematiche che, nella loro forma più generale, sono in genere equazioni differenziali alle derivate parziali. La fluidodinamica computazionale è un ramo della fluidodinamica che utilizza metodi numerici e algoritmi allo scopo di risolvere e analizzare tali equazioni.

Per ottenere le equazioni fondamentali del moto dei fluidi, sono fondamentali tre passaggi successivi:

1. Scelta appropriata dei principi fisici dalle leggi della fisica;
2. Applicazioni di questi principi ad un modello di flusso adatto;
3. Formalizzazione delle equazioni.

Dalla scelta del principio fisico di conservazione della massa si ottiene l'equazione di continuità. Tale equazione ha una formulazione diversa a seconda del modello usato, infatti in tabella viene riportata l'equazione della continuità nella forma conservativa e non conservativa.

Equazione di continuità in *forma non conservativa* o lagrangiana

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0$$

Equazione di continuità in forma conservativa  
(Euleriana-fissato un volume di controllo finito)

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV + \iint_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0$$

*Forma integrale*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

*Forma differenziale*

Per convenzione  $d\vec{S}$  è diretto sempre verso l'esterno del volume di controllo. Quindi quando anche  $\vec{v}$  è diretta fuori dal volume di controllo, vuol dire che la portata massica fisicamente sta lasciando il volume e si ha dunque un flusso in uscita. Al contrario, quando  $\vec{v}$  è diretta all'interno del volume di controllo, si ha un flusso di massa che entra.

Tabella 4-I Equazione della continuità in forma conservativa e non conservativa

Entrambe le forme espresse in tabella sono ugualmente valide ed una può facilmente essere ricavata dall'altra.

Quando si considera la seconda legge di Newton ( $\vec{F} = m\vec{a}$ ) come principio fisico, si ottiene l'equazione della quantità di moto. Esistono due tipi di forze:

1. *Forze di volume*  $\vec{f}$ , che agiscono direttamente sulla massa volumetrica degli elementi fluidi, ne sono esempi le forze gravitazionali, elettriche e magnetiche.
2. *Forze superficiali*, che agiscono sulla superficie di elementi fluidi e sono dovute a distribuzioni di pressione che agiscono su di una superficie e che sono imposte dal fluido esterno che circonda l'elemento in questione e le distribuzioni di sforzi tangenziali e normali sulla superficie.

Sia gli sforzi tangenziali che quelli normali dipendono dai gradienti di velocità nel flusso. In molti flussi viscosi, gli sforzi normali sono trascurabili rispetto a

quelli tangenziali e divengono importanti quando i gradienti di velocità normale sono molto grandi, come nel caso di un'onda d'urto.

Utilizzando l'approccio Lagrangiano, si ottiene la forma non conservativa dell'equazione della quantità di moto:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{componente lungo } x \rightarrow \rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \rho f_x \\ \text{componente lungo } y \rightarrow \rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \rho f_y \\ \text{componente lungo } z \rightarrow \rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \end{array} \right.$$

dove  $u, v, w$  sono le componenti della velocità rispettivamente nella direzione  $x, y, z$ .

queste equazioni sono dette di Navier-Stokes in onore dei due scienziati che le ricavarono, indipendentemente uno dall'altro, nella prima metà del diciannovesimo secolo.

La forma conservativa della Navier-Stokes è:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{componente lungo } x \rightarrow \frac{D(\rho u)}{Dt} + \nabla \cdot (\rho u \vec{v}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \rho f_x \\ \text{componente lungo } y \rightarrow \frac{D(\rho v)}{Dt} + \nabla \cdot (\rho v \vec{v}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \rho f_y \\ \text{componente lungo } z \rightarrow \frac{D(\rho w)}{Dt} + \nabla \cdot (\rho w \vec{v}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \end{array} \right.$$

Per un fluido newtoniano la curva tensione-velocità di deformazione è lineare e passa per l'origine:  $\tau$  è proporzionale al gradiente di velocità e la costante di proporzionalità è conosciuta con il nome di viscosità.

Enunciando il principio di conservazione dell'energia, si ottiene l'equazione dell'energia. Un'espressione di tale principio è la prima legge della termodinamica, che quando applicata ad un elemento di un fluido in moto diventa:

**variazione temporale di energia in un elemento fluido = flusso di calore netto entrante + potenza meccanica entrante dovuta alle forze di volume e superficie**

il primo membro di questa equazione tiene conto dell'energia totale per unità di massa di un fluido in moto, che è data dalla somma della sua energia interna per unità di massa e della sua energia cinetica per unità di massa,  $v^2/2$ .

Il flusso di calore netto entrante all'interno dell'elemento è dato dal riscaldamento volumetrico, come l'assorbimento o l'emissione di radiazione e dal flusso di calore attraverso la superficie dovuto a gradienti di temperatura come la conduzione termica.

Le equazioni fondamentali possono essere scritte in forma semplificata se si considera un flusso inviscido. Per definizione, un flusso inviscido è un flusso dove i fenomeni di trasporto dissipativi della viscosità, diffusione di massa e conducibilità termica non vengono considerati.

È bene notare come la forma conservativa di tutte le equazioni fondamentali sia sempre la stessa:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = J$$

dove  $U$  il vettore incognito,  $F, G, H$  sono detti termini di flusso (o vettori), e  $J$  rappresenta il termine sorgente ed è pari a zero se le forze di volume sono trascurabili. Dunque le equazioni precedenti governano il flusso e sono sempre le stesse, anche se i campi di moto sono differenti, sia che si tratti del flusso attorno ad un aereo o del flusso subsonico in una galleria del vento. Imponendo le giuste condizioni al contorno è possibile risolvere e trovare le soluzioni particolari di un problema specifico. Le condizioni al contorno e quelle iniziali dettano le soluzioni particolari da ottenere dalle equazioni fondamentali. Ad esempio, per un fluido viscoso le condizioni al contorno su una superficie assumono un valore di velocità relativa tra la superficie e il gas immediatamente su di essa pari a 0 ( $u = v = w =$

0 sulla superficie). Invece per un flusso inviscido la condizione al contorno impone che il flusso sia tangente alla superficie.

La scelta più appropriata e accurata delle condizioni al contorno è molto importante per la CFD, ed è oggetto di un numero crescente di ricerche in tale campo.

## Discretizzazione delle equazioni differenziali alle derivate parziali

Le soluzioni analitiche di equazioni differenziali alle derivate parziali comportano espressioni in forma chiusa che restituiscono la variazione di variabili dipendenti, in maniera continua, all'interno di un dominio. Di contro, le soluzioni numeriche possono restituire una risposta solo in punti discreti di un dominio, detti grid-points. In figura è mostrato un esempio di griglia computazionale.

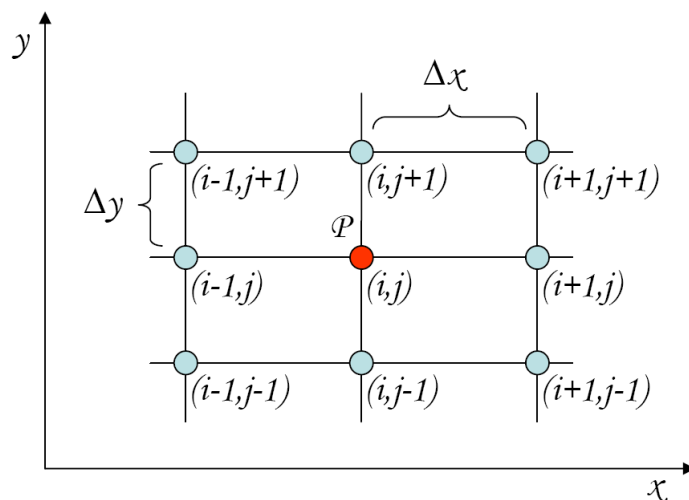


Figura 4.2 Matrice di punti discreti

Nella griglia precedente, viene impiegata una distribuzione uniforme di punti in direzione  $x$  e  $y$ . Le distanze tra due punti consecutivi sono rispettivamente  $\Delta x$  e  $\Delta y$  i quali possono essere uguali oppure di diversa grandezza. Nell'esempio sono costanti dato che la griglia è uniforme ma non sono uguali.

I grid-points vengono identificati tramite un indice logico "i" che varia in direzione  $x$ , ed un indice logico "j" che varia in direzione  $y$ . Quindi, se  $(i, j)$  è l'indice del punto "P", allora il punto immediatamente a destra di "P" avrà un indice  $(i + 1, j)$ , e quello immediatamente a sinistra è  $(i - 1, j)$ , mentre il punto al di sopra è  $(i, j + 1)$  e quello al di sotto è  $(i, j - 1)$ .

I metodi alle differenze finite sono metodi numerici per l'approssimazione delle soluzioni di equazioni differenziali tramite l'uso di equazioni alle differenze finite che approssimano le derivate. Questi metodi sono ampiamente utilizzati nella

CFD. La filosofia del metodo delle differenze finite è quella di sostituire le derivate parziali che appaiono nelle equazioni fondamentali della fluidodinamica con differenze algebriche, in modo da ottenere un sistema di equazioni algebriche risolvibili per le variabili del campo di moto nei singoli grid-points.

Per dare un esempio, si consideri la componente lungo x della velocità  $u_{i,j}$ , allora la velocità  $u_{i+1,j}$  nel punto  $(i+1, j)$  può essere espressa in termini di un'espansione in serie di Taylor attorno al punto  $(i, j)$ :

$$(1) \quad u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^3}{6} + \dots$$

Questa equazione rappresenta l'espressione matematicamente esatta per  $u_{i+1,j}$  se:

1. Il numero di termini è infinito e la serie converge;
2. e/o  $\Delta x \rightarrow 0$ .

Per il calcolo numerico, è impossibile riportare un numero infinito di termini e per tale motivo l'equazione deve essere troncata. I termini di ordine superiore che vengono trascurati rappresentano l'errore di troncamento nella rappresentazione finita della serie.

Ritornando all'equazione (1) e risolvendola per  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}$ :

$$(2) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{6} - \dots = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

Considerando solo il termine  $\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}$  e trascurando quelli di ordine superiore, si ottiene la seguente soluzione per  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}$ .

$$(3) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \quad \text{Derivata in avanti del primo ordine}$$

L'equazione (3) è l'espressione della derivata in avanti del primo ordine per la derivata  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)$  al grid-point  $(i, j)$ .

Se si scrive ora l'espansione in serie di Taylor per  $u_{i-1,j}$  attorno a  $u_{i,j}$ .

Risolvendo per  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}$ , si ottiene:

$$(4) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \quad \text{Derivata all'indietro del primo ordine}$$

sottraendo la (4) dalla (3), e risolvendo per  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}$ , si ottiene:

$$(5) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad \text{Derivata centrale del secondo ordine}$$

Dalla somma della (3) e della (4) si ottiene infine l'espressione della *derivata seconda centrale del secondo ordine*:

$$(6) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x)^2$$

l'espressione alle differenze finite per le derivate di y si ottengono allo stesso modo, ed i risultati sono analoghi a quelli delle equazioni precedenti per le derivate di x.

La stessa filosofia può essere usata per definire l'espressione della derivata mista

$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j}$  nel punto  $(i, j)$ . In tal caso si può scrivere:

$$(7) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)$$

partendo dalla (7), scritta la derivata secondo x come differenza centrale della derivata secondo y, e poi quella secondo y ancora come differenza centrale, si ottiene:

$$(8) \quad \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} = \frac{1}{4\Delta x \Delta y} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j-1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1}) + O[(\Delta x)^2, (\Delta y)^2]$$

la filosofia è la stessa per tutte le approssimazioni alle differenze finite.

Si consideri la variabile dipendente “u” come una funzione dello spazio “x” e del tempo “t”, in questo modo si ottiene una equazione differenziale alle derivate parziali, dove il flusso è noto al tempo “n” e incognito al tempo “n + 1”.

$$(9) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad \text{Equazione ellittica}$$

$$(10) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{Equazione parabolica}$$

$$(11) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{Equazione iperbolica}$$

Nei sistemi fluidodinamici multidimensionali stazionari la discriminante è il numero di Mach; in particolare per  $M < 1$  si ha un sistema di equazioni differenziali ellittico mentre per  $M > 1$  il sistema risulta iperbolico. In realtà poiché è possibile avere, all’interno dello stesso dominio, zone a regime subsonico e zone a regime supersonico ( come nel caso analizzato in questo lavoro di Tesi) si preferisce studiare il problema in forma instazionaria poiché, si può dimostrare, che nella forma non stazionaria il sistema risulta sempre iperbolico e dunque esiste un unico metodo di assegnazione delle condizioni ai limiti ed un unico metodo di soluzione.

Un semplice esempio di equazione differenziale alle derivate parziali iperbolica è data dall’equazione d’ onda unidimensionale,  $\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$  con c velocità del

suono, mentre un esempio di equazione differenziale alle derivate parziali parabolica è data dall'equazione del calore unidimensionale,  $\frac{1}{a} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ , dove  $u(x, t)$  è la temperatura al tempo  $t$  e nella posizione  $x$ , ed  $a$  è la diffusività termica.

Se si considera ad esempio l'equazione (10), questa può essere descritta nella seguente espressione, dove la derivata del tempo è sostituita con una differenza in avanti, mentre la derivata spaziale con una differenza centrale:

$$(10a) \quad \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + O(\Delta t, \Delta x^2)$$

La differenza tra la soluzione analitica di una equazione differenziale alle derivate parziali e la soluzione esatta di una equazione alle differenze finite è data dall'errore di troncamento. Quando  $\Delta x \rightarrow 0$  e  $\Delta t \rightarrow 0$  l'errore di troncamento tende a 0, e quindi l'equazione alle differenze finite tende all'equazione differenziale originale. In questo caso, la rappresentazione alle differenze finite di un'equazione differenziale alle derivate parziali è detta "consistente".

La soluzione dell'equazione (10a) prende la forma di una soluzione che marcia in passi temporali; esaminandola si nota come questa contenga solo un'incognita chiamata  $u_i^{n+1}$  ma che può essere esplicitamente ottenuta dal risultato noto al tempo "n". Questo è un esempio di soluzione esplicita alle differenze finite:

$$(10b) \quad u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

Si può considerare un'altra forma dell'equazione (10) dove le differenze spaziali al secondo membro sono scritte in termini di proprietà medie tra "n" e "n + 1":

$$(12) \quad \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^{n+1} + u_{i-1}^n}{(\Delta x)} \quad \text{Forma di Crank-Nicholson}$$

Ora si ha solo una equazione ma tre quantità incognite al tempo "n + 1" quindi l'equazione (12) applicata ad un dato punto non può da sola restituire la soluzione per  $u_i^{n+1}$ . Più propriamente, questa equazione deve essere scritta per ogni grid-

point, restituendo un sistema di equazioni algebriche, dove le incognite  $u_i^{n+1}$  per tutti i punti ( $i$ ) possono essere risolte simultaneamente. Questo è il caso di una soluzione a differenze finite implicite.

Il metodo esplicito è relativamente facile da impostare e programmare, ma ha come svantaggio il fatto che per un dato  $\Delta x$ , il  $\Delta t$  deve essere minore di un certo limite imposto dai vincoli di stabilità, e questo può portare a elevati tempi di calcolo.

Il metodo implicito ha il vantaggio che la stabilità si può mantenere anche per valori di  $\Delta t$  più elevati, e questo si traduce in un minore tempo di calcolo. D'altra parte, tale metodo è più complicato da impostare e programmare e siccome in genere sono richieste matrici molto estese per ogni passo temporale il tempo di calcolo per ogni passo temporale è più elevato rispetto a quello del metodo esplicito.

In conclusione è importante sottolineare che non esistono garanzie per l'accuratezza e la stabilità di un sistema di equazioni alle differenze finite sotto tutte le condizioni. La soluzione numerica di una equazione differenziale alle derivate parziali è affetta da due tipi di errori: L'errore di discretizzazione, dato dalla differenza tra la soluzione analitica e la soluzione esatta ( senza arrotondamento) della corrispondente equazione alle differenze finite, e l'errore di arrotondamento "ε", che rappresenta l'errore numerico introdotto dopo una serie di calcoli ripetitivi nei quali un computer arrotonda costantemente in numeri. Un'altra proprietà di uno schema numerico è la consistenza. Un sistema numerico si dice consistente se i suoi operatori discreti ( con differenze finite) convergono verso operatori continui ( con derivate) di una PDE per  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ .

Si ha stabilità se "il rumore" ( dato da condizioni iniziali, errori di arrotondamento, ...) non aumenta, mentre si ha convergenza se la soluzione di uno schema numerico converge verso la soluzione reale di una PDE per  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ .

Il teorema dell'equivalenza di Lax stabilisce la condizione per la convergenza: “dato un problema ai valori iniziali propriamente posto e una sua approssimazione alle differenze finite che soddisfa la condizione di consistenza, la stabilità è la condizione necessaria e sufficiente per la convergenza”.

In tabella 4-II vengono riportate in forma schematica le diverse condizioni per la convergenza.

<i>Consistenza</i>	Operatore discreto $\rightarrow$ PDE per $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$
<i>Stabilità</i>	Operatore discreto che non amplifica il “rumore”
<i>Convergenza</i>	Soluzione numerica $\rightarrow$ Soluzione reale per $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$
<i>Teorema dell'equivalenza di Lax</i>	Consistenza + Stabilità $\leftrightarrow$ Convergenza

Tabella 4-II Condizioni per la convergenza

La soluzione sarà stabile se l'errore  $\varepsilon_i$  diminuisce, oppure non aumenta, quando la soluzione avanza dal passo “n” a quello “n+1”. Invece, se l'errore aumenta durante la progressione della soluzione, allora la soluzione è instabile. In altre parole, la soluzione sarà stabile se è soddisfatta la seguente condizione:

$$(13) \quad \left| \frac{\varepsilon_i^{n+1}}{\varepsilon_i^n} \right| \leq 1$$

Per mantenere la stabilità, ci si può riferire alla condizione di Courant-Friedrichs-Lewy (condizione CFL). Questa è una condizione per la convergenza da soddisfare mentre si risolvono alcune PDE e si usa nei casi di utilizzo di schemi marcianti nel tempo, di conseguenza il passo temporale deve essere minore di una certa quantità in molte simulazioni ed inoltre la simulazione produrrà risultati ampiamente incorretti.

Ad esempio, se un'onda attraversa una griglia discreta, allora il passo temporale deve essere più basso del tempo che l'onda impiega ad attraversare due grid-point adiacenti. Come corollario, quando lo spazio tra grid-point si riduce, anche il limite superiore per il passo temporale diminuisce. Essenzialmente, il dominio computazionale di dipendenza deve includere tutto il dominio analitico di dipendenza in modo da assicurare che lo schema possa adeguatamente ricavare le informazioni richieste a formare la soluzione.

Per un caso unidimensionale la condizione CFL è la seguente:

$$(14) \quad C = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \rightarrow t \leq \frac{\Delta x}{c}$$

Dove “C” è detto numero di Courant, e la costante “c” dipende dall'equazione da risolvere.

Le considerazioni precedenti riguardano la stabilità, mentre la questione inerente l'accuratezza è abbastanza differente: il numero di Courant deve essere minore o uguale di 1 per avere stabilità, ma allo stesso tempo si desidera avere una C quanto più prossima all'unità per l'accuratezza.

Per pervenire a una soluzione numerica di un set di equazioni differenziali parziali, si sostituiscono le quantità differenziali con quantità alle differenze finite, tenendo conto del fatto che un errore di troncamento di un certo ordine di grandezza verrà introdotto nel set di equazioni. Riorganizzando le equazioni alle differenze finite si ottiene un sistema di equazioni algebriche.

La scelta della griglia di discretizzazione computazionale è importante poiché influenza sia l'errore di troncamento, sia la stabilità, sia la consistenza.

Un esempio di griglia per un metodo esplicito è mostrato in figura 4.3. I punti noti sono a sinistra e quelli incogniti a destra, inoltre vengono date anche le condizioni al contorno sulla parete.

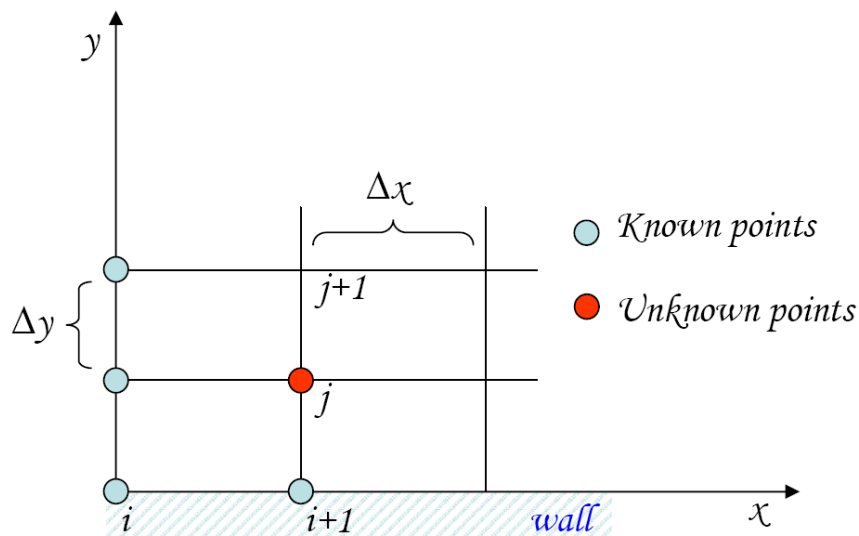


Figura 4.3 Griglia per un metodo esplicito

In questo modo è semplice calcolare il flusso nei punti incogniti usando modelli di discretizzazione ma, come detto prima, il metodo esplicito causa forti riduzioni nella scelta del valore del passo temporale.

La figura 4.4 mostra un altro esempio di griglia computazionale definita per il “metodo completamente implicito”. In tal caso è noto solo un punto dal precedente passo mentre nel passo attuale tutti i punti sono incogniti, eccetto i valori al contorno. Questo porta ad una forma implicita del set di equazioni algebriche. Per quanto riguarda la scelta del passo, tale metodo è più veloce ed incondizionatamente stabile ma può portare ad una scarsa accuratezza.

E' possibile formulare un metodo intermedio. La figura 4.5 mostra la mesh computazionale proposta da Crank-Nicholson. In questo caso, vengono coinvolti tutti i punti della riga sia che essi siano noti che incogniti, ma il centro di discretizzazione è posizionato al punto  $(i + \lambda)$ , con  $\lambda=1/2$  come inizialmente proposto da Crank-Nicholson.

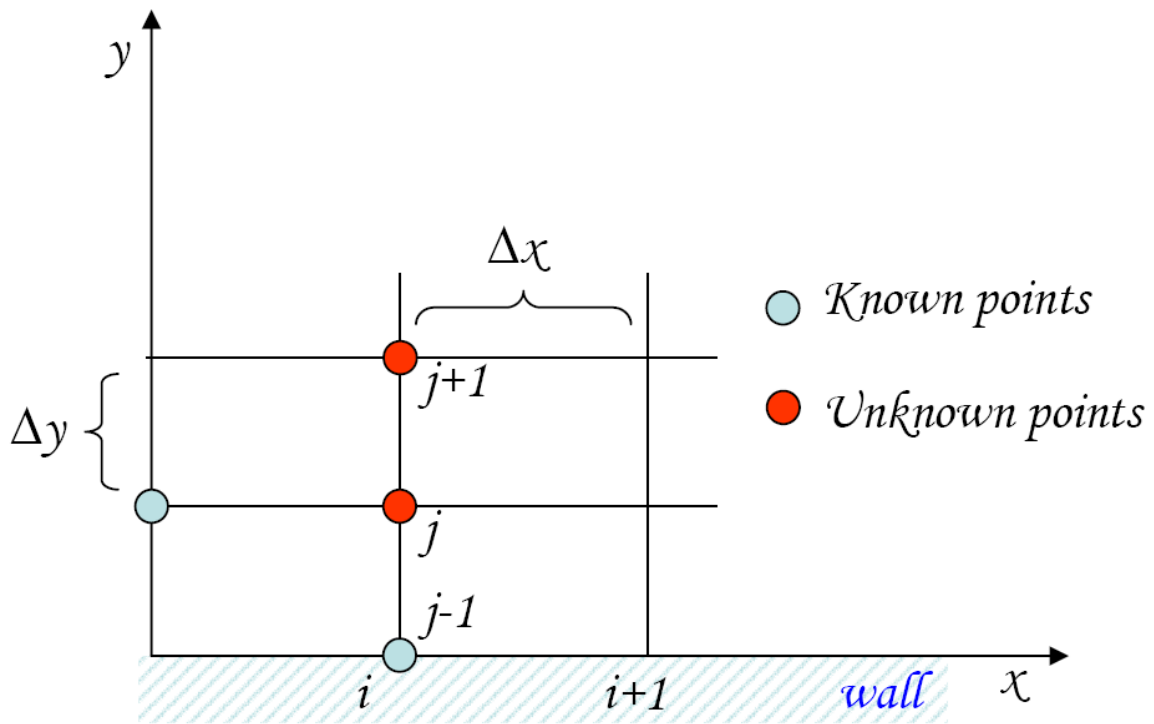


Figura 4.4 Griglia per un metodo interamente implicito

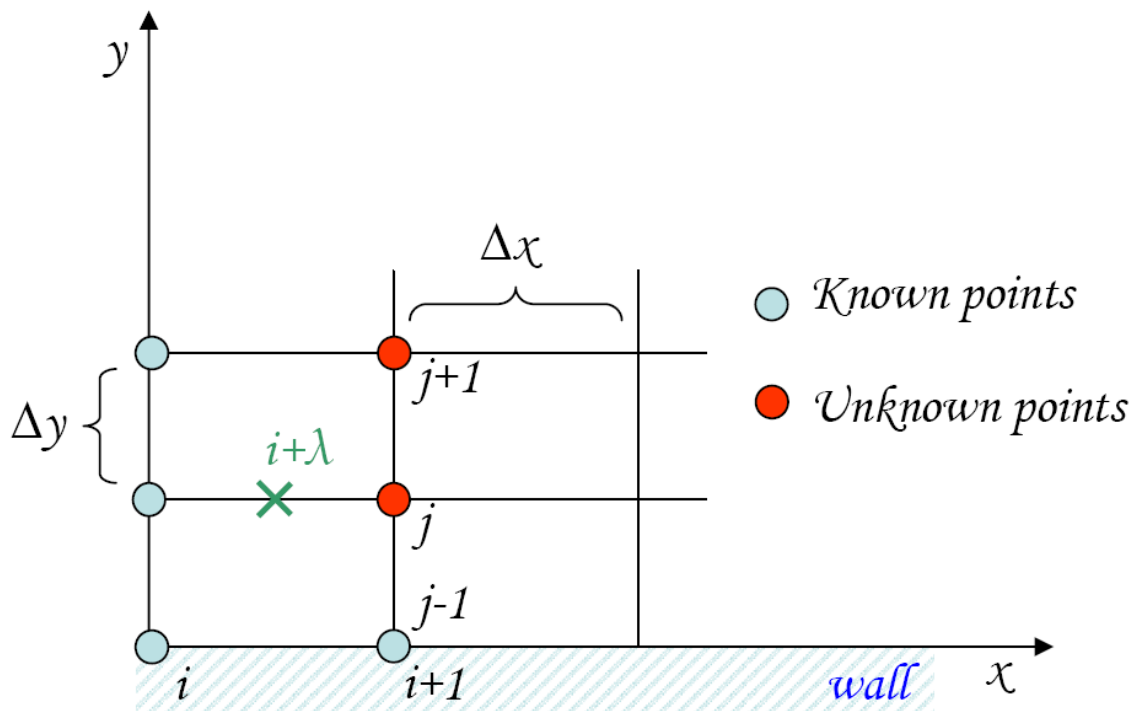


Figura 4.5 Griglia per un metodo implicito generalizzato

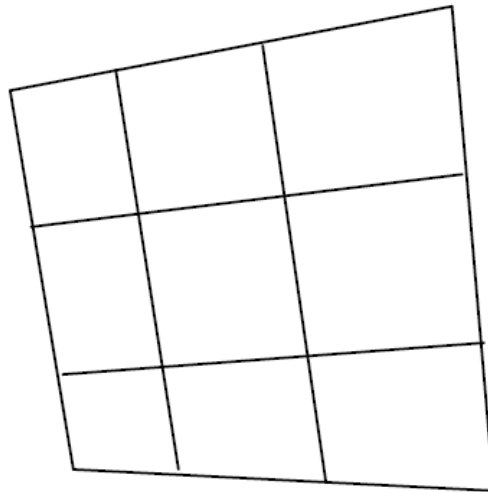
## Il metodo ai volumi finiti

Il metodo ai volumi finiti ( FVM) è un metodo per rappresentare e valutare le equazioni differenziali parziali come equazioni algebriche. Così come nel metodo alle differenze finite, i valori vengono calcolati in postazioni discrete su una geometria meshata. I volumi finiti si riferiscono ai piccoli volumi posti attorno a ciascun nodo su una mesh. Il campo di moto o il dominio è, suddiviso in un set di celle non sovrapposte che ricoprono l'intero dominio. Le leggi di conservazione vengono applicate in alcuni punti discreti, detti nodi, per determinare le variabili di flusso. Questi nodi sono posizionati all'interno delle celle in posizioni tipiche come il centro i vertici e vi è un'ampia libertà nella scelta di celle e nodi. Nel FVM gli integrali di volume nelle equazioni differenziali parziali che contengono un termine di divergenza vengono convertiti in integrali superficiali, usando il teorema della divergenza. Questi termini sono dunque valutati come flussi attraverso le superfici di ogni volumetto. Dato che il flusso che entra in un dato volume è uguale a quello che esce dal volume adiacente, tale metodo è conservativo. Un altro vantaggio di tale metodo è che questo è facilmente formulato anche per mesh non strutturate. Infatti, le celle possono essere triangolari, quadrilatere, etc e possono formare griglie strutturate o non strutturate. Nelle figure 4.6 e 4.7 vengono mostrate alcune griglie tipiche.

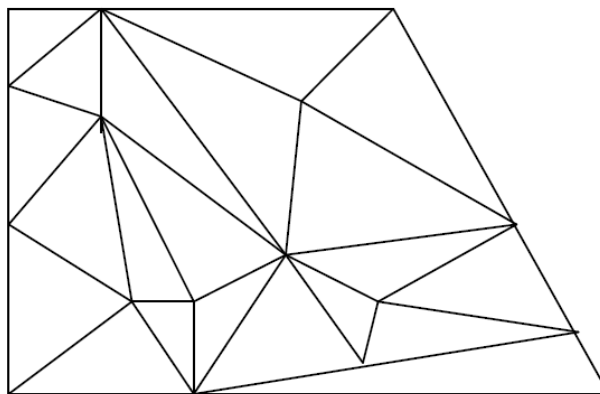
Il termine volume denota il volume di controllo all'interno delle quali vengono applicate le leggi di conservazione, mentre il termine cella denota la suddivisione (mesh) di una griglia. Un importante requisito per le celle è che queste non si sovrappongano e che coprano l'intero dominio.

D'altra parte sono possibili differenti scelte di volumi di controllo; infatti questi possono coincidere con le celle o meno, ma possono anche essere sovrapponibili, la cosa importante è che il flusso uscente da un volume entri all'interno di un altro.

Ovviamente, disaccoppiando volumi e celle la libertà di determinazione della funzione che rappresenta il campo di moto diventa maggiore rispetto sia al metodo agli elementi finiti che a quello alle differenze finite.



**Figura 4.6** Griglia strutturata quadrilatera



**Figura 4.7** Griglia non strutturata triangolare

Il primo passo nel FVM è quello di dividere il dominio in un numero di volumi di controllo dove le variabili di controllo sono posizionate, ad esempio, al centro del volume. Il passo successivo consiste nell'integrazione della forma differenziale delle equazioni fondamentali su ogni volume di controllo. Vengono poi assunti profili interpolanti allo scopo di descrivere la variazione delle variabili interessate tra i centri delle diverse celle. L'equazione che ne risulta è detta discretizzata o equazione di discretizzazione. In questo modo, l'equazione di discretizzazione

esprime il principio di conservazione per la variabile all'interno del volume di controllo.

#### 4.1.1. Importazione della geometria da un software CAD e generazione della griglia

Lo scopo di questa sezione è quello di dare alcuni chiarimenti nei passi da compiere per l'ottenimento di una soluzione CFD di un campo di moto all'interno o attorno ad un oggetto usando un software CFD commerciale.

Il primo passo è la creazione della geometria dell'oggetto, ed a tale scopo esistono diversi format di scambio dati tra differenti pacchetti CAD ( IGES, ACIS, STEP, STL,etc).

Una volta importata la geometria CAD nel generatore di griglia può accadere che questa risulti inconsistente a causa, ad esempio, delle differenze di tolleranza tra software CAD ed il generatore di griglia. Una geometria può risultare inconsistente a causa di differenti ragioni:

- Una faccia può essere formata da spigoli con punti terminali non coincidenti (figura 4.8);
- Un volume può essere costituito da facce che non hanno spigoli coincidenti (figura 4.9);
- Una geometria può essere costituita da volumi che non hanno facce coincidenti;

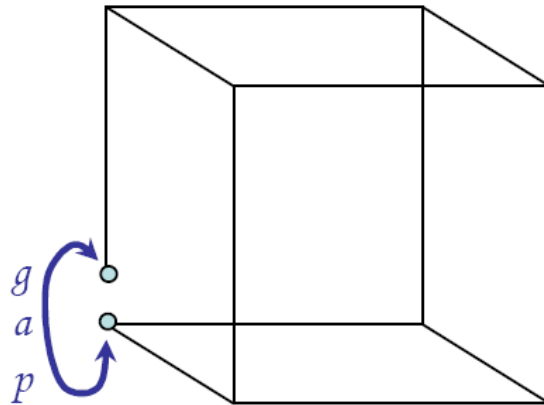


Figura 4.8 Spigoli con punti d'estremità non coincidenti

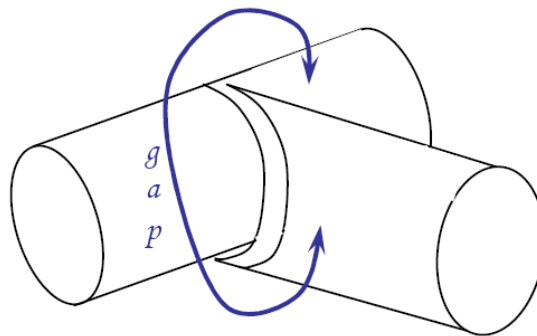


Figura 4.9 Facce con spigoli non coincidenti

Per risolvere questo problema gli spazi vuoti possono essere rimossi facendo collassare i vertici o gli spigoli.

In un elaborato precedente (rif. [7]) è stato impiegato il software CFD ANSYS ICEM sia per creare la geometria che per generare la griglia computazionale.

Una volta ottenuta una valida geometria il processo di generazione della griglia può partire. Le scelte più comuni per suddividere uno spigolo sono quelle di prescrivere il numero di nodi o l'ampiezza dell'intervallo per una mesh equidistanziata o prescrivere una distribuzione attraverso una funzione di distensione (ad esempio, un numero più elevato di punti nodali è richiesto vicino alle pareti se il codice CFD non ha implementata al suo interno una funzione parete per la descrizione dello strato limite). Dato che FLUENT ha implementato al suo interno tale funzione parete, la griglia generata può essere composta da nodi

equidistanti. Le facce possono essere suddivise con una griglia strutturata o instrutturata o ancora con una griglia ibrida. In questo lavoro è stata generata una griglia instrutturata.

#### 4.1.2. Scelta del modello e delle condizioni al contorno

Il passo successivo per ottenere la soluzione di un campo di moto è la scelta del modello nel solutore. La scelta di un calcolo a due o tre dimensioni, a flusso viscoso o inviscido ha un'influenza diretta sul processo di generazione della griglia e sulla soluzione ottenuta.

Nella maggior parte dei casi il flusso sarà turbolento. Una tipica tecnica per risolvere questi problemi è quella RANS ( Reynolds Averaged Navier-Stokes) questa consiste in un'operazione di media temporale per l'equazione del moto per flussi fluidi. Seguendo questa metodologia viene esplicitamente calcolato solo un flusso medio mentre le quantità turbolente vengono modellate. Le soluzioni approssimate medie delle equazioni di Navier-Stokes vengono ottenute in questo modo con minori tempi di calcolo e di risorse. Per una migliore descrizione della turbolenza, esiste un'altra tecnica, chiamata LES ( Large Eddy Simulation). Questa è una tecnica numerica usata per risolvere le equazioni differenziali parziali che governano il flusso turbolento di fluidi ed è stata formulata alla fine degli anni 60 e per la prima volta usata da Joseph Smagorinsky per simulare i flussi d'aria atmosferica, per cui la sua prima applicazione fu quella di calcoli e previsioni meteorologiche. Durante gli anni 80 e 90 la tecnica LES si diffuse ampiamente in campo ingegneristico grazie ai miglioramenti nella capacità di calcolo dei computer. Una ben nota deduzione di Kolmogorov's è che i vortici più grandi del flusso dipendono dalla geometria del flusso mentre i vortici più piccoli sono autosimilari ed hanno un carattere universale. Per cui, nel LES i moti di larga scala del flusso vengono calcolati, mentre gli effetti delle scale più piccole universali (le così dette scale di sub griglia) vengono modellati usando un modello

di scale sub griglia (SGS). In altri termini, i vortici grandi sono esplicitamente risolti mentre gli effetti di quelli più piccoli vengono modellati.

La tecnica LES richiede un minore sforzo computazionale rispetto alla simulazione numerica diretta (DNS), ma maggiori sforzi rispetto a quei metodi che risolvono le equazioni Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS). Il vantaggio principale della tecnica LES è il maggior livello di dettaglio rispetto alle tecniche RANS poiché la LES è in grado di predire caratteristiche istantanee del flusso e di risolvere strutture turbolente di flusso, fornendo un risultato medio locale: le strutture più piccole associate a fenomeni viscosi di dissipazione di energia in calore non sono risolti, mentre i vortici più grandi associati al trasporto di energia del flusso vengono calcolati. Ciò è particolarmente importante in quelle simulazioni che includono reazioni chimiche, come ad esempio la combustione di un combustibile in un propulsore, nello studio di flussi non reagenti, nel trasporto di particelle solide e in simulazioni di flussi multifase. In conclusione, la tecnica RANS può essere scelta per problemi stazionari ed instazionari, bidimensionali o tridimensionali, mentre la LES può risolvere solo problemi instazionari 3-D.

Una volta definita e meshata la geometria, le condizioni al contorno devono essere specificate. I contorni sono in genere ingressi, uscite, pareti, piani di simmetria, piani periodici, oppure un asse per geometrie assialsimmetriche. Per un flusso subsonico, “n-1” condizioni devono essere specificate all’ingresso dove “n” è il numero di gradi di libertà di ciascuna cella : vengono prescritte velocità, temperatura e variabili di turbolenza. Per flussi supersonici, tutti i gradi di libertà devono essere specificati all’ingresso: devono essere prescritte velocità, temperatura, pressione e variabili di turbolenza.

Per un’uscita subsonica deve essere specificata una sola condizione, mentre per un’uscita supersonica non ne deve essere specificata alcuna.

Per flussi incomprimibili con trasferimento di calore o flussi comprimibili, la temperatura o il flusso di calore deve essere specificato sulla parete. Nel caso di

non convergenza della soluzione del campo di moto, alcuni parametri devono essere modificati adeguatamente. Ad esempio per solutori espliciti il numero di CFL può essere cambiato.

La predizione iniziale e la strategia di soluzione per il campo di moto sono molto importanti. Per i calcoli di flusso turbolento, può essere utile iniziare con schemi di ordine più basso e senza turbolenza nella prima fase di iterazioni. Dopo di che le equazioni di turbolenza possono essere attivate ed infine può essere aumentato l'ordine del metodo di discretizzazione.

### 4.1.3. Le equazioni del modello

Un solutore fluidodinamico descrive il comportamento del fluido attraverso le classiche equazioni di Navier-Stokes a cui si aggiungono le due equazioni del modello di turbolenza e quelle per il calcolo delle reazioni chimiche.

Le equazioni di conservazione della massa sono genericamente espresse come:

$$(15) \quad \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_m) + \rho'_m{}^c \quad (m = 1, NSP)$$

dove  $m$  è la specie generica e NSP il numero di specie presenti. Il primo termine a destra rappresenta il trasporto di massa per diffusione, mentre l'ultimo termine è il termine sorgente per le reazioni chimiche.

La conservazione della quantità di moto per la miscela fluida è data da:

$$(16) \quad \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\frac{1}{\alpha^2} \nabla p - A_0 \nabla \left( \frac{2}{3} \rho k \right) + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} + \rho \mathbf{g}$$

Dove il tensore degli sforzi viscosi è pari a:  $\bar{\bar{\sigma}} = \mu[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] + \lambda \nabla \cdot \mathbf{v} \mathbf{I}$ ,

$\mathbf{I}$ = matrice unitaria;  $A_0$  ha valore zero per flussi laminari, valore 1 quando è utilizzato il modello di turbolenza K- $\varepsilon$ ;  $\mathbf{g}$  è la forza gravitazionale.

L'equazione di conservazione dell'energia è espressa come:

$$(17) \quad \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} E) = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + (1 - A_0) \bar{\bar{\sigma}} \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{J} + A_0 \rho \varepsilon + Q' c$$

dove l'ultimo termine rappresenta la quantità di calore dovuta alle reazioni chimiche.

Le equazioni precedenti includono i termini  $k$  ed  $\varepsilon$  in accordo al modello di turbolenza (modello k- $\varepsilon$ ) a due equazioni:

$$(18) \quad \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{v} + \bar{\bar{\sigma}} \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon$$

$$(19) \quad \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\varepsilon) = - \left( \frac{2}{3}c_{\varepsilon 1} - c_{\varepsilon 2} \right) \rho\varepsilon \nabla \cdot \mathbf{v} + \bar{\sigma} \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} \bar{\sigma} \nabla \mathbf{v} - c_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon)$$

I valori delle costanti sono definiti come :

$$c_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad c_{\varepsilon 2} = 1.92; \quad c_{\varepsilon 3} = -1.0; \quad Pr_k = 1.0; \quad Pr_{\varepsilon} = 1.3$$

A queste equazioni si aggiungono quelle di stato per una miscela di gas perfetti:

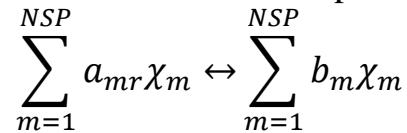
$$p = RT \sum_{m=1}^{NSP} \left( \frac{\rho_m}{W_m} \right)$$

$$e(T) = \sum_{m=1}^{NSP} Y_m e_m(T)$$

$$c_p(T) = \sum_{m=1}^{NSP} Y_m c_{pm}(T)$$

$$h_m(T) = e_m(T) + R \frac{T}{W_m}$$

Per quanto riguarda la parte di *ossidazione del combustibile* e formazione di specie inquinanti, il codice in genere adotta un metodo estremamente semplificato, non essendo proponibile inserire un modello complesso che rappresenti il processo reale di ossidazione con le numerose reazioni e specie chimiche. La generica reazione chimica è così espressa:



dove  $a_{mr}$  e  $b_{mr}$  sono i coefficienti stechiometrici della generica specie 'm' nella reazione 'r'.

Le reazioni all'equilibrio sono, invece, scritte come:

$$\prod_{m=1}^{NSP} (C_m)^{b_{mr} - a_{mr}} = K_c^r(T)$$

dove  $K_c^r(T)$  è la costante di equilibrio in funzione delle concentrazioni delle specie chimiche.

La velocità delle reazioni lente, ossia quelle che non hanno raggiunto l'equilibrio tra velocità della reazione diretta e di quella inversa, vale:

$$\omega'_r = k_{fr} \prod_{m=1}^{NSP} (C_m)^{a'_{mr}} - k_{br} \prod_{m=1}^{NSP} (C_m)^{b'_{mr}}$$

dove  $k = C_e T^x e^{-(E_a/T)}$  con  $E_a$  energia di attivazione.

Una volta calcolata  $\omega'$  si conoscono altri due termini nelle equazioni del moto (15÷19) viste prima, ossia:

$$\rho'_m{}^c = W_m \sum_{r=1}^{NRK} (b_{mr} - a_{mr}) \omega'_r$$

$$Q'_c = \sum_{r=1}^{NRK} Q_r \omega'_r$$

dove  $Q_r = \sum_{m=1}^{NRK} (b_{mr} - a_{mr}) \Delta h_m^0$  rappresenta l'opposto del calore di reazione allo zero assoluto e  $\Delta h_m$  è l'entalpia di formazione della specie.

Per calcolare le suddette velocità di reazione, necessarie allo scopo di accrescere l'accuratezza della soluzione numerica così individuata, è necessario implementare all'interno del solutore un opportuno meccanismo cinetico per la descrizione del processo di combustione e del processo di formazione delle specie inquinanti.

#### 4.1.4. Selezione del meccanismo cinetico

Lo studio numerico di un sistema di propulsione avanzato richiede lo sviluppo di strumenti CFD in modo da investigare i complessi processi fisico-chimici, come l'ignizione, il mantenimento di fiamma e il miscelamento turbolento, che avvengono al suo interno. Inoltre risulta di primaria importanza il raggiungimento sia di una panoramica completa dei meccanismi cinetici che generano gli  $NO_x$  che la comprensione dell'interazione della cinetica chimica con la fluidodinamica. Solo nel momento in cui vengono compresi tali meccanismi è possibile proseguire con prove sperimentali in grado di suggerire nuove strategie per la minimizzazione della produzione di tali inquinanti. A tal scopo esistono due possibili strade, la prima prevede modifiche al processo di combustione stesso mentre la seconda riguarda tutti i processi di post-combustione che permettono la conversione chimica degli  $NO_x$  in prodotti innocui (rif. [1]).

I modelli chimici di combustione hanno un ruolo fondamentale e vanno selezionati tenendo conto sia dell'accuratezza che dei costi computazionali, per cui deve essere selezionato uno schema ridotto per sviluppare la successiva campagna CFD.

I modelli di cinetica chimica si distinguono in meccanismi *dettagliati* e in meccanismi *ridotti*.

I meccanismi di cinetica chimica *dettagliati* descrivono accuratamente il processo di ossidazione e la formazione di  $NO_x$  tenendo conto di tutte le possibili strade di formazione di tali specie, ma, in genere, coinvolgono un numero molto elevato di specie e reazioni, per cui ogni tentativo di includere tutte queste reazioni in una simulazione numerica di un flusso turbolento multidimensionale risulterebbe computazionalmente proibitivo o addirittura impossibile.

Invece, i meccanismi di reazione *diretti* sono in genere implementati all'interno di analisi multidimensionali CFD. Un meccanismo ridotto si ottiene a partire da uno dettagliato trascurando un certo numero di reazioni elementari che non risultano significative nelle condizioni di interesse ( in termini di temperatura e pressione) per l'analisi, e modificando opportunamente alcuni coefficienti di Arrhenius. Tale processo di semplificazione, se da un lato riduce fortemente il numero di specie e reazioni e rende il meccanismo più adatto ad essere implementato in un codice CFD, dall'altro presenta un minore *range* di applicabilità ed inoltre occorre verificare la sua accuratezza rispetto al meccanismo dettagliato. Per tale motivo, in lavoro precedenti ( rif.[7]) è stata effettuata un'analisi per selezionare il meccanismo di cinetica chimica ridotto più adatto alla descrizione del processo di ossidazione dell'idrogeno ed alla modellizzazione della chimica dell'azoto durante la combustione, nelle condizioni operative tipiche del *LAPCAT A2* e che richiedesse bassi costi computazionali.

Le variabili obiettivo che hanno guidato la scelta sono state la *temperatura adiabatica di fiamma*, il *tempo di ritardo all'accensione* e *l'emissione di NO in termini di frazione molare*.

La *temperatura adiabatica di fiamma*  $T_{a,f}$  è la temperatura finale raggiunta da una miscela combustibile, ad una data temperatura e pressione iniziale, quando questa raggiunge l'equilibrio chimico attraverso un processo adiabatico. Chiaramente la  $T_{a,f}$  dipende dalla pressione, la temperatura iniziale e la composizione iniziale della miscela ( rif. [3]).

## ***1. La Fluidodinamica Computazionale***

La fluidodinamica computazionale (brevemente detta CFD, Computational Fluid Dynamics in [inglese](#)) è la tecnica che permette lo studio dei problemi di [fluidodinamica](#) mediante l'utilizzo del [computer](#).

Viene utilizzata nel campo dell'[industria](#) e della ricerca per tutte le problematiche che coinvolgono l'azione di [fluidi](#) (forze aerodinamiche, [motori](#), [pompe](#), [impianti chimici](#), [comfort ambientale](#), ecc.). Esistono oggi numerosi software commerciali che risolvono in questa maniera le equazioni della fluidodinamica. Tra i più noti troviamo [CFX](#), [Fluent](#), [KIVA](#), [NUMECA](#), [Phoenics](#), [STAR-CD](#), [STAR-CCM+](#), [CFD++](#), [Floworks](#) ed altri open source come [Code Saturne](#).

La risoluzione per via analitica delle [equazioni di Navier-Stokes](#) è praticamente possibile solo in caso di flussi laminari, e per geometrie semplici (sfere, lastre piane). I [flussi turbolenti](#) incontrati nelle applicazioni reali richiedono l'ausilio di un [modello di turbolenza](#) e, a causa dell'elevato costo computazionale che essi comportano, necessitano di tecniche numeriche per la soluzione. In tal caso si utilizzano le equazioni di Navier-Stokes ([formulazione RANS](#)) in forma di Reynolds, che richiedono l'utilizzo di ulteriori equazioni (ad esempio il modello k-ε) di chiusura del problema. Un altro approccio consiste nella risoluzione diretta delle strutture vorticosi più grandi e modellizzare ciò che accade per le strutture vorticosi più fini, delimitate dalla risoluzione della griglia di calcolo (Sub-grid Scale) questo approccio è il cosiddetto [Large Eddy Simulation](#) (LES).

In molti casi devono essere risolte anche altre equazioni contemporaneamente alle equazioni di Navier-Stokes e alle equazioni del modello di turbolenza. Esse possono comprendere quelle relative alla concentrazione di specie diverse ([flusso multicomponente](#)), di reazioni chimiche ([flussi reagenti](#)), irraggiamento termico, ecc.. Problemi più complessi richiedono la modellazione di ulteriori fenomenologie, come nel caso dei [flussi bifase](#) (ad esempio gas / liquido) o nel caso di [fluidi non Newtoniani](#).

## ***II. Metodi di discretizzazione***

- *Metodo ai volumi finiti*: è l'approccio standard utilizzato nella maggior parte dei codici commerciali per la CFD. Le equazioni vengono risolte in un volume di controllo discreto (cella).
- *Metodo agli elementi finiti*: questo metodo (il cui acronimo inglese è FEM) è generalmente utilizzato nell'analisi strutturale, ma viene applicato a volte anche allo studio dei fluidi laddove i numeri di Reynolds siano dell'ordine delle decine di migliaia.
- *Metodo alle differenze finite*: è stato il primo adottato nell'ambito della fluidodinamica. Oggi viene comunque usato solo in alcuni codici specializzati.

### ***III. Procedura di analisi***

L'approccio tipico richiede di discretizzare il dominio fluido in celle elementari così da ottenere una griglia di calcolo (anche detta mesh), sulla quale applicare dei metodi di risoluzione iterativi al fine di risolvere le equazioni di Navier-Stokes o le equazioni di Eulero.

Nei diversi approcci evidenziati la procedura di analisi risulta sempre, per grandi linee, simile:

1. Viene definita la geometria (o dominio fisico) del problema da analizzare.
2. Il volume occupato dal fluido viene discretizzato, cioè suddiviso in un gran numero di celle elementari generando una griglia di calcolo.
3. Viene definito il modello fisico (ad esempio, le equazioni del moto + l'equazione dell'energia + le equazioni delle specie) e quindi quello numerico (metodo di discretizzazione delle equazioni, algoritmi per la risoluzione delle equazioni).
4. Vengono definite le condizioni al contorno, ossia vengono specificate le proprietà del fluido nel dominio di calcolo. Per problemi dipendenti dal tempo devono essere specificate le condizioni iniziali.
5. Vengono risolte le equazioni in maniera iterativa. Il calcolo viene interrotto una volta che sia stato raggiunto il grado di accuratezza desiderato.
6. I risultati prodotti vengono visualizzati con un post-processore.
7. Si effettua, infine, l'analisi dei risultati.
8. Va sottolineato che l'integrazione iterativa fra i risultati dell'analisi fluidodinamica e quelli strutturali ad elementi finiti permette di valutare non solo gli effetti dei flussi attorno ai solidi ma anche le loro deformazioni, permettendo di valutare approfonditamente anche effetti variabili nel tempo delle pressioni su una superficie.

## *IV. Le equazioni di Navier-Stokes*

Le equazioni di Navier-Stokes sono un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono il comportamento di un fluido dal punto di vista macroscopico. L'ipotesi di base è che il fluido possa essere modellato come un continuo deformabile. Esse presuppongono perciò la continuità del fluido in esame, oltrove il sistema perde di validità nello studio di un gas rarefatto.

Le equazioni debbono il loro nome da Claude-Louis Navier e da George Gabriel Stokes.

### *IV.1 Il modello matematico*

L'efficienza predittiva di tali equazioni viene pagata in termini di difficoltà di calcolo. Nel caso generale coinvolgono infatti cinque equazioni scalari differenziali alle derivate parziali e 20 variabili. Il bilancio tra equazioni e incognite avviene (come vedremo più avanti) con la definizione delle proprietà del fluido considerato, delle eventuali forze di campo in gioco e con considerazioni matematiche. Inoltre, a causa della loro non linearità, le equazioni di Navier-Stokes non ammettono quasi mai una soluzione analitica (ovvero una soluzione esatta), ma esclusivamente numerica (una soluzione approssimata con un metodo numerico).

Le equazioni di Navier-Stokes sono in grado di descrivere completamente qualsiasi flusso fluido, anche turbolento. In particolare per un flusso turbolento, dove cioè le traiettorie delle particelle di flusso non sono più costanti nel tempo, un approccio numerico di calcolo è chiamato generalmente simulazione numerica diretta. A causa del fatto che le risorse di calcolo necessarie alla loro risoluzione cresce con il numero di Reynolds (quasi con  $Re^3$ ) e che tale numero può avere valori dell'ordine di  $10^6$ - $10^9$ , tale approccio resta tecnicamente impossibile. Alternativa alla simulazione numerica è possibile adottare sistemi meno onerosi quali la formulazione LES o le equazioni mediate.

Le equazioni vengono completate dalle condizioni al contorno e dalle condizioni iniziali (condizioni imposte all'inizio temporale del fenomeno da studiare). Possono inoltre essere integrate dall'equazione di stato dei gas perfetti e dalle equazioni di conservazione delle singole specie gassose nel caso di una miscela di gas.

La soluzione delle equazioni fornisce il campo delle velocità del fluido. Da questo sarà poi possibile risalire a tutte le altre grandezze che caratterizzano il flusso.

## ***IV.2 Ipotesi del modello matematico***

Il modello matematico che permette l'analisi della dinamica dei continui deformabili si basa sulle seguenti caratteristiche:

- fluido continuo;
- fluido chimicamente omogeneo e non reagente;
- fluido privo di cariche elettriche.

### ***IV.2.1 Ipotesi di fluido continuo***

Viene trascurata la natura discontinua della materia, in questo modo sarà possibile far tendere a zero un volume di fluido, senza che questo possa restare privo di materia.

Un parametro fondamentale che caratterizza il mezzo dal punto di vista della continuità è il numero di Knudsen, definito come il rapporto tra il cammino libero medio di una particella costituente il fluido e una lunghezza caratteristica del flusso:

$$\text{Kn} = \frac{l}{L}$$

Se il numero di Knudsen è molto minore di uno, allora è possibile considerare il fluido continuo. Altrimenti sarà necessario studiare il comportamento del gas unicamente su base statistica, mediante la teoria cinetica dei gas, la quale analizza statisticamente la distribuzione delle velocità molecolari e da questa ricava tutte le proprietà del gas.

### ***IV.2.2 Ipotesi di fluido chimicamente omogeneo e non reagente***

Verranno trascurate le perturbazioni dovute alla non omogeneità del flusso ed alle reazioni chimiche. Ciò non sarà del tutto possibile per flussi reagenti quali quelli all'interno di una camera di combustione ad esempio.

### ***IV.2.3 Ipotesi di fluido privo di cariche elettriche***

Verranno trascurate le perturbazioni dovute al campo elettromagnetico. L'interazione di flussi con campi elettromagnetici è studiata dalla magnetofluidodinamica.

## ***IV.3 Derivazione delle equazioni di Navier-Stokes***

Le equazioni di Navier-Stokes sono la formalizzazione matematica di tre principi fisici ai quali i fluidi rispondono, imposta la condizione di continuo deformabile:

- principio di conservazione della massa (equazione di continuità);
- secondo principio della dinamica (bilancio della quantità di moto);
- primo principio della termodinamica (conservazione dell'energia).

Per questo motivo sono spesso nominate anche equazioni di bilancio.

Nei successivi paragrafi si indicherà sempre il vettore velocità del fluido con la notazione  $\vec{u}$ , mentre  $p$  e  $\rho$  indicheranno rispettivamente la pressione statica e la densità del fluido stesso. Il simbolo  $\vec{a}$  rappresenterà il vettore delle accelerazioni di campo.

### ***IV.3.1 Descrizione del moto lagrangiana ed euleriana***

È possibile descrivere temporalmente il moto di un fluido attraverso due punti di vista.

Il primo, detto lagrangiano o materiale, segue la traiettoria di ogni particella di fluido, identificata solitamente dalle sue coordinate iniziali, analizzando le variazioni delle sue proprietà fisiche (come ad esempio la densità o la temperatura). Indicando le coordinate iniziali come  $(a; b; c; 0)$ , le coordinate della particella saranno variabili dipendenti:

$$\begin{cases} x = x(a; b; c; t) \\ y = y(a; b; c; t) \\ z = z(a; b; c; t) \end{cases}$$

così come le altre proprietà specifiche.

Il punto di vista euleriano, viceversa, osserva le variazioni delle proprietà fisiche per ogni data posizione spaziale  $(x; y; z)$ . Le coordinate spaziali (assieme alla variabile temporale) saranno perciò variabili indipendenti. Le variabili dipendenti sono perciò funzione di quelle spaziali e temporali. Ad esempio, per la velocità:

$$\vec{u} = \vec{u}(x; y; z; t).$$

### ***IV.3.2 Equazione di continuità***

#### ***IV.3.2.1 Equazione di continuità - Punto di vista lagrangiano***

Il principio di conservazione della massa, nel caso di moto di un fluido, può essere espresso dal punto di vista lagrangiano affermando che:

« resta invariata nel tempo la massa contenuta in un volume (deformabile) che si muove con il fluido. »

In questo caso dunque, in termini matematici:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0.$$

Applicando il teorema del trasporto di Reynolds alla densità  $\rho$  (massa per unità di volume), otteniamo l'equazione di continuità in forma di divergenza:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

che può essere riportata anche in forma indiciale:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0$$

che può essere riportata anche in forma estesa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = 0$$

o in termini della derivata totale:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

#### ***IV.3.3.2 Equazione di continuità - Punto di vista euleriano***

Lo stesso principio di conservazione, dal punto di vista euleriano, può essere così espresso:

« la variazione di massa contenuta in un volume fisso eguaglia la differenza tra i flussi di massa entranti ed i flussi di massa uscenti (opposto del flusso netto). »

Un generico flusso di massa per unità di superficie, che passi attraverso una coppia di facce P e Q di un volume, è considerato come il prodotto tra la densità  $\rho$  del fluido, la componente della velocità in direzione perpendicolare alla faccia considerata e l'area della faccia medesima.

Considerando l'ipotesi di elemento infinitesimo possiamo approssimare il valore del flusso nel punto centrale di ogni faccia con il suo valore medio e calcolare il valore del flusso su una faccia a partire dal valore assunto sulla faccia precedente tramite una serie di Taylor troncata al primo ordine:

$$\Phi_{P_x} = \rho u \, dydz \quad \Phi_{Q_x} = \rho u \, dydz + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \, dx \, dy \, dz$$

dove con  $P_x$  e  $Q_x$  si sono indicate le facce normali (cioè perpendicolari) alla direzione  $x$ . Seguendo l'enunciato del principio, ovverosia calcolando la differenza dei flussi, otteniamo:

$$\Phi_x = \Phi_{Q_x} - \Phi_{P_x} = \rho u \, dydz + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \, dx \, dy \, dz - \rho u \, dydz = \frac{\partial \rho u}{\partial x} \, dx \, dy \, dz$$

Estendendo il ragionamento alle altre direzioni spaziali otteniamo che il flusso netto sarà uguale a:

$$\Phi = \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \, dx \, dy \, dz = [\nabla \cdot (\rho \vec{u})] \, dx \, dy \, dz.$$

Ponendo ora la variazione di massa nel tempo uguale all'opposto del flusso netto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \, dx \, dy \, dz = -[\nabla \cdot (\rho \vec{u})] \, dx \, dy \, dz$$

ed infine, per unità di volume:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

riottenendo l'espressione precedentemente mostrata.

### ***IV.3.3 Bilancio della quantità di moto***

#### ***IV.3.3.1 Equazione di bilancio della quantità di moto - Punto di vista lagrangiano***

La conservazione della quantità di moto (definita come prodotto della massa per la velocità o, per unità di volume, della densità per la velocità) si esprime affermando che:

« la variazione temporale della quantità di moto di un sistema coincide con la risultante delle forze esterne al sistema »

e matematicamente:

$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = \vec{F}_e$$

dove, appunto, con  $F_e$  si è indicata la somma delle forze esterne, di massa (come ad esempio la forza di gravità) e di superficie (quali ad esempio le forze viscosse).

Introducendo questa differenziazione nelle forze ed una formulazione integrale:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \vec{u} dV = \int_{V(t)} \rho \vec{F}_V dV + \int_{S(t)} \vec{F}_S dS$$

Il primo membro può essere trasformato in forma più conveniente mediante il teorema del trasporto di Reynolds:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \vec{u} dV = \int_{V(t)} \left( \frac{D\rho \vec{u}}{Dt} + \rho \vec{u} (\nabla \cdot \vec{u}) \right) dV$$

che può essere ridotta nella forma:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \vec{u} dV = \int_{V(t)} \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} dV + \int_{V(t)} \vec{u} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} \right) dV$$

dove l'ultimo integrale coincide con l'equazione di continuità ed è perciò nullo.

Se si applica il teorema della divergenza all'ultimo integrale dell'equazione della quantità di moto, sarà possibile scriverlo come integrale di volume. L'equazione si trasforma quindi come segue:

$$\int_{V(t)} \left( \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} - \rho \vec{F}_V - \nabla \cdot \underline{\underline{T}} \right) dV = 0$$

dove con  $T$  con doppia sottolineatura si è indicato il tensore delle tensioni. Dato che l'uguaglianza precedente deve valere per qualsiasi arbitrario volume di integrazione, dovrà essere nullo l'integrando:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{F}_V + \nabla \cdot \underline{\underline{T}}$$

che esprime l'equazione della quantità di moto (per unità di volume).

#### ***IV.3.3.2 Equazione di bilancio della quantità di moto - Punto di vista euleriano***

Il secondo principio della dinamica esprime la conservazione della quantità di moto e, per un elemento del fluido può essere enunciato come segue:

« la variazione, nel tempo, della quantità di moto del fluido contenuto nel volume di controllo  $\tau$ , sommata al flusso netto di quantità di moto attraverso la superficie  $\sigma$ , uguaglia la risultante delle forze esterne agenti sul fluido contenuto nel volume stesso. »

Quindi, con formulazione integrale:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{u} dV + \oint_S (\rho \vec{u}) \vec{u} \cdot \hat{n} dS = \int_V \vec{F}_V dV + \oint_S \underline{\underline{T}} dS$$

dove il volume (come la superficie S che lo racchiude) non è funzione del tempo.

#### IV.3.3.3 Il tensore delle tensioni per un fluido

Il tensore delle tensioni o tensore degli sforzi è un tensore bidimensionale, caratterizzato da nove componenti  $T_{ik}$  che rappresentano le tre componenti degli sforzi nelle tre direzioni spaziali di un certo sistema di riferimento cartesiano. In forma matematica:

$$\underline{\underline{T}} = \begin{Bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Bmatrix}.$$

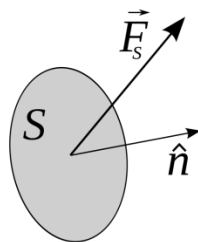
Se si considera una generica superficie, orientata secondo il versore  $\hat{n}$  come nella figura, e la risultante delle forze elementari che le molecole di fluido in prossimità della faccia positiva esercitano su quelle in prossimità della faccia negativa si ha che lo sforzo relativo alla superficie S ed al versore  $\hat{n}$  è:

$$\vec{T}_n = \frac{\vec{F}_n}{S}$$

Il pedice n indica che la forza dipende dalle dimensioni e dall'orientamento della superficie, mentre lo sforzo dal solo orientamento.

Nel caso statico, cioè di un fluido in quiete, a differenza della meccanica dei solidi, l'unica forza sarà puramente normale e lo sforzo risultante sarà chiamato pressione. In un fluido in moto invece, l'attrito tra strati adiacenti e che si muovono a differenti velocità darà luogo a forze risultanti oblique.

Al contrario dei solidi elastici, per i quali gli sforzi dipendono essenzialmente dalla deformazione attuale delle particelle, per i fluidi gli sforzi dipendono dalla velocità di deformazione.



#### IV.3.3.4 Fluido non micropolare

Nel caso in cui il fluido sia non micropolare infine che il tensore è simmetrico, ovvero  $T_{ik} = T_{ki}$ , cosicché le nove componenti sono ridotte a sei quantità indipendenti. Ciò è dovuto al fatto che i momenti meccanici agenti sulle facce di un certo volume (per esempio in forma di parallelepipedo rettangolo), rispetto ad un certo asse (per esempio  $z$ ), che passi per il centro del volume, sono:

$$|\vec{M}_z| = T'_{12} bc \frac{a}{2} - T''_{12} bc \left(-\frac{a}{2}\right) + T'_{21} ac \left(-\frac{b}{2}\right) - T''_{21} ac \frac{b}{2}$$

mentre l'equazione del momento meccanico di un moto attorno ad un baricentro di un parallelepipedo è:

$$|\vec{M}_z| = I_z \omega_z = \rho abc \frac{a^2 + b^2}{12} \omega_z$$

dove con  $I_z$  si è indicato il momento d'inerzia attorno all'asse  $z$  e con  $\omega_z$  la velocità angolare. Eguagliando le precedenti espressioni si ottiene:

$$\rho \frac{a^2 + b^2}{12} \omega_z = \frac{T'_{12} + T''_{12}}{2} - \frac{T'_{21} + T''_{21}}{2}.$$

Al tendere del volume a 0, le lunghezze  $a$ ,  $b$  e  $c$  tenderanno a 0, mentre gli sforzi sulle facce opposte tenderanno ad un valore comune. Resta quindi:

$$T_{12} - T_{21} = 0$$

che vale anche per gli altri assi.

#### ***IV.3.3.5 Relazioni tra sforzi e velocità di deformazione: fluidi newtoniani isotropi***

Un fluido si definisce newtoniano quando la sua viscosità non varia con la velocità e, per questo motivo, la relazione matematica che lega il tensore degli sforzi alle componenti del tensore della velocità di deformazione è lineare.

Desiderando trovare le relazioni che legano sforzi e velocità di deformazione, analizziamo i casi più semplici per poi sommarne gli effetti (grazie alla linearità del problema), ricavando il caso generale.

Il caso più semplice in assoluto sarà il caso statico: come già osservato gli sforzi saranno puramente normali, mentre il tensore delle velocità di deformazione (che indicheremo con  $\underline{\underline{\epsilon}}$ ) è nullo per ipotesi. In termini matematici:

$$\begin{cases} T_{ik} = -p & \text{per } i = k \\ T_{ik} = 0 & \text{per } i \neq k. \end{cases}$$

Consideriamo adesso un flusso in moto, dove però, per un particolare sistema di riferimento cartesiano, gli sforzi siano puramente normali alle superfici di un elemento di forma parallelepipedica (sistema di riferimento degli assi principali di deformazione). Per esempio supponiamo che sia:

$$\begin{cases} T_{ik} = 0 & \text{per } i \neq k \\ T_{11} > T_{22} = T_{33} . \end{cases}$$

Gli effetti del sistema di sforzi precedente su di un fluido, sono differenti nel caso di fluido isotropo (come ad esempio acqua ed aria) oppure anisotropo (come ad esempio il sangue, le cui molecole conferiscono al fluido proprietà diverse nelle differenti direzioni). L'esperienza fisica dimostra che i fluidi che interessano l'aerodinamica e l'idrodinamica sono fluidi newtoniani ed isotropi, altrimenti detti fluidi stokesiani. Analizzeremo perciò un fluido isotropo, dove cioè dovrà essere  $\varepsilon_{12} = 0$ :

$$\begin{cases} \varepsilon_{ik} = 0 & \text{per } i \neq k \\ \varepsilon_{11} > 0 \\ \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} < \varepsilon_{11} . \end{cases}$$

Resta infine da considerare il caso più generale, dove cioè tutte le componenti degli sforzi saranno diversi da zero:

$$T_{ik} \neq 0 \quad \forall i, k \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{ik} \neq 0 \quad \forall i, k.$$

Ogni componente del tensore degli sforzi sarà una certa funzione, lineare per fluidi newtoniani, delle componenti del tensore delle velocità di deformazione. Sviluppando tale funzione in serie di Taylor (arrestata al primo ordine per la sua proprietà di linearità), si ottiene:

$$T_{ik} = f_0 + f_1(\varepsilon_{mn}).$$

Resta ora da ricavare tali funzioni lineari: trattando il problema in un sistema di riferimento particolare quale quello degli assi principali di deformazione, si ha:

$$\begin{cases} T_{11} = f_0 + a_1\varepsilon_{11} + b_1\varepsilon_{22} + b_1\varepsilon_{33} \\ T_{22} = f_0 + a_2\varepsilon_{22} + b_2\varepsilon_{11} + b_2\varepsilon_{33} \\ T_{33} = f_0 + a_3\varepsilon_{33} + b_3\varepsilon_{11} + b_3\varepsilon_{22}. \end{cases}$$

Nel primo caso analizzato sarà quindi:

$$f_0 = -p.$$

A causa del fatto che studiamo un fluido stokesiano, vi è inoltre completa equivalenza di comportamento tra le tre direzioni principali di deformazione  $x_1, x_2, x_3$  e quindi:

$$\begin{cases} a_1 = a_2 = a_3 = a \\ b_1 = b_2 = b_3 = b \end{cases}$$

e dunque il sistema iniziale si potrà scrivere come:

$$\begin{cases} T_{11} = f_0 + (a - b)\varepsilon_{11} + b \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii} \\ T_{22} = f_0 + (a - b)\varepsilon_{22} + b \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii} \\ T_{33} = f_0 + (a - b)\varepsilon_{33} + b \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii} \end{cases}$$

Infine, tenendo conto che

$$\sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii} = \nabla \cdot \vec{u}$$

e ponendo per comodità

$$\begin{cases} a - b = 2\mu \\ b = \lambda \end{cases}$$

si ottiene:

$$\begin{cases} T_{11} = -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + 2\mu \varepsilon_{11} \\ T_{22} = -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + 2\mu \varepsilon_{22} \\ T_{33} = -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + 2\mu \varepsilon_{33} \end{cases}$$

dove il secondo termine a secondo membro descrive l'effetto della viscosità dovuto alla variazione di volume di una particella di fluido.

Non resta ora che generalizzare il sistema di equazioni precedente al caso di una terna di riferimento qualsiasi:

$$\begin{cases} T_{kk} = -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + 2\mu \varepsilon_{kk} \\ T_{ik} = 2\mu \varepsilon_{ik} \quad i \neq k. \end{cases}$$

La prima equazione del sistema precedente evidenzia il fatto che, nel caso generale, i tre sforzi normali sono differenti tra loro. La loro media è:

$$\begin{aligned} \frac{T_{11} + T_{22} + T_{33}}{3} &= -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + \frac{2}{3} \mu (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) = \\ &= -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{u} \\ &= -p + \mu' \nabla \cdot \vec{u} \end{aligned}$$

dove con  $\mu'$  si è indicata la viscosità di volume (o in terminologia anglosassone bulk viscosity), la quale descrive la differenza tra lo sforzo normale medio e la pressione di un fluido, dovuta alla viscosità. Il valore della viscosità di volume in genere è trascurabile per i gas, in particolare per quelli monoatomici.

#### IV.3.4 Conservazione dell'energia

Il primo principio della termodinamica, ovvero il principio di conservazione dell'energia può essere espresso dicendo che:

La variazione nell'unità di tempo dell'energia totale del fluido contenuto nel volume di controllo sommata al flusso netto di energia totale attraverso le facce del volume di controllo uguaglia la somma della potenza delle forze agenti sull'elemento di fluido e del flusso netto di energia termica trasmessa all'elemento di fluido per conduzione.

Come si nota in questa formulazione viene trascurata l'energia trasmessa all'elemento per irraggiamento. Formalizzando matematicamente questo principio si sfrutterà il concetto di energia totale per unità di massa  $E$  che è uno scalare definito come:

$$E = e + \frac{1}{2}V^2$$

cioè la somma tra l'energia interna delle molecole e l'energia meccanica degli elementini di fluido.

Nell'enunciato si parla di flusso netto di energia totale: come per la quantità di moto si indicherà questo flusso come il prodotto tra il flusso di massa e l'energia totale per unità di massa trasportata in ogni direzione:

$$\Phi_E = \frac{\partial E \rho u}{\partial x} + \frac{\partial E \rho v}{\partial y} + \frac{\partial E \rho w}{\partial z}$$

La potenza degli sforzi agenti sull'elementino di fluido considerato comprende sia la potenza sviluppata dagli sforzi viscosi del tensore  $S$  sia gli sforzi associati alla pressione.

Ricorrendo alla definizione di potenza come prodotto di una forza per una velocità, si potrà scrivere:

$$P_S = \frac{\partial(S_{xx}u + S_{yx}v + S_{zx}w)}{\partial x} + \frac{\partial(S_{xy}u + S_{yy}v + S_{zy}w)}{\partial y} + \frac{\partial(S_{xz}u + S_{yz}v + S_{zz}w)}{\partial z}$$

per quanto riguarda gli sforzi viscosi, mentre per la pressione sarà:

$$P_P = - \left( \frac{\partial p u}{\partial x} + \frac{\partial p v}{\partial y} + \frac{\partial p w}{\partial z} \right)$$

La potenza delle forze di campo si definisce come:

$$P_c = \rho a_x u + \rho a_y v + \rho a_z w$$

Per quanto riguarda la potenza termica trasmessa per conduzione attraverso le facce dell'elementino è necessaria la definizione di un vettore  $\vec{q} = [q_x, q_y, q_z]^T$  flusso termico. Sarà possibile scrivere:

$$- \left( \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right)$$

L'equazione completa che formalizza il primo principio della termodinamica per i fluidi in movimento sarà quindi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial E \rho u}{\partial x} + \frac{\partial E \rho v}{\partial y} + \frac{\partial E \rho w}{\partial z} = & - \left( \frac{\partial p u}{\partial x} + \frac{\partial p v}{\partial y} + \frac{\partial p w}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial (S_{xx} u + S_{yx} v + S_{zx} w)}{\partial x} + \frac{\partial (S_{xy} u + S_{yy} v + S_{zy} w)}{\partial y} + \frac{\partial (S_{xz} u + S_{yz} v + S_{zz} w)}{\partial z} + \\ & + \rho a_x u + \rho a_y v + \rho a_z w - \left( \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

#### IV.3.5 Osservazioni e chiusura del problema

Le 3 equazioni (due equazioni scalari ed un'equazione vettoriale) appena derivate sono insufficienti, da sole, alla chiusura del problema della determinazione del campo di moto del fluido. Infatti le equazioni contengono 20 incognite:

- densità
- vettore velocità (3 incognite)
- pressione
- tensore degli sforzi viscosi  $S$  (9 incognite)
- vettore accelerazione di campo (3 incognite)
- energia interna  $e$
- vettore flusso termico  $\vec{q}$ , sempre riconducibile a una funzione di un coefficiente di conducibilità termica e della temperatura (2 incognite).

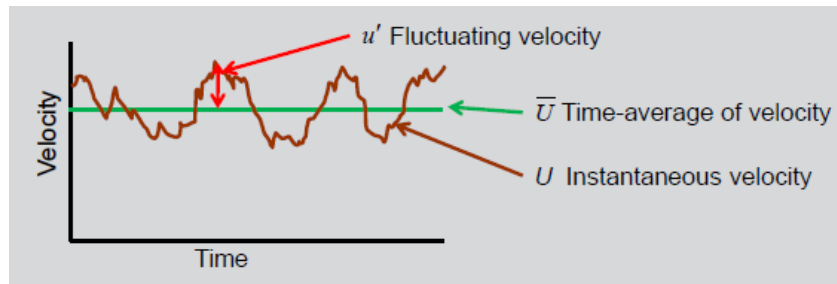
Queste equazioni sono del tutto generali e per la loro applicazione è necessaria una sorta di specializzazione delle stesse alla situazione di lavoro.

Per la chiusura del problema è quindi necessario definire le proprietà termofisiche del fluido in esame (che permettono di definire la conducibilità termica, la densità, l'energia interna e una o più equazioni di stato in grado di determinare anche temperatura e pressione) e il campo di forze in cui si muove (determinando il vettore di accelerazioni di campo). Inoltre si osserva che il tensore degli sforzi viscosi  $S$  è simmetrico, con la conseguenza che le incognite effettivamente contenute sono 6 e non 9 e sono determinabili sperimentalmente o teoricamente specificando il tipo di fluido. Saranno successivamente necessarie le condizioni iniziali e le

condizioni al contorno, trattandosi di equazioni differenziali (problema di Cauchy o problema di von Neumann).

## TURBOLENZA IN ANSYS FLUENT

In ambito ingegneristico spesso non c'è la necessità di conoscere, istante per istante, il valore della velocità istantanea in tutto il dominio di calcolo, ma basta conoscere la velocità media temporale. Questa considerazione rappresenta di fatto il punto di partenza per trattare la turbolenza.



In ogni istante di tempo vale la seguente relazione:

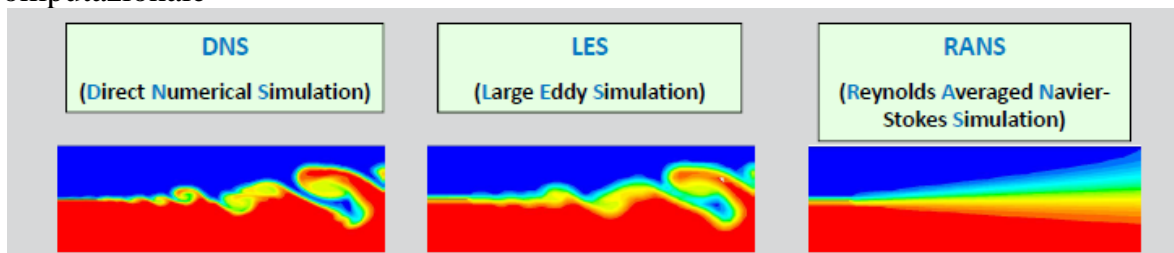
$$U = \bar{U} + u'$$

Il valore medio temporale di  $u'$  è uguale a zero:  $\overline{u'} = 0$ , il valore medio del quadrato della  $u'$  invece non è necessariamente uguale a zero:  $\overline{u'^2} \neq 0$ .

Una grandezza cui si farà riferimento è l'energia cinetica turbolenta  $k$ , definita come:

$$k = \frac{1}{2} * (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$$

Esistono differenti approcci per rendere la turbolenza trattabile dal punto di vista computazionale



L'approccio DNS consente di risolvere le equazioni instazionarie di Navier-Stokes complete e cioè su tutte le scale spaziali e temporali.

Questo tipo di simulazione non richiede alcun modello di turbolenza ma è necessario avere una griglia di calcolo molto fitta: la dimensione delle celle deve essere minore della dimensione del vertice di scala più piccola. E' chiaro che una mesh di questo tipo ha un costo computazionale proibitivo.

L'approccio LES consente di risolvere le equazioni di N-S mediante nello spazio. I vortici più grandi vengono risolti mentre quelli aventi dimensioni più piccole degli elementi della mesh vengono modellati. Questo approccio è dunque meno oneroso del precedente dal punto di vista computazionale ma è ancora troppo elevato per le applicazioni pratiche, perchè la mesh richiesta deve essere comunque molto fitta.

L'approccio RANS risolve le equazioni di N-S mediate nel tempo. Tutte le scale di lunghezza turbolente vengono modellate. Vari modelli sono disponibili. Questo è l'approccio usato in campo industriale, pertanto su di esso ci si soffermerà maggiormente.

Mediare nel tempo le equazioni di N-S significa sostanzialmente sostituire ogni grandezza con somma del suo valor medio temporale con la componente istantanea.

Così facendo, ci si ritrova con equazioni che hanno al suo interno sei incognite (gli sforzi di Reynolds) che vengono raggruppate nel tensore di Reynolds.

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_k \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} \quad R_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} \quad (\text{Reynolds stress tensor})$$

$$R_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \begin{pmatrix} -\rho \overline{u'^2} & -\rho \overline{u'v'} & -\rho \overline{u'w'} \\ -\rho \overline{u'v'} & -\rho \overline{v'^2} & -\rho \overline{v'w'} \\ -\rho \overline{u'w'} & -\rho \overline{v'w'} & -\rho \overline{w'^2} \end{pmatrix}$$

Il problema può essere chiuso in due modi:

### 1) Reynolds-Stress Models (RSM)

Gli sforzi di Reynold vengono calcolati risolvendo sei equazioni aggiuntive, le equazioni di trasporto:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \overline{u'_i u'_j}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \bar{u}_k \overline{u'_i u'_j}) = P_{ij} + F_{ij} + D_{ij}^T + \Phi_{ij} - \varepsilon_{ij}$$

Questo approccio richiede a sua volta la necessità di modellare molti dei termini presenti in queste equazioni aggiuntive.

Questo approccio è vantaggioso per complessi flussi turbolenti tridimensionali, soprattutto per flussi molto swirlati e caratterizzati da una grande curvatura delle linee di flusso.

Tuttavia si tratta di un approccio più complesso, costoso dal punto di vista computazionale e difficile da mandare a convergenza rispetto ai modelli che si servono della viscosità turbolenta ("eddy viscosity").

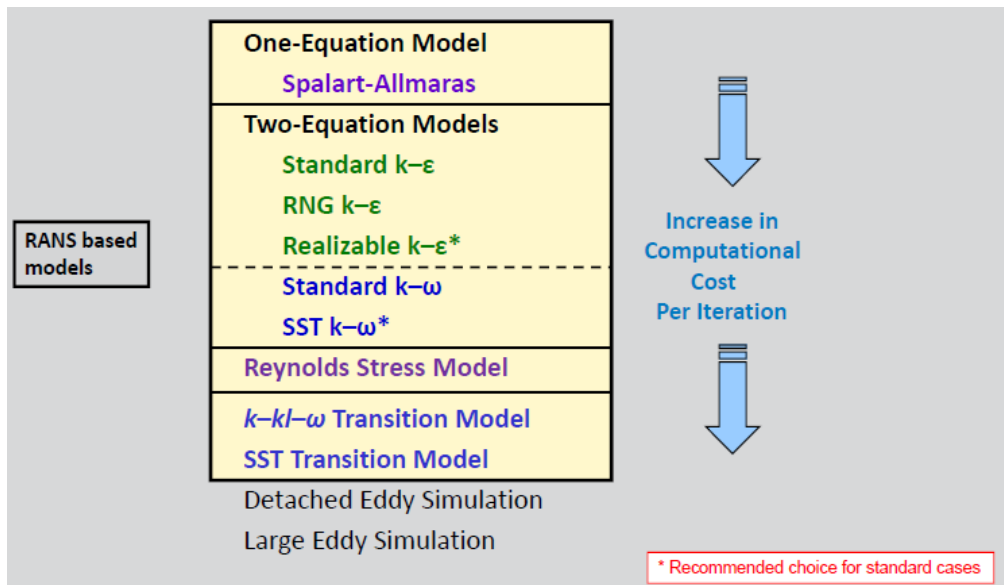
### 2) Eddy Viscosity Models

Questi modelli si basano sulla ipotesi di Boussinesq per la quale gli sforzi di Reynolds vengono modellati usando una viscosità turbolenta (o vorticosa),  $\mu_T$

$$R_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$$

Questa ipotesi è ragionevole per flussi turbolenti relativamente semplici (boundary layers, flussi in condotti, etc. ).

Facendo questa ipotesi, il problema si chiude con due sole equazioni aggiuntive. Si riportano qui di seguito i modelli RANS disponibili:



E' importante notare che tutti i modelli di turbolenza sono caratterizzati da un certo grado di empirismo. Le equazioni infatti non possono essere derivate dai principi fondamentali. Inoltre le equazioni vengono calibrate sulla base di osservazioni sperimentali e considerazioni.

### Two-Equations Models

Questi modelli prevedono di risolvere le equazioni di trasporto.

Potenzialmente tutti i modelli usano l'equazione di trasporto dell'energia cinetica turbolenta:

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P - \rho \epsilon; \quad P = \mu_t S^2 (ske) \quad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

↑ production    ↓ dissipation

Molte variabili di trasporto sono state proposte ed usate per la seconda equazione. La viscosità turbolenta viene poi formulata combinando le variabili di trasporto.

## Standard k- ε (SKE) Model

Le equazioni del modello k-ε standard sono di seguito riportate:

**k-transport equation**

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \rho \varepsilon; \quad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

**ε-transport equation**

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} \mu_t S^2 - \rho C_{2\varepsilon} \varepsilon)$$

**coefficients**

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$  ← Empirical constants determined from benchmark experiments of simple flows using air and water.

**turbulent viscosity**

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Annotations in the diagram: 'production' points to  $\mu_t S^2$ , 'dissipation' points to  $-\rho \varepsilon$ , and 'inverse time scale' points to  $\frac{\varepsilon}{k}$ .

Il modello SKE è il più utilizzato nelle applicazioni industriali.

Risulta essere robusto ed abbastanza accurato.

I parametri del modello sono calibrati usando dati provenienti da esperimenti quali ad esempio lo studio del flusso in un condotto, del flusso su una piastra piana, etc.

Il modello contiene a sua volta sottomodelli per tener conto della compressibilità del flusso, della combustione, galleggiabilità, etc.

Le limitazioni del modello SKE sono le seguenti:

Non è adatto in quei casi in cui il flusso è caratterizzato da grandi gradienti di pressione, separazione massiva, elevato swirl e grande curvatura delle linee di flusso.

Lo spreading rate of round jets non viene descritto accuratamente.

La produzione di k è sovrastimata nelle regioni caratterizzate da grandi strain rate (ad esempio, vicino ad un punto di ristagno).

## Realizable k- ε (RKE) Model (Shih)

L'equazione del coefficiente di dissipazione ε viene derivata dalla media quadratica della fluttuazione turbolenta, ed inoltre molte condizioni di realizzabilità vengono applicate agli sforzi di Reynolds.

Il modello RKE viene spesso preferito al modello SKE per le seguenti ragioni:

Predice accuratamente lo spreading rate di jets sia planar che round.

Da risultati migliori nei casi di flussi rotanti, forti gradienti di pressione avversi, separazione del flusso, ricircolo

Va a convergenza più velocemente.

## Spalart-Allmaras (S-A) Model

Si tratta di un modello a basso costo computazionale che risolve una singola equazione di trasporto di una viscosità turbolenta modificata.

Questo modello è stato specificamente progettato per applicazioni aerospaziali che coinvolgono flussi confinati. Viene però utilizzato con buoni risultati anche nel campo delle turbomacchine (ad esempio nello studio di profili alari), purchè i fenomeni di separazione del flusso e ricircolo non siano eccessivi.

Si ottengono buoni risultati anche nel caso in cui il flusso si muove con un gradiente di pressione avverso.

### k-omega Models

Nei modelli k- $\omega$  l'equazione di trasporto del coefficiente di dissipazione turbolenta,  $\mathcal{E}$ , viene sostituita da un'equazione del coefficiente di dissipazione specifica,  $\omega$ .

L'equazione di trasporto dell'energia cinetica turbolenta è ancora presente.

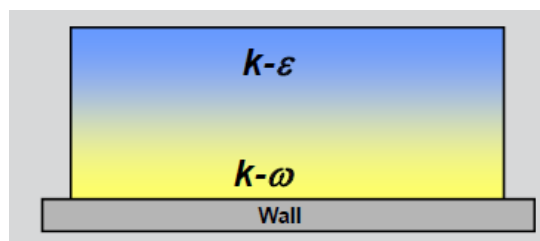
$$\begin{aligned}
 R_{ij} &= -\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \\
 \mu_t &= \alpha^* \rho \frac{k}{\omega} \\
 \rho \frac{Dk}{Dt} &= \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \beta^* f_\beta k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \\
 \rho \frac{D\omega}{Dt} &= \alpha \frac{\omega}{k} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \beta f_\beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right]
 \end{aligned}
 \left. \vphantom{\begin{aligned} R_{ij} \\ \mu_t \\ \rho \frac{Dk}{Dt} \\ \rho \frac{D\omega}{Dt} \end{aligned}} \right\} \omega = \text{specific dissipation rate}$$

$$\omega \approx \frac{\varepsilon}{k} \propto \frac{1}{\tau}$$

I modelli k- $\omega$  descrivono meglio dei modelli k- $\mathcal{E}$  il flusso a parete. Predicono con maggiore accuratezza i fenomeni di separazione, transizione, effetti legati ai bassi valori del Re e l'impingement.

Oltre al **modello k- $\omega$  standard** (Wilcox, 1998) è disponibile anche il **modello SST k- $\omega$**  (Menter).

Il modello SST è un modello ibrido che combina i vantaggi del modello k- $\mathcal{E}$  con quelli del modello k- $\omega$ . Il modello k- $\omega$  infatti descrive meglio il substrato viscoso vicino alla parete, mentre il k- $\mathcal{E}$  descrive meglio il flusso nel core.



Dunque, i due modelli vengono combinati in maniera tale da ottenere un modello che si comporta come il k- $\omega$  standard vicino alla parete e come il k- $\mathcal{E}$  nel cuore del flusso.

## RNG k-ε Model

Le costanti del modello sono derivate dalla teoria dei gruppi adimensionali piuttosto che da considerazioni empiriche.

I vantaggi rispetto al modello k-ε standard sono molto simili a quelli derivanti dall'uso del modello RKE.

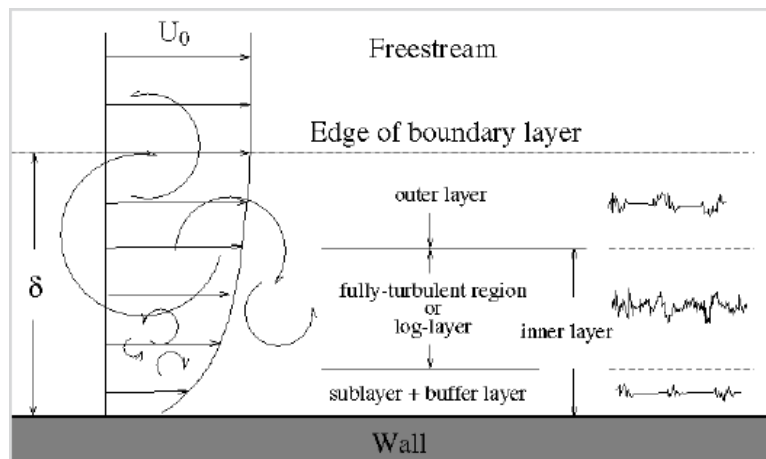
## Reynolds Stress Model (RSM)

Invece di usare la viscosità turbolenta per chiudere le equazioni RANS, il modello RSM risolve un'equazione di trasporto per ogni sforzo di Reynolds.

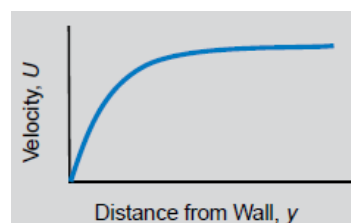
Il modello che ne risulta è molto più oneroso dal punto di vista computazionale ed anche molto difficile da mandare a convergenza. Per tale motivo, il modello RSM viene utilizzato solo nei casi in cui i modelli basati sulla viscosità turbolenta falliscono. Sostanzialmente questo accade nei casi in cui la caratteristica principale del flusso è un forte swirl, come ad esempio accade in un ciclone.

Si vuole ora mostrare come viene affrontato in ANSYS FLUENT il problema della **turbolenza in prossimità della parete**.

La struttura del flusso in prossimità della parete può essere schematizzato come segue:

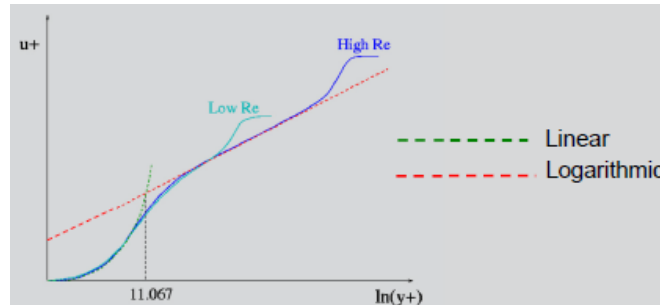


Vicino alla parete la velocità cambia rapidamente:



Se invece si considerano scale logaritmiche per entrambi gli assi, una velocità adimensionalizzata  $U/U_\tau$  ( $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_{wall}}{\rho}}$ ) ed una distanza dalla parete

adimensionalizzata ( $y^+ = \frac{yu\tau}{\nu}$ ) si perviene ad un grafico la cui forma è in genere la stessa per tutti i flussi.



Dunque, se il comportamento del flusso a parete risulta essere spesso prevedibile, ne consegue che si possono usare delle funzioni per descrivere il flusso a parete piuttosto che usare una mesh molto fitta per risolvere accuratamente lo strato limite.

Queste funzioni sono chiamate **wall functions**.

Bisogna dunque operare una scelta su come modellare il flusso a parete. La scelta è tra risolvere il substrato viscoso ed utilizzare una wall function.

### **Risolvere il substrato viscoso**

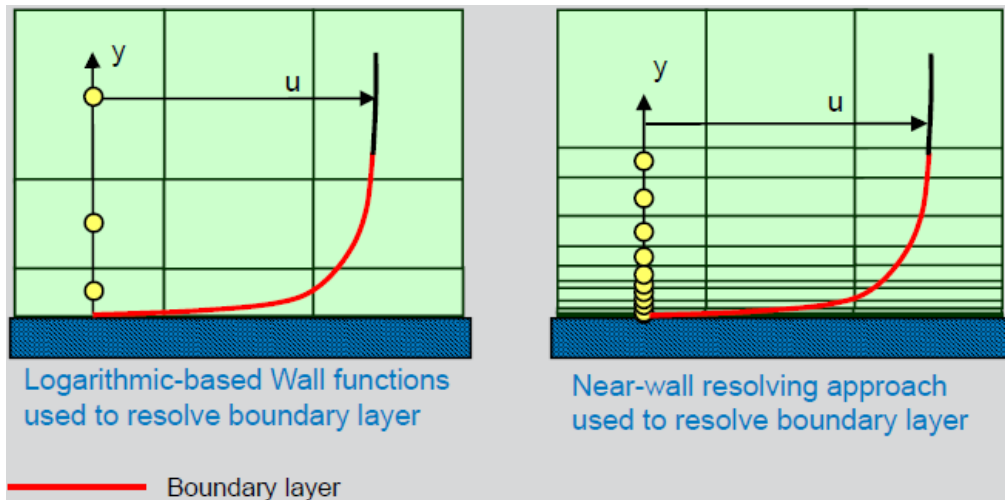
Il primo nodo di griglia deve essere posto in corrispondenza di  $y^+ = 1$ . Questo determinerà un significativo incremento del numero di celle. In questo caso occorre utilizzare un modello di turbolenza a basso numero di Reynolds.

Nella pratica, se le forze sulla parete sono di fondamentale importanza per la simulazione (resistenza aerodinamica, prestazioni della pala di una turbomacchina) bisogna allora ricorrere a questo approccio.

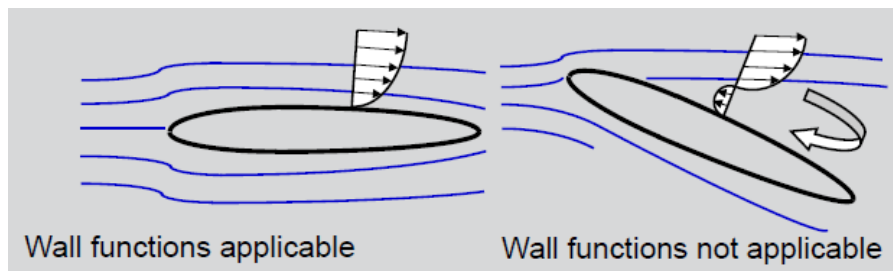
### **Usare una wall function**

Il primo nodo di griglia deve essere tra  $30 < y^+ < 300$ . Al di sotto di 30 il modello non è più valido, al di sopra di 300 il flusso a parete non viene risolto in maniera corretta. In questo caso occorre utilizzare un modello di turbolenza ad alto numero di Reynolds (SKE, RKE, RNG).

Nella pratica, questo è l'approccio che si utilizza se si è interessati a predire il comportamento del flusso all'interno del dominio piuttosto che alle forze di parete.



In alcune situazioni, come ad esempio la separazione dello strato limite, le wall functions non descrivono accuratamente il campo di moto a parete.



Per tali situazioni sono state sviluppate le cosiddette "**Non-equilibrium wall functions**". Tuttavia esse sono molto empiriche, per cui se è possibile si raccomanda fortemente il ricorso ad un approccio più rigoroso, andando cioè a risolvere direttamente lo strato limite.

Oltre alle wall functions e le non-equilibrium wall functions esistono altri due modi per trattare il flusso vicino alla parete, per i quali però si rimanda alla user's guide di ANSYS FLUENT.

