



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Ingegneria Industriale DII  
Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Aerospaziale

**Simulazione delle grandi scale di getti  
turbolenti multifase**

Relatore: *Prof. Francesco Picano*

Laureanda: *Debora Quintabà*

Matricola: 1077948

Anno accademico 2015-2016



# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Moto turbolento e Large-Eddy Simulation</b>	<b>7</b>
2.1	Moto turbolento . . . . .	7
2.1.1	La Cascata di energia e la teoria di Kolmogorov . . . . .	8
2.1.2	Fluidodinamica computazionale . . . . .	12
2.2	Perché la LES? . . . . .	14
2.2.1	Equazioni filtrate . . . . .	15
2.2.2	Modello di Smagorinsky e Smagorinsky dinamico . . . . .	17
<b>3</b>	<b>LES comprimibile per getti multifase</b>	<b>19</b>
3.1	Spray in regime turbolento . . . . .	19
3.1.1	Evaporazione . . . . .	21
3.2	Formulazione matematica . . . . .	23
3.3	Modelli per i termini incogniti . . . . .	25
3.4	Equazioni fase liquida . . . . .	26
3.4.1	Equazioni lagrangiane del moto delle particelle . . . . .	27
3.4.2	Variazione di dimensione e temperatura delle particelle . . . . .	28
3.4.3	I termini di accoppiamento . . . . .	30
3.5	Modelli stocastici . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Analisi comparativa</b>	<b>35</b>
4.1	Codice utilizzato . . . . .	35
4.2	Parametri simulazione . . . . .	37
4.3	Risultati LES con griglia fine . . . . .	38
4.3.1	Campi istantanei . . . . .	39

Indice	Indice	
4.3.2	Frazione di massa $\Phi$ . . . . .	42
4.3.3	Campo di saturazione e velocità di evaporazione . . . . .	43
4.3.4	Velocità della fase portante e di quella dispersa . . . . .	46
4.3.5	Raggio delle particelle . . . . .	48
4.3.6	Discussione dei risultati . . . . .	53
4.4	Risultati LES con griglia grossolana . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Conclusioni</b>	<b>69</b>

# Capitolo 1

## Introduzione

La ricerca nell'ambito dei getti turbolenti multifase è progredita molto negli ultimi decenni, grazie alla crescita e allo sviluppo di tecniche numeriche avanzate, che consentono delle analisi preliminari molto utili specialmente in campo scientifico. Lo studio di questi fenomeni suscita interesse in svariati settori, come quello ambientale, meteorologico, aerospaziale, automobilistico e molti altri. Ne sono un esempio le tempeste di sabbia, la dispersione delle ceneri vulcaniche in atmosfera, il trasporto di sedimenti nei corsi d'acqua, ma anche e soprattutto motori a combustione interna, motori con turbine a gas, razzi a propellente solido e liquido.

In particolare, in questo contesto, il tema di indagine è l'evaporazione di particelle liquide in uno spray turbolento, pertanto le principali applicazioni riguardano l'atomizzazione, l'evaporazione e la combustione in motori che utilizzano combustibili liquidi ad iniezione diretta. In questi casi il combustibile viene iniettato nella camera di combustione e le goccioline, che si formano in seguito all'atomizzazione, evaporano nel getto turbolento dando luogo a reazioni chimiche. Il motivo dello studio dell'evaporazione negli spray risiede dunque nel tentativo di migliorare l'efficienza della combustione e di ridurre le emissioni inquinanti, che hanno limiti sempre più restrittivi.

La dispersione delle goccioline, la turbolenza e le reazioni chimiche coinvolte sono processi strettamente legati l'uno all'altro: per questo motivo lo studio degli spray e la loro ottimizzazione è diventato un compito molto difficile a livello pratico/sperimentale, in direzione opposta al crescente progresso nello sviluppo di

codici di fluidodinamica computazionale (CFD) [Chen et al., 2006].

La fisica di questo problema, e di conseguenza il relativo approccio numerico, è molto complessa soprattutto perché il getto turbolento in questione oltre ad essere multiscala è anche multifase, quindi è necessaria un'approfondita conoscenza della fisica e della chimica dei complessi meccanismi di interazione tra la fase gassosa e la fase liquida presenti nello spray.

Nel nostro caso lo studio viene effettuato su uno spray composto da una *fase gassosa continua* di aria e vapore di acetone e una *fase liquida dispersa* costituita da piccole goccioline di acetone (indeformabili). La descrizione del processo di evaporazione è lo scopo principale di questo lavoro, quindi non verranno considerate la fase di atomizzazione iniziale e le reazioni chimiche: il regime in cui ci si pone viene detto *regime diluito*, dove fenomeni di collisione e break-up sono trascurabili, e dove vi è un forte accoppiamento tra le due fasi presenti, *two-way coupling*, tramite trasferimento di massa, quantità di moto ed energia da una fase all'altra.

Lo strumento utilizzato per caratterizzare la dinamica dello spray di acetone è la simulazione delle grandi scale, o Large Eddy Simulation (LES). La LES, rispetto alla simulazione numerica diretta (DNS), è in grado di studiare flussi turbolenti a numeri di Reynolds elevati con un ragionevole costo computazionale: questo è possibile poiché non vengono risolte tutte le scale del moto, come nella DNS, ma solo le più grandi, e l'effetto delle scale non risolte viene simulato attraverso dei modelli, come ad esempio il modello di Smagorinsky. Ovviamente si ha una perdita di informazioni relativa alla dinamica delle scale non risolte ed è proprio l'entità di questa perdita che si vuole osservare qualitativamente in questa tesi. L'obiettivo finale, infatti, è quello di vedere quanto le simulazioni LES riescono a riprodurre il fenomeno fisico dell'evaporazione delle particelle di acetone in uno spray turbolento, rispetto al medesimo caso studiato con la DNS.

La DNS che viene presa come riferimento è stata implementata con gli stessi parametri delle LES in un dominio cilindrico discretizzato nello spazio per mezzo di una griglia non uniforme di  $N_\theta \times N_r \times N_z = 128 \times 223 \times 640$  nodi. Per avere una visione più ampia del comportamento della LES nello studio di questo fenomeno, sono stati studiati quattro casi diversificati per risoluzione della griglia e numero di goccioline immesse. Per quanto riguarda la risoluzione della griglia,

## 1. Introduzione

si è ridotto il numero di nodi rispetto alla DNS, in un caso di un fattore 64 (4 per ogni direzione) e in un altro di un fattore 512 (8 per ogni direzione). Per quanto concerne invece il numero di particelle immesse, in due simulazioni viene usato l'approccio delle *particelle rappresentative*, il quale consente di ridurre notevolmente il costo computazionale, introducendo un numero inferiore di particelle nello spray e considerando che ognuna di esse abbia un effetto sulla fase gassosa che è  $k$  volte quello della singola particella liquida. Si considerano due casi: il primo con  $k = 55$  e il secondo con  $k = 110$ .

Tutto ciò è possibile grazie all'utilizzo di un preesistente codice numerico parallelo, CYCLON, che è stato messo a punto per simulazioni LES multifase. Per la fase gassosa viene usato un approccio Euleriano, mentre per quella dispersa un approccio Lagrangiano.

In generale si è potuto osservare come i risultati ottenuti con la LES con una griglia sufficientemente fine, a meno di uno sfasamento nella zona di ingresso, siano coerenti con quelli ottenuti con la DNS; in questo caso il fatto di usare particelle rappresentative non ha comportato significativi errori e ha ridotto notevolmente il costo computazionale.





# Capitolo 2

## Moto turbolento e Large-Eddy Simulation

### 2.1 Moto turbolento

Lo studio del moto turbolento è fondamentale per la comprensione di gran parte dei fenomeni che avvengono in natura ma anche e soprattutto di quelli in ambito ingegneristico e meteorologico. Oltre al fatto che i flussi di interesse sono per la maggior parte turbolenti, la motivazione fondamentale che spinge allo studio della turbolenza è la capacità di trasporto di massa, quantità di moto ed energia e la capacità di miscelamento dei fluidi che comporta, decisamente molto più efficace di quello che avviene in regime laminare.

D'altra parte, mentre per il moto laminare si possono trovare soluzioni analitiche alle equazioni della fluidodinamica, per i moti a regime turbolento questo non è possibile. Le alternative sono quindi studiare i flussi turbolenti in campo sperimentale o con metodi numerici: i limiti cui si deve far fronte sono dati, nel primo caso, dalle caratteristiche dei sensori e dalla difficoltà di riproducibilità dell'esperimento, nel secondo caso dal numero di incognite e dalla difficoltà nell'implementare il modello su geometrie complesse.

Per distinguere se ci si trova in regime laminare o turbolento si è soliti usare il numero di Reynolds,  $Re$ : un flusso si dice turbolento quando presenta  $Re$  elevati, tuttavia non vi è un valore preciso che determina il passaggio da un regime all'altro. Questo parametro adimensionale è definito come il rapporto tra

le forze d'inerzia e quelle viscosi che agiscono sul fluido:

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.1)$$

dove  $U$  e  $L$  sono la velocità e la lunghezza caratteristica del flusso e  $\nu$  la viscosità cinematica del fluido. Si deduce, dunque, che in un flusso turbolento le forze d'inerzia prevalgono su quelle viscosi, al contrario di quanto avviene nel moto laminare.

Nell'approccio allo studio di questo fenomeno si incorre nel cosiddetto *problema del caos deterministico*, ovvero il sistema risulta fortemente sensibile a piccolissime variazioni delle condizioni iniziali. Quest'ultime, una volta definite, portano ad un'unica soluzione e se minimamente perturbate ne forniscono un'altra in generale diversa dalla prima. Facendo però una media temporale dei due segnali, il risultato è lo stesso: è quindi la soluzione istantanea ad essere soggetta al problema del caos deterministico. Risulta chiaro, quindi, che a causa della natura caotica del moto turbolento, l'approccio più adatto a trattarlo sia quello statistico. Si prende in considerazione una gran quantità di campi istantanei o realizzazioni e si effettua una media che viene detta *media d'insieme*, ottenendo in questo modo un campo di valori statistici. La media d'insieme della velocità si ottiene da:

$$\langle u^n(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_1^N u^n(t) = U(t) \quad (2.2)$$

con  $N$  il numero di realizzazioni. Per un fenomeno statisticamente stazionario la media d'insieme può essere effettuata come una media temporale di campi istantanei che si rilevano per tempi successivi.

Ovviamente anche per il moto turbolento valgono le equazioni di Navier-Stokes, tuttavia la loro risoluzione diretta (DNS), fornisce sì informazioni molto dettagliate del campo di moto, ma allo stesso tempo richiede l'elaborazione di un numero enorme di informazioni, non attuabile agli elevati numeri di Reynolds di interesse pratico.

### 2.1.1 La Cascata di energia e la teoria di Kolmogorov

Il flusso turbolento è caratterizzato da strutture vorticosi tridimensionali, multiscala e non stazionarie. Queste strutture vorticosi multiscala possono avere



**Figura 2.1:** *Disegno di strutture vorticosi in un moto turbolento, Leonardo da Vinci*

dimensioni da chilometriche a submillimetriche e quindi vi può essere una separazione tra la più grande e la più piccola scala anche dell'ordine di  $10^6$ . I moti delle grandi scale sono fortemente influenzati dalla geometria del flusso e controllano il trasporto e il miscelamento; i moti delle piccole scale sono determinati in base all'energia che ricevono dalle grandi scale e dalla viscosità, hanno quindi un comportamento universale e indipendente dal tipo di flusso [Pope, 2001].

Il primo a teorizzare il trasferimento di energia dalle grandi alle piccole scale e la dissipazione di energia che ne consegue, fu Richardson, intorno al 1920. Le strutture vorticosi, chiamate *eddies*, sono definite come regioni dello spazio in cui il flusso si muove con una certa coerenza: hanno una dimensione caratteristica indicata con  $l$ , una velocità caratteristica  $u(l)$  e un tempo caratteristico  $\tau(l) = l/u(l)$ .

Le strutture vorticosi, o eddies, più grandi contengono la maggior parte di energia cinetica; questa energia viene trasferita via via ad eddies più piccoli, fino a che non viene dissipata per effetto della viscosità. Questo fenomeno viene chiamato *cascata di energia*.

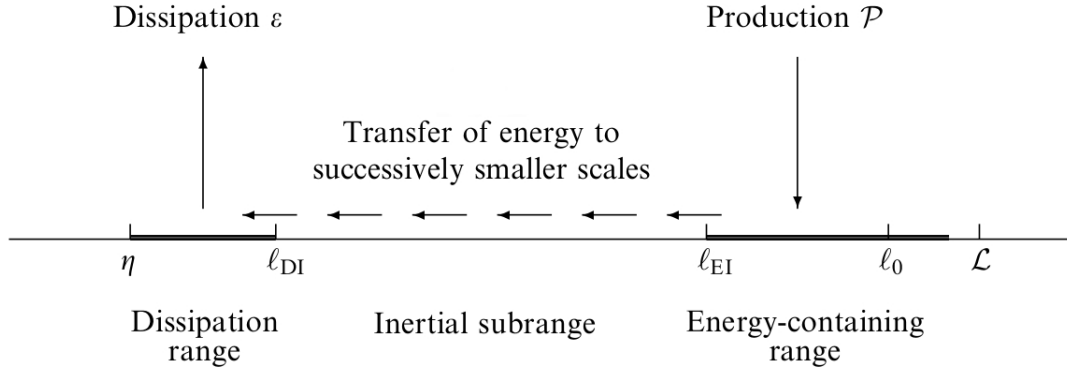
Per flussi turbolenti ad alto numero di Reynolds, si dimostra che le strutture vorticosi più grandi, con  $l = l_0 \simeq L$ , hanno  $Re_{l_0} = u_{l_0} l_0 / \nu$  dello stesso ordine di grandezza del  $Re$  del flusso, per questo motivo la loro dinamica è sostanzialmente legata ai termini inerziali. La dinamica delle piccole scale, invece, caratterizzata

da  $l \ll L$  e quindi  $Re_l \sim 1$ , è influenzata dai termini viscosi, che in questo caso diventano importanti. Il trasferimento di energia continua perciò dalle grandi scale alle più piccole finché gli effetti dissipativi della viscosità non diventano così preponderanti da indurre una dissipazione di energia cinetica. La scala a cui gli sforzi viscosi, proporzionali agli elevati gradienti di velocità, dissipano l'energia del flusso, viene chiamata *scala di Kolmogorov*,  $\eta$ , dal matematico russo Andrej Kolmogorov. E' la scala più piccola esistente nel flusso turbolento in corrispondenza della quale la cascata di energia giunge a termine.

Nel 1941 Kolmogorov formulò una teoria dimensionale sulla turbolenza omogenea e isotropa, anche detta K41. Questa teoria è formulata per mezzo di tre ipotesi:

- Ipotesi zero o ipotesi di locale isotropia: le strutture vorticosi più grandi sono influenzate dalla geometria del problema, quindi sono fortemente anisotrope. Le strutture vorticosi più piccole non dipendono invece dalla direzione di osservazione e quindi dalla geometria, sono *isotrope*.
- Prima ipotesi di similarità: nei flussi turbolenti ad alto numero di Reynolds, la statistica delle piccole scale della turbolenza è *universale* e dipende solo dall'energia cinetica trasferita  $\epsilon$  e dalla viscosità  $\nu$ , non dal tipo di flusso considerato.
- Seconda ipotesi di similarità: le scale con lunghezza caratteristica  $l$ , tale che  $\eta \ll l \ll l_0$ , hanno un comportamento universale che dipende solo da  $\epsilon$ , indipendentemente da  $\nu$ . Questo intervallo di scale viene chiamato *range inerziale*.

Come conseguenza dell'ipotesi zero risulta necessario introdurre la scala  $l_{EI}$ , ovvero la scala di "confine" tra le grandi scale anisotrope, con  $l > l_{EI}$ , e le piccole scale isotrope, con  $l < l_{EI}$ . Secondo quanto affermato nella prima ipotesi di similarità, possiamo riferirci in generale all'intervallo  $l < l_{EI}$  con *range universale*: tutte le informazioni relative alla geometria delle grandi scale, determinate dal campo di moto medio e dalle condizioni al contorno, vengono perse. Il comportamento delle piccole scale ad elevati  $Re$  sono in un certo senso universali e quindi simili in ogni flusso turbolento ad alti numeri di Reynolds. Noti  $\epsilon$  e  $\nu$  è possibile



**Figura 2.2:** Scale turbolente suddivise nei vari range, in accordo con la teoria di Kolmogorov.

conoscere lunghezza, velocità e tempo caratteristici della scala più piccola che si forma nel flusso turbolento, ovvero della scala di Kolmogorov:

$$\eta \equiv \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}, \quad u_\eta \equiv (\epsilon\nu)^{1/4}, \quad \tau_\eta \equiv \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad (2.3)$$

A prova del fatto che  $\eta$  rappresenta la scala dissipativa più piccola si ha che:

- il numero di Reynolds basato sulla scala di Kolmogorov è unitario,  $Re_\eta = \eta u_\eta / \nu = 1$ , in accordo con il fatto che la cascata di energia procede verso scale sempre più piccole finché  $Re$  non è così piccolo da rendere effettiva la dissipazione, ovvero da non poter più trascurare i termini viscosi;
- la dissipazione alla scala  $\eta$  è data da  $\epsilon = \nu(u_\eta/\eta)^2 = \nu/\tau_\eta^2$ , che è proprio la dissipazione dell'energia cinetica turbolenta.

Infine, nella seconda ipotesi di similarità, si descrivono quelle strutture vorticose che sono molto piccole rispetto  $l_0$ , ma allo stesso tempo molto più grandi di  $\eta$ , quindi poco influenzate dagli effetti della viscosità. A tal proposito si definisce la scala  $l_{DI}$ , che suddivide il range universale in due sotto-intervalli: il *range di dissipazione* dove  $l < l_{DI}$  e il già citato *range inerziale* dove  $l_{DI} < l < l_{EI}$ . Solo i moti nel range dissipativo risentono in modo non trascurabile degli effetti viscosi e sono quindi praticamente responsabili di tutta la dissipazione. Nella Fig. 2.2 sono rappresentate le varie scale e i rispettivi range.

Il rapporto tra le scale più piccole e quelle più grandi può essere espresso dalle seguenti relazioni:

$$\eta/l_0 \sim Re^{-3/4}, \quad u_\eta/u_0 \sim Re^{-1/4}, \quad \tau_\eta/\tau_0 \sim Re^{1/2} \quad (2.4)$$

Risulta chiaro come all'aumentare di  $Re$  il rapporto  $\eta/l_0$  decresca, andando ad ampliare il range inerziale dove  $\eta \ll l \ll l_0$ . Ad alti numeri di Reynolds le scale temporali e di velocità degli eddies più piccoli sono molto piccole se comparate con quelle degli eddies più grandi. Infine, una quantità di primaria importanza è l'energia trasferita nel range inerziale dagli eddies più grandi a quelli più piccoli: si può notare come questa sia indipendente da  $l$  e che inoltre è uguale a  $\epsilon$ . L'energia quindi fluisce da  $l_{EI}$  a  $l_{DI}$  senza essere intaccata e viene poi completamente dissipata alla scala  $\eta$ .

### 2.1.2 Fluidodinamica computazionale

Come già accennato precedentemente, per lo studio dei flussi turbolenti è necessario ricorrere ad un approccio numerico. Esistono quindi diversi modelli numerici che sono in grado di risolvere le equazioni di Navier-Stokes con costi computazionali e precisioni che variano da modello a modello. Ad oggi le tre principali tecniche utilizzate per studiare i flussi turbolenti, in ordine decrescente di risoluzione del campo di moto ma anche di costo computazionale, sono: la simulazione numerica diretta (Direct Numerical Simulation, DNS), la simulazione delle grandi scale (Large Eddy Simulation) e le equazioni mediate alla Reynolds (Reynolds Averaged Navier-Stokes, RANS).

Nella simulazione numerica diretta, DNS, la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes avviene senza usare modelli di turbolenza, ma risolvendo esplicitamente tutte le scale del moto turbolento su una griglia (o mesh) discreta. In questo modo si riesce a descrivere tutta la fisica del problema in esame in modo molto accurato, prevedendo tutte le variazioni temporali dei campi fluidodinamici. Uno dei punti cruciali, prima dell'applicazione della DNS, è la discretizzazione del dominio nello spazio e nel tempo. Dovendo risolvere tutte le scale della turbolenza, da quella di Kolmogorov  $\eta$  a quella della struttura vorticoso più grande  $l_0$ , di dimensione paragonabile alla scala del flusso  $L$ , è necessario che le seguenti

espressioni siano soddisfatte:

$$n_s \Delta s \geq L, \quad \Delta s \leq \eta \quad (2.5)$$

con  $n_s$  numero di punti lungo una determinata direzione della griglia, con passo  $\Delta s$ . Se si considera una griglia uniforme, il numero totale di punti della griglia deve essere

$$N_{TOT} = n_s^3 \propto Re^{9/4}; \quad (2.6)$$

il passo temporale da utilizzare deve essere in grado di risolvere il tempo caratteristico di Kolmogorov  $\tau_\eta$  e dunque il numero di passi temporali risulta:

$$N_t = \frac{T}{\Delta t} \sim \frac{\tau_{l_0}}{\tau_\eta} \propto Re^{1/2} \quad (2.7)$$

dove  $T$  è il tempo caratteristico della scala  $L$  del flusso. Il numero di operazioni richieste per completare la simulazione è proporzionale al numero totale di punti della griglia e al numero di passi temporali, ovvero è proporzionale a  $Re^{9/4} \cdot Re^{1/2} \propto Re^3$ , quindi il costo computazionale della simulazione cresce con il cubo del numero di Reynolds. Nonostante l'elevata accuratezza dei risultati che fornisce la simulazione diretta, è chiaro come questo sia un limite non trascurabile nell'applicazione della DNS in ambito industriale.

Nelle simulazioni LES, che verranno trattate ampiamente nel paragrafo e nei capitoli seguenti, vengono risolte solo le scale più grandi del moto turbolento, tramite un'operazione di filtraggio (esplicito o implicito), mentre le scale più piccole, sottofiltro, vengono modellate. Questa tecnica riduce significativamente le risorse computazionali richieste per la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes, ma allo stesso tempo perde accuratezza rispetto i dati sperimentali e rispetto alla DNS.

L'approccio RANS è utile in prima approssimazione per flussi di interesse ingegneristico, in quanto inizialmente è richiesta solo la configurazione stazionaria dei campi di velocità mediata. Attraverso la *decomposizione di Reynolds*, il campo fluidodinamico viene scomposto in una parte media e una parte fluttuante, ad esempio per la velocità si ha:

$$u_i(x, t) = U_i(x, t) + u'_i(x, t) \quad (2.8)$$

dove  $U_i(x, t) = \langle u_i(x, t) \rangle$  è la velocità media, calcolata con la 2.2, e  $u'_i(x, t)$  è la componente fluttuante della velocità mediata. La media d'insieme della parte

fluttuante è sempre nulla  $\langle u'_i(x, t) \rangle = 0$ , mentre  $\langle u'^2(x, t) \rangle \neq 0$ . Una volta scritte le equazioni di Navier-Stokes mediate, ci si accorge di avere come incognite, oltre alle tre componenti di velocità e alla pressione, anche il *Reynolds stress*, ovvero un tensore simmetrico del secondo ordine a 9 componenti, che rappresenta il flusso di quantità di moto dovuto alle fluttuazioni della velocità mediata. Per stimare il Reynolds stress è quindi necessario un modello di chiusura, come ad esempio il modello  $k - \epsilon$ . Questa tecnica risulta essere quella di più immediata applicazione, ma fornisce informazioni solo sui valori medi delle varie quantità, modellando l'intero effetto di tutte le scale del moto tramite il tensore degli sforzi di Reynolds.

## 2.2 Perché la LES?

La risoluzione numerica diretta (DNS) delle equazioni di Navier-Stokes per flussi turbolenti è molto onerosa anche per geometrie piuttosto semplici e richiede una griglia con celle di dimensioni molto piccole, in grado di studiare tutte le scale fino a quella di Kolmogorov. D'altra parte la tecnica RANS non descrive fenomeni instazionari e, per tener conto delle fluttuazioni di velocità, si devono assumere diverse costanti di taratura. Nell'ottica di trovare un compromesso tra queste due tecniche, nasce intorno agli anni '60-'70 la Large-Eddy Simulation (LES). La logica della LES è quella di risolvere esplicitamente le dinamiche del moto delle grandi scale, anisotrope e legate alla geometria e alla natura del caso in esame, mentre, per simulare l'influenza delle piccole scale, isotrope e caratterizzate da una certa universalità, si utilizzano dei modelli. La griglia di una simulazione LES, quindi, è più rada di quella di una DNS in quanto non deve cogliere tutte le scale fino a quella dissipativa, ma è sufficiente che sia minore della dimensione della macrostruttura di cui si vuole studiare in modo esplicito l'evoluzione. Le scale che vengono modellate faranno quindi parte del range universale: infatti, solo in questo modo si può costruire un modello indipendente dal flusso simulato, visto che in questo intervallo, dal range inerziale a quello dissipativo, si ha una dinamica universale.

Questa tecnica è da preferirsi alla DNS specialmente in termini di costo computazionale: se da una parte, infatti, si ha una riproduzione dettagliata e accurata



del flusso in esame, con risultati paragonabili a quelli sperimentali, dall'altra si vede che il tempo totale di simulazione cresce con il cubo del numero di Reynolds e questo limita l'utilizzo della DNS a flussi con  $Re$  non troppo elevati. La LES, inoltre, è un'ottima alternativa alle tecniche RANS in quanto fornisce una descrizione molto più precisa del flusso turbolento e porta a risultati più accurati e affidabili.

Per effettuare una LES è necessario:

1. Definire l'operatore di filtraggio: necessario per decomporre la velocità  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  nella somma della componente filtrata (o risolta)  $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$  e della componente residua  $\mathbf{u}''(\mathbf{x}, t)$ . Il campo di velocità filtrata  $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ , tridimensionale e tempovariante, rappresenta il moto delle grandi scale.

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'' \quad (2.9)$$

2. Applicare il filtro alle equazioni di Navier-Stokes per ottenere le equazioni filtrate che governano l'evoluzione di  $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ .
3. Modellare i termini incogniti, ovvero il tensore degli sforzi residui.
4. Risolvere numericamente le equazioni filtrate e modellate.

### 2.2.1 Equazioni filtrate

Per separare le strutture vorticosi più grandi da quelle piccole è necessaria un'operazione di filtraggio di tipo *passa-basso* in modo tale che il risultante campo di velocità filtrato  $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$  sia risolto su una griglia relativamente grossolana. Come già accennato nel precedente paragrafo, l'ampiezza del filtro può essere arbitrariamente grande a patto che riesca a risolvere tutti i moti fino al range inerziale, quando non c'è più dipendenza dalla geometria e dal tipo di flusso. La velocità filtrata risulta:

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = G_\Delta[\mathbf{u}] = \int_D \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t) G_\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{x}) d\mathbf{r}^3 \quad (2.10)$$

dove  $G_\Delta$  è l'operatore di filtraggio scelto,  $\Delta$  è l'ampiezza caratteristica del filtro ovvero la scala di filtraggio,  $\mathbf{x}$  è il punto in cui voglio calcolare la grandezza filtrata ed  $\mathbf{r}$  è la distanza da tale punto. L'operatore  $G_\Delta$  deve soddisfare la condizione:

$$\int_D G_\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{x}) d\mathbf{r}^3 = 1 \quad (2.11)$$

Il campo di velocità residua risulterà:

$$\mathbf{u}''(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.12)$$

che a prima vista potrebbe risultare simile alla decomposizione di Reynolds, in realtà, a differenza della media d'insieme, l'operatore  $G$  ha le seguenti proprietà:

$$G[\tilde{\mathbf{u}}] = G[G[\mathbf{u}]] = G^2[\mathbf{u}] = \tilde{\mathbf{u}} \quad (2.13)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} \neq \tilde{\tilde{\mathbf{u}}} \quad (2.14)$$

$$\widetilde{\mathbf{u}''} \neq \mathbf{0} \quad (2.15)$$

Alcuni esempi di filtri *espliciti* sono:

- Filtro a scatola (Box filter) con  $G_\Delta(r) = \frac{1}{\Delta} H\left(\frac{\Delta}{2} - |r|\right)$
- Filtro Gaussiano con  $G_\Delta(r) = \left(\frac{\sigma}{\pi\Delta^2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{6r^2}{\Delta^2}\right)$

Un altro modo per filtrare le equazioni è quello di considerare la griglia stessa un filtro, in questo modo le frequenze più alte di quella di griglia non verranno catturate. Solitamente questo tipo di filtraggio, detto *implicito*, viene applicato quando nella LES si utilizzano tecniche di discretizzazione spaziale alle differenze finite e ai volumi finiti.

A questo punto andando a filtrare le equazioni di Navier-Stokes si ottiene, per l'equazione di continuità:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.16)$$

il che comporta che sia il campo filtrato che quello residuo sono solenoidali.

Per l'equazione di conservazione della quantità di moto si ha:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \tilde{e}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij}^R \quad (2.17)$$

dove  $\tau_{ij}^R$  è il *tensore degli sforzi residui* e vale:

$$\tau_{ij}^R = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (2.18)$$

### 2.2.2 Modello di Smagorinsky e Smagorinsky dinamico

Per risolvere le equazioni filtrate è necessario fornire un modello per il tensore degli sforzi residui  $\tau_{ij}^R$ . Il modello classico, che viene usato nella maggior parte dei casi, è il *modello di Smagorinsky* (1963): questo modello fa uso del concetto di *eddy viscosity* introdotto da Boussinesq, ovvero l'effetto delle scale residue su quelle risolte viene modellato per mezzo di una viscosità aggiuntiva  $\nu_r$ , anche detta viscosità cinematica residua. Il tensore degli sforzi residui può essere scomposto come segue:

$$\tau_{ij}^R = \frac{2}{3}k^R\delta_{ij} - \tau_{ij}^r, \quad \tau_{ij}^r = 2\nu_r\tilde{e}_{ij} \quad (2.19)$$

dove con  $\tau_{ij}^r$  si è indicata la parte deviatorica del tensore degli stress residui. Il sistema tuttavia non è ancora risolvibile perché manca ancora un modello per  $\nu_r$ . Secondo quanto riportato nel paragrafo 2.1.1, tutta l'energia immessa alle grandi scale, che possiamo chiamare  $\epsilon_{l_0}$ , sarà uguale a quella che fluisce nel range inerziale a scala  $\Delta$  ( $\epsilon_\Delta$ ), che a sua volta sarà uguale a quella dissipata alla scala  $\eta$ ,  $\epsilon_\eta$ . Tuttavia, poiché non possiamo descrivere le scale più piccole della frequenza di taglio scelta per il filtraggio, l'energia introdotta verrà dissipata alla più piccola scala simulata, ovvero  $\Delta$ . In questo modo sto spostando artificialmente il range dissipativo da  $\eta$  a  $\Delta$  tramite la viscosità aggiuntiva  $\nu_r$ :

$$\epsilon_\Delta = \nu_r \frac{u_\Delta^2}{\Delta^2} = C_S \frac{u_\Delta^3}{\Delta} \quad (2.20)$$

quindi posso ricavarmi  $\nu_r$ :

$$\nu_r = C_S \Delta u_\Delta \quad \text{con} \quad u_\Delta = \tilde{S}\Delta \quad \text{e} \quad \tilde{S} = \sqrt{2\tilde{e}_{ij}\tilde{e}_{ij}} \quad (2.21)$$

con  $\tilde{e}_{ij}$  tensore di velocità di deformazione del campo filtrato. Possiamo quindi riassumere il modello di Smagorinsky con le seguenti espressioni:

$$\nu_r = C_S \tilde{S}\Delta^2 \quad \text{e} \quad \tau_{ij}^r = 2\nu_r\tilde{e}_{ij} = 2(C_S\tilde{S}\Delta^2)\tilde{e}_{ij} \quad (2.22)$$

Una volta assegnata la costante di taratura del modello,  $C_S$ , anche detta costante di Smagorinsky, il sistema è chiuso e risolvibile numericamente. Solitamente  $C_S$  assume valori compresi tra 0.06 e 0.2.

Un'altra possibilità per determinare  $C_S$  è quella di calcolarla automaticamente effettuando un nuovo filtraggio delle equazioni ad una scala più grande di  $\Delta$ , ad

esempio  $\Delta' = 2\Delta$ . Sfruttando poi l'*identità di Germano* si riesce a ricavare il valore ottimale di  $C_S$ . Questo modello viene chiamato *Smagorinsky dinamico* ed ha come vantaggio il fatto che  $C_S$ , in questo modo, risulta funzione dello spazio e del tempo e viene calcolata dalla simulazione stessa, non assegnata a priori. Tuttavia il limite di questo modello, oltre ai problemi di instabilità numerica, è l'aumento del costo computazionale e della quantità di memoria richiesta.

In conclusione passando da RANS a LES si acquisisce maggiore universalità: nella LES abbiamo una sola costante di taratura, mentre nelle RANS ce ne sono cinque. La LES, dovendo quindi fare meno assunzioni, risulta più rigorosa. Tutta la differenza tra le due tecniche risiede nelle viscosità aggiuntive:  $\nu_T$ , nelle RANS, è infatti molto maggiore di  $\nu_r$ , poiché deve considerare gli effetti delle scale da  $l_0$  fino a  $\eta$ , quindi anche quelli delle scale non universali, mentre  $\nu_r$  è meno invasiva. Tuttavia la simulazione delle grandi scale non ha gli stessi livelli di accuratezza di una simulazione diretta, anche se i tempi di simulazione sono decisamente inferiori. Per questo motivo la ricerca in campo numerico è volta ad ottimizzare le tecniche LES, poiché viste come valido compromesso in termini di costo computazionale e qualità dei risultati.

# Capitolo 3

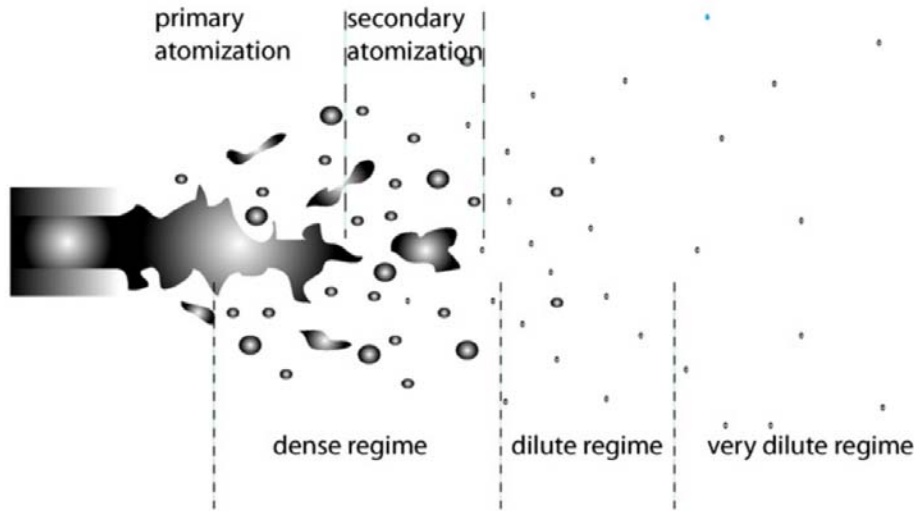
## LES comprimibile per getti multifase

### 3.1 Spray in regime turbolento

Uno degli obiettivi che si prefigge questa tesi è quello di studiare, mediante la tecnica LES, flussi multifase in regime turbolento. Un esempio di tali flussi è lo spray, ovvero un getto costituito da una fase gassosa, o portante, e una fase liquida, o dispersa, costituita da particelle liquide.

Come possiamo vedere dalla figura 3.1, a valle dell'iniettore si possono distinguere tre regimi di flusso differenti in base alla frazione di volume occupata dalla fase dispersa. La zona più densa, dove avvengono i processi di atomizzazione primaria e secondaria, è caratterizzata da una frazione di volume  $\Phi_v$  oltre  $10^{-3}$  e quindi collisioni e coalescenze risultano predominanti. Nella zona intermedia, dove si ha un flusso più diluito,  $\Phi_v$  è compresa tra  $10^{-3}$  e  $10^{-6}$ : in questa zona collisioni e frammentazioni delle particelle sono trascurabili. Infine, nell'ultima zona, si ha un regime ancora più diluito, con  $\Phi_v$  minore di  $10^{-6}$ , dove l'influenza della fase dispersa su quella portante è insignificante e l'interazione tra le due fasi viene detta *one-way coupling*.

Nella zona più densa la differenza di velocità tra la fase dispersa e quella portante dà origine a dei fenomeni di instabilità, come ad esempio quelli di Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, e si assiste ad una frammentazione del getto in filamenti di liquido (*ligaments*) e gocce relativamente grandi di varie dimensio-



**Figura 3.1:** *Fasi principali del processo di formazione di uno spray*

ni. Questa fase del processo di atomizzazione viene detta *primaria*, tuttavia se le gocce prodotte da questo processo sono ancora abbastanza grandi potrebbero frammentarsi nuovamente e dare origine alla fase di *atomizzazione secondaria* [Marmottant and Villermaux, 2004].

Nella zona intermedia, lo scambio di quantità di moto all'interfaccia delle due fasi fa sì che la dinamica delle particelle sia influenzata dalla fase gassosa turbolenta e viceversa. Questa interazione viene detta *two-way coupling* ed è strettamente legata alla frazione di massa delle particelle [Jenny et al., 2012]. Le particelle possono quindi contribuire sia alla dissipazione che all'aumento della turbolenza nella fase continua, questo dipende principalmente dalla loro inerzia e quindi dal numero di *Stokes*,  $St$ :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (3.1)$$

Questo parametro adimensionale è definito come il rapporto tra il tempo di rilassamento della fase dispersa e il tempo caratteristico del flusso e descrive il comportamento delle particelle in base alla loro capacità o meno di seguire le dinamiche della fase gassosa. Ad esempio, per piccoli valori di  $St$ , le particelle hanno praticamente un'inerzia trascurabile e vengono quindi considerate come delle traccianti che riescono a seguire abbastanza fedelmente le linee di flusso della fase portante.

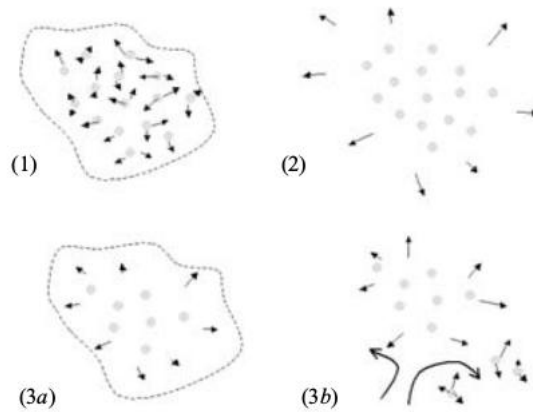


Figura 3.2: Possibili scenari di evaporazione delle particelle

### 3.1.1 Evaporazione

Nell'ottica di un regime *two-way coupling*, viene ora descritto il fenomeno dell'evaporazione delle particelle liquide. Questo processo comporta uno scambio di massa, quantità di moto ed energia tra la fase portante e quella dispersa: il vapore rilasciato dalla superficie delle particelle si miscela con la fase gassosa circostante e ne varia localmente le caratteristiche. Reveillon and Demoulin [2007] hanno individuato quattro possibili scenari riscontrabili durante il processo di evaporazione, vedi figura 3.2:

1. Inizialmente l'evaporazione è molto veloce, poiché non c'è vapore o ce n'è ancora poco.
2. Possono formarsi regioni estese con elevate concentrazioni di vapore, vicino al valore di saturazione, attorno a dei *cluster* con elevata densità di particelle. Di conseguenza, la velocità di evaporazione delle particelle all'interno del cluster diminuisce drasticamente, se non addirittura viene bloccata.
3. A questo punto due strade sono possibili: (a) le particelle più leggere non riescono ad uscire dall'area di vapore saturo a causa della loro piccola inerzia. La loro evaporazione è strettamente legata alla velocità di diffusione del vapore verso il gas con una minore concentrazione di vapore e quindi, in questo caso, tutte le particelle nel cluster possono essere considerate come un'unica particella che evapora. (b) Il moto turbolento aiuta la dispersione delle

particelle più grandi, le quali, raggiungendo aree con minore concentrazione di vapore, riescono a completare il loro processo di evaporazione.

La frazione di massa del vapore,  $Y_v$ , nello strato limite della particella liquida è uno dei parametri responsabili della velocità di evaporazione. La frazione molare e la frazione di massa del vapore saturo,  $x_s$  e  $Y_{v,s}$ , dipendono fortemente dalla temperatura della particella e dalla pressione della fase gassosa. Utilizzando l'equazione di Clausius-Clapeyron per la pressione del vapore saturo, possiamo scrivere:

$$p_{vs}(T_p) = p_{ref} e^{\frac{L_v}{R_v} \left( \frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_p} \right)} \quad (3.2)$$

dove  $p_{ref}$  è la pressione di vapore saturo valutata ad una temperatura di riferimento  $T_{ref}$ ,  $T_p$  è la temperatura della particella liquida,  $L_v$  è il calore latente di vaporizzazione della fase liquida e  $R_v$  è la costante dei gas specifica del vapore. La frazione molare e la frazione di massa di vapore saturo possono quindi essere scritte come:

$$x_s(T_p, p) = \frac{p_{vs}}{p} \quad (3.3)$$

$$Y_{v,s}(T_p, p) = \frac{x_s}{x_s + (1 - x_s) \frac{M_g}{M_v}} \quad (3.4)$$

con  $M_g$  e  $M_v$  la massa molare del gas e del vapore.

Andando a vedere cosa accade più nello specifico, si osserva che in prossimità della superficie della particella liquida che sta evaporando si sviluppa uno strato di vapore saturo. Questo si forma a causa della rottura dei legami intermolecolari quando l'energia cinetica microscopica diventa sufficientemente elevata. Questo strato di vapore saturo viene disperso nella fase gassosa circostante attraverso due meccanismi: la *diffusione molecolare*, funzione del gradiente di concentrazione del vapore, e la *convezione forzata*, indotta dal flusso esterno e dalla presenza del cosiddetto *flusso di Stefan*. Il flusso di Stefan (Stefan flow) provoca l'ispessimento dello strato limite termico e diffusivo e viene modellato correggendo i numeri di Sherwood, per il trasporto di massa, e Nusselt, per lo scambio di calore, tramite due parametri,  $F_m$  e  $F_t$ , che verranno descritti nel paragrafo 3.4.2.

Nei capitoli successivi si utilizzerà la tecnica di simulazione delle grandi scale (LES) per studiare il fenomeno dell'evaporazione in uno spray turbolento. Per



fare questo si ipotizza di essere nel regime diluito dello spray, quindi in two-way coupling, e le equazioni che governeranno le dinamiche delle due fasi saranno derivate attraverso un approccio *Euleriano* per la fase portante e *Lagrangiano* per la fase dispersa.

## 3.2 Formulazione matematica

Come accennato precedentemente, per quanto riguarda la descrizione del campo di moto della fase gassosa si utilizzerà un punto di vista euleriano. Tuttavia, prima di andare a scrivere le equazioni di Navier-Stokes, è necessario fare un'ulteriore assunzione, ovvero l'ipotesi di regime a basso numero di Mach (*low Mach*). Questa ipotesi introduce notevoli semplificazioni per quanto riguarda la risoluzione numerica delle equazioni, infatti, in questo modo, gli effetti della propagazione delle onde acustiche sulle dinamiche della fase gassosa vengono trascurati, senza però perdere le informazioni sulle variazioni locali di pressione, temperatura e densità.

Si ipotizza di trattare fluidi Newtoniani e si assume che la diffusione delle specie avvenga secondo la legge di Fick. Inoltre, nei flussi dove si osservano importanti variazioni di densità, viene solitamente effettuato un filtraggio pesato sulla densità (*density-weighted*), la cosiddetta *media alla Favre*. La generica funzione  $\Psi = \Psi(\mathbf{x}, t)$  filtrata viene definita come segue:

$$\tilde{\Psi} = \frac{\overline{\rho\Psi}}{\bar{\rho}} \quad (3.5)$$

Le equazioni di Navier-Stokes per regimi a basso numero di Mach, con filtraggio alla Favre e per flussi bifase, si possono scrivere in questo modo:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = \bar{S}_{mass} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial(2\bar{\mu}\tilde{S}_{ij})}{\partial x_j} + \bar{S}_{mom} \quad (3.7)$$

Se sommiamo ad entrambi i membri della 3.7 il termine  $\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j}$ , possiamo riscrivere l'equazione come:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\rho}[\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j] + \frac{\partial(2\bar{\mu}\tilde{S}_{ij})}{\partial x_j} + \bar{S}_{mom,i} \quad (3.8)$$

Ponendo poi  $\tau_{ij}^R = \bar{\rho}[\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j]$  e  $\bar{\sigma}_{ij} = 2\bar{\mu}\tilde{S}_{ij}$ , le equazioni della conservazione della massa e quantità di moto diventano:

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = \bar{S}_{mass} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial\tau_{ij}^R}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{S}_{mom} \quad (3.10)$$

dove  $\tilde{u}_i$  è la velocità filtrata, pesata sulla densità, della fase gassosa,  $\bar{\rho}$  e  $\bar{p}$  sono rispettivamente la densità e la pressione filtrate. Il tensore degli stress residui (o sotto-griglia),  $\tau_{ij}^R$ , è un'incognita e dovrà poi essere modellato per poter chiudere il sistema.

I termini filtrati  $\bar{S}_{mass}$  e  $\bar{S}_{mom}$  sono i termini di accoppiamento tra la fase gassosa e quella liquida, ovvero rappresentano il contributo delle particelle liquide disperse nel gas, le quali vengono considerate come sorgenti puntiformi di massa e quantità di moto. Una descrizione più completa di questi termini sarà presentata nel paragrafo 3.4.3.

Per poter studiare in modo completo il caso in esame si devono considerare due ulteriori equazioni:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_{Yj}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\tilde{D}\frac{\partial\tilde{Y}}{\partial x_j}\right) + \bar{S}_Y \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{e})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{e}\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial\bar{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{\sigma}_{ij}u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_{ej}}{\partial x_j} + \bar{S}_{energy} \quad (3.12)$$

dove  $\tilde{Y}$  è la frazione di massa del vapore filtrata,  $\tilde{D}$  è il coefficiente di diffusione del vapore,  $q_{Yj} = \bar{\rho}[\widetilde{Y u_j} - \tilde{Y}\tilde{u}_j]$  è il flusso scalare residuo relativo alla  $Y$ ,  $\tilde{e}$  è l'energia totale specifica,  $q_{ej} = \bar{\rho}[\widetilde{e u_j} - \tilde{e}\tilde{u}_j]$  è il flusso scalare residuo relativo alla  $e$  e  $q_j = k\nabla T$ . I termini  $\bar{S}_Y$  e  $\bar{S}_{energy}$  sono, come per le due equazioni precedenti, i termini sorgente dovuti al contributo della fase liquida sulla fase gassosa (vedi

paragrafo 3.4.3).

Le equazioni 3.9, 3.10, 3.11, 3.12 governano, dunque, il moto della fase portante gas-vapore e presentano tre termini incogniti che devono essere modellati, ovvero  $\tau_{ij}^R$ ,  $q_{Yj}$  e  $q_{ej}$ .

### 3.3 Modelli per i termini incogniti

Il modello più semplice che può essere usato per il tensore degli stress residui  $\tau_{ij}^R$  è quello di Smagorinsky. Questo, come abbiamo già visto nel paragrafo 2.2.2, fa uso del concetto di *eddy viscosity*, ovvero l'effetto delle scale residue su quelle risolte viene modellato tramite una viscosità aggiuntiva. Il tensore degli stress residui è composto da una parte isotropa e da una parte deviatorica anisotropa  $\tau_{ij}^a$  che può essere scritta come:

$$\tau_{ij}^a = -2\mu_{sgs}\tilde{S}_{ij} \quad (3.13)$$

dove

$$\mu_{sgs} = \bar{\rho}(C_s\Delta)^2\|\tilde{S}_{ij}\|, \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}\right), \quad \|\tilde{S}_{ij}\| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (3.14)$$

e  $\Delta$  è l'ampiezza del filtro. La parte deviatorica del tensore degli stress residui è legata quindi al tensore di velocità di deformazione del campo filtrato  $\tilde{S}_{ij}$  per mezzo della viscosità cinematica residua  $\mu_{sgs}$ , dove con *sgs* si intende *sub-grid scale*. Per flussi a basse velocità, come nel nostro caso, la parte isotropa del tensore degli stress residui può essere aggiunta nella definizione di pressione dell'equazione 3.10, andando così a definire una *pseudo pressione* che non necessita di un modello.

Il modello di Smagorinsky contiene una costante di taratura,  $C_s$ , che deve essere specificata; tuttavia diversi studi hanno dimostrato che, in presenza di numeri di Reynolds elevati e con i moti turbolenti delle grandi scale adeguatamente risolti, i risultati sono abbastanza insensibili al valore di  $C_s$ . In alcuni casi, invece, dove un'adeguata risoluzione della mesh non è possibile, si possono usare delle procedure di calibrazione dinamica per ottenere un valore di  $C_s$  più preciso, ad esempio attraverso l'identità di Germano [Bini and Jones, 2009].

Per il flusso scalare sottogriglia  $q_{Yj}$  solitamente si assume il seguente modello:

$$q_{Yj} = \bar{\rho}[\widetilde{u_j Y} - \tilde{u}_j \tilde{Y}] = -\bar{\rho} D_{T,Y} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

dove  $D_{T,Y} = C_Y \Delta^2 \|\tilde{S}\|$  è la diffusività turbolenta e  $C_Y$  è una costante che può essere determinata tramite una procedura dinamica, come quella proposta da Germano. Allo stesso modo  $q_{ej}$  può essere modellato per mezzo di una diffusività turbolenta  $D_{T,e}$ .

### 3.4 Equazioni che governano la fase liquida

La fase liquida, o dispersa, consiste nell'insieme delle particelle distribuite lungo tutto il volume di controllo. Per studiare la dinamica del moto di queste particelle si segue l'approccio Lagrangiano. Tuttavia, prima di passare alla trattazione matematica, è necessario argomentare le assunzioni che sono state fatte circa le caratteristiche fisiche e il comportamento durante l'evaporazione delle particelle. Prima di tutto le equazioni sono state ricavate considerando un campo di moto diluito e a bassa temperatura. Si assumono particelle con dimensioni più piccole dell'ampiezza del filtro LES e di densità molto più grande di quella della fase gassosa, così da considerare solo le forze d'inerzia e di resistenza aerodinamica nello studio del loro moto; la forza gravitazionale, i moti interni e la rotazione non vengono considerati. La frazione di volume di particelle è un compromesso tra la possibilità di poter considerare l'accoppiamento con la fase gassosa, *two-way coupling*, e quella di poter trascurare collisioni e coalescenze: questo corrisponde al caso di frazioni di volume di particelle dell'ordine di  $10^{-6} - 10^{-3}$  [Bukhvostova et al., 2014]. Si modellano le particelle come sfere rigide, le quali, cambiando il loro raggio nel processo di evaporazione, mantengono sempre la forma sferica: questo per l'ipotesi che, nello spray, dopo la fase di atomizzazione, le tensioni superficiali prevalgano sulle forze aerodinamiche. Nel calcolare le variabili della fase gassosa in corrispondenza della particella, si è assunta l'ipotesi di particella puntiforme: equivalente ad assumere che la particella sia investita da un flusso uniforme con le stesse caratteristiche del flusso effettivo in quel punto.

Si ipotizza che i processi di scambio di massa e di calore siano stazionari e che la temperatura e la concentrazione di vapore siano costanti sulla superficie della

particella; inoltre la temperatura viene considerata uniforme per tutto il volume della particella. Questi modelli in letteratura vengono definiti come modelli a conduttività termica infinita della fase liquida [Abramzon and Sirignano, 1989]. Vengono inoltre considerati solo scambi termici per convezione e quindi trascurati quelli per irraggiamento, questo a causa dell'ipotesi di campo di moto diluito e a basse temperature.

### 3.4.1 Equazioni lagrangiane del moto delle particelle

Il modello per l'accelerazione delle particelle è direttamente responsabile della dispersione di queste nel campo di moto turbolento [Bini and Jones, 2009].

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = f_1 \frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + \chi, \quad \mathbf{u}_p = \frac{d\mathbf{x}_p}{dt} \quad (3.16)$$

Nella definizione dell'accelerazione, il primo termine a destra rappresenta la parte deterministica, calcolata usando la correlazione di Schiller-Naumann mediante  $f_1 = 1 + 0.15 Re_p^{0.687}$ , che è il termine di correzione del coefficiente di drag della particella [Schiller and Naumann, 1933]. Questa correlazione risulta accurata per  $Re_p$  che va da 0 a 1000, range ampiamente sufficiente per le simulazioni svolte in questo contesto [De and Kim, 2013, Bukhvosova et al., 2014].  $\tilde{\mathbf{u}}$  è la velocità filtrata nota della fase gassosa, calcolata nella posizione della particella  $p$ -esima,  $\mathbf{u}_p$  è la velocità della particella e  $\tau_p$  è il tempo di rilassamento della particella:

$$\tau_p = \frac{2}{9} \frac{\rho_l}{\mu_g} r_p^2 \quad (3.17)$$

dove i pedici  $l$  e  $g$  si riferiscono rispettivamente allo stato liquido e a quello gassoso lontano dalla particella. Il numero di Reynolds della particella  $Re_p$  viene calcolato come segue:

$$Re_p = \frac{2\rho_g \|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_p\| r_p}{\mu_g} \quad (3.18)$$

La funzione  $\chi$  rappresenta l'influenza delle fluttuazioni di velocità non risolte sull'accelerazione delle particelle, quindi sulla dispersione, per le quali è necessario un modello [Bini and Jones, 2009].

### 3.4.2 Variazione di dimensione e temperatura delle particelle

Per quanto riguarda  $dm_p/dt$ , ovvero la velocità di evaporazione della particella, possiamo scrivere:

$$\dot{m}_p = \frac{dm_p}{dt} = -\frac{m_p Sh}{3\tau_p Sc} \ln(1 + Bm) \quad (3.19)$$

Il parametro adimensionale  $B_m$ , introdotto da Spalding [1953], viene chiamato numero di trasferimento di massa e dipende dalla differenza tra la frazione di massa di vapore nello strato saturo,  $Y_s$ , e la frazione di massa di vapore locale nella fase gassosa,  $Y_\infty$ :

$$B_m = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s} \quad (3.20)$$

Il termine  $Y_s$  può essere ricavato tramite l'equazione di Clausius-Clapeyron, vedi equazione 3.4.  $Sh$  è il numero di Sherwood modificato, ovvero che tiene conto degli effetti del flusso di Stefan:

$$Sh = 2 + \frac{(Sh_0 - 2)}{F_m} \quad (3.21)$$

dove  $Sh_0 = 2 + 0.552\sqrt{Re_p}Sc^{1/3}$  e  $Sc = \bar{\mu}/(\bar{\rho}D)$  è il numero di Schmidt della miscela gas-vapore nello strato vicino alla superficie della particella, con  $D$  coefficiente di diffusione del vapore. Il termine  $F_m$ , in accordo con Abramzon and Sirignano [1989], è un fattore di correzione per lo strato limite diffusivo che tiene conto della presenza del flusso di Stefan e del moto relativo tra particelle e fase portante:

$$F_m = \frac{(1 + B_m)^{0.7}}{B_m} \ln(1 + B_m) \quad (3.22)$$

Tuttavia l'equazione 3.19 può portare ad instabilità numerica, per questo si preferisce riscriverla in funzione del raggio della particella  $r_p$ :

$$\frac{dr_p^2}{dt} = -\frac{\bar{\mu}}{\rho_l} \frac{Sh}{Sc} \ln(1 + Bm) \quad (3.23)$$

L'energia totale della particella è data da  $E_p = C_l m_p T_p + \frac{1}{2} m_p |\mathbf{u}_p|^2$ , dove  $C_l$  è il calore specifico della fase liquida. Questa può variare a causa di due meccanismi: l'evaporazione delle particelle e lo scambio termico per convezione sulla superficie

della particella, dovuto alla differenza tra la temperatura della fase gassosa in  $\mathbf{x}_p$  e quella della superficie della particella:

$$\frac{d}{dt}E_p = \dot{m}_p h_v + h_m S_d (T_\infty - T_p) \quad (3.24)$$

con  $h_v$  entalpia specifica del vapore,  $h_m$  coefficiente di scambio termico convettivo tra la fase gassosa e la particella liquida e  $S_d$  l'area della superficie della particella. Allo stesso modo è possibile ricavare l'equazione che descrive la variazione nel tempo della temperatura della particella,  $T_p$ , assunta costante in tutto il suo volume:

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{3\tau_p} \left( \frac{Nu \bar{C}_p}{Pr C_l} (T_g - T_p) - \frac{Sh L_v}{Sc C_l} \ln(1 + B_m) \right) \quad (3.25)$$

dove  $\bar{C}_p$  e  $L_v$  sono rispettivamente la capacità termica media della miscela di gas nello strato limite della particella e il calore latente di vaporizzazione. Il numero di Nusselt  $Nu$  è stato modificato per tener conto dell'effetto del flusso di Stefan sullo spessore dello strato limite termico:

$$Nu = 2 + \frac{(Nu_0 - 2)}{F_t} \quad \text{con} \quad Nu_0 = 2 + 0.552\sqrt{Re} Pr^{1/3} \quad (3.26)$$

$Pr$  è il numero di Prandtl della miscela nello strato limite e vale:

$$Pr = \frac{\bar{\mu}\bar{C}_p}{\bar{k}} \quad (3.27)$$

con  $\bar{\mu}$  e  $\bar{k}$  che corrispondono rispettivamente alla viscosità media e alla conduttività termica media della miscela nello strato limite della particella. Il termine  $F_t$  è il fattore di correzione per lo strato limite termico, [Abramzon and Sirignano, 1989], che, analogamente ad  $F_m$ , è definito come:

$$F_t = \frac{(1 + B_t)^{0.7}}{B_t} \ln(1 + B_t) \quad (3.28)$$

dove  $B_t$ , [Spalding, 1953], è il numero di trasferimento di energia per lo strato limite che si forma in prossimità di una superficie che evapora:

$$B_T = (T_g - T_p) \frac{C_{p,vap}}{L_v} \quad (3.29)$$

e  $C_{p,vap}$  è il calore specifico a pressione costante del vapore.

### 3.4.3 I termini di accoppiamento

Nelle equazioni 3.9, 3.10, 3.11 e 3.12 sono presenti quattro termini sorgente che rappresentano gli effetti della massa, della quantità di moto e dello scambio di energia delle particelle liquide sulla fase gassosa. Dall'ipotesi di particelle puntiformi, abbiamo che il generico termine sorgente filtrato vale:

$$\bar{\dot{S}}_\gamma(\mathbf{x}) = \sum_p \int_D \dot{S}_{\gamma,p} \delta(\mathbf{x}_p - \mathbf{r}) G_\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{r}), d\mathbf{r}^3, \quad (3.30)$$

dove con il termine  $\dot{S}_p$  si intende l'apporto dovuto alla p-esima particella nella posizione  $\mathbf{x}_p$ ,  $\gamma$  può essere *mass*, *Y*, *mom* e *energy*, corrispondenti rispettivamente a massa, frazione di massa del vapore, quantità di moto ed energia [De and Kim, 2013]. I valori di questi termini si ottengono dalle equazioni che governano la dinamica e le variazioni di dimensioni e temperatura delle particelle liquide, descritte nei sotto-paragrafi 3.4.1 e 3.4.2:

$$\dot{S}_{mass,p} = \dot{S}_Y = -\frac{dm_p}{dt}, \quad (3.31)$$

$$\dot{S}_{mom,p} = -\frac{d}{dt}(m_p \mathbf{u}_p), \quad (3.32)$$

$$\dot{S}_{energy,p} = -\frac{d}{dt} \left( c_l m_p T_p + \frac{1}{2} m_p |\mathbf{u}_p|^2 \right) \quad (3.33)$$

Il termine di accoppiamento 3.31, che compare sia nell'equazione di conservazione della massa sia in quella del vapore, evidenzia il trasferimento di massa tra le fasi dovuto all'evaporazione e alla condensazione.

Il termine 3.32 descrive il trasferimento di quantità di moto tra le fasi. Questo consiste in due meccanismi: la resistenza aerodinamica tra la fase dispersa e quella gassosa e lo scambio di quantità di moto dovuto al trasferimento di massa generato dai cambiamenti di fase. Se si considerano flussi sufficientemente diluiti l'effetto di questo termine è trascurabile e quindi potrebbe essere omesso senza sostanziali perdite [Jones et al., 2010].

Infine, il primo termine a destra della 3.33 descrive il trasferimento di calore per convezione e il trasferimento di energia dal vapore alla fase portante; il secondo termine è il contributo dato dall'energia cinetica delle particelle.



### 3.5 Modelli stocastici per le scale non risolte

Quando si utilizzano le simulazioni LES e si vuole calcolare la velocità del flusso nella posizione della particella in realtà, a differenza di una DNS, si conosce solo il valore filtrato di questa velocità,  $\tilde{\mathbf{u}}$ . Questa velocità non fornisce informazioni su tutto il campo di frequenze esistenti nel campo di moto, infatti il contributo delle frequenze più alte viene eliminato attraverso l'operazione di filtraggio.

Tuttavia noi consideriamo le particelle liquide di dimensioni inferiori o al più paragonabili alla più piccola scala dissipativa e quindi le scale non risolte del moto possono avere un ruolo importante nello studio della dinamica della fase dispersa in ambito LES [Bini and Jones, 2007].

In questo contesto si deve perciò tenere conto di due fattori: (a) il moto delle particelle interagisce e modifica le scale più piccole della turbolenza; (b) le fluttuazioni turbolente di velocità sono incognite. Per questo motivo è necessario un modello che riproduca gli effetti delle scale non risolte sulla dinamica delle particelle. D'altra parte l'uso di un modello che non rappresenta adeguatamente gli effetti della dispersione delle fluttuazioni delle scale non risolte della fase gassosa può portare ad un errore non trascurabile [Bini and Jones, 2008]. Quindi è molto probabile che la maggior parte degli studi che usano la modellazione LES trascurino le fluttuazioni di velocità sottogriglia [Mashayek and Pandya, 2003]. Di seguito vengono descritti brevemente alcuni dei più recenti modelli stocastici per le fluttuazioni sottogriglia usati in ambito LES.

In Bini and Jones [2009] la parte deterministica dell'equazione per l'accelerazione della  $p$ -esima particella liquida viene presa uguale al primo termine della formulazione di Maxey e Riley [1983], che è formalmente identica all'equazione 3.16 ma in questo caso il tempo di rilassamento delle particelle vale:

$$\tau_p^{-1} = \frac{3}{8} \frac{\rho_g}{\rho_l} C_D \frac{|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_p|}{r_p} \quad (3.34)$$

con  $C_D$  coefficiente di drag della particella, determinato usando la *drag law* di Yuen-Chen.

Il contributo random all'equazione dell'accelerazione deve avere le seguenti proprietà generali: può essere integrato nel tempo, così che l'incremento  $du_p$  possa avvenire in un intervallo di tempo  $dt$ ; deve possedere le proprietà dei vettori

random e deve rappresentare la diffusione delle particelle a causa delle fluttuazioni non risolte. Per queste ragioni è stato scelto il processo di Wiener (o moto browniano) multidimensionale: in questo modo vengono soddisfatte le prime due proprietà ed inoltre questo processo è già stato ampiamente utilizzato per modelli di diffusione. Un processo di Wiener discretizzato nel tempo ha la forma:

$$W(t_n) = \delta t^{1/2} \sum_{j=1}^n \xi_j \quad (3.35)$$

dove  $t_n = n\delta t$  e  $\xi$  è una variabile random con media nulla e varianza unitaria. Il termine  $\chi dt$  è quindi scritto come un vettore calcolato tramite il processo di Wiener, precedentemente moltiplicato da una matrice di diffusione [Bini and Jones, 2007, 2008]. Per rappresentare dunque l'influenza delle fluttuazioni di velocità delle scale sottogriglia non risolte sull'accelerazione delle particelle e quindi sulla dispersione, viene usato un modello stocastico markoviano e l'accelerazione della p-esima particella può essere scritta come:

$$d\mathbf{u}_p = \tau_p^{-1}(\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_p)dt + \sqrt{C_0 \frac{k_{sgs}}{\tau_t}} d\mathbf{W} \quad (3.36)$$

dove  $k_{sgs} = (2\Delta\nu_{sgs}\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{2/3}$  è l'energia cinetica sottogriglia della fase gassosa,  $C_0$  è una costante del modello,  $d\mathbf{W}$  rappresenta l'incremento del processo di Wiener e  $\tau_t$  è il tempo che determina la velocità di interazione tra la particella e la turbolenza della fase gassosa.

In aggiunta, anche la frazione di massa del vapore  $Y$ , la temperatura della fase gassosa  $T_g$  e quindi, di conseguenza, la velocità di evaporazione  $dm_p/dt$  sono valori filtrati dei campi istantanei, quindi gli effetti delle fluttuazioni sottofiltro non sono incluse nelle equazioni 3.19 e 3.25. Tuttavia, nel considerare l'evaporazione di una singola particella e trascurando la combustione, la variazione di temperatura è molto meno rilevante della velocità di evaporazione. Quindi,  $dT_p/dt$  viene valutata in funzione delle grandezze filtrate, mentre per  $dm_p/dt$  gli effetti sottogriglia vengono modellati; questo, se trattato in termini stocastici, contribuirà indirettamente nel creare fluttuazioni stocastiche anche nella variazione della temperatura. Il metodo proposto consiste nel correggere il parametro che governa la convezione,  $Sh$ , riscrivendolo come la somma di un contributo risolto e di una parte random:

$$dm_p = -\ln(1 + B_m) \frac{m_p}{3\tau_p Sc_g} \left( Sh + Sh_{st} \right) dt \quad (3.37)$$

dove  $Sh$  è dato dall'equazione 3.21, e viene valutato usando le variabili del flusso filtrate,  $Sh_{st}$  tiene conto degli effetti delle scale non risolte. Il contributo del termine stocastico dell'equazione precedente è dato da:

$$Sh_{st} dt = C_v S C_g^{1/3} \left( \rho_g \frac{k_{sgs}^{1/2} D}{\mu_g} \right)^{1/2} |dW_t|^{1/2} \tau_p^{3/4} \quad (3.38)$$

con  $dW_t$  l'incremento dovuto al processo di Wiener e  $C_V$  una costante del modello dal valore unitario.

In De and Kim [2013] la velocità istantanea della fase gassosa, nell'equazione della particella  $p$ -esima, è ottenuta mediante un campionamento casuale della distribuzione Gaussiana parametrizzata con la velocità filtrata  $\tilde{\mathbf{u}}_p$  e la varianza  $2/3 k_{sgs}$ , con  $k_{sgs} = 2\Delta C_s^{2/3} \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}$ . Questo modello di dispersione delle particelle ipotizza che la turbolenza locale sia isotropa. Inoltre, il valore stocasticamente fluttuante della frazione di massa del vapore  $\check{Y}$ , visto da una singola particella, è ottenuto tramite un campionamento casuale dalla funzione di densità di probabilità (PDF) sottofiltro della frazione di massa locale.

Pozorski et al. [2013] hanno effettuato uno studio sull'effetto diretto delle velocità sottogriglia sul moto delle particelle nel caso di turbolenza isotropa forzata. Si è visto che nelle regioni non risolte dove l'energia cinetica sottogriglia  $k_{sgs}$  è maggiore del 30%, gli effetti sulla dinamica delle particelle sono più pronunciati. In questi casi è necessario usare un modello stocastico per ricavare le velocità sottogriglia. Quando, invece, l'energia contenuta nelle scale non risolte risulta molto piccola, il loro effetto può essere trascurato.

Mazzitelli et al. [2014] hanno sviluppato un modello lagrangiano delle scale sottogriglia (LSGS) per la dispersione di un numero arbitrario di traccianti in un flusso turbolento incompressibile, omogeneo e isotropo. L'idea di questo modello è quella di definire la differenza di velocità multiscala tra due traccianti: questa differenza, caratterizzata da un proprio tempo di turn-over, riesce a riprodurre la dispersione di Richardson per una singola coppia di traccianti. Il modello è capace di assicurare correlazioni consistenti tra un numero arbitrario di traccianti in accordo con le loro posizioni e relative distanze.



# Capitolo 4

## Analisi comparativa tra diverse simulazioni di uno spray turbolento di acetone

### 4.1 Codice utilizzato

Il codice numerico che è stato adottato per svolgere le simulazioni LES è basato su un codice preesistente chiamato CYCLON, sviluppato nel Dipartimento di Meccanica e Aeronautica dell'Università *La Sapienza* di Roma dal Prof. F. Picano. Questo codice è stato implementato con il linguaggio di programmazione FORTRAN90 e attualmente è in grado di svolgere simulazioni DNS e LES di getti multifase in regimi *one-way* e *two-way coupling*. In questo contesto viene usata una parallelizzazione del codice MPI per distribuire il lavoro su più processori e quindi aumentare le prestazioni di calcolo. Il codice è stato precedentemente validato e utilizzato per diversi studi su getti turbolenti con una sola fase e con particelle solide tra cui Picano et al. [2010, 2011], Picano and Hanjalić [2012] e recentemente anche su simulazioni dirette di getti con particelle che evaporano, come Dalla Barba [2016]. CYCLON è diviso in due parti principali:

- Il *modulo della fase portante*, dove vengono risolte le equazioni di Navier-Stokes in *low Mach* tramite il metodo di Runge-Kutta del terzo ordine. Il codice è in grado di risolvere, quindi, le equazioni che governano le dinamiche della fase portante, la quale può essere composta da una o più

specie chimiche. E' in questa fase che l'utente può scegliere se effettuare una simulazione DNS o LES.

- Il *modulo della fase dispersa*, dove si simula il comportamento delle particelle liquide con la possibilità o meno di considerare il processo di evaporazione. Qui, inoltre, vengono stimati i termini sorgente che compaiono nelle equazioni di Navier-Stokes, garantendo, se richiesto, l'accoppiamento tra la fase portante e quella dispersa.

I due moduli possono essere considerati come due codici numerici separati che ogni iterazione comunicano e scambiano informazioni. Durante la generica iterazione,  $it$ , il modulo della fase portante calcola tutte le variabili Euleriane e successivamente invia quelle necessarie a risolvere le equazioni Lagrangiane delle particelle al modulo della fase dispersa. Qui vengono calcolate tutte le variabili di interesse per le particelle presenti nel dominio, come ad esempio raggio, temperatura, velocità e posizione e inoltre vengono ricavati i termini di accoppiamento  $\dot{S}_{\gamma,p}$ , che sono poi inviati al modulo della fase portante nel caso di *two-way coupling*. A questo punto l'iterazione  $it$  è conclusa e si può passare alla valutazione dello step temporale successivo relativo all'iterazione  $it+1$ .

L'accoppiamento tra le due fasi, inoltre, richiede l'implementazione di una tecnica di interpolazione per due motivi in particolare:

- le variabili ricavate con l'approccio euleriano possono essere calcolate solo in corrispondenza dei nodi della mesh, mentre le particelle possono trovarsi in qualsiasi punto del dominio computazionale. Per questo motivo, per valutare le variabili della fase gassosa in corrispondenza del punto in cui si trova la particella è necessario un interpolatore.
- allo stesso modo il contributo di massa, quantità di moto ed energia dalle particelle al fluido deve essere distribuito sulla mesh discreta, o meglio nei nodi della mesh in prossimità della particella. Questo viene fatto per mezzo di un'interpolazione che garantisce la conservazione di massa, quantità di moto ed energia del sistema.

## 4.2 Parametri simulazione

Di seguito verranno presentati e discussi i risultati ottenuti dalle simulazioni LES implementate per lo studio dell'evaporazione in uno spray di acetone, in campo di moto turbolento. Inoltre, per una comprensione più ampia del fenomeno e dell'influenza del modello numerico utilizzato, i dati ottenuti verranno messi a confronto con una simulazione diretta (DNS) dello stesso caso, effettuata sempre con questo codice in un precedente lavoro di tesi [Dalla Barba, 2016], con gli stessi parametri considerati nelle LES.

Le simulazioni LES che consideriamo sono quattro e differiscono l'una dall'altra per risoluzione della griglia e per l'approccio utilizzato nei confronti delle particelle liquide. Infatti, una delle cause dell'elevato costo computazionale delle simulazioni numeriche che studiano getti multifase è l'elevato numero di particelle nel dominio e quindi l'elevato numero di equazioni da risolvere per seguire il comportamento e le dinamiche di ognuna di esse.

Per provare ad aggirare questo problema sono state introdotte nel getto delle *particelle rappresentative*, ovvero delle particelle che hanno le stesse proprietà (massa, temperatura, densità, ...) delle singole particelle, ma hanno un effetto sulla fase portante che è  $k$  volte quello che avrebbe una singola particella. In questo modo si possono introdurre meno particelle nel getto, favorendo una diminuzione dei tempi di simulazione, e replicare l'effetto di un numero maggiore di queste tramite i termini sorgente  $\dot{S}_{\gamma,p}$  che compaiono nelle equazioni di Navier-Stokes, vedi paragrafo 3.4.3.

Nei paragrafi seguenti le tre tecniche di simulazione verranno indicate rispettivamente con DNS, LES e LES\_rappr.

La simulazione consiste nell'iniettare particelle liquide di acetone in un getto composto da una miscela di gas e vapore di acetone.

L'acetone è un composto organico, volatile, di densità pari a  $800\text{kg}/\text{m}^3$  e con una pressione di vapore saturo ad una temperatura di  $293\text{K}$  pari a  $24598\text{Pa}$ , circa 10 volte maggiore di quella dell'acqua; per questo motivo è spesso usato negli esperimenti di spray turbolenti, così da non rendere necessaria una fase di preriscaldamento della fase gassosa per ottenere una discreta evaporazione [Chen et al., 2006].

All'ingresso del getto la frazione di massa delle particelle è posta pari a  $\Phi = \dot{m}_l/\dot{m}_g = 0.05$ , mentre la frazione di massa del vapore  $Y_v \simeq Y_{v,s}$ , dove con  $Y_{v,s}$  si intende il valore della frazione di massa di vapore saturo. Quest'ultima condizione fa sì che, all'ingresso, l'evaporazione nella regione interna del getto sia praticamente bloccata; tuttavia appena fuori da questa zona, dove la frazione di massa del vapore è più bassa, le particelle di acetone possono riprendere il loro processo di evaporazione.

Le condizioni del flusso in ingresso sono mantenute costanti imponendo il numero di Reynolds iniziale  $Re_D = 2U_0R/\nu = 6000$ , dove  $U_0$  è la velocità media in ingresso (*bulk velocity*) pari a circa  $8m/s$ ,  $R \simeq 0.005m$  è il raggio del pipe e  $\nu$  è la viscosità cinematica. Le particelle vengono immesse quando il flusso turbolento è già pienamente sviluppato e con una velocità iniziale pari a quella del fluido in ingresso. La temperatura di immissione del gas e delle particelle è  $T_0 = 275.15K$  e il raggio delle particelle immesse è pari a  $6\mu m$ .

Per quanto riguarda le simulazioni LES, per modellare l'effetto delle scale sottogriglia su quelle risolte viene applicato il modello di Smagorinsky, con costante  $C_s = 0.1$ . In questo contesto, non sono stati considerati modelli stocastici per tener conto degli effetti delle scale non risolte sulla dinamica delle particelle liquide. Le simulazioni hanno come dominio un cilindro di dimensioni  $2\pi \times 22R \times 70R$ , rispettivamente nella direzione azimutale  $\theta$ , radiale  $r$  e assiale  $z$ , dove  $R$  è il raggio del pipe. Il dominio della DNS è discretizzato tramite  $N_\theta \times N_r \times N_z = 128 \times 223 \times 640$  nodi. Le griglie di tutte le simulazioni non sono equispaziate, ma le dimensioni delle celle aumentano all'aumentare di  $r$  e  $z$ ; inoltre si utilizzano griglie sfalsate, dove le grandezze scalari sono definite nel centro cella, mentre le velocità sono sfalsate nelle rispettive direzioni, ovvero sono definite nel mezzo delle facce delle celle.

### 4.3 Risultati delle simulazioni LES con griglia fine

Di seguito verranno presentati e discussi i risultati ottenuti dalle prime due simulazioni LES e, per stabilire la loro accuratezza nel modellare lo spray di acetone, verranno confrontati con i dati ottenuti dalla DNS dello stesso caso. Per



studiare il comportamento dello spray sono stati usati due metodi:

- rappresentazione del getto tramite campi istantanei, i quali permettono di osservare la distribuzione delle particelle nel dominio;
- rappresentazione tramite grafici e mappe 2D, ottenuti mediando le variabili di interesse nella direzione  $\theta$  e nel tempo, una volta superata la fase transitoria e stabilita una certa stazionarietà del getto. Per le particelle, descritte tramite un approccio Lagrangiano, si media, oltre che in  $\theta$  e nel tempo, per il numero delle particelle presenti nelle celle considerate; i valori medi ottenuti vengono poi attribuiti a punti discreti della griglia.

In questo caso il dominio delle LES è discretizzato tramite  $N_\theta \times N_r \times N_z = 32 \times 56 \times 160$  nodi, ovvero la dimensione della griglia della DNS è stata ridotta di un fattore 64, 4 per ogni direzione. La LES\_rappr, invece, è una replica della prima, ma se nella prima la frazione di massa imposta in ingresso è  $\Phi = 0.05$  e quindi per ogni iterazione vengono immesse  $N_{p,it} = 165$  particelle, nella seconda si è scelto di introdurre nel getto  $N_{p,it} = 3$  particelle, ovvero  $k = 55$ . Nella LES classica sono state immesse circa  $12 \cdot 10^6$  particelle, nella seconda circa  $220 \cdot 10^3$ , ma ognuna di queste con un contributo sulla fase portante pari a 55 volte quello della singola particella.

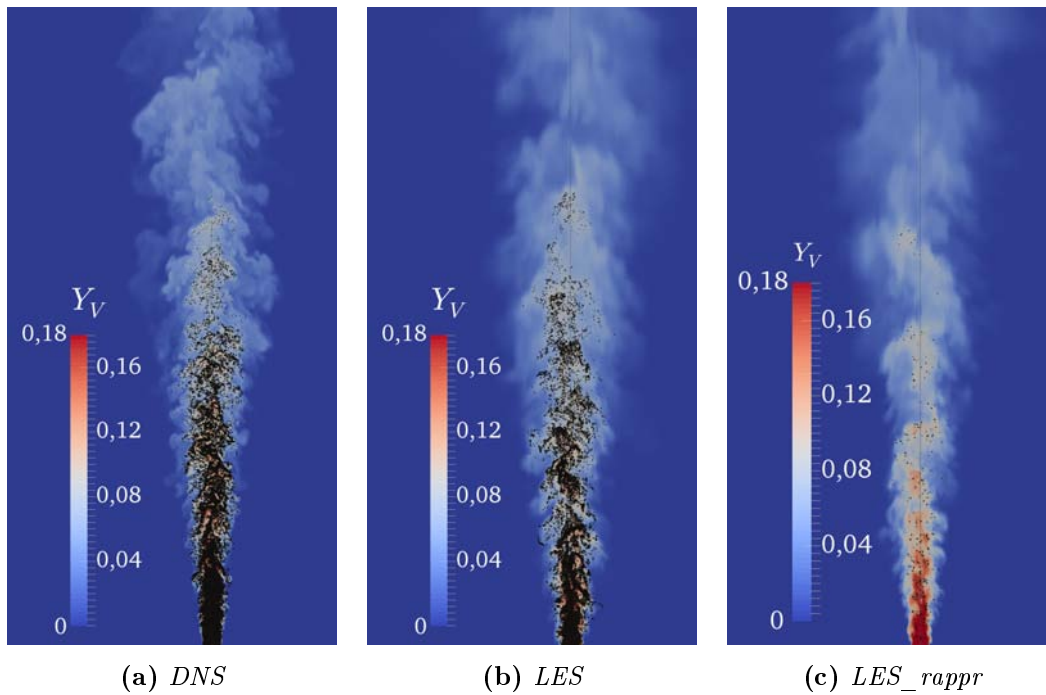
$$\dot{S}_{\gamma,p}|_{rappr} = \underbrace{55}_{=k} \dot{S}_{\gamma,p} \quad (4.1)$$

### 4.3.1 Campi istantanei

I campi istantanei delle simulazioni DNS e LES innanzitutto evidenziano la differenza di risoluzione delle diverse scale del moto turbolento.

La frazione di massa di vapore presenta una distribuzione non omogenea per effetto del miscelamento turbolento. Nelle zone interne si hanno valori più elevati di  $Y_v$ , mentre nelle regioni più esterne del getto si hanno valori più bassi e il campo di moto è caratterizzato da evidenti fluttuazioni turbolente. Queste fluttuazioni consentono l'inclusione nel getto di bolle di aria provenienti dall'ambiente esterno, le quali concorrono alla diluizione della concentrazione di vapore e all'aumento della velocità di evaporazione.

L'evaporazione delle particelle, inoltre, sottrae dalla fase gassosa una quantità di

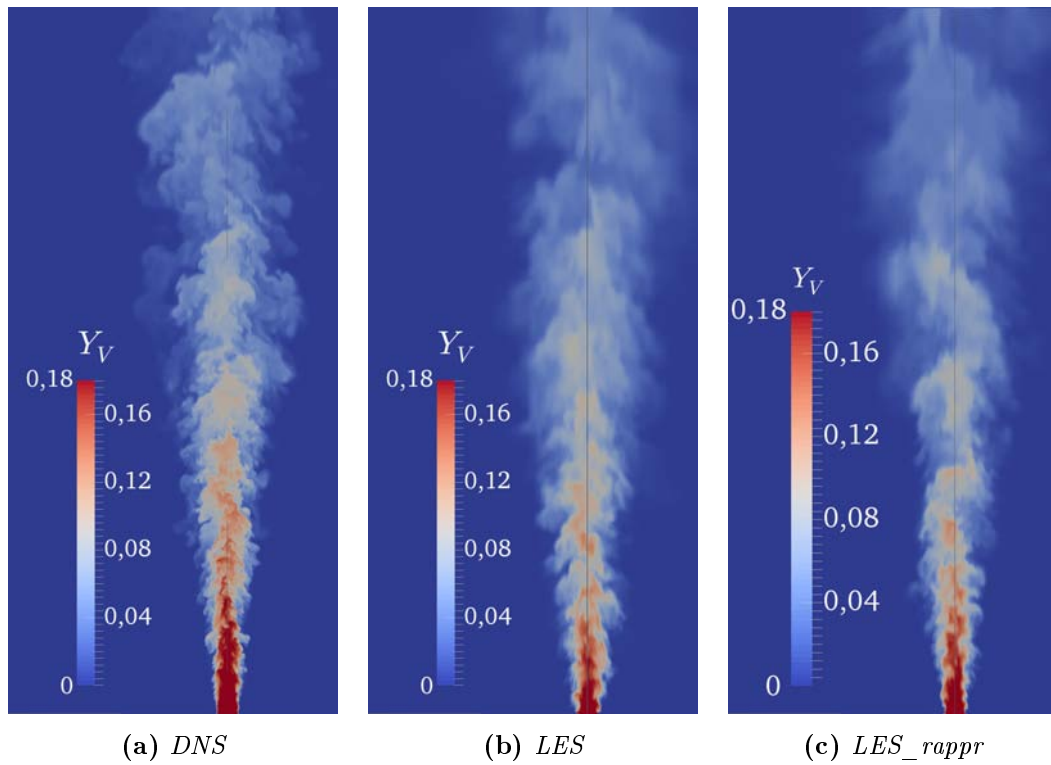


**Figura 4.1:** Sezione del campo istantaneo della frazione di massa di vapore  $Y_v$  della fase gassosa. Le particelle sono rappresentate come punti neri e la loro dimensione è funzione del raggio in quell'istante.

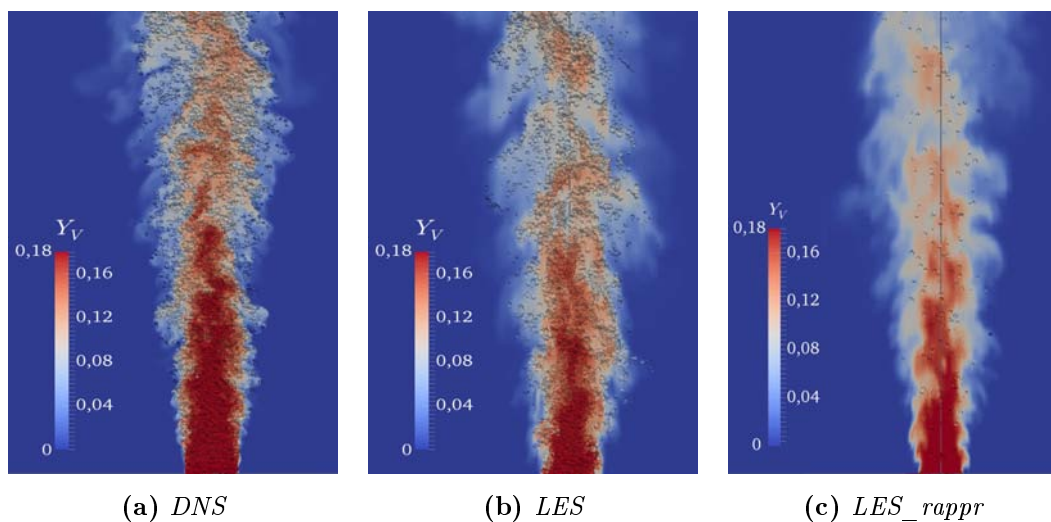
energia pari al calore latente di vaporizzazione, necessario per il cambio di fase, e ne provoca una diminuzione della temperatura.

Andando a confrontare il comportamento delle diverse simulazioni, si nota che mentre nella DNS si riescono a distinguere con maggiore dettaglio le variazioni di  $Y_v$ , nella LES si perde accuratezza, vedi Fig. 4.1.

Sono poi visibili zone con maggiore concentrazione di particelle: quest'ultima può arrivare ad essere centinaia di volte superiore a quella media nel getto. Gli agglomerati di particelle che si formano vengono chiamati *cluster* e si posizionano in corrispondenza delle zone con più alta frazione di massa di vapore di acetone. Queste strutture possono influenzare il processo di evaporazione e il campo di velocità della fase gassosa. Possono formarsi sia nella regione più interna dello spray che negli strati più esterni e possono causare l'aumento di concentrazione di vapore, anche fino al valore di saturazione, riducendo o addirittura bloccando il processo di evaporazione. Se non si ha una sufficiente diffusione di vapore in quell'area, quando  $Y_v = Y_{v,s}$  l'evaporazione all'interno del cluster si ferma.



**Figura 4.2:** Sezione del campo istantaneo della frazione di massa di vapore  $Y_v$  della fase gassosa.



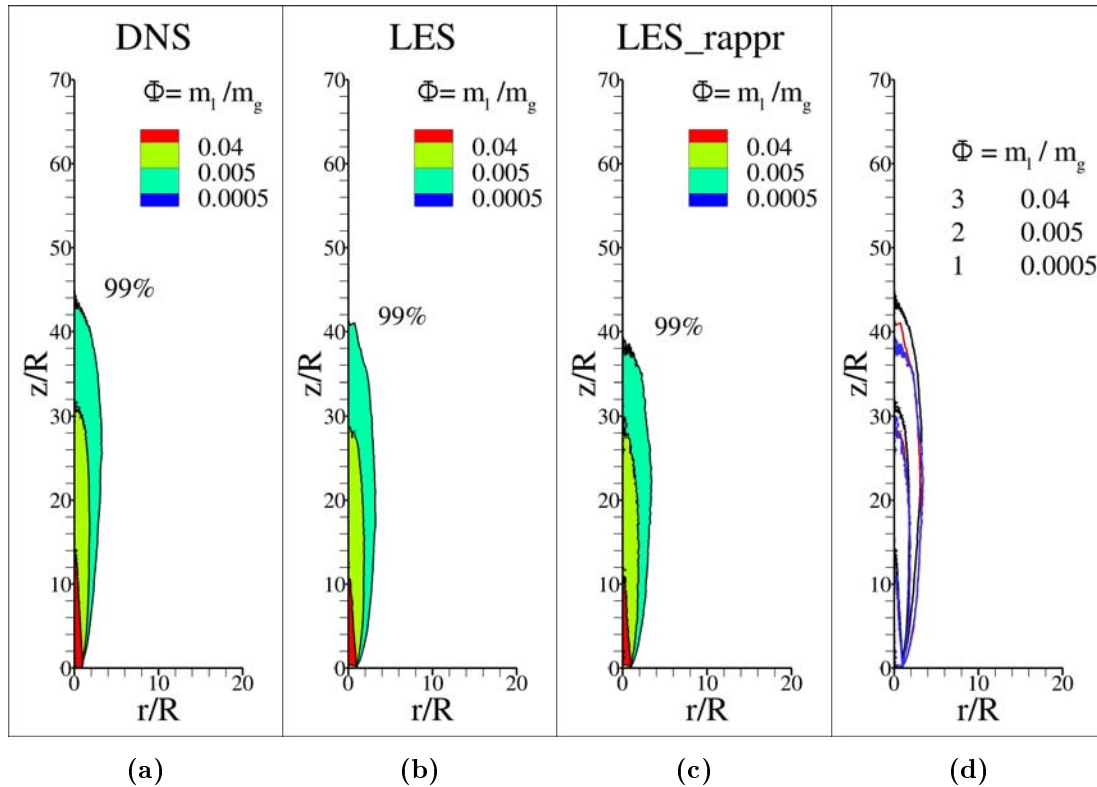
**Figura 4.3:** Ingrandimento della zona di ingresso dello spray: sezione del campo istantaneo della frazione di massa di vapore  $Y_v$  della fase gassosa e rappresentazione delle particelle come sfere, scalate in base al raggio e colorate in funzione della loro temperatura.

Osservando, invece, le Fig. 4.2 e 4.3 si nota la prima grande differenza tra la descrizione dello spray nella DNS e nelle LES. Mentre in (a) si ha una zona di transizione all’imbocco del getto, dove la concentrazione di vapore  $Y_v$  è ancora al livello di saturazione, nella (b) e nella (c) questa zona è pressoché assente, ovvero la diminuzione iniziale della frazione di massa del vapore è molto più rapida nella LES, piuttosto che nella DNS, la quale mantiene la configurazione imposta dalle condizioni iniziali per un tratto più lungo.

Nello zoom della sezione iniziale del getto di Fig. 4.3 si riescono a vedere ancora meglio le differenze in ingresso e le zone con maggiore concentrazione di particelle.

### 4.3.2 Frazione di massa $\Phi$

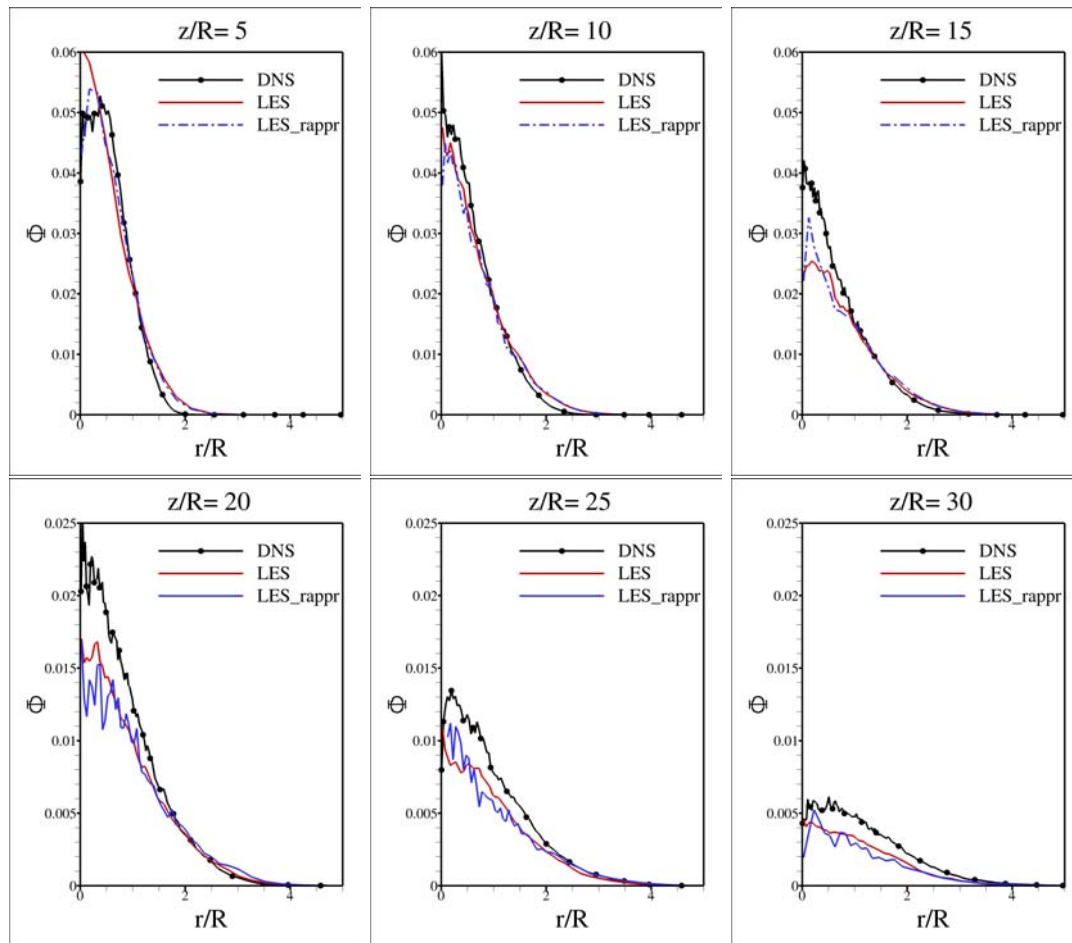
Una delle prime grandezze che andiamo a confrontare è la frazione di massa delle particelle  $\Phi$ , definita come il rapporto tra la massa della fase liquida e quella di aria/vapore. Come già precisato,  $\Phi$  in ingresso è imposta pari a 0.05, quindi possiamo dire che per  $\Phi = 0.0005$  tutte le particelle liquide sono evaporate a meno di un 1% che è ancora allo stato liquido. Dalla Fig. 4.4, non emergono sostanziali differenze fra le tre simulazioni, se non che le due simulazioni LES sembrano essere leggermente in *anticipo* se si osservano le tre isolinee rappresentate; questo fatto si riesce a vedere ancora meglio nella (d). Nella DNS si ha  $\Phi = 0.0005$  a circa  $z/R = 44$ , nella LES a circa  $z/R = 41$  e nella LES\_rappr a  $z/R = 38$ . L’errore, rispetto alla DNS, nel prevedere la lunghezza di evaporazione è del 6,8% per la LES e del 13,6% per la LES con le particelle rappresentative. Fino a  $z/R = 10$  non sembrano esserci differenze tra la LES e la LES\_rappr; tuttavia il valore che assumono a questa altezza è leggermente minore di quello nella DNS, ovvero nella zona centrale del getto delle LES si trovano meno particelle liquide. Dalla Fig. 4.5 si possono osservare i profili radiali della frazione di massa delle particelle a diversi tagli lungo l’asse  $z$ : al centro del getto, ovvero entro  $1R$  dall’asse, si riscontrano le principali differenze. Nelle LES la frazione di massa è in genere minore del caso con la DNS, in particolare nella zona oltre  $z/R = 10$ . In generale, in tutte le simulazioni, oltre  $r/R = 2$  la frazione di massa delle particelle è molto piccola.



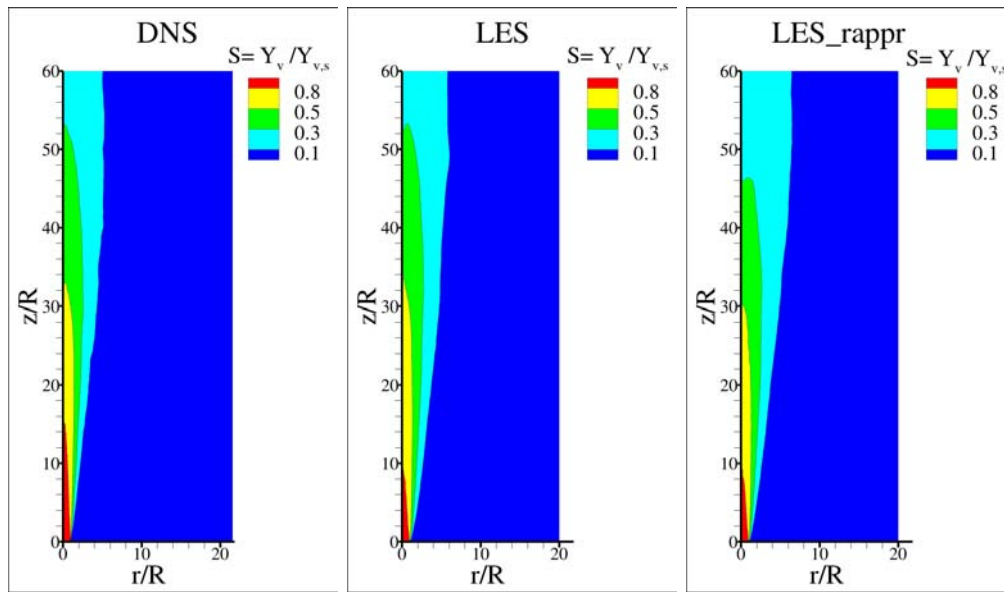
**Figura 4.4:** *Frazione di massa delle particelle  $\Phi = m_l/m_g$  nelle diverse simulazioni (a), (b), (c). Il 99% della fase liquida è evaporato entro la zona delimitata dall'isolinea a  $\Phi = 0.0005$ ; oltre questa zona solo l'1% delle particelle è ancora allo stato liquido. Nella (d): — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative*

### 4.3.3 Campo di saturazione e velocità di evaporazione

La velocità di evaporazione delle particelle è funzione sia della temperatura del gas che della concentrazione di vapore. A questo proposito si è introdotta una nuova variabile che descrive il campo di saturazione, ovvero  $S = Y_v/Y_{v,s}$ . Come già spiegato nel paragrafo 3.1.1,  $Y_{v,s}$  è la frazione di massa del vapore saturo, funzione solo della temperatura e della pressione locale della fase gassosa (vedi eq. 3.4): in corrispondenza di quel valore l'evaporazione delle particelle è estremamente ridotta o bloccata. Il campo di saturazione  $S$  assume il suo valore massimo quando vale 1, ovvero all'ingresso, nella regione interna del getto, per la condizione al contorno imposta. Quando  $S$  assume valori molto piccoli, invece, vuol dire che ci troviamo in zone con una concentrazione di vapore di acetone molto bassa. Come possiamo vedere dalla Fig.4.6,  $S$  nella regione più interna



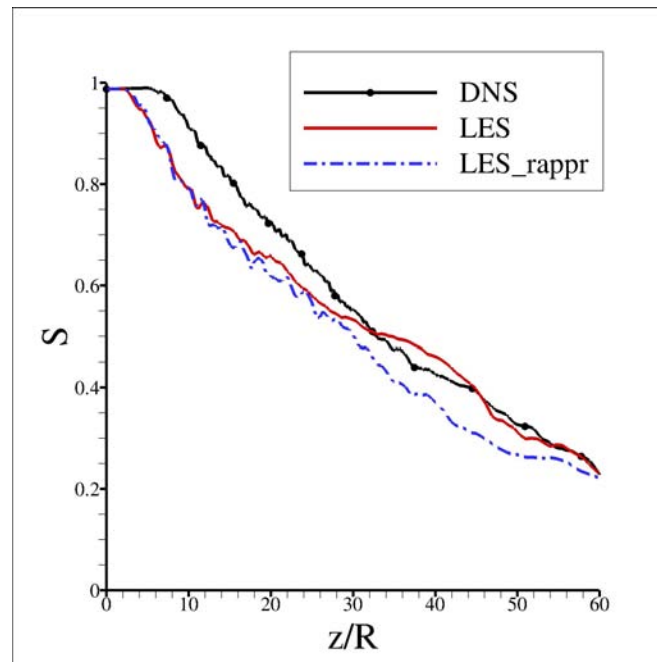
**Figura 4.5:** *Profili radiali della frazione di massa delle particelle  $\Phi = m_l/m_g$  in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative.*



**Figura 4.6:** Campo di saturazione  $S = Y_v/Y_{v,s}$  nelle diverse simulazioni.

del getto e intorno a  $z/R \simeq 10$ , decresce più velocemente nelle simulazioni LES rispetto alla DNS: questo fa sì che le particelle liquide inizino prima il processo di evaporazione e quindi, allo stesso modo, riescano a terminarlo prima, come osservato precedentemente con l'analisi della frazione di massa  $\Phi$ . Tra i  $32R$  e circa i  $45R$ , la LES presenta un campo di saturazione maggiore rispetto alla DNS nella zona centrale del getto per poi accordarsi ad essa nell'ultimo tratto, vedi Fig. 4.7. In entrambe le LES,  $S$  inizia a decrescere rapidamente dopo  $z/R = 2$ , nella DNS questo avviene dopo  $z/R = 7$ .

Per valutare l'intensità dell'evaporazione delle particelle liquide nelle diverse regioni dello spray, nella Fig. 4.8 viene rappresentato il termine  $dm_p/dt$ , che descrive per l'appunto la variazione media nel tempo della massa delle particelle, ovvero la velocità di evaporazione. Si nota subito come i valori più alti si trovino nella zona più esterna all'ingresso del getto: questo è dovuto al fatto che le particelle più grandi, da poco immesse nello spray, entrano in contatto con una zona molto povera di vapore non appena si allontanano dalla zona centrale del getto. Quindi, mentre lungo l'asse, dove si ha un'alta concentrazione di vapore, l'evaporazione avviene più lentamente, nelle zone più esterne questa è favorita dall'aria più secca all'esterno dello spray. Lungo l'asse, nei primi  $8R$  per la DNS e circa  $4R$  per le LES, l'evaporazione è bloccata, poi, grazie al fenomeno dell'



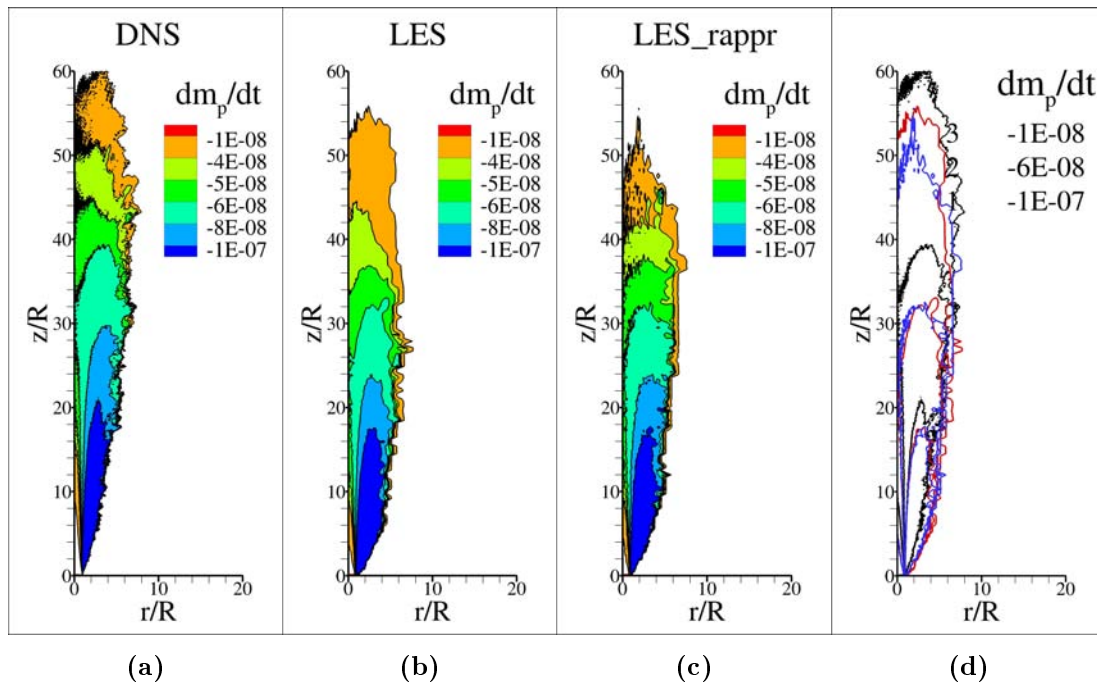
**Figura 4.7:** *Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, del campo di saturazione  $S = Y_v/Y_{v,s}$ . Confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative*

*entrainment*, ovvero la diminuzione della concentrazione di vapore di acetone nella regione interna del getto grazie al flusso di aria proveniente dall'esterno dello spray, le particelle liquide iniziano ad evaporare anche nella zona interna. Intorno a  $z = 34R$  per la DNS e  $z = 26R$  circa per le LES, la velocità di evaporazione torna poi a diminuire lungo l'asse. Dalla (d) della Fig. 4.8 si possono vedere meglio le differenze tra le simulazioni: le due LES sembrano presentare un andamento molto simile di  $dm_p/dt$  fino circa  $z = 40R$ ; rispetto alla DNS, le LES forniscono la stessa velocità di evaporazione a valori di  $z/R$  in genere più piccoli, questa differenza si accentua man mano che si procede lungo  $z$ .

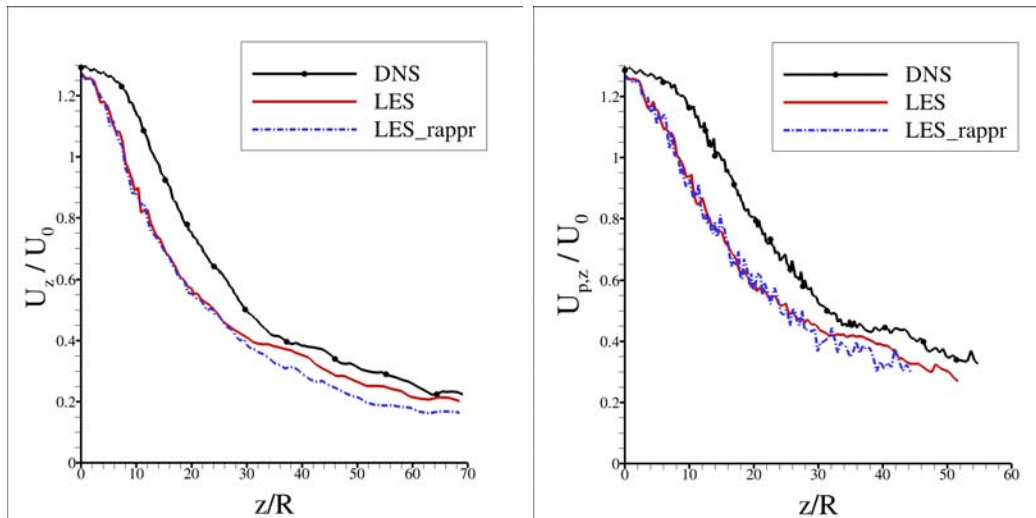
#### 4.3.4 Velocità della fase portante e di quella dispersa

Come si è visto precedentemente nel paragrafo 4.3.3, anche dalle Fig. 4.9 si nota uno sfasamento di circa  $5R$  fino a  $z/R = 30$  tra le simulazioni LES e la DNS. Sia la miscela di aria/vapore che le particelle nelle LES presentano velocità inferiori a quelle ricavate dalla DNS. L'andamento delle velocità del fluido nella LES e nella LES con particelle rappresentative coincide fino a circa  $30R$ , poi la velocità nella LES\_rappr inizia a diminuire più velocemente, mentre la LES si





**Figura 4.8:** Velocità di evaporazione  $dm_p/dt$  nelle diverse simulazioni (a),(b),(c). Nella (d): — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative.



**Figura 4.9:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della velocità della fase gassosa (a sinistra) e delle particelle liquide (a destra), normalizzate con la velocità media in ingresso  $U_0$ . Confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative.

avvicina ai valori della DNS.

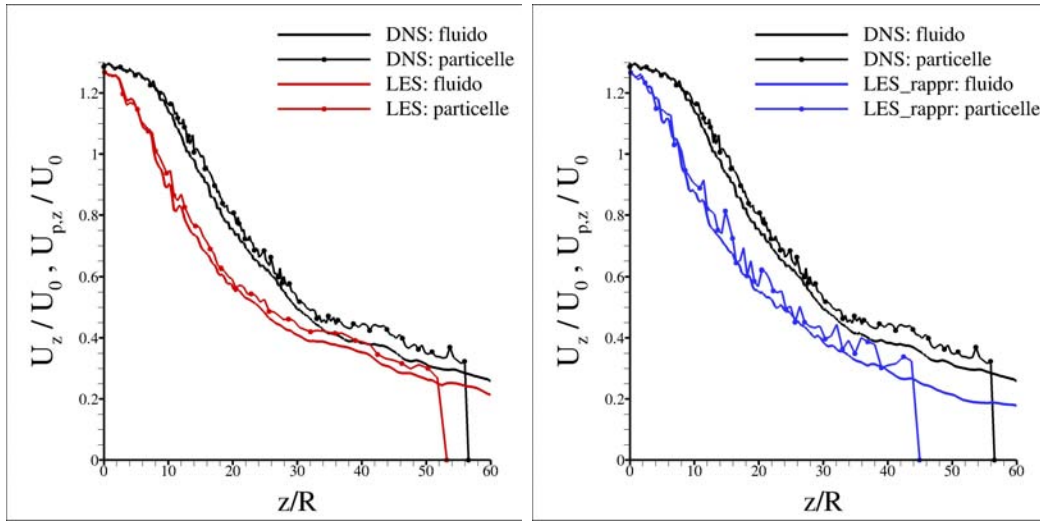
Per quanto riguarda, invece, la velocità delle particelle si ha una differenza meno marcata tra la LES e la LES\_rappr, ma in ogni caso le particelle hanno velocità minori rispetto a quelle nella DNS. Come nel caso della velocità della fase gassosa anche qui vi è uno sfasamento delle curve di circa  $5R$  lungo l'asse  $z$ . Il fatto che le curve si interrompano a valori diversi sta ad indicare che oltre l'ultimo punto rappresentato, nella zona interna del getto, non vi sono più particelle liquide, quindi sono tutte evaporate: per la LES questo avviene a circa  $53R$  dall'ingresso, per la LES\_rappr a circa  $45R$  e infine nella DNS a  $56R$ . Il fatto che le particelle nelle due LES siano più lente, potrebbe influenzare il processo di evaporazione facendolo terminare prima.

Dalla Fig. 4.10 in generale si osserva che, nelle tre simulazioni, le particelle sono mediamente più veloci del fluido e che la LES nella zona più a valle del getto (oltre  $z/R = 30$ ) è più accurata della LES\_rappr. Nelle Fig. 4.11 sono rappresentati gli andamenti di  $u_{z,rms}$  e  $u_{r,rms}$ , ovvero delle componenti fluttuanti della velocità della fase gassosa in direzione assiale e radiale. Le velocità r.m.s. radiali risultano poco minori di quelle in direzione assiale, ma hanno pressoché lo stesso andamento: aumentano fino ad un valore massimo, posizionato entro i  $20R$ , e poi diminuiscono gradualmente. Si nota che nelle simulazioni LES il massimo avviene in anticipo rispetto alla DNS, in accordo con lo sfasamento iniziale evidenziato precedentemente.

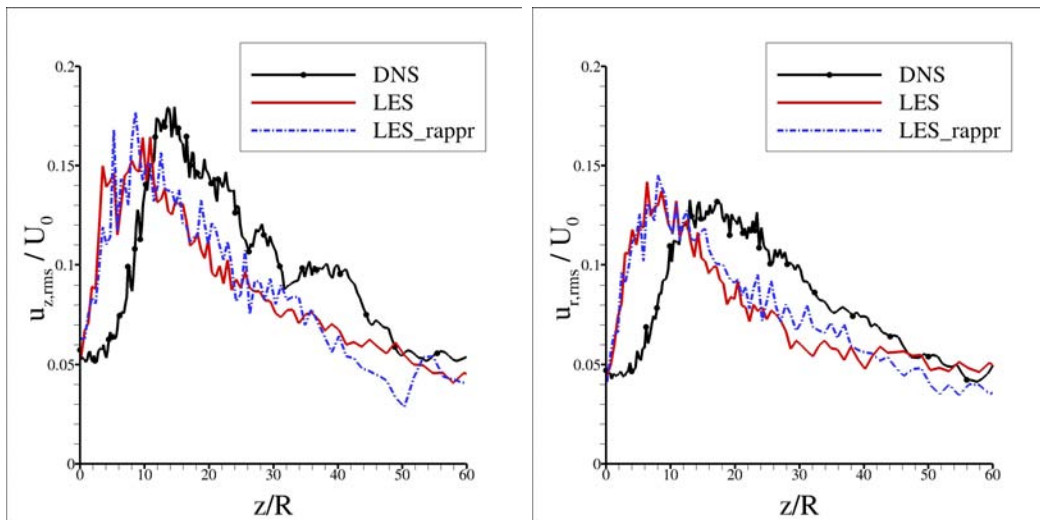
Nella DNS le particelle mantengono la loro velocità iniziale più a lungo, vedi Fig. 4.12, mentre, come ci si aspettava, nelle simulazioni LES si ha un decremento più rapido a partire da circa  $8R$ . Il getto nella LES con particelle rappresentative risulta più aperto in direzione radiale rispetto alle altre due simulazioni.

### 4.3.5 Raggio delle particelle

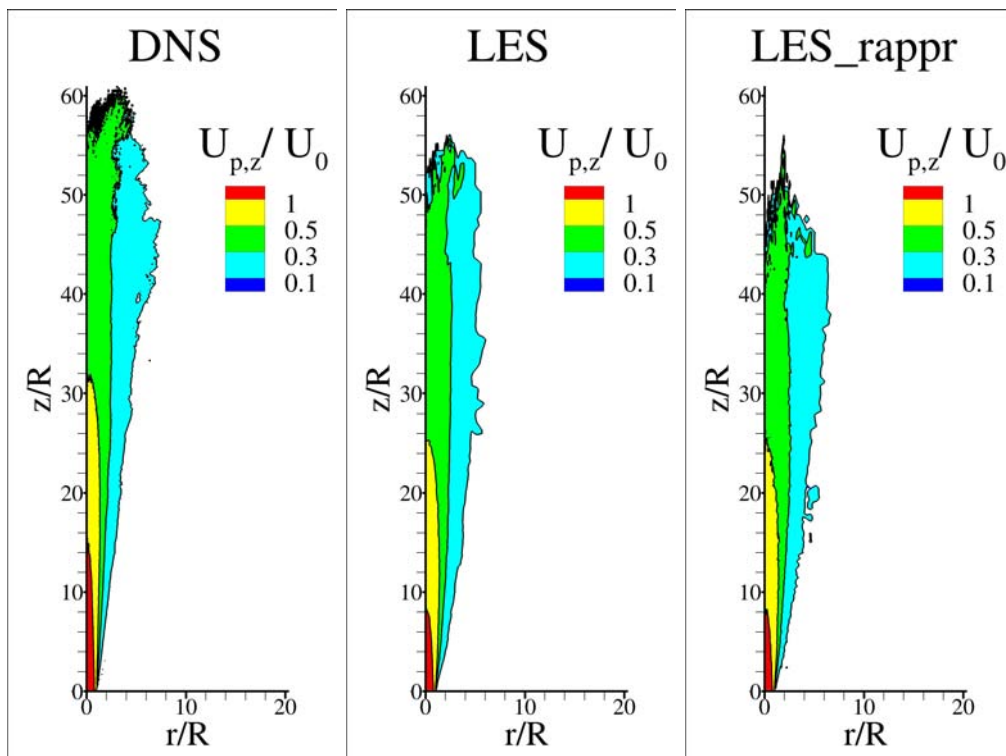
Come ultima grandezza, si è deciso di osservare la distribuzione nello spray del raggio medio delle particelle, normalizzato sul loro raggio di ingresso, che come già detto è  $6\mu m$ . Per una stessa quota lungo l'asse  $z$ , nelle zone più esterne si trovano particelle con raggi più piccoli, a causa di un'evaporazione più intensa rispetto quelle che si trovano nelle zone più interne del getto. In accordo con quanto detto nei precedenti paragrafi, nelle LES i medesimi valori di  $r_p/r_{p,i}$  si trovano prima



**Figura 4.10:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della velocità del getto e delle particelle. Confronto della LES (a sinistra) e della LES\_rappr (a destra) con la DNS.



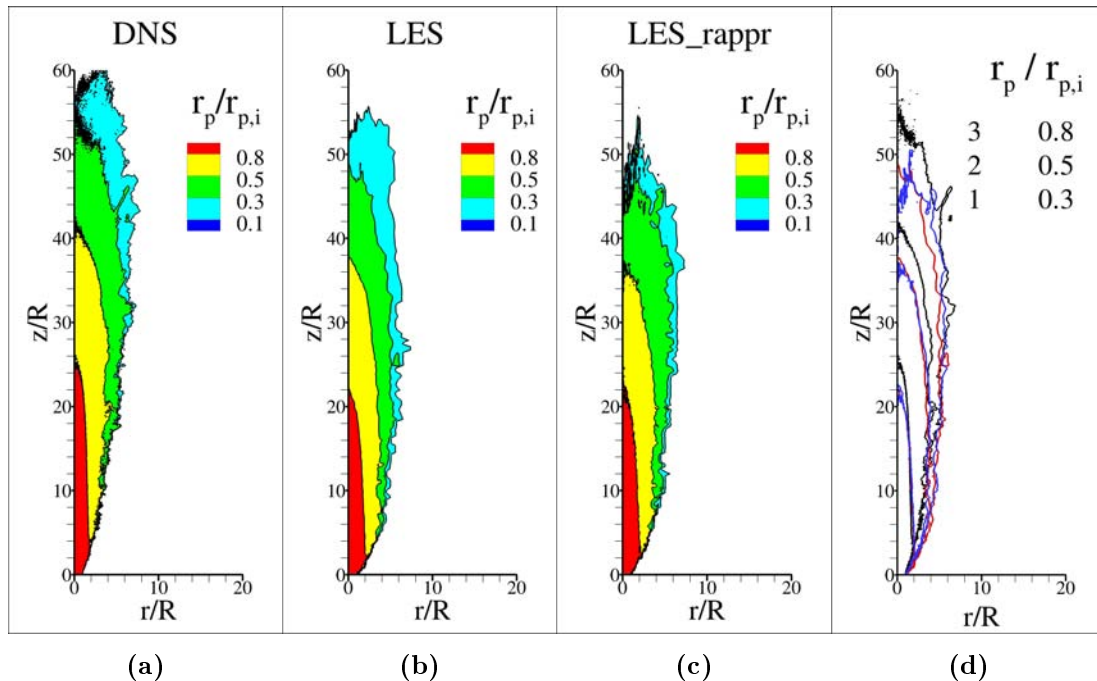
**Figura 4.11:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, delle fluttuazioni di velocità (rms) in direzione assiale  $u_{z,rms}$  e in direzione radiale  $u_{r,rms}$ , normalizzate con la velocità media in ingresso  $U_0$ .



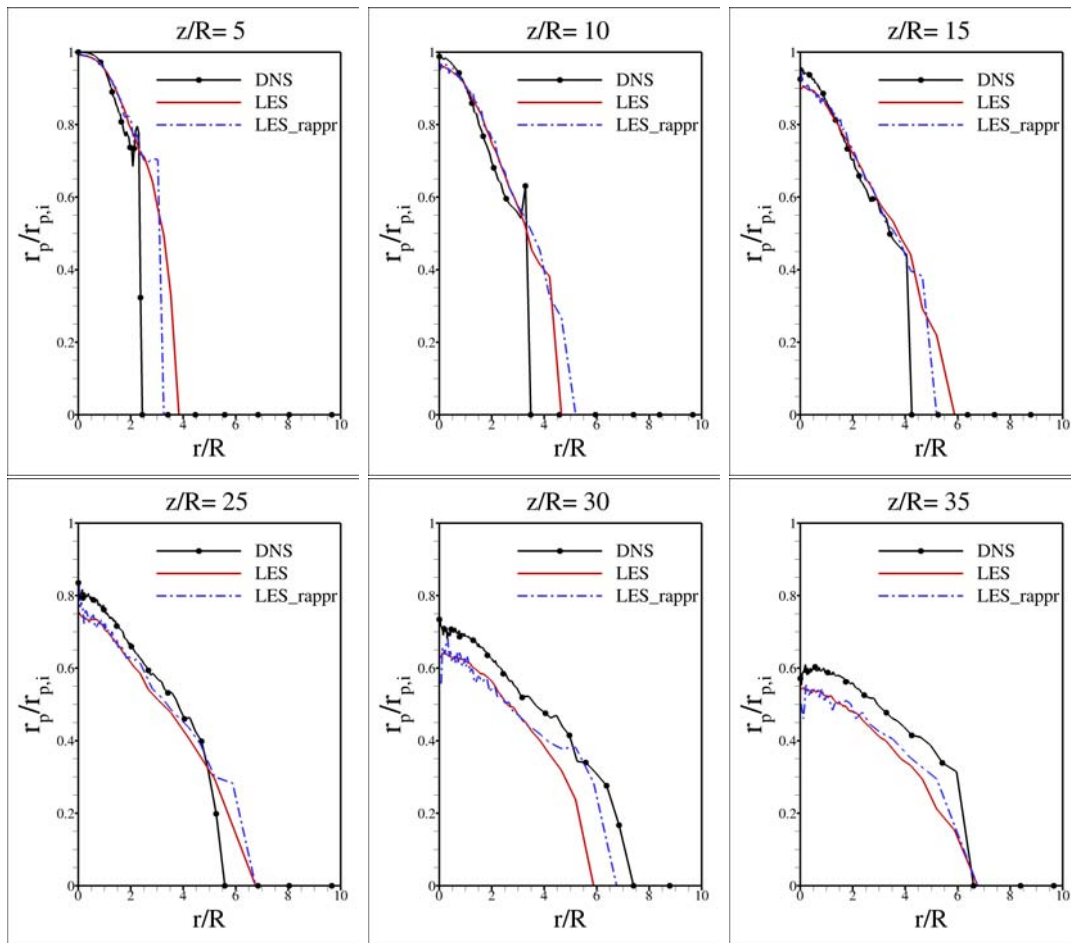
**Figura 4.12:** *Velocità delle particelle, normalizzata sulla velocità media del gas in ingresso  $U_0$ , nelle diverse simulazioni.*

lungo  $z$  rispetto alla DNS, Fig. 4.13. Nella zona centrale, si trovano particelle con raggio pari o inferiore al 10% di quello iniziale oltre  $z = 60R$  nella DNS, oltre ai  $50R$  nelle simulazioni LES, questo fatto è in accordo con le osservazioni fatte per le precedenti grandezze secondo cui nelle LES l'evaporazione termina prima e quindi la soglia oltre la quale non si trovano più particelle, o quasi, è posizionata prima lungo l'asse  $z$ .

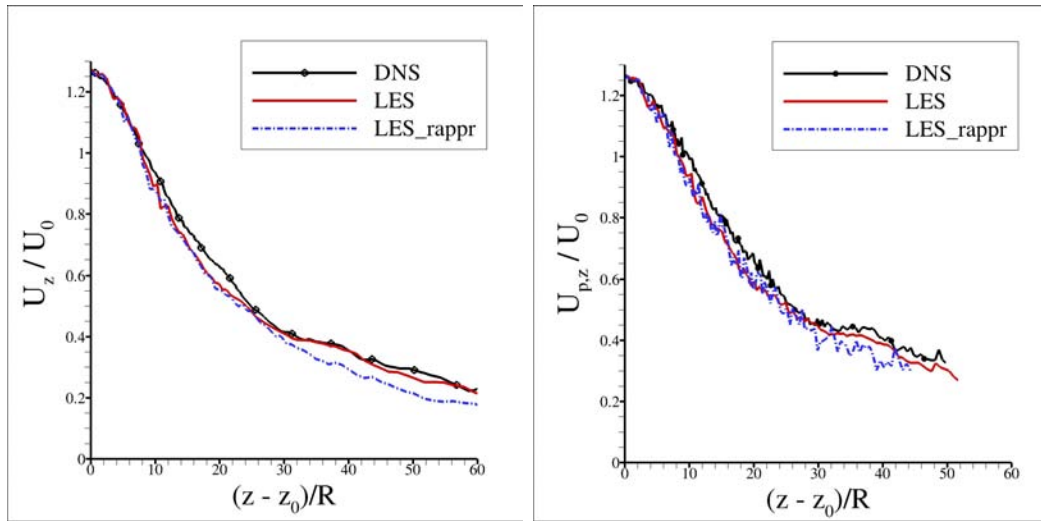
Dalla figura 4.14, si può innanzitutto notare che fino a circa  $z = 25R$  nei getti simulati con le LES vi sono particelle a valori di  $r/R$  maggiori rispetto alla DNS, infatti radialmente i getti risultano più ampi. Questa situazione va a stabilizzarsi o addirittura ad invertirsi (ad esempio per la LES) oltre  $z = 30R$ . Tuttavia, fino a  $z/R = 20$  le tre curve nelle zone più interne dello spray sono praticamente coincidenti, mentre per valori di  $z$  maggiori le curve delle LES assumono valori più bassi rispetto alla DNS.



**Figura 4.13:** Raggio delle particelle, normalizzato sul raggio delle particelle in ingresso, nelle diverse simulazioni (a), (b), (c). Nella (d): — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative.



**Figura 4.14:** *Profili radiali del raggio delle particelle, normalizzato sul raggio delle particelle all'ingresso del getto, in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative*

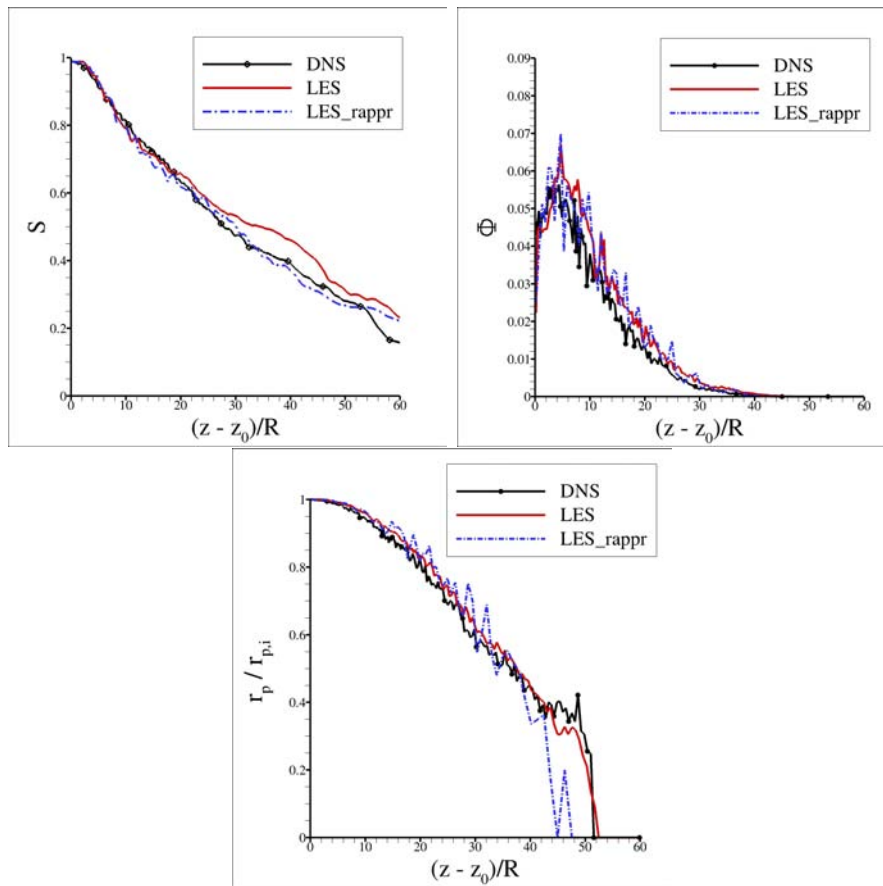


**Figura 4.15:** *Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della velocità del getto e delle particelle con origine virtuale a  $z_0 = -5R$  per la DNS*

### 4.3.6 Discussione dei risultati

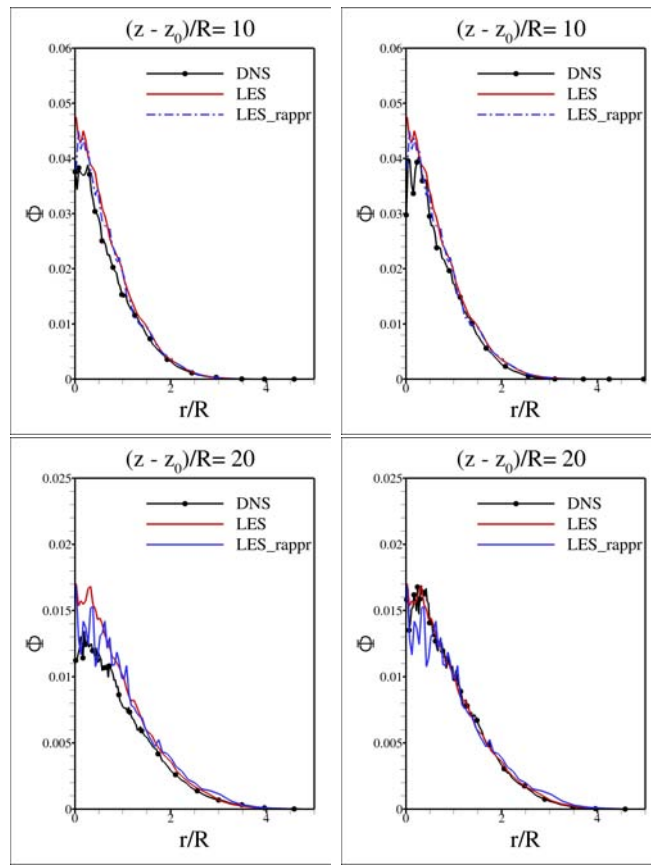
Quello che emerge fin'ora è che le simulazioni LES descrivono i campi delle varie grandezze fluidodinamiche abbastanza accuratamente se si prende come riferimento la DNS. Tuttavia spesso, andando ad osservare le differenze fra le due tecniche numeriche, si è notato uno sfasamento fra le varie curve o isolinee di circa  $5R$  lungo l'asse  $z$ . Si è supposto che questo sfasamento sia dovuto al fenomeno già osservato nel paragrafo 4.3.1 relativo ai campi istantanei, ovvero alla differenza nella rappresentazione della zona di transizione all'ingresso del getto tra DNS e LES. Per verificare quanto appena detto, si è spostata l'origine delle curve dell'evoluzione assiale della velocità del getto e delle particelle della DNS ad una cosiddetta origine virtuale  $z_0$ . Il valore che si è scelto è quello tale per cui le due curve coincidano nei primi  $2R$  lungo  $z$ , questo avviene per  $z_0 = -5R$ . Come si può vedere dalla Fig. 4.15, a questo punto le tre simulazioni si accordano perfettamente almeno fino a  $z - z_0/R = 30$ , poi la LES\_rappr tende a presentare valori leggermente inferiori di velocità.

Ponendo come origine virtuale della DNS  $z_0 = -5R$  anche per tutte le altre grandezze fluidodinamiche si può notare come le differenze che si vedevano prima tra DNS, LES e LES\_rappr, tendano a diminuire notevolmente, se non a scomparire, vedi Fig. 4.16. Il campo di saturazione che presentava lo stesso sfasamento



**Figura 4.16:** *Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, del campo di saturazione, della frazione di massa e del raggio delle particelle con origine virtuale a  $z/R = -5$  per la DNS*

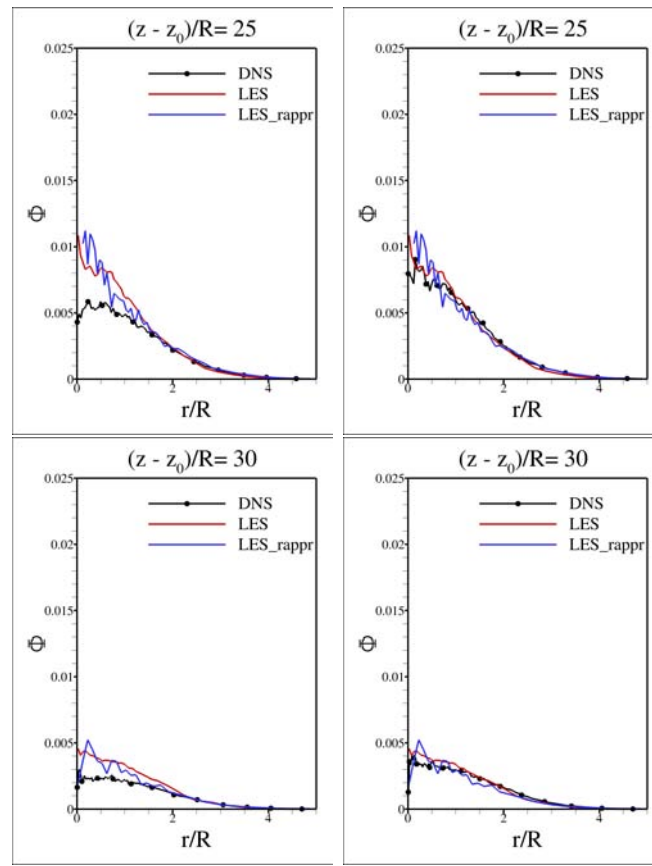




**Figura 4.17:** (a) Profili radiali della frazione di massa delle particelle  $\Phi = m_l/m_g$  in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS con origine virtuale a  $-5R$  (a sinistra) e  $-3R$  (a destra), LES e LES con particelle rappresentative.

presente nella velocità, ora è perfettamente coincidente nelle tre simulazioni, almeno fino a  $z/R = 30R$ . Una notevole riduzione dell'errore si ha anche per la frazione di massa delle particelle  $\Phi$  e per il raggio delle particelle.

In realtà, per avere un migliore accordo circa la frazione di massa delle particelle e, quindi, per avere una migliore previsione della lunghezza di evaporazione si è posta l'origine virtuale della DNS a  $z_0 = -3R$ , a discapito della precisione sulle velocità. Nelle Fig. 4.17 e 4.18 sono rappresentati i profili radiali della frazione di massa  $\Phi$  a diversi tagli lungo  $z$ , con la DNS riscalata con le due origini virtuali: a sinistra  $z_0 = -5R$  e a destra  $z_0 = -3R$ . Mentre a destra, a meno di alcune oscillazioni in prossimità dell'asse, le curve delle tre simulazioni coincidono, a sinistra le LES tendono a sovrastimare la lunghezza di evaporazione a partire da  $z - z_0/R = 15$ . Dalla Fig. 4.19 si nota, come accennato prima, che

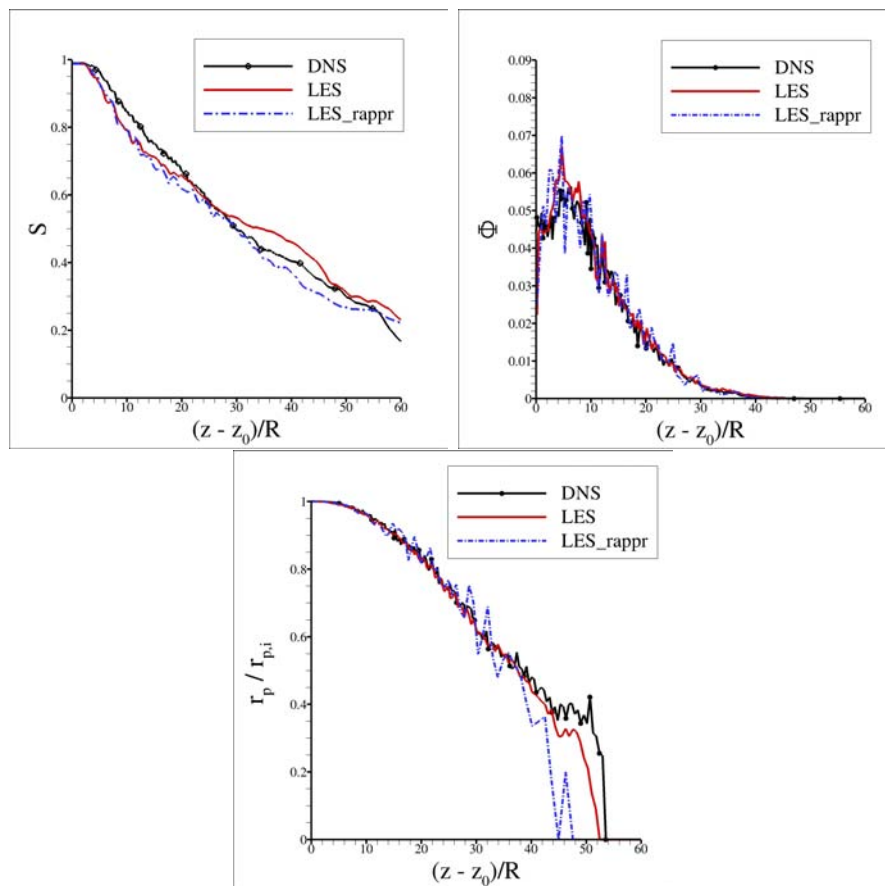


**Figura 4.18:** (b) Profili radiali della frazione di massa delle particelle  $\Phi = m_l/m_g$  in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS con origine virtuale a  $-5R$  (a sinistra) e  $-3R$  (a destra), LES e LES con particelle rappresentative.

l'evoluzione assiale della frazione di massa e del raggio delle particelle migliora rispetto al caso con  $z_0 = -5$ .

Le principali differenze fra le tre simulazioni sono quindi da ricondurre ad un'errata rappresentazione della zona di ingresso del getto. Questo fatto potrebbe essere causato dal fatto che le LES, risolvendo solo le scale del moto più grandi e quindi avendo una griglia meno fitta rispetto alla DNS, non riescono a rappresentare in modo adeguato l'evoluzione del flusso all'inizio. Modificando, quindi, l'origine virtuale della DNS le curve coincidono e la LES può essere usata senza incorrere in particolari errori per simulare l'evaporazione delle particelle di acetone nello spray.

Per quanto riguarda la LES con particelle rappresentative, si può affermare che, a meno di alcune imprecisioni oltre  $z/R = 40$ , risulta accurata come la LES classica



**Figura 4.19:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, del campo di saturazione e del raggio delle particelle con origine virtuale a  $z/R = -3$  per la DNS

**Tabella 4.1:** *Tempo di esecuzione della simulazione, impiegato per svolgere 10000 iterazioni*

	Minuti	
DNS	2852	(1,98 giorni)
LES	748	(0,52 giorni)
LES_rappr	53	(0,037 giorni)

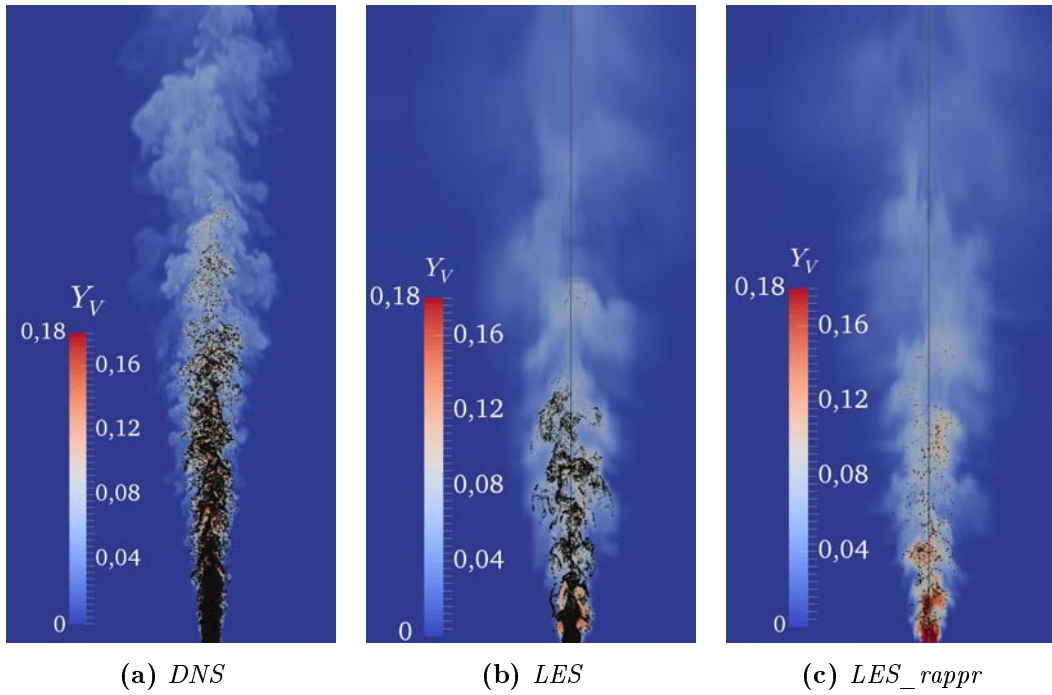
ma con un costo computazionale notevolmente ridotto.

A questo punto per capire se effettivamente l'implementazione delle LES può essere utile o meno rispetto alla più accurata DNS, è necessario determinare il tempo computazionale delle tre simulazioni (rappresentativo del costo computazionale).

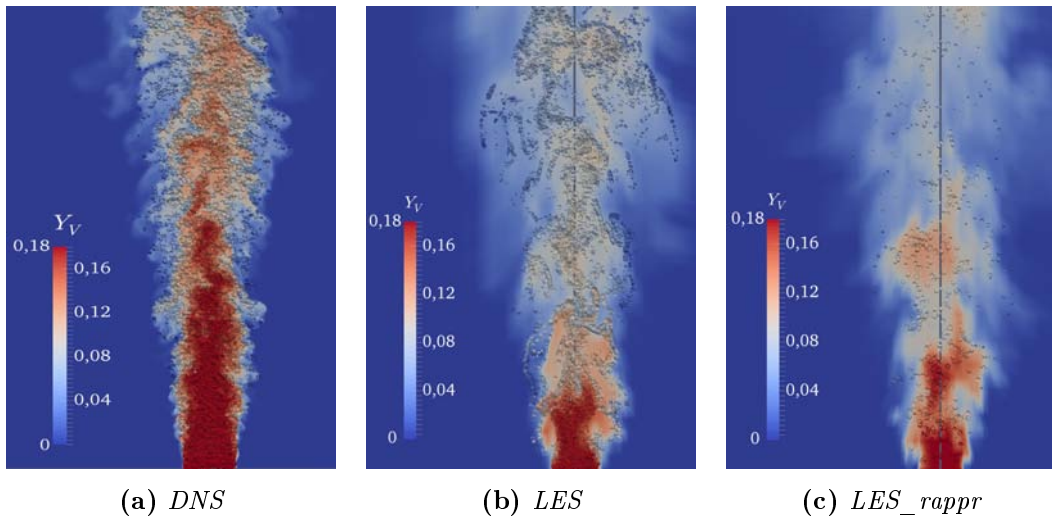
Nella tabella 4.1 viene riportato il tempo impiegato dal codice per svolgere 10000 iterazioni nelle tre simulazioni, senza tener conto del diverso passo temporale. Il tempo impiegato dalla LES è circa 1/4 di quello impiegato dalla DNS, mentre il tempo della LES\_rappr per svolgere 10000 iterazioni è di due ordini di grandezza inferiore a quello della simulazione diretta. E' evidente come le LES se accurate forniscono un notevole risparmio di risorse a livello computazionale.

## 4.4 Risultati LES con griglia grossolana

Per avere una visione più ampia del comportamento della LES e dell'approccio con le particelle rappresentative si è deciso di effettuare altre due simulazioni con una griglia con ancora meno nodi rispetto alle precedenti. In questo modo andiamo ad aumentare l'intervallo di scale non risolte e allo stesso tempo il costo computazionale va a ridursi ulteriormente. I parametri sono gli stessi descritti nel paragrafo 4.2 e la griglia è composta da  $N_\theta = 16$ ,  $N_r = 28$  e  $N_z = 80$  nodi nelle tre direzioni  $\theta$ ,  $r$  e  $z$ . L'attuale griglia presenta la metà dei nodi in ogni direzione rispetto alla precedente delle simulazioni LES e 1/8 dei nodi per direzione rispetto alla griglia utilizzata nella DNS. Per quanto riguarda la simulazione con le particelle rappresentative, in questo caso il fattore di riduzione è  $k = 110$ . I tempi di simulazione si sono notevolmente ridotti e nelle tabelle 4.2 e 4.3 possiamo confrontare questi due nuovi casi con i precedenti.



**Figura 4.20:** Sezione del campo istantaneo della frazione di massa di vapore  $Y_v$  della fase gassosa. Le particelle sono rappresentate come punti neri e la loro dimensione è funzione del raggio in quell'istante.



**Figura 4.21:** Ingrandimento della zona di ingresso dello spray: sezione del campo istantaneo della frazione di massa di vapore  $Y_v$  della fase gassosa e rappresentazione delle particelle come sfere, scalate in base al raggio e colorate in funzione della loro temperatura.

**Tabella 4.2:** *Tempo di esecuzione della simulazione, impiegato per svolgere 10000 iterazioni*

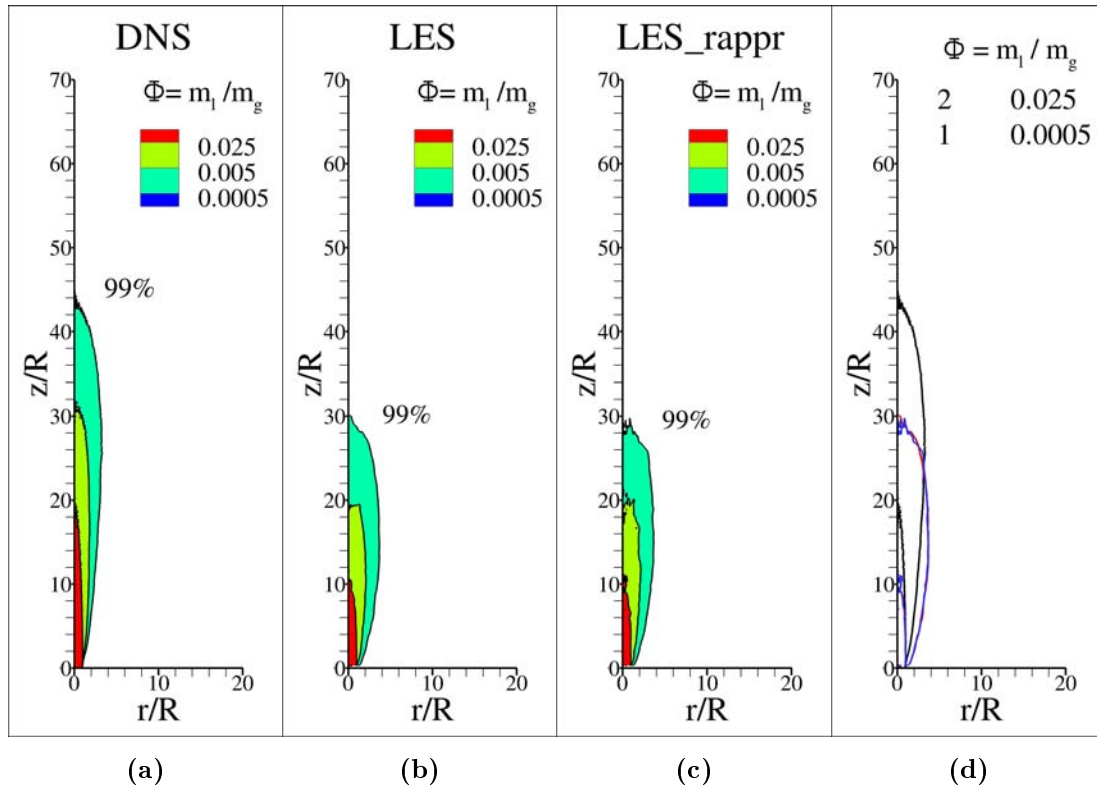
	$N_\theta \times N_r \times N_z$	Minuti	
DNS	128 x 223 x 640	2852	(1,98 giorni)
LES	32 x 56 x 160	748	(0,52 giorni)
LES_rappr	32 x 56 x 160	53	(0,037 giorni)
LES	16 x 28 x 80	496	(0,34 giorni)
LES_rappr	16 x 28 x 80	10	(0,007 giorni)

**Tabella 4.3:** *Tempo di esecuzione della simulazione, impiegato per svolgere 100 tempi adimensionali, ovvero  $T \cdot U_0/R = 100$ . In questo caso si tiene conto del diverso passo temporale.*

	$N_\theta \times N_r \times N_z$	Giorni
DNS	128 x 223 x 640	7,9
LES	32 x 56 x 160	1,0
LES_rappr	32 x 56 x 160	0,074
LES	16 x 28 x 80	0,344
LES_rappr	16 x 28 x 80	0,007

Appurato che con una griglia di questo tipo le simulazioni hanno tempi estremamente minori rispetto alla DNS, di seguito vengono confrontati i risultati ottenuti con la simulazione diretta dello stesso caso, utilizzata anche nel paragrafo precedente. Dall'osservazione dei campi istantanei, figure 4.20 e 4.21, si nota subito che il getto delle LES è molto più breve di quello nella DNS e inoltre la concentrazione di particelle appare molto meno uniforme.

La frazione di massa di vapore  $Y_v$  nelle LES diminuisce molto rapidamente, mentre nella DNS si ha una condizione di quasi saturazione per un tratto molto più lungo nella direzione  $z$ . Nella figura 4.22 è raffigurata la frazione di massa di vapore nelle tre simulazioni: i risultati ottenuti con le LES sono molto distanti dai valori della DNS. A  $\Phi = 0.0005$ , ovvero quando il 99% delle particelle liquide sono evaporate, si ha un errore di circa il 32% rispetto alla DNS.

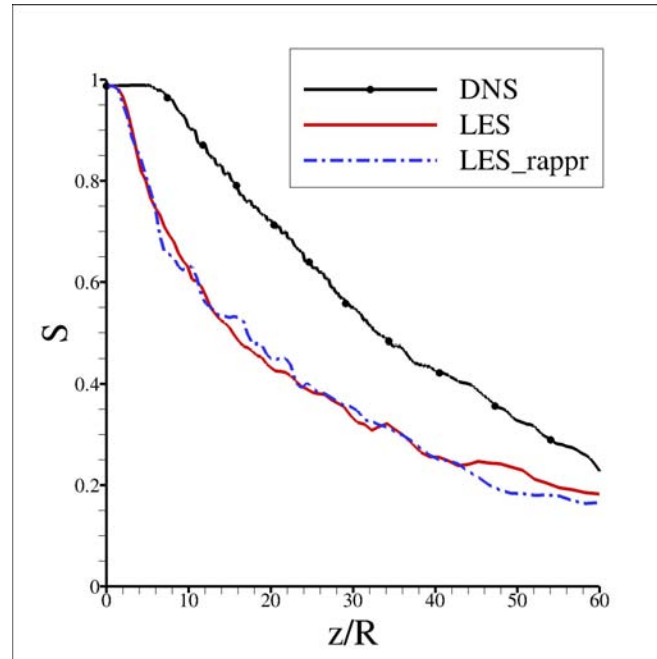


**Figura 4.22:** *Frazione di massa delle particelle  $\Phi = m_l / m_g$  nelle diverse simulazioni (a), (b), (c). Il 99% della fase liquida è evaporato entro la zona delimitata dall'isolinea a  $\Phi = 0.0005$ ; oltre questa zona solo l'1% delle particelle è ancora allo stato liquido. Nella (d): — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative*

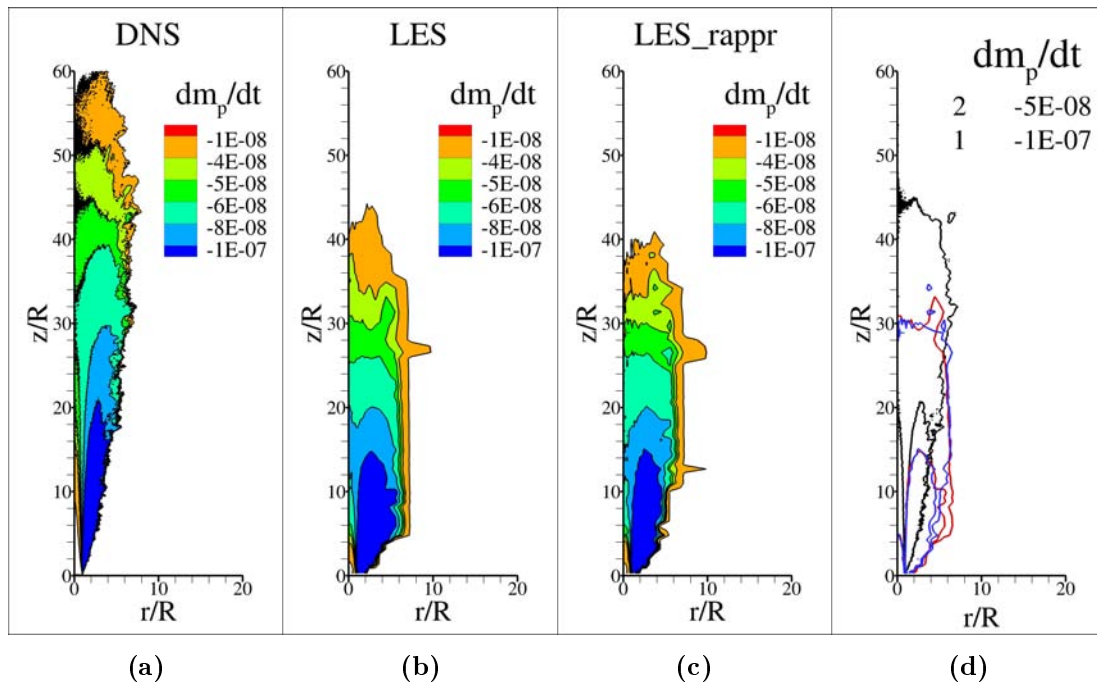
Allo stesso modo nella Fig. 4.23, si vede come l'evoluzione assiale del campo di saturazione  $S$  nelle LES, presenti oltre ad uno sfasamento una diversa inclinazione delle curve, che nelle LES decrescono più rapidamente.

Dalla figura 4.24 si osserva che nelle LES si ha evaporazione in direzione radiale fino a valori di  $r/R = 8$  anche all'ingresso del getto, nella DNS, invece, l'evaporazione all'ingresso è concentrata entro i primi  $4R$  lungo  $r$ .

Per quanto riguarda la velocità del getto e delle particelle, si ha già un errore non trascurabile all'ingresso del getto, al primo nodo (vedi Fig. 4.25). Le LES hanno campi di velocità molto inferiori a quelli della DNS: presentano un ripido decremento della velocità a partire già dalla zona d'ingresso, ad esempio, l'isolinea a  $U_z = 0.9U_0$  nelle LES raggiunge il suo massimo a  $z/R \simeq 6$ , nella DNS questo accade a  $z/R = 16$ .

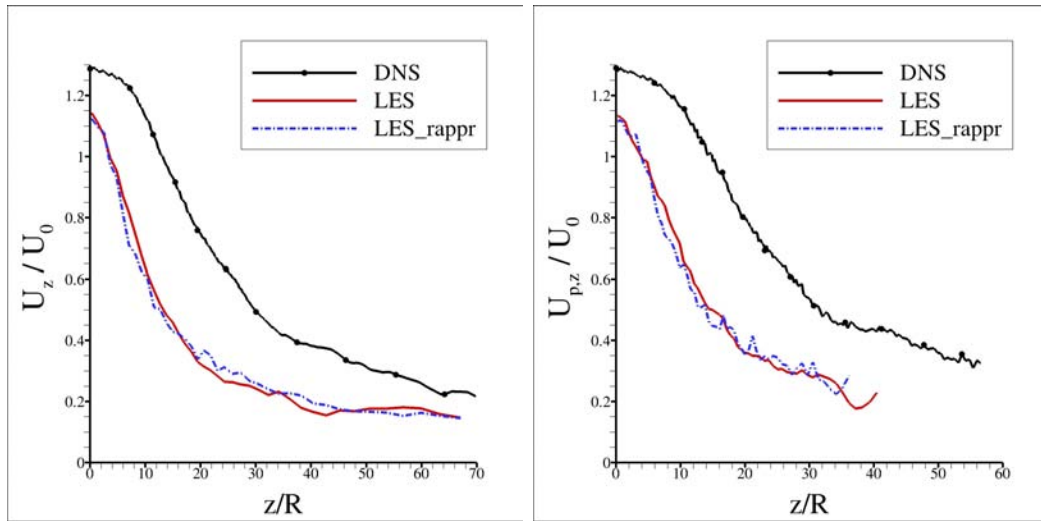


**Figura 4.23:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, del campo di saturazione  $S = Y_v/Y_{v,s}$ . Confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative



**Figura 4.24:** Velocità di evaporazione  $dm_p/dt$  nelle diverse simulazioni (a),(b),(c). Nella (d): — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative.





**Figura 4.25:** *Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della velocità della fase gassosa (a sinistra) e delle particelle liquide (a destra), normalizzate con la velocità media in ingresso  $U_0$ . Confronto tra DNS, LES e LES con particelle rappresentative.*

Per vedere se si riesce ad ottenere una migliore concordanza dei risultati, si è spostata l'origine della DNS a  $z_0 = -9.5$ , come fatto nel paragrafo precedente. Anche se la velocità inizialmente per i primi  $8R$  lungo  $z$  sembra coincidere, poi le curve presentano valori molto diversi, inferiori per le LES. Per quanto riguarda la frazione di massa delle particelle  $\Phi$  e i vari tagli lungo  $z$  del raggio delle particelle (Fig. 4.28, 4.29 e 4.30), si notano dei miglioramenti, ma fino a  $z - z_0/R = 15$  le differenze non possono definirsi trascurabili.

Le LES qui analizzate hanno una griglia troppo poco fitta per poter simulare accuratamente l'evaporazione dello spray di acetone, le scale che non vengono risolte in questo caso danno in realtà un contributo essenziale per la corretta rappresentazione delle varie grandezze fluidodinamiche. Infine, la differenza tra la LES e la LES\_rappr risulta minima, in particolare in ingresso dove la LES con particelle rappresentative simula un getto un po' più ampio in direzione radiale. Questo ci dice che, essendo la griglia molto rada, il fatto di immettere un numero di particelle di due ordini di grandezza inferiore al caso standard non influisce sulla rappresentazione del getto, che in ogni caso risulta molto distante da quella della DNS.

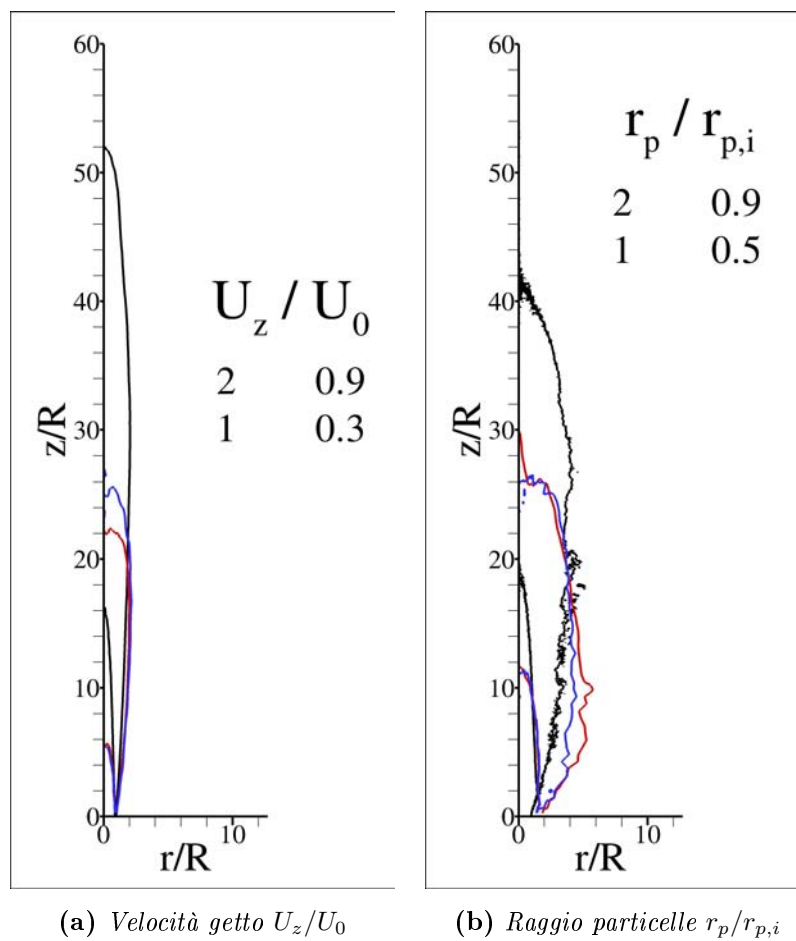
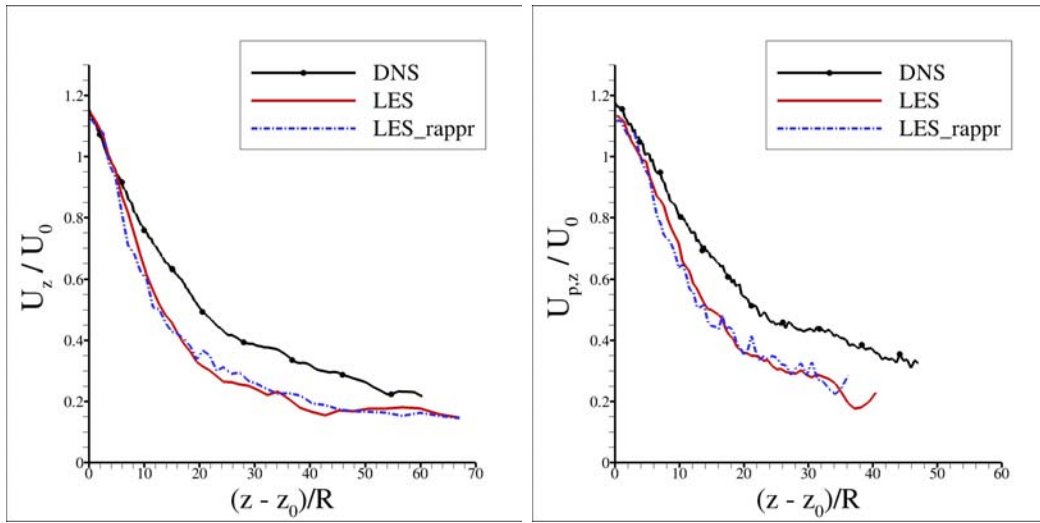
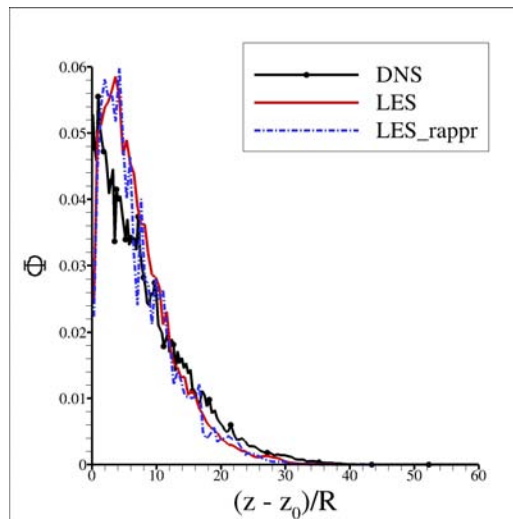


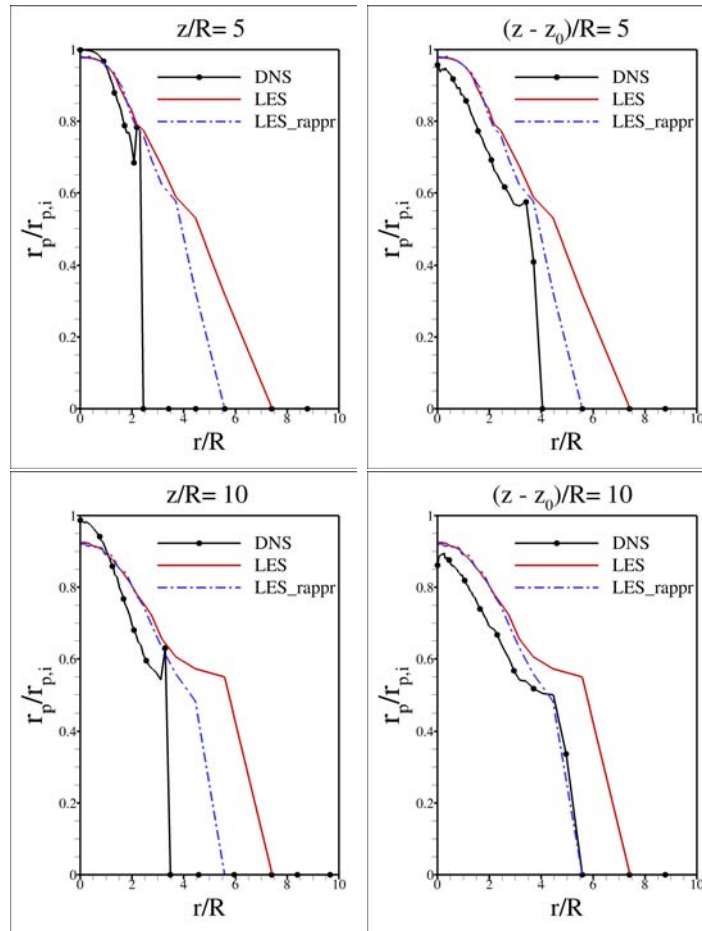
Figura 4.26: Confronto fra: — DNS, — LES, — LES con particelle rappresentative



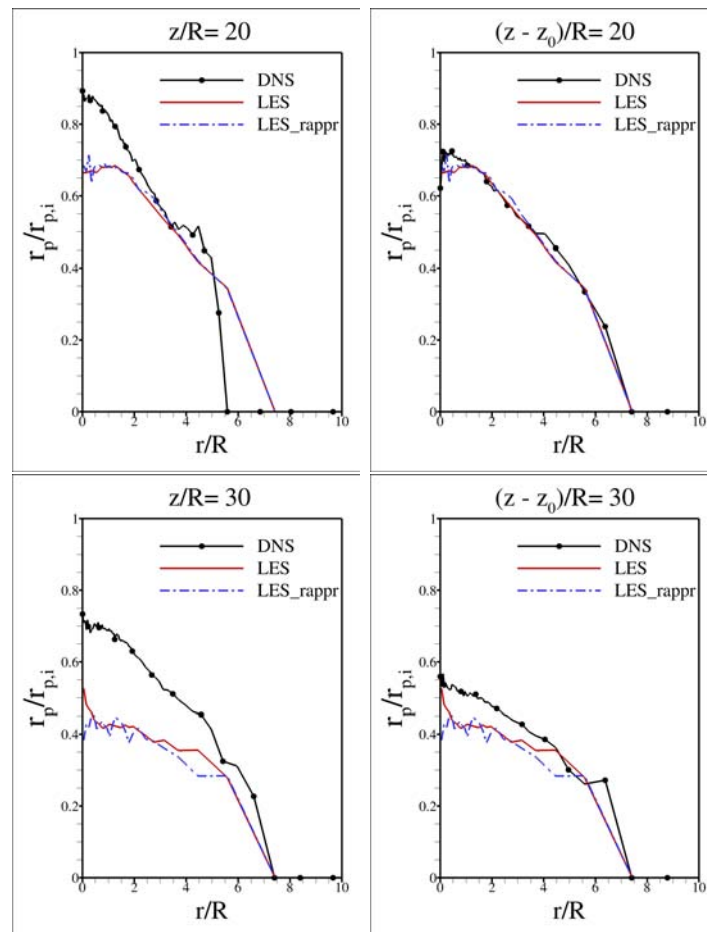
**Figura 4.27:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della velocità della fase gassosa (a sinistra) e delle particelle liquide (a destra), normalizzate con la velocità media in ingresso  $U_0$ . Confronto tra DNS con origine virtuale  $z_0 = -9.5$ , LES e LES con particelle rappresentative.



**Figura 4.28:** Evoluzione lungo  $z$ , sull'asse, della frazione di massa delle particelle liquide. Confronto tra DNS con origine virtuale a  $z_0 = -9.5R$ , LES e LES\_rappr



**Figura 4.29:** (a) Profili radiali del raggio delle particelle, normalizzato sul raggio delle particelle all'ingresso del getto, in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS (a sinistra) o DNS con origine virtuale  $z_0 = -9.5R$  (a destra) e le simulazioni LES



**Figura 4.30:** (b) Profili radiali del raggio delle particelle, normalizzato sul raggio delle particelle all'ingresso del getto, in differenti posizioni lungo l'asse  $z$ ; confronto tra DNS (a sinistra) o DNS con origine virtuale  $z_0 = -9.5R$  (a destra) e le simulazioni LES



# Capitolo 5

## Conclusioni

L'obiettivo principale di questa tesi consiste nel valutare le prestazioni delle simulazioni delle grandi scale, LES, nello studio dell'evaporazione di particelle di acetone in uno spray turbolento. Per raggiungere questo scopo sono state effettuate quattro diverse simulazioni, diverse per accuratezza e costo computazionale, e sono state messe a confronto con una simulazione numerica diretta, DNS, dello stesso caso.

Le prime due simulazioni LES prese in considerazione presentano una griglia più rada rispetto alla DNS, ovvero si riduce il numero dei nodi di un fattore 4 in ogni direzione (quindi 64 in totale), e in una delle due viene applicato l'approccio delle particelle rappresentative.

La prima differenza osservabile dai campi istantanei è che le LES, oltre ad essere meno dettagliate, presentano una precoce diminuzione della concentrazione di vapore all'ingresso del getto nei primi  $5R$  lungo  $z$ . I grafici della velocità del gas e del campo di saturazione presentano infatti uno sfasamento tra le LES e la DNS, che si ripercuote poi su tutte le altre grandezze osservate.

Si è visto che questa discrepanza è principalmente riconducibile al fatto che la LES, risolvendo solo le scale turbolente più grandi, non riesce a riprodurre in maniera accurata l'evoluzione del campo di velocità iniziale. A prova di quanto appena detto, le curve della DNS sono state riscalate ipotizzando un'origine virtuale del getto 5 raggi prima di quella reale, ovvero è come se lo scarico del getto della DNS fosse stato traslato di  $-5R$  lungo  $z$ , rispetto quello della LES. A questo punto tra LES e DNS vi è un'ottima concordanza di risultati, specialmente per

quanto riguarda il campo di velocità e di saturazione. La frazione di massa delle particelle, quindi la lunghezza di evaporazione, e il loro raggio risulta allo stesso modo più accurato e conforme ai risultati della simulazione diretta.

Per quanto riguarda la simulazione con le particelle rappresentative, questa non risulta particolarmente differente dalla LES classica.

Entrambe, quindi, riproducono in maniera sufficientemente accurata l'evaporazione delle particelle nello spray con tempi di simulazione estremamente inferiori alla DNS.

Per una visione più completa del comportamento delle LES, si è deciso di effettuare due ulteriori simulazioni dimezzando su tutte le direzioni i nodi della griglia delle LES precedenti e aumentando il fattore di riduzione delle particelle per il caso con le particelle rappresentative.

In questo caso si osserva lo stesso fenomeno descritto precedentemente nella zona d'ingresso del getto, tuttavia andando a riscaldare i risultati della DNS con un'origine virtuale in anticipo di 9.5 raggi rispetto quella reale, il miglioramento che si ottiene è minimo e non sufficiente a rappresentare adeguatamente la fisica dello spray in esame.

In conclusione, con un filtraggio delle LES e senza modelli stocastici che tengono conto degli effetti delle scale sottogriglia sulle dinamiche delle particelle, per ottenere una buona prestazione delle simulazioni LES vi è un limite alla risoluzione della griglia, sotto al quale i risultati non sono più accettabili. Per quanto riguarda le particelle rappresentative, se la griglia è adeguata, il loro uso può essere un valido modo per ridurre il costo computazione.

Questa tesi, oltre a dare risposte circa l'affidabilità dei modelli LES, pone diversi quesiti da cui possono prendere spunto ricerche future.

Andrebbe innanzitutto stabilito qual è il limite sotto al quale le particelle rappresentative non riescono più a descrivere in modo adeguato l'evaporazione nello spray. Si potrebbero, quindi, introdurre un numero di particelle di due o tre ordini di grandezza inferiore al caso standard e vedere come questo influisce sulle prestazioni della LES, giungendo così ad un quadro più completo dell'affidabilità di questa tecnica.

In aggiunta, per comprendere appieno come mai nella sezione di ingresso si rileva una discrepanza nel campo di velocità tra LES e DNS, andrebbero eventualmente



## 5. Conclusioni

effettuate nuove simulazioni con la sola fase gassosa, indagate le possibili cause di queste differenze e, se possibile, aggirate.

Infine, per aspirare a dei risultati ancora più precisi, si potrebbero introdurre dei modelli stocastici per simulare l'influenza delle scale non risolte sulle particelle. La ricerca in questo campo è ancora in fase di sviluppo, in quanto il tema è complesso e la creazione di modelli che tengono conto delle interazioni tra le scale sottogriglia e le particelle devono considerare diversi fattori e, quindi, non sono di facile implementazione.



# Bibliografia

- B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9):1605–1618, 1989.
- M Bini and WP Jones. Particle acceleration in turbulent flows: A class of nonlinear stochastic models for intermittency. *Physics of Fluids (1994-present)*, 19(3):035104, 2007.
- M Bini and WP Jones. Large-eddy simulation of particle-laden turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 614:207–252, 2008.
- M. Bini and W.P. Jones. Large eddy simulation of an evaporating acetone spray. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(3):471–480, 2009.
- A. Bukhovstova, E. Russo, J.G.M. Kuerten, and B.J. Geurts. Comparison of {DNS} of compressible and incompressible turbulent droplet-laden heated channel flow with phase transition. *International Journal of Multiphase Flow*, 63:68–81, 2014.
- Yung-Cheng Chen, Sten H Stårner, and Assaad R Masri. A detailed experimental investigation of well-defined, turbulent evaporating spray jets of acetone. *International journal of multiphase flow*, 32(4):389–412, 2006.
- Federico Dalla Barba. High performance computing of turbulent evaporating sprays. 2016.
- Santanu De and Seung Hyun Kim. Large eddy simulation of dilute reacting sprays: Droplet evaporation and scalar mixing. *Combustion and Flame*, 160(10):2048–2066, 2013.

Patrick Jenny, Dirk Roekaerts, and Nijso Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(6):846–887, 2012.

W.P. Jones, S. Lyra, and A.J. Marquis. Large eddy simulation of evaporating kerosene and acetone sprays. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(11–12):2491–2505, 2010.

Philippe Marmottant and Emmanuel Villermaux. On spray formation. *Journal of fluid mechanics*, 498:73–111, 2004.

F Mashayek and RVR Pandya. Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Progress in energy and combustion science*, 29(4):329–378, 2003.

Irene M Mazzitelli, Federico Toschi, and Alessandra S Lanotte. An accurate and efficient lagrangian sub-grid model. *Physics of Fluids (1994-present)*, 26(9):095101, 2014.

F Picano, G Sardina, Paolo Gualtieri, and Carlo Massimo Casciola. Anomalous memory effects on transport of inertial particles in turbulent jets. *Physics of Fluids (1994-present)*, 22(5):051705, 2010.

F Picano, Gaetano Sardina, Paolo Gualtieri, and Carlo Massimo Casciola. Particle-laden jets: particle distribution and back-reaction on the flow. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 318, page 052018. IOP Publishing, 2011.

Francesco Picano and K Hanjalić. Leray- $\alpha$  regularization of the smagorinsky-closed filtered equations for turbulent jets at high reynolds numbers. *Flow, turbulence and combustion*, 89(4):627–650, 2012.

Stephen B Pope. *Turbulent flows*, 2001.

J Pozorski, SV Apte, and V Raman. Filtered particle tracking for dispersed two-phase turbulent flows. 2013.

Julien Reveillon and François-Xavier Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583:273–302, 2007.

L Schiller and A Naumann. Über die grundlegenden berechnungen bei der schwerkraftaufbereitung. *Z. Ver. Dtsch. Ing*, 77(12):318–320, 1933.

Dudley Brian Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Symposium (international) on combustion*, volume 4, pages 847–864. Elsevier, 1953.