



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PADOVA

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PADOVA

---

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

Tesi di Laurea Magistrale

**Analisi numerica della frattura di materiali porosi  
indotta da forze fluidodinamiche in flusso laminare di  
condotto**

Relatore

**Ch.mo Prof. Francesco Picano**

Correlatore:

**Ing. Federico Dalla Barba**

Studente

**Alessandro Affolati**

Matricola: 2062752

---

Anno Accademico 2024/2025

22 Ottobre 2024

# Abstract

Il presente lavoro tratta la rottura di mezzi porosi dovuta all'azione di forze fluidodinamiche. L'obiettivo è quello di fornire un'analisi dettagliata dei problemi di interazione fluido-struttura (FSI), complessi problemi che interessano un'ampia gamma di applicazioni ingegneristiche e campi scientifici, nei quali un fluido interagisce con una struttura solida, che può essere deformabile o rigida.

I problemi FSI sono di particolare interesse nell'ingegneria aerospaziale, bioingegneria e scienze ambientali, e richiedono simulazioni precise per garantire l'affidabilità e la sicurezza dei sistemi. Tali problemi si riscontrano in casi come la stabilità delle ali, le superfici aerodinamiche e le vibrazioni delle pale di turbine, con fenomeni come il *flutter* aeroelastico, oppure l'uso di freni aerodinamici a membrana porosa e sistemi di isolamento termico a base di fibre porose.

Per riprodurre correttamente il fenomeno è necessario considerare contemporaneamente la fluidodinamica, la meccanica dei solidi e la meccanica della frattura; tuttavia, prevedere il cedimento strutturale dovuto a frattura rappresenta un complesso fenomeno dove si hanno variazioni delle tensioni a livello microstrutturale.

La principale sfida delle teorie classiche della meccanica dei solidi risiede nella difficoltà di prevedere e simulare la formazione di cricche. Questo problema è dovuto all'insorgere di singolarità nelle derivate delle equazioni differenziali parziali, che causano la comparsa di discontinuità.

Questo studio presenta un innovativo metodo numerico per affrontare un problema FSI tridimensionale, in cui il flusso di un fluido provoca la frattura di un solido poroso. In tale contesto la meccanica dei solidi e della frattura sono simulate con la peridinamica, una riformulazione avanzata e consolidata della teoria del continuo che prevede la sostituzione delle equazioni differenziali parziali con equazioni integrali, permettendo di considerare in modo intrinseco la formazione e la propagazione delle cricche, inclusa la loro ramificazione. Il comportamento del fluido viene simulato utilizzando le equazioni di Navier-Stokes in forma incomprimibile tramite simulazioni numeriche dirette (DNS). Le condizioni al contorno sulle interfacce tra fluido e solido vengono gestite tramite l'*Immersed Boundary Method* (IBM), mentre il *normal-probe method* viene utilizzato per calcolare le tensioni sulle superfici solide immerse.

Le simulazioni vengono eseguite utilizzando un solutore sviluppato in Fortran 90 e arricchito con lo standard Message-Passing Interface (MPI) per il calcolo in parallelo. Questo solutore, precedentemente realizzato e validato, consente di sfruttare in modo efficiente il calcolo parallelo su larga scala. Il sistema è composto da tre moduli: un solutore per il fluido, un solutore per la peridinamica e un modulo di accoppiamento per sincronizzare le equazioni di Navier-Stokes con quelle peridinamiche tramite l'IBM.

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Panoramica dell'argomento</b>	<b>8</b>
2.1.	Solidi porosi e proprietà fisiche . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Metodologie</b>	<b>13</b>
3.1.	Teorie locali e non locali . . . . .	13
3.1.1.	Limiti dei classici metodi numerici . . . . .	15
3.2.	Problemi FSI: metodo ALE e metodo IB. . . . .	16
3.3.	Peridinamica . . . . .	17
3.3.1.	Le equazioni della peridinamica . . . . .	17
3.3.2.	Peridinamica bond-based . . . . .	21
3.3.3.	Cedimento di legame . . . . .	23
3.4.	Le equazioni della fase fluida . . . . .	26
3.4.1.	Simulazione numerica diretta . . . . .	27
3.4.2.	Discretizzazione spaziale e integrazione temporale . . . . .	29
3.5.	Immersed Boundary Method . . . . .	33
3.5.1.	Metodo della forzante multidiretta . . . . .	36
3.5.2.	Metodo della sonda normale . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Implementazione</b>	<b>42</b>
4.1.	Solutore fluido . . . . .	42
4.2.	Solutore peridinamico e accoppiamento . . . . .	43
4.3.	Organizzazione dell'architettura parallela del codice . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Configurazione della simulazione e risultati</b>	<b>49</b>
5.1.	Configurazione del dominio computazionale . . . . .	49
5.2.	Inizializzazione del fluido e del solido . . . . .	50
5.3.	Abilitazione della frattura . . . . .	51
5.4.	Risultati . . . . .	53
5.4.1.	Porosità . . . . .	53
5.4.2.	Permeabilità . . . . .	55

5.4.3.Distribuzione degli stress . . . . .	57
<b>6 Conclusioni</b>	<b>61</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>63</b>

# Capitolo 1

## Introduzione

L'interazione fluido-struttura (FSI, *Fluide Structure Interaction problems*) si riferisce ad un complesso problema non lineare in cui un fluido e un solido interagiscono tra loro e che coinvolge l'accoppiamento tra le equazioni che governano la fluidodinamica, la meccanica dei solidi, e anche il fenomeno della frattura nei solidi. Nella FSI, le fasi solida e fluida interagiscono attraverso lo scambio di quantità di moto lungo le loro interfacce che si evolvono nel tempo, portando ad un forte accoppiamento tra la dinamica del fluido e quella dei solidi coinvolti.

La FSI è rilevante in molte applicazioni ingegneristiche e campi scientifici, inclusi ingegneria aerospaziale, civile, biomedica, geotecnica e scienze planetarie. Ad esempio, nell'ingegneria aerospaziale, la FSI è cruciale per la modellazione delle ali degli aerei e delle pale delle turbine. Un esempio tipico è il cosiddetto *aeroelastic flutter*, fenomeno che consiste nell'interazione reciproca tra strutture solide elastiche e le correnti fluide che le investono. Questo fenomeno può verificarsi nelle ali degli aerei durante il volo normale, causando un incremento delle sollecitazioni che può portare a danni locali o persino al cedimento totale della struttura. Un altro esempio è la degradazione dei materiali ablativi, tipicamente porosi, usati per il raffreddamento dei serbatoi dei veicoli di lancio spaziali a propulsione liquida, oppure aerofreni a membrana porosa, sistemi di isolamento termico a fibra porosa e filtri d'aria in sistemi di supporto vitale. In tutti questi casi, il danneggiamento o il deterioramento dei materiali porosi può avere un impatto rilevante sulle prestazioni e sulla sicurezza dei sistemi aerospaziali. Una modellazione e simulazione precise dell'interazione tra il fluido e la struttura, unite a un'attenta valutazione della durabilità dei materiali porosi, sono fondamentali per prevedere e ridurre il rischio di rotture e per garantire il corretto funzionamento del sistema. Questo va a dimostrare come la FSI sia presente in aree critiche e debba essere accuratamente considerata durante il processo di progettazione.

Per comprendere a fondo la fisica dei problemi FSI con frattura di solidi indotta da un flusso, è necessario integrare la fluidodinamica, la meccanica dei solidi e la meccanica della frattura. Poiché lo scopo del presente lavoro è riprodurre la deformazione e la rottura di un mezzo poroso a causa di forze fluidodinamiche, è fondamentale avere un codice che includa tutti questi aspetti.

La previsione del cedimento causato da frattura è complessa, poiché la formazione di cricche modifica il campo degli sforzi a livello microstrutturale. Questo cambiamento rende inapplicabile l'uso della teoria lineare per affrontare il problema. La teoria del continuo locale, infatti, risulta inadeguata per prevedere l'innescio e la propagazione delle cricche in un solido,

a causa delle singolarità che sorgono nelle derivate delle equazioni differenziali parziali che descrivono la meccanica dei solidi.

Negli anni, sono stati sviluppati diversi tentativi per simulare numericamente il problema in questione. Tra questi, uno dei più noti è la combinazione del metodo agli elementi finiti (FEM) con la fluidodinamica computazionale (CFD). Il FEM viene impiegato per analizzare la struttura, suddividendola in piccoli elementi nei quali vengono risolte le equazioni del moto. La CFD, invece, è utilizzata per discretizzare il dominio fluido e risolvere le equazioni di Navier-Stokes, simulando così il comportamento del flusso. È necessario includere anche una descrizione dell'interfaccia tra solido e fluido. Le interazioni tra la struttura e il fluido vengono simulate accoppiando le soluzioni della struttura con quelle del fluido. L'interfaccia tra i due domini può essere modellata con varie tecniche, come il metodo dell'interfaccia immersa (IBM) o i metodi basati su una griglia arbitraria (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*, ALE).

Un'altra tecnica numerica innovativa e molto diffusa è il cosiddetto *Extended Finite Element Method* (XFEM), che permette di risolvere problemi di propagazione delle fratture, diffusione delle crepe e altre discontinuità nei materiali. Rispetto al FEM tradizionale, l'XFEM offre una maggiore capacità di modellare le discontinuità senza la necessità di modificare la mesh.

In questa tesi, viene introdotto un nuovo metodo numerico per affrontare i problemi FSI tridimensionali in cui un flusso provoca la frattura di un solido. La dinamica della fase fluida viene risolta mediante una simulazione numerica diretta (*Direct Numerical Simulation*, DNS) tridimensionale delle equazioni di Navier-Stokes, considerando la loro formulazione incompressibile; tale metodo non richiede un modello per la turbolenza e si basa sulla discretizzazione diretta delle equazioni di Navier-Stokes, ottenendo risultati comparabili a quelli sperimentali grazie a una simulazione ad alta risoluzione.

Il metodo innovativo utilizza la peridinamica per affrontare la meccanica dei solidi e la meccanica della frattura. La peridinamica è una riformulazione avanzata della teoria del continuo, capace di considerare intrinsecamente l'innescò e la propagazione delle crepe. In questa teoria, le singolarità sono evitate poiché le leggi della meccanica dei solidi sono formulate tramite equazioni integrali anziché equazioni differenziali alle derivate parziali, consentendo così di gestire le discontinuità senza introdurre delle singolarità. Questo approccio permette di descrivere la formazione e la ramificazione delle cricche senza ricorrere a modelli empirici o macroscopici. La ricerca presentata si basa sul modello peridinamico *bond-based*, che utilizza relazioni costitutive per i materiali *microelastici*.

Per gestire le condizioni di aderenza e impermeabilità sulle interfacce fluido-solido, si impiega il metodo dell'interfaccia immersa (*Immersed Boundary Method* (IBM)), utilizzato per accoppiare la dinamica dei fluidi con quella dei solidi, applicando una distribuzione di forze che annulla la velocità relativa locale tra le due fasi vicino alla loro interfaccia, riproducendo l'effetto delle interfacce. Infine, le sollecitazioni sulle superfici dei solidi immersi sono calcolate utilizzando il metodo della sonda normale (*normale probe method*).

Il codice sorgente è scritto in Fortran 90 con estensioni per la *Message-Passing Interface* (MPI), per l'utilizzo del calcolo in parallelo. Il codice è composto da tre moduli: un solutore fluido, un solutore perid dinamico e un modulo per la sincronizzazione e l'accoppiamento delle equazioni di Navier-Stokes e perid dinamiche tramite l'IBM.

## Capitolo 2

# Panoramica dell'argomento

L'interazione fluido-struttura è un affascinante fenomeno che si osserva in molteplici applicazioni ingegneristiche e ambiti scientifici, quando un corpo deformabile viene immerso in un flusso fluido. Queste situazioni possono includere la risposta di una superficie aerodinamica esposta a un flusso fluido, le vibrazioni delle pale di compressori o turbine, oppure la rottura di un materiale ablativo a causa delle forze indotte dal flusso. Questo fenomeno coinvolge infatti diverse discipline, dalla matematica all'ingegneria e le scienze computazionali, per risolvere problemi complessi legati ai flussi fluidi e alle strutture deformabili, e per questo motivo, è essenziale affrontare la questione con un approccio il più possibile generale. Nelle simulazioni che coinvolgono l'interazione fluido-struttura, il materiale solido è generalmente modellato con un comportamento elastico lineare (legge di Hooke), mentre per deformazioni significative può essere considerato un comportamento non lineare più complesso. Il fluido, invece, viene solitamente trattato come un flusso laminare caratterizzato da un basso numero di Reynolds e densità costante (ipotesi di flusso incomprimibile). Lo scopo di questa tesi è quello di analizzare numericamente la deformazione e la rottura di un mezzo poroso solido immerso in un flusso fluido, analizzando anche il livello di danneggiamento del solido. Pertanto, per avere una comprensione più chiara dell'argomento, di seguito viene fornita una panoramica generale delle proprietà fisiche dei mezzi porosi.

### 2.1. Solidi porosi e proprietà fisiche

Un solido poroso è un materiale caratterizzato dalla presenza di pori, ovvero delle cavità o canali interconnessi, all'interno della sua struttura. La parte solida del materiale è spesso chiamata "matrice", mentre i pori costituiscono lo spazio vuoto attraverso cui può fluire un liquido o un gas. Questo spazio vuoto può essere continuo, se le strutture dei pori sono interconnesse, o isolato, se i volumi del materiale sono separati dall'ambiente esterno [6]. I mezzi porosi, essendo spesso riempiti di fluidi, rappresentano tipici casi di interazione fluido-struttura (FSI) e sono elementi critici in numerosi settori, inclusi i processi geologici e una vasta gamma di applicazioni industriali e scientifiche.

I mezzi porosi si caratterizzano spesso per una distribuzione casuale dei pori, che variano per dimensione e forma, creando uno spazio vuoto interno molto complesso. A causa di questa disposizione, i percorsi disponibili per il flusso del fluido all'interno del mezzo solido non sono lineari, ma piuttosto pieni di curve e intersezioni, il che costringe il fluido a percorrere un tragitto più lungo rispetto alla semplice lunghezza del solido lungo la direzione del flusso macroscopico. Per semplificare la descrizione dei solidi porosi, questi vengono spesso trattati senza considerare in dettaglio la loro complessa morfologia interna [7]. Di conseguenza, i parametri principali che caratterizzano un solido poroso e le leggi che governano il flusso nelle sue cavità sono mediati su una scala sufficientemente ampia da poter considerare il materiale come omogeneo.

Il parametro più importante è la porosità ( $\phi$ ). La porosità è una proprietà intrinseca di ogni solido poroso e viene definita come il rapporto tra il volume dei pori e il volume totale occupato dal solido [8]:

$$\phi = \frac{V_p}{V_m}, \quad (2.1)$$

dove  $V_p$  rappresenta il volume totale dei pori, calcolato sommando i volumi di tutte le cavità presenti all'interno del mezzo, e  $V_m$  è il volume totale del mezzo. La presenza di questi pori conferisce al materiale una superficie interna molto ampia rispetto al suo volume apparente e aumenta di conseguenza la capacità del materiale di interagire con fluidi o gas che vi passano attraverso. In questo contesto, il volume dei vuoti considera tutti gli spazi vuoti generati dai pori interconnessi; tuttavia, quando un solido poroso è immerso in un fluido, non tutta la rete di pori è accessibile al fluido, in quanto la presenza di pori isolati non permette il passaggio di fluido. In questo caso si parla di porosità chiusa, altrimenti quando i pori sono interconnessi si parla di porosità aperta. La porosità  $\phi$  è un parametro adimensionale che varia tra 0 e 1, dove 0 indica un mezzo completamente solido senza pori e 1 rappresenta una condizione in cui non vi è materiale solido, implicando un flusso senza ostacoli. Una maggiore presenza della matrice solida implica una minore porosità, il che rende più difficile il passaggio del fluido, rallentando il flusso e dissipando una maggiore quantità di energia a causa dell'aumento della superficie di contatto, che incrementa la resistenza aerodinamica complessiva e la caduta di pressione.

Un altro parametro cruciale per descrivere le proprietà fisiche di un mezzo poroso è la permeabilità ( $k$ ), che descrive la capacità di un materiale di consentire il passaggio di fluidi attraverso la sua struttura porosa. In questo contesto, la permeabilità è calcolata utilizzando la formulazione derivante dalla geologia della legge di Darcy, espressa come:

$$Q = \frac{kS \Delta p}{L \mu},$$

(2.2)

dove  $Q$  è la portata volumetrica del fluido misurata in  $m^3/s$ ,  $S$  è la sezione attraverso la quale scorre il fluido espressa in  $m^2$ ,  $k$  è la permeabilità,  $\mu$  è la viscosità dinamica del fluido misurata in  $Pa \cdot s$ ,  $\Delta p$  è la differenza di pressione tra la faccia anteriore (ingresso) e quella posteriore (uscita) del solido, misurata in  $Pa$  e  $L$  è la distanza lungo la quale il fluido scorre attraverso il mezzo poroso, in  $m$ . Di conseguenza, la permeabilità è definita come:

$$k = \frac{QL}{S} \frac{\mu}{\Delta p},$$

(2.3)

Dalla formula (2.4) risulta evidente che valori elevati di permeabilità sono associati a una minore resistenza al flusso, poiché  $k$  è proporzionale al rapporto tra portata  $Q$  e differenza di pressione  $\Delta p$ . La permeabilità di un mezzo poroso è influenzata da vari fattori legati sia alla struttura del poro sia alle proprietà del fluido. Materiali con pori più grandi, ad esempio, tendono ad avere una permeabilità più elevata, poiché i fluidi incontrano meno resistenza nel muoversi attraverso questi pori rispetto a quelli più piccoli. Una distribuzione uniforme dei pori contribuisce a un flusso più regolare e aumenta la permeabilità, mentre una distribuzione irregolare può generare percorsi preferenziali che ostacolano il flusso, aumentando la resistenza complessiva. Affinché un fluido possa attraversare un materiale poroso, è necessario che i pori siano interconnessi; quindi, un'alta connettività tra i pori migliora la permeabilità. Le proprietà del fluido stesso, come la viscosità, giocano anch'esse un ruolo cruciale: un fluido più viscoso avrà più difficoltà a scorrere attraverso il materiale poroso, riducendo la portata per le stesse condizioni di pressione. Tuttavia, materiali con alta permeabilità sono in grado di consentire un buon flusso anche per fluidi viscosi. Infine, secondo la legge di Darcy, maggiore è la differenza di pressione attraverso il materiale poroso, maggiore sarà la portata del fluido che lo attraversa. Questo principio evidenzia come la permeabilità sia direttamente influenzata non solo dalle caratteristiche fisiche del materiale e del fluido, ma anche dalle condizioni operative.

Quando un fluido attraversa le cavità di un mezzo poroso, la fase solida può deviare il percorso del fluido, allungando il tragitto che esso deve percorrere. Per descrivere più accuratamente questo effetto e prevedere la permeabilità dei mezzi porosi, si utilizza un parametro aggiuntivo chiamato tortuosità, una caratteristica geometrica che descrive la complessità del percorso che un fluido deve seguire attraverso i pori del materiale. Questo parametro quantifica l'allungamento medio del percorso del fluido in un materiale poroso rispetto a un flusso diretto. La complessità dei mezzi porosi sta proprio nel fatto che i percorsi che un fluido deve seguire non sono rettilinei, ma serpeggianti e tortuosi.

Si possono trovare varie definizioni di tortuosità. In particolare, la tortuosità geometrica viene definita come:

$$\tau_g = \frac{L_h}{L},$$

(2.4)

Dove  $L_h$  è la lunghezza media dei percorsi geometrici del flusso e  $L$  è la distanza in linea retta nella direzione del flusso macroscopico. Per calcolare la lunghezza media dei percorsi di flusso all'interno di un mezzo poroso, sono possibili due approcci distinti. Il primo consiste nel calcolare la media delle lunghezze reali di tutte le linee di flusso presenti nel mezzo. In questo approccio, non si tiene conto del fatto che le particelle di fluido possono avere velocità diverse lungo queste linee, fornendo quindi una semplice media geometrica basata sulla configurazione fisica del mezzo poroso. Il secondo prevede di calcolare la media delle lunghezze delle linee di flusso di tutte le particelle di fluido che attraversano una determinata sezione trasversale durante un periodo di tempo specifico. Questa media è ponderata in base al flusso, cioè tiene conto delle diverse velocità con cui le particelle di fluido si muovono lungo le linee di flusso. Di conseguenza, questo metodo fornisce una stima più accurata della lunghezza media dei percorsi di flusso, considerando la dinamica effettiva del fluido

Nel caso di un flusso a basso numero di Reynolds attraverso un solido poroso, il secondo approccio è generalmente considerato più appropriato. Questo perché, in condizioni di basso numero di Reynolds, il flusso è dominato dalla viscosità piuttosto che dall'inerzia, e le variazioni di velocità del fluido all'interno del mezzo diventano significative. Di conseguenza, una media ponderata che tiene conto di queste variazioni offre una descrizione più realistica e naturale del comportamento del fluido nel mezzo poroso.

Considerando la media ponderata per il flusso  $L_h$  si definisce la tortuosità idraulica  $\tau_h$ :

$$\tau_h = \left(\frac{L_h}{L}\right)^2,$$

(2.5)

Tutti i parametri discussi sopra saranno utilizzati all'interno di modelli sviluppati nel corso degli anni per descrivere il comportamento del fluido che scorre attraverso le cavità di un mezzo poroso e per comprendere l'interazione tra la fase fluida e quella solida, analizzando inoltre come cambiano prima e dopo la rottura del solido. Nel presente studio si affronta la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes per un fluido incomprimibile attraverso un approccio di Simulazione Numerica Diretta (DNS) tridimensionale. Questa tecnica, utilizzando una griglia numerica altamente dettagliata, permette di catturare completamente la dinamica del fluido, inclusa quella nelle regioni interstiziali del mezzo poroso. Per riprodurre accuratamente le

condizioni del flusso e interazione fluido-struttura, viene adottato l'Immersed Boundary Method (IBM). Questo metodo consente di imporre condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità, oltre ad utilizzare il *probe normal method* per calcolare le forze fluidodinamiche sulle superfici solide. Tutte queste metodologie verranno illustrate nel dettaglio nel prossimo capitolo.

# Capitolo 3

## Metodologie

Il seguente capitolo racchiude una panoramica sulle metodologie per trattare il problema FSI in questione, spiegando nel dettaglio i modelli teorici e numerici impiegati per trattarlo. Inizialmente vengono analizzati i limiti dei principali modelli numerici impiegati per la simulazione della meccanica dei solidi e delle fratture, per poi evidenziare i vantaggi della peridinamica come tecnica ottimale per gestire una vasta gamma di simulazioni numeriche di problemi FSI tridimensionali con geometrie complesse, inclusa l'analisi delle fratture e la propagazione delle cricche. Vengono inoltre spiegate le tecniche di simulazione numerica diretta (DNS) per trattare la dinamica dei fluidi e il *Immersed Boundary Method* (IBM) per definire le condizioni al contorno alle interfacce tra fluido e solido.

### 3.1 Teorie locali e non locali

Le teorie sviluppate negli ultimi anni per descrivere la meccanica dei solidi con comportamenti complessi possono essere divise in due principali categorie: teorie locali e teorie non locali.

Le teorie locali si basano sull'idea che un mezzo solido venga considerato composto da un denso e infinito insieme di punti materiali, e quindi possa essere trattato come un continuo a qualsiasi scala di lunghezza, anche la più piccola. Questo significa che ogni punto all'interno del solido è considerato indipendente e interagisce solo con i punti adiacenti tramite forze di contatto a distanza infinitesima [9]. Di conseguenza, la descrizione matematica del solido, basata su equazioni differenziali parziali, non riesce a rappresentare accuratamente le caratteristiche specifiche della struttura interna del materiale reale quando piccole caratteristiche microstrutturali influenzano l'intera macrostruttura, come porosità, grani o strutture cristalline. Inoltre, la presenza di discontinuità crea singolarità nelle equazioni differenziali, limitando l'efficacia delle teorie locali. Il principale limite della meccanica classica del continuo è infatti la predizione dell'inizio di una cricca e della sua propagazione.

Al contrario, le teorie non locali dei mezzi si basano sull'assunto che i volumi infinitesimali di materiale possano interagire su una distanza finita, che rappresenta una scala di lunghezza caratteristica del materiale. Questa scala può essere associata a lunghezze fisiche significative

come porosità, dimensioni dei grani o microfessure [10]. In questo modello, lo stato di un punto è influenzato dai punti materiali che stanno nel suo intorno in uno spazio di raggio finito. Questo approccio consente di catturare gli effetti non solo a grande scala ma anche della microstruttura del materiale, a scale molecolari e atomiche. Le teorie non locali risultano ottimali per la predizione della crescita di una cricca; tuttavia, possono ancora incontrare problemi di singolarità in presenza di discontinuità.

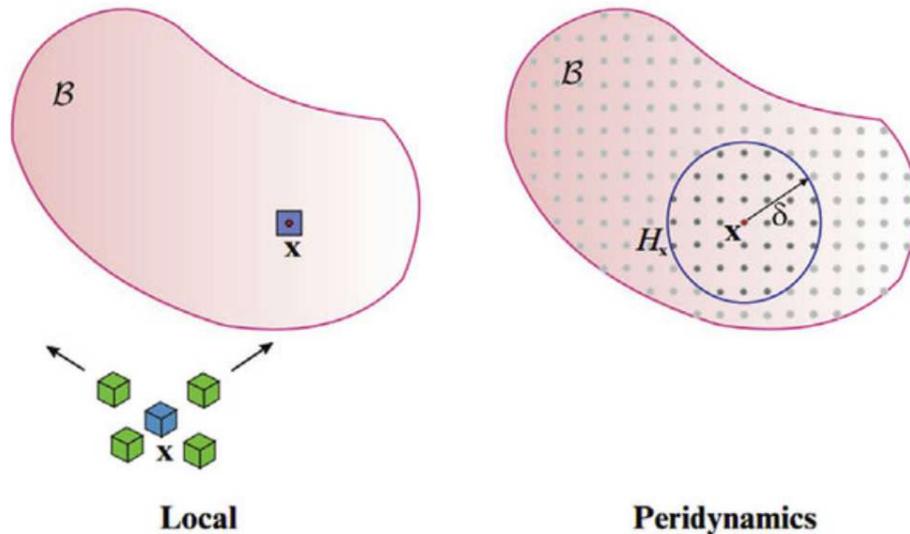


Figura 3. 1: Differenza tra il modello locale e il modello peridinamico (non locale), dove si può vedere a destra la regione di raggio  $\delta$  all'interno della quale i punti materiali influenzano lo stato del punto  $x$ . Immagine da [1]

All'interno delle teorie non locali, la peridinamica è una recente riformulazione della meccanica dei solidi che cerca di eliminare completamente il problema delle singolarità nelle equazioni differenziali parziali dovute alla presenza di discontinuità, sostituendole con equazioni integrali; dal momento che non si utilizzano derivate spaziali, le equazioni rimangono valide anche in punti o superfici discontinue [11]. Nella peridinamica, ogni punto può interagire con altri punti tramite forze a corto raggio che agiscono su una distanza finita chiamata *orizzonte*. Le leggi che governano la peridinamica includono un bilancio integrale della quantità di moto lineare calcolato sull'orizzonte, tenendo conto delle forze interne reciproche scambiate tra i punti materiali. Grazie a questa innovativa formulazione, l'innesco della cricca è descritto semplicemente dalla disattivazione delle interazioni tra coppie di punti nel punto in cui si verifica la cricca. Le forze interne disattivate vengono quindi rimosse dal bilancio del momento. La teoria peridinamica permette di considerare il fallimento del materiale in maniera intrinseca, con le fratture che emergono come conseguenza naturale dell'equazione del moto e dei modelli costitutivi [12].

### 3.1.1. Limiti dei classici metodi numerici

Nonostante la teoria classica non riesca a descrivere accuratamente il comportamento dei materiali su diverse scale, essa rimane utile in molti problemi ingegneristici, in particolare per quelli che coinvolgono i processi di frattura. Uno strumento particolarmente potente in questo ambito è il metodo agli elementi finiti (FEM). Il FEM permette di determinare il campo delle tensioni in problemi caratterizzati da geometrie complesse, condizioni di carico generiche e materiali diversi. Tuttavia, poiché il metodo FEM è basato sulla meccanica classica del continuo, presenta alcune limitazioni, come la difficoltà nel determinare gli spostamenti alla punta delle crepe e lungo le loro superfici. Inoltre, il metodo agli elementi finiti con elementi tradizionali risulta inadeguato dal punto di vista del remeshing, poiché necessita di una nuova discretizzazione della mesh ad ogni avanzamento della crepa. Per superare queste limitazioni, sono stati sviluppati vari modelli alternativi, tra cui il modello di zona coesiva (*Cohesive Zone Model*, CZM). Questo modello rappresenta materiali e interfacce tra materiali mediante una legge di separazione a trazione, che consente la separazione quando lo spostamento critico è raggiunto. Gli elementi coesivi sono posizionati lungo i bordi degli elementi tradizionali, il che significa che la frattura può avvenire solo lungo questi percorsi predefiniti. Di conseguenza, i percorsi delle crepe risultano strettamente dipendenti dalla configurazione della mesh.

Negli ultimi anni sono stati sviluppati vari modelli numerici per affrontare la meccanica dei solidi con la presenza di discontinuità. Tra i più diffusi vi sono l'*Extended Finite Element Method* (XFEM) e il *Distinct Element Method* (DEM).

L'XFEM è stato inizialmente creato per risolvere le problematiche del metodo classico degli elementi finiti, come sopra descritto, che necessita di una conoscenza preliminare della forma delle discontinuità, come fessure, vuoti o disomogeneità, e richiede di effettuare un remeshing ad ogni passo temporale per adattarsi a tali caratteristiche. L'idea principale dell'XFEM consiste nell'aggiungere alle funzioni di forma polinomiali standard alcune funzioni di base discontinue, appropriate per i nodi degli elementi attraversati da discontinuità localizzate, come le cricche. Questo metodo elimina la necessità di conoscere a priori le forme degli elementi coinvolti e di eseguire un remeshing per tracciare il percorso delle discontinuità. Sebbene l'XFEM sia piuttosto preciso nella modellazione di elementi discontinui, non riesce a gestire intrinsecamente la presenza di discontinuità come fa la peridinamica, richiedendo invece l'uso di modelli semi-empirici o semplificati, il che limita la sua risoluzione [13].

Il DEM è un altro metodo ampiamente utilizzato per la simulazione numerica di solidi con discontinuità. Questo approccio suddivide il solido in un insieme di blocchi solidi di forma poliedrica o sferica, di dimensioni finite, che possono deformarsi e interagire tra loro attraverso modelli di forza di contatto nelle regioni di interfaccia solido-solido [14]. Il DEM è spesso accoppiato con il metodo degli elementi finiti (FEM) per simulare il comportamento

meccanico complesso dei solidi, e con il modello di Navier-Stokes per affrontare simulazioni di flussi multifase che coinvolgono aggregati solidi discontinui. Tuttavia, è necessaria una conoscenza preliminare delle forme dei blocchi, e la formazione di cricche e discontinuità può avvenire solo tra elementi distinti, non all'interno di un singolo blocco, mediante l'uso di modelli di forza coesiva.

Queste limitazioni rendono XFEM e DEM meno adatti per simulazioni generali del comportamento meccanico di solidi discontinui.

## 3.2. Problemi FSI: metodo ALE e metodo IB

Negli ultimi anni sono stati sviluppati vari metodi per simulare i problemi FSI. Tra i più diffusi ci sono il metodo *Arbitrary Lagrangian-Eulerian* (ALE) e l'*Immersed Boundary Method* (IBM).

Il metodo ALE si basa sulla discretizzazione del dominio utilizzando una griglia computazionale non strutturata che si adatta alle interfacce fluido-solido ad ogni passo temporale. Le equazioni che governano la fase fluida vengono risolte temporalmente utilizzando schemi espliciti o impliciti e la soluzione viene aggiornata a intervalli di tempo discreti. Dopo aver calcolato le forze esercitate dalla fase fluida sul solido, la posizione dei nodi situati sulle superfici dei solidi immersi viene aggiornata, creando così una nuova mesh. Le condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità vengono imposte direttamente ai nodi situati sulle superfici dei solidi immersi, specificando i valori precisi della velocità e delle sue derivate. Questo approccio, sebbene molto accurato nel trattare le interfacce, è computazionalmente costoso a causa della necessità dell'operazione di remeshing e il calcolo dei flussi convettivi ad ogni passo temporale [15].

Al contrario, il metodo IBM elimina completamente la necessità di remeshing. Tale metodo utilizza una griglia Euleriana fissa che non si conforma alle interfacce fluido-solido ed è indipendente dal tempo, purché fornisca una risoluzione locale adeguata a risolvere le più piccole scale di turbolenza [16]. Le condizioni al contorno alle pareti sono imposte indirettamente attraverso funzioni forzanti applicate al flusso nelle immediate vicinanze delle superfici del solido immerso; tali forze fittizie vengono sommate alle equazioni della fase fluida, riproducendo l'effetto dei confini. Nel presente lavoro, l'IBM è implementato con un approccio di forzatura discreta, dove la funzione forzante, che considera la presenza del confine, viene introdotta dopo la discretizzazione delle equazioni. In tale metodo, le equazioni della fase fluida vengono risolte su una griglia Cartesiana uniforme (griglia Euleriana), mentre la superficie solida è rappresentata come un insieme di punti lagrangiani distribuiti uniformemente sull'interfaccia fluido-solido. L'obiettivo è imporre condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità, assicurando che la velocità della fase fluida alle interfacce sia uguale a quella dei punti lagrangiani sulle superfici solide, rendendo la velocità relativa tra le fasi fluida e solida uguale a zero alle loro interfacce. Questo viene ottenuto tramite un termine

di forzatura calcolato tramite operazioni di interpolazione e diffusione tra le rappresentazioni Euleriana e Lagrangiana mediante una funzione delta di Dirac regolarizzata.

Per migliorare l'accuratezza e la stabilità numerica del metodo, vengono utilizzati schemi iterativi e varie procedure di interpolazione. Questa classe di metodi, nota come *multi-direct forcing* IBM, affronta principalmente il problema della reazione del fluido sul solido. Nella presente tesi, si utilizza un metodo IBM *multi-direct forcing* per imporre condizioni al contorno sulle interfacce fluido-solido, accoppiato a un approccio detto a sonda normale per calcolare gli stress su superfici solide deformabili.

### 3.3. Peridinamica

La peridinamica è una recente teoria del continuo che si basa su un approccio non locale, che si rivela particolarmente adatta allo studio dell'inesco e della ramificazione delle cricche. Infatti, a differenza dei metodi più comuni per risolvere numericamente la meccanica dei solidi, che si basano su equazioni differenziali parziali e richiedono tecniche specifiche per gestire la presenza di discontinuità, essa utilizza una formulazione integrale, superando i limiti delle teorie classiche che richiedono una conoscenza preliminare delle caratteristiche particolari coinvolte, come la disomogeneità o la direzione di propagazione delle cricche.

Il concetto fondamentale di questa teoria innovativa è che un corpo solido sia composto da un numero finito di punti materiali, ognuno dei quali interagisce solo con i punti situati entro una breve distanza, chiamata orizzonte peridinamico  $\delta$ . Questa caratteristica permette a questa teoria di modellare efficacemente la formazione e l'evoluzione delle cricche, offrendo una maggiore flessibilità e precisione rispetto ai metodi basati su equazioni differenziali parziali.

È importante sottolineare che il vero potenziale della teoria peridinamica risiede nell'introduzione della non-località tramite l'uso di una relazione integrale per imporre l'equilibrio delle forze interne, evitando così l'insorgenza di singolarità che si verificano nelle teorie locali durante la valutazione delle derivate parziali in presenza di discontinuità, come disomogeneità e fessure, nel materiale

#### 3.3.1. Le equazioni della peridinamica

Consideriamo ora un corpo solido chiuso e limitato, denominato  $B$ . Questo corpo viene discretizzato in un numero finito di particelle materiali cubiche, ciascuna avente un volume e una massa fissi, come descritto da Silling e Lehoucq [17]. Ogni particella è rappresentata da un punto materiale con massa zero, situato al centro della particella stessa.

L'equazione fondamentale della peridinamica si basa essenzialmente su una formulazione lagrangiana della conservazione della quantità di moto lineare nei mezzi continui. La coordinata lagrangiana di un punto materiale arbitrario del corpo nella sua configurazione di riferimento, al tempo  $t=0$ , è indicata come  $\mathbf{X}_0 \in B$ . La coordinata del punto  $\mathbf{X}_0$  in una configurazione deformata del corpo, al tempo  $t \geq 0$ , è invece espressa dalla variabile lagrangiana  $\mathbf{X}(\mathbf{X}_0, t)$ .

Come già accennato, l'interazione fisica diretta tra due punti materiali  $\mathbf{X}_0$  e  $\mathbf{X}'_0$  avviene solo all'interno di una regione avente raggio pari all'orizzonte peridinamico. Possiamo quindi definire il legame  $\xi$  come:

$$\xi = \mathbf{X}'_0 - \mathbf{X}_0, \quad \forall \mathbf{X}_0 \in B, \mathbf{X}'_0 \in H_{\mathbf{X}_0}, \quad (3.2)$$

Dove  $H_{\mathbf{X}_0}$  è l'intorno del punto materiale  $\mathbf{X}_0$  di raggio  $\delta$ , e centrato in  $\mathbf{X}_0$ .

L'immagine del legame in una configurazione deformata è:

$$\zeta = \mathbf{X}'(\mathbf{X}'_0, t) - \mathbf{X}(\mathbf{X}_0, t), \quad \forall \mathbf{X}_0 \in B, \mathbf{X}'_0 \in H_{\mathbf{X}_0}, \quad (3.3)$$

Mentre il *bond displacement vector* viene indicato come:

$$\eta = \zeta - \xi. \quad (3.4)$$

Dalle considerazioni fatte sopra, possiamo quindi esprimere la velocità di un generico punto materiale all'interno del solido nel modo seguente:

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}_0, t) = \frac{d}{dt} \mathbf{X}(\mathbf{X}_0, t). \quad (3.5)$$

In generale l'equazione lagrangiana che governa il moto di un qualsiasi punto materiale  $\mathbf{X}_0$  all'interno del solido è espressa nel modo seguente:

$$\rho(\mathbf{X}_0) \frac{d}{dt} \mathbf{V}(\mathbf{X}_0, t) = \mathbf{L}(\mathbf{X}_0, t) + \mathbf{F}(\mathbf{X}_0, t), \quad \forall \mathbf{X}_0 \in B, t \geq 0. \quad (3.6)$$

dove  $\rho(\mathbf{X}_0)$  è la densità del corpo, che può variare all'interno del solido e quindi viene espressa come funzione della coordinata  $\mathbf{X}_0$ .  $\mathbf{F}(\mathbf{X}_0, t)$  rappresenta una forza esterna per unità di volume e  $\mathbf{L}(\mathbf{X}_0, t)$  la forza per unità di volume che agisce al tempo  $t$  su  $\mathbf{X}_0$  a causa delle interazioni con altri punti materiali. Si noti che  $\mathbf{L}(\mathbf{X}_0, t)$  è una densità di forza interna e, secondo la legge di azione-reazione, è auto-equilibrante.

Se applichiamo la seconda legge di Newton all'intero corpo solido  $\mathbf{B}$ , l'equazione lagrangiana che governa il moto del corpo diventa quindi:

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho(\mathbf{X}_0) \mathbf{V}(\mathbf{X}_0, t) dV = \int_B \mathbf{F}(\mathbf{X}_0, t) dV. \quad (3.7)$$

Per evitare problemi di singolarità dovuti alla presenza di discontinuità, nel quadro peridinamico qualsiasi densità di forza interna che agisce su un punto materiale è espressa tramite una relazione integrale, come mostrato nell'equazione (3.7), calcolata su una regione finita  $H_{\mathbf{X}_0}$  di raggio spaziale  $\delta$  e centrata in  $\mathbf{X}_0$

$$\mathbf{L}(\mathbf{X}_0, t) = \int_{H_{\mathbf{X}_0}} \mathbf{f}(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t) dV \quad \forall \mathbf{X}_0 \in B, t \geq 0 \quad (3.8)$$

Infatti, per un qualsiasi campo di forza  $\mathbf{L}(\mathbf{X}_0, t)$  esiste sempre una funzione a valori vettoriali  $\mathbf{f}(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t)$  antisimmetrica, chiamata *pairwise force density* e può essere interpretata come la forza per unità di volume quadrato esercitata dal punto  $\mathbf{X}'_0$  su  $\mathbf{X}_0$ , come illustrato nella figura 3.2.

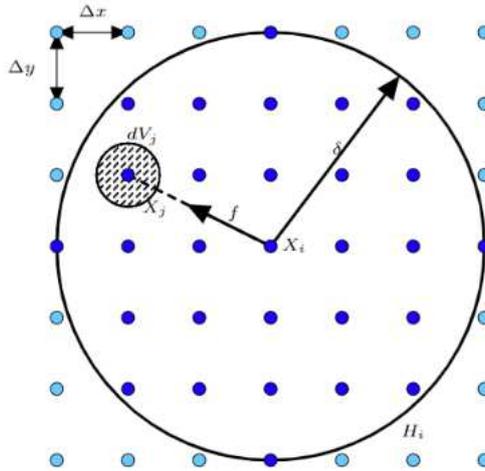


Figura 3. 2: Schema 2D di un solido peridinamico e rappresentazione della forza  $f$  che agisce tra  $X_i$  e  $X_j$ . In blu scuro sono evidenziati i punti che fanno parte dell'intorno di  $X_i$ , ovvero una regione spaziale con raggio pari all'orizzonte  $\delta$ . Immagine da [18]

È possibile dimostrare che per ogni funzione  $f(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t)$  esiste sempre una funzione  $\mathbf{t}(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t)$  tale per cui:

$$f(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t) = \mathbf{t}(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t) - \mathbf{t}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}'_0, t) \quad \forall \mathbf{X}_0 \in B, t \geq 0. \quad (3.9)$$

Tale funzione prende il nome di *bond force density*.

Per risolvere le equazioni della peridinamica è necessario fornire una relazione costitutiva che permetta di calcolare la *bond force density* in funzione delle proprietà meccaniche macroscopiche del materiale e dello stato di deformazione del corpo.

Per un materiale peridinamico, è possibile determinare diverse relazioni costitutive. A seconda del modello costitutivo utilizzato, si possono distinguere tre differenti modelli peridinamici: la *bond-based peridynamics*, la *ordinary state-based peridynamics* e la *non ordinary state-based peridynamics*.

Nel modello *bond-based* vettori *bond force density*  $\mathbf{t}(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t)$  e  $\mathbf{t}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}'_0, t)$  sono paralleli alla posizione relativa dei vettori nella configurazione deformata del corpo e uguali in modulo. Nel modello *ordinary state-based* i vettori sono paralleli ma possono avere moduli differenti. Infine, nel modello *non ordinary state-based* i vettori possono essere sia non paralleli che differenti in modulo.

Il presente elaborato si concentra esclusivamente sulla *bond-based peridynamics*, in quanto è sufficiente per riprodurre le proprietà meccaniche del materiale del mezzo solido poroso che verrà simulato.

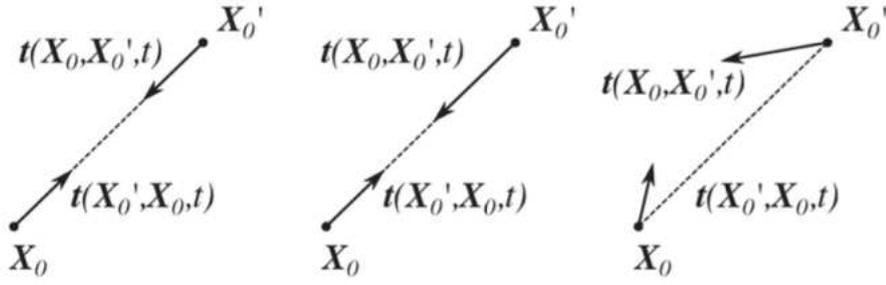


Figura 3. 3: Rappresentazione dei vettori *bond force density* rispettivamente, partendo da sinistra, per la peridinamica *bond-based*, *state-based* e *non ordinary state based*.

### 3.3.2. Peridinamica bond-based

La teoria *bond-based* si basa sul presupposto che ogni legame abbia una propria relazione costitutiva, indipendente dagli altri. Come evidenziato nel paragrafo precedente, il modello costitutivo della peridinamica *bond-based* genera coppie di vettori *bond force density* che dipendono dai vettori di posizione relativa nella configurazione deformata del corpo,  $\xi$ , e che sono uguali in modulo.

Il modello *bond based* tratta materiali che vengono chiamati *microelastici*. Per tali tipo di materiali la rottura di un legame si verifica quando l'allungamento supera un valore soglia  $s_0$ , definito come *limit bond-stretch*. La rottura di un legame è permanente e irreversibile, quindi il legame è dipendente dal tempo e inoltre il legame non può rompersi sotto compressione.

Dato che ogni legame ha una relazione costitutiva indipendente, la *pairwise force density*  $f(\mathbf{X}'_0, \mathbf{X}_0, t)$  dipende esclusivamente dal singolo legame,  $\xi$ , che collega il punto materiale  $\mathbf{X}'_0$  a  $\mathbf{X}_0$  e possiamo descriverla nel seguente modo [11]:

$$f(\mathbf{X}'_0\mathbf{X}_0, t) = f(\xi, \eta) = c_0 s(\xi, \eta) \frac{\xi + \eta}{\|\xi + \eta\|} \lambda(\xi, t).$$

(3.10)

Dove  $s(\xi, \eta)$  è l'allungamento del legame e viene definito come:

$$s(\xi, \eta) = \frac{\|\xi + \eta\| - \|\xi\|}{\|\xi\|},$$

(3.11)

mentre  $\lambda(\xi, \eta)$  è una funzione scalare che tiene conto della formazione di cricche e del fallimento del legame e sarà discusso più avanti.

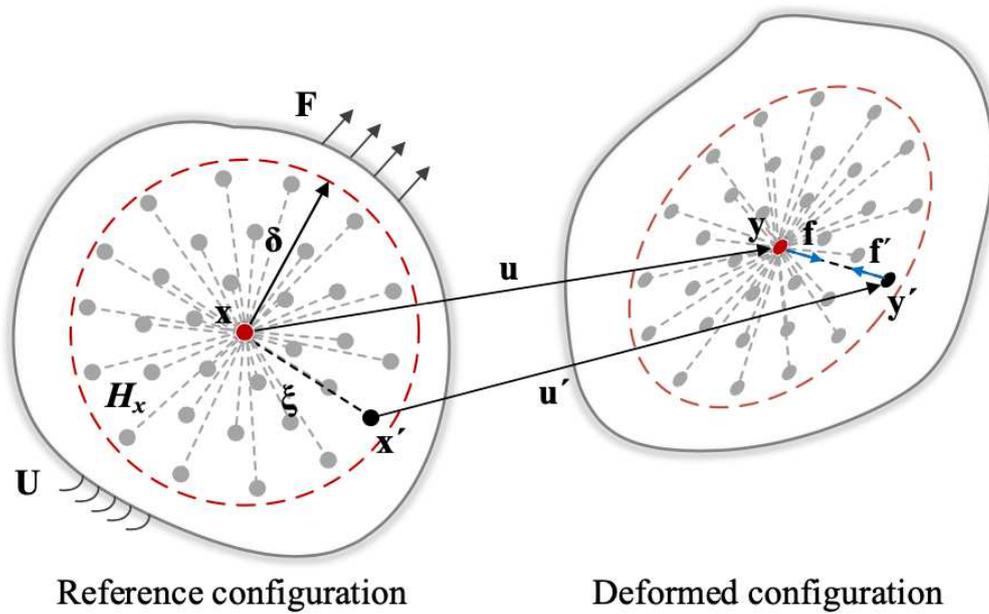


Figura 3.4: deformazione di un legame nella *bond-based peridynamics*, dove a sinistra è rappresentata la configurazione di riferimento del corpo, e a destra la sua configurazione deformata. Immagine da [2]

Infine,  $c_0$  è il *bond micro-modulus*, e può essere correlato alle proprietà meccaniche macroscopiche dei materiali. La relazione costitutiva  $c_0$  dipende dalla geometria e dalle condizioni di carico del problema specifico e in particolare è funzione del modulo di Young  $E$  e dell'orizzonte peridinamico  $\delta$ :

$$c_0 = \begin{cases} \frac{9E}{\pi t \delta^3}, & \text{in caso di sforzo piano 2D} \\ \frac{48E}{5\pi t \delta^3}, & \text{in caso di deformazione piana 2D} \\ \frac{12E}{\pi \delta^4}, & \text{in 3D} \end{cases} \quad (3.12)$$

dove  $t$  si riferisce alla profondità del corpo lungo la direzione fuori dal piano nei casi bidimensionali.

Il rapporto di Poisson  $\nu_s$  non è incluso nell'equazione (3.11) e, dalla derivazione dell'equazione, si può dimostrare che è fissato al valore di  $1/4$  per i casi tridimensionali e di deformazione piana, e a  $1/3$  per il caso di sollecitazione piana. Il fatto che il rapporto di Poisson sia costante per la specifica geometria e condizione di carico del problema rappresenta la principale limitazione della peridinamica *bond-based* per la risposta che il materiale può riprodurre. Nel

presente elaborato, per semplicità, si assume che il *bond micro-modulus* sia uniforme e costante.

### 3.3.3. Cedimento di legame

Il principale vantaggio della teoria peridinamica è quello di essere in grado di rappresentare la frattura in un corpo che ha subito una deformazione. L'utilizzo di tale modello consente infatti alle fratture di manifestarsi come naturale conseguenza dell'equazione del moto e dei modelli costitutivi adottati. Il principio fondamentale della peridinamica è che, quando il *limit bond stretch*  $s_0$ , definito secondo l'equazione (3.10), supera un valore di soglia critico  $s_0$ , chiamato *limit bond stretch*, i vettori *pairwise force density* tra i punti del materiale coinvolti vengono disattivati, e il loro contributo al bilancio delle forze interne viene quindi escluso. La disattivazione di un'interazione a coppie indica la rottura del legame corrispondente e, quindi, la formazione di una cricca [12].

Come accennato in precedenza nell'equazione 3.9 è presente il parametro  $\lambda(\xi, \eta)$ , chiamato *history-dependent scalar-valued function*, e viene utilizzato per considerare la disattivazione dei vettori *pairwise force density* quando l'allungamento del legame supera il valore limite, e quindi la conseguente formazione della cricca. Questo parametro consente infatti di escludere immediatamente dal bilancio delle forze interne la *pairwise force density* relativa ai legami rotti.

$$\lambda(\xi, t) = \lambda(\mathbf{s}) = \begin{cases} 1, & s \leq s_0 \quad \forall t \geq 0, \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

(3.13)

Analogamente al *bond micro-modulus*, anche il *limit bond stretch*  $s_0$  può essere espresso in funzione delle proprietà meccaniche del materiale, attraverso relazioni costitutive che dipendono dalla geometria e dalle condizioni di carico del problema specifico. In particolare, può essere correlato al *critical fracture energy release rate* del materiale,  $G_0$ , definito come la diminuzione dell'energia potenziale totale in rapporto all'aumento della superficie di frattura, al modulo di Young  $E$ , e all'orizzonte peridinamico,  $\delta$ .

Di seguito viene derivata un'espressione per il *limit bond stretch* nel caso tridimensionale, nell'ambito della teoria *bond-based*, considerando un materiale fragile microelastico, equiparando il tasso critico di rilascio dell'energia di frattura, definito secondo la teoria classica della meccanica della frattura, con il lavoro necessario per rompere tutti i legami per unità di area di frattura, calcolata nel contesto peridinamico.

Si consideri una frattura in un materiale fragile microelastico e due punti arbitrari,  $\mathbf{X}_0$  e  $\mathbf{X}'_0$ , situati ai lati opposti della superficie di frattura.

Il lavoro necessario per rompere un singolo legame  $\xi$ , che collega i punti  $\mathbf{X}_0$  e  $\mathbf{X}'_0$ , è espressa come:

$$w_0(\xi) = \int_0^{s_0} c_0 s r ds = \frac{1}{2} c_0 s_0^2 r, \quad (3.14)$$

dove  $r = \|\xi\|$ . Considerando tutti i punti materiali  $\mathbf{X}_0$  lungo l'asse  $z$ , con coordinate  $z$  comprese nell'intervallo  $0 < z < \delta$ , il lavoro per unità di frattura  $W_0$  necessario per rompere tutti i legami che collegano  $\mathbf{X}_0$  ai punti  $\mathbf{X}'_0$  della calotta sferica situata dalla parte opposta della superficie di frattura, può essere calcolato come:

$$W_0 = \int_0^\delta \int_0^{2\pi} \int_z^\delta \int_0^{\cos^{-1}(z/r)} \left( \frac{1}{2} c_0 s_0^2 r \right) r^2 \sin(\Phi) d\Phi dr d\theta dz. \quad (3.15)$$

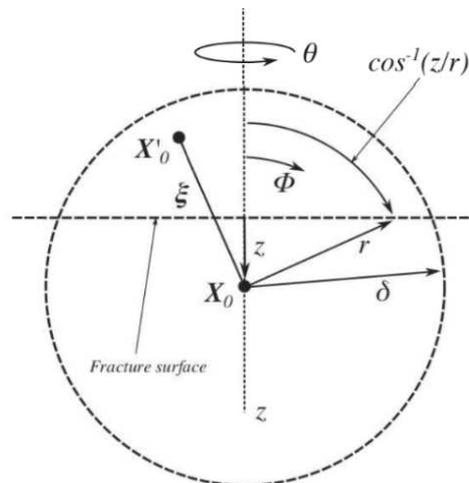


Figura 3.5: Rappresentazione di due punti materiali  $\mathbf{X}_0$  e  $\mathbf{X}'_0$  situati ai lati opposti della superficie di frattura. L'asse  $z$  locale misura la distanza del punto  $\mathbf{X}_0$  dalla superficie di frattura, e si considera un sistema di coordinate sferiche centrati in  $\mathbf{X}_0$ . L'equazione 3.14 calcola il lavoro necessario per rompere i legami che collegano il punto  $\mathbf{X}_0$  a ciascun punto  $\mathbf{X}'_0$  della calotta sferica.

Per la completa separazione delle due metà del corpo considerato risulta:

$$W_0 = \frac{\pi c_0 s_0^2 \delta^5}{10} = G_0.$$

(3.16)

Infine, risolvendo questa equazione per  $s_0$  e considerando l'equazione (3.11), che esprime  $c_0$  in funzione di  $E$  e  $\delta$  per il caso tridimensionale, si ottiene:

$$s_0 = \sqrt{\frac{5G_0}{6E\delta}}.$$

(3.17)

Applicando una procedura simile al caso bidimensionale, considerando le condizioni di sollecitazione piana e deformazione piana, si ottengono le seguenti espressioni:

$$s_0 = \begin{cases} \sqrt{\frac{4\pi G_0}{9E\delta}}, & \text{in caso di sforzo piano 2D,} \\ \sqrt{\frac{5\pi G_0}{12E\delta}}, & \text{in caso di deformazione piana 2D,} \\ \sqrt{\frac{5G_0}{6E\delta}}, & \text{in 3D.} \end{cases}$$

(3.18)

Quando un legame si rompe, si verifica la formazione di una micro-cricca che si propaga localmente nella direzione normale ai legami rotti. Come accennato in precedenza, la rottura di un legame implica la rimozione della *pairwise force density* relativa al legame rotto dal bilancio interno, comportando un indebolimento del materiale vicino alla punta della cricca, che si manifesta come una risposta più morbida del materiale.

Il vantaggio di introdurre la rottura a livello di legame è che il danno può essere chiaramente identificato in qualsiasi punto del materiale e può essere quantificato tramite il *damage level*, calcolato come:

$$\Phi(\mathbf{X}_0, t) = 1 - \frac{\int_{H_{x_0}} \lambda(\xi, t) dV'}{\int_{H_{x_0}} dV'}.$$

(3.19)

Il livello di danno è una funzione scalare che varia da 0 a 1, dove 0 corrisponde a materiale intatto e 1 corrisponde alla completa disconnessione del punto di riferimento del materiale da tutti i punti che originariamente facevano parte del suo intorno.

### 3.4. Equazioni della fase fluida

Il moto dei fluidi è descritto da un insieme di equazioni differenziali alle derivate parziali note come equazioni di Navier-Stokes. Queste equazioni rappresentano matematicamente la conservazione della massa e della quantità di moto per un fluido viscoso che si evolve nel tempo e nello spazio. Solitamente, vengono integrate da un'equazione di stato (equazione di bilancio energetico) che collega pressione, temperatura e densità. Le equazioni sono espresse nel seguente modo nella cosiddetta *conservation form*, valide per un fluido compressibile:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f}, \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E) = -\nabla \cdot (p \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} + Q, \end{cases} \quad (3.20)$$

dove  $\rho$  rappresenta la densità del fluido,  $p$  la pressione idrodinamica,  $T$  la temperatura,  $k$  la conducibilità termica,  $\mathbf{u} = (u, v, m)$  la velocità,  $\mathbf{f}$  le forze esterne per unità di massa e  $Q$  la produzione interna di calore per unità di massa,  $E$  l'energia totale specifica, data dalla somma dell'energia cinetica specifica e dall'energia interna specifica, rispettivamente  $E = \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + e$ . Il tensore  $\boldsymbol{\sigma}$  è il tensore degli sforzi viscosi, espresso nel seguente modo:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I}, \quad (3.21)$$

dove  $\mu$  è la viscosità dinamica,  $\lambda$  la viscosità volumetrica e  $\mathbf{I}$  il tensore identità.

L'insieme delle equazioni è composto da 5 equazioni totali e da 7 variabili incognite; pertanto, devono essere integrate con un modello costitutivo sia per il fluido ( $\rho = \rho(p, T)$ ) sia per l'energia interna ( $e = e(p, T)$ ). In particolare, per un gas ideale abbiamo:

$$p = \rho R T, \quad (3.22)$$

$$e = c_v T,$$

(3.23)

dove  $R$  è la costante specifica dei gas e  $c_v$  il calore specifico a volume costante. Le equazioni presentate sono valide per fluidi comprimibili, ma per il caso in questione, come verrà spiegato più avanti, ci sono alcune condizioni che permettono di trattare il fluido simulato come un fluido incomprimibile. Per questo tipo di fluido,  $\rho$ ,  $\mu$  e  $\lambda$  possono essere considerati costanti, e le equazioni di Navier-Stokes si semplificano nel seguente modo:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{u}) = -\frac{\nabla p}{\rho_f} + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}, \end{cases}$$

(3.24)

dove  $\nu_f = \mu_f / \rho_f$  è la viscosità cinematica del fluido. Da notare che considerando l'equazione di continuità e la definizione di derivata totale è possibile riorganizzare il sistema di equazioni nella cosiddetta *convective form*. Come si può osservare dalle equazioni, le equazioni della massa e della quantità di moto per un fluido incomprimibile costituiscono un sistema autoconsistente che non richiede la risoluzione dell'equazione di bilancio energetico.

Come accennato all'inizio, in questa tesi viene utilizzato un metodo numerico innovativo per affrontare problemi di interazione fluido-struttura (FSI) tridimensionali con fratturazione di solidi indotta dal flusso, in cui la fisica dei flussi fluidi è completamente risolta. La formulazione incomprimibile delle equazioni di Navier-Stokes viene impiegata per riprodurre la dinamica della fase fluida nel contesto della simulazione numerica diretta (DNS) tridimensionale. Quest'ultima si basa su una solida struttura numerica che permette simulazioni accurate e ad alta risoluzione, in cui tutte le scale spaziali e temporali del flusso sono risolte direttamente a partire dai principi fondamentali su una griglia di calcolo, senza necessità di un modello di turbolenza.

### 3.4.1. Simulazione numerica diretta

L'approccio più intuitivo per risolvere le equazioni di Navier-Stokes consiste nel discretizzare il dominio del fluido e risolvere direttamente le equazioni senza introdurre approssimazioni legate alla turbolenza, al fine di semplificare il processo di calcolo. Questa tecnica è nota come Simulazione Numerica Diretta (DNS), poiché le equazioni del fluido vengono risolte senza mediazioni [20]. A differenza delle tecniche basate su modelli di turbolenza, la DNS fornisce una rappresentazione dettagliata e accurata del flusso analizzato, tanto che i risultati ottenuti possono essere considerati equivalenti a quelli di un esperimento pratico. Per questo motivo, la DNS è la strategia di simulazione più fondamentale e precisa. Tuttavia, poiché le equazioni

considerano tutta la fisica dei flussi turbolenti, che sono un fenomeno caotico, multiscala e non stazionario, richiede una griglia di calcolo molto densa, sia a livello spaziale che temporale, con conseguenti elevati costi computazionali.

In un flusso turbolento generico, l'energia cinetica viene introdotta, attraverso il meccanismo di produzione, su una scala spaziale paragonabile alla dimensione del corpo che genera la turbolenza. Successivamente, questa energia si trasferisce dai vortici di grandi dimensioni a quelli più piccoli mediante processi non viscosi, per poi venir dissipata sotto forma di calore alla scala più piccola. Tale fenomeno prende il nome di cascata di energia e fu introdotta da Richardson nel 1922, e rappresenta un concetto fondamentale per la trattazione di flussi turbolenti. La dimensione della scala dissipativa, nota come scala di Kolmogorov, rappresenta la dimensione fondamentale della formazione dei vortici. Per risolvere correttamente il moto del fluido e rappresentare le strutture turbolente, la spaziatura delle celle della maglia utilizzata deve essere comparabile a questa dimensione.

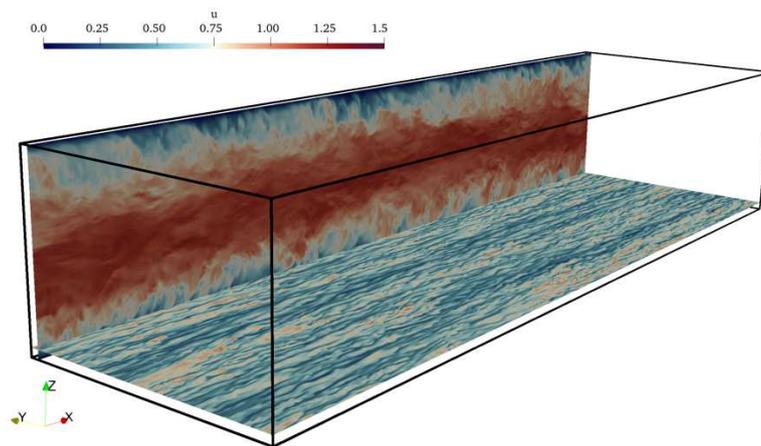


Figura 3.6: Illustrazione di un canale in regime turbolento

Secondo la teoria di Kolmogorov (1941), il tasso di dissipazione dell'energia cinetica  $\varepsilon$  può essere stimato come:

$$\varepsilon \propto \frac{U^3}{L}$$

(3.24)

dove  $U$  è la scala di velocità del flusso e  $L$  è la lunghezza caratteristica delle strutture turbolente più grandi, paragonabile alle dimensioni dell'oggetto che genera la turbolenza. Da  $\varepsilon$ , si può determinare la scala di Kolmogorov  $\eta$ , che rappresenta la lunghezza caratteristica delle

strutture turbolente più piccole, dove le strutture vorticosi sono così fini che possono dare luogo ai processi dissipativi che trasformano energia cinetica in calore:

$$\eta \propto \frac{\nu^3}{\varepsilon^{1/4}} \quad (3.25)$$

dove  $\nu$  è la viscosità cinematica del fluido.

Il numero di punti in ogni direzione è dato da  $N_{x_i} = \frac{L_{x_i}}{\Delta x_i} \propto \frac{L}{\eta}$  con  $i=1,2,3$ . Una stima del numero totale di nodi necessari per risolvere correttamente il dominio fluido, considerando che il numero di Reynolds è  $Re = \frac{UL}{\nu}$ , è:

$$N \propto N_{x_i}^3 \propto \frac{L}{\eta} = \frac{L}{\left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}} \propto \left(\frac{L^4 U^3}{L \nu^3}\right)^{3/4} = Re^{9/4} \quad (3.26)$$

Da questa relazione, risulta evidente che il numero di nodi della griglia necessario per simulare accuratamente la dinamica di un flusso fluido aumenta rapidamente con il numero di Reynolds. Inoltre, se introduciamo la scala di velocità di Kolmogorov come  $u_\eta \propto (\nu\varepsilon)^{1/4}$  e la corrispondente scala temporale  $\tau_\eta \propto \frac{\eta}{u_\eta} (\nu/\varepsilon)^{1/2}$ , si ottiene il tempo totale di calcolo per un generico dominio fluido:

$$T_{tot} \propto N \cdot \frac{U}{L} \propto Re^{11/4} \approx Re^3 \quad (3.27)$$

che evidenzia l'effetto negativo di un elevato numero di Reynolds sul costo computazionale della simulazione numerica diretta. Per questo motivo, come nel caso considerato, la tecnica DNS viene generalmente utilizzata per bassi numeri di Reynolds.

### 3.4.2. Discretizzazione spaziale e integrazione temporale

Come si può osservare dalla formulazione incomprimibile delle equazioni di Navier-Stokes, la pressione idrodinamica dipende dallo spazio e dal tempo, ma non ha una relazione diretta con

gli altri termini presenti nelle equazioni. Nel caso comprimibile, la pressione è determinata da un'equazione di stato come indicato nell'equazione 3.21, mentre nel caso incomprimibile non esiste un legame esplicito tra la pressione e le altre variabili, questo significa che esprimere la pressione in funzione delle componenti della velocità, o viceversa, non è un'operazione banale. Per chiarire la relazione tra pressione e velocità, è necessario manipolare l'equazione del bilancio della quantità di moto di Navier-Stokes incomprimibile; in particolare applicando la divergenza all'equazione di conservazione del momento si ricava l'equazione di Poisson:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right), \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (3.29)$$

considerando l'equazione della massa ( $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$ ) si ottiene:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_i} = -\rho_f \frac{\partial}{\partial x_i} \left( u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (3.30)$$

Questa equazione indica che il laplaciano del campo di pressione è uguale alla divergenza della componente non lineare del termine convettivo. Di conseguenza, la pressione agisce come un vincolo che assicura che il campo di velocità rimanga solenoidale a ogni passo temporale.

Risulta necessario applicare il metodo *pressure-correction* per risolvere le equazioni di Navier-Stokes, come descritto sinteticamente di seguito.

Poiché la pressione influisce immediatamente sul campo di velocità a causa della necessità di conservare la massa in tutto il dominio del fluido, queste due grandezze devono essere risolte congiuntamente. Tuttavia, dal punto di vista numerico, ciò è difficile da realizzare poiché questo accoppiamento rende l'algoritmo implicito. Il metodo *pressure-correction* affronta questo problema dividendo il processo di integrazione in due sottofasi, seguendo un approccio di tipo "*predictor-corrector*".

Nella prima fase, si assume un campo di velocità a divergenza non nulla  $\mathbf{u}^*$  basato sulla velocità e sul campo di pressione attuali; successivamente, si calcola un campo di pressione previsto tramite l'equazione di Poisson. Nella seconda sottofase, il campo di velocità viene

corretto utilizzando il campo di pressione previsto  $\hat{p}$ , e la pressione  $p$  viene aggiornata di conseguenza [19].

Partendo dai campi di velocità e pressione  $\mathbf{u}^n$  e  $p^n$  si calcola il campo di velocità previsto come:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t \left( \mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \frac{\nabla p^n}{\rho_f} \right) \quad (3.31)$$

dove  $\mathbf{C}^n$  e  $\mathbf{D}^n$  sono rispettivamente i termini convettivi e diffusivi dell'equazione integrata.

Successivamente, il campo di pressione viene previsto nel seguente modo:

$$\nabla^2 \hat{p} = \frac{\rho_f \nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} \quad (3.32)$$

Infine, si correggono i campi di velocità e pressione  $\mathbf{u}^{n+1}$  e  $p^{n+1}$  con le seguenti equazioni:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \cdot \frac{\nabla \hat{p}}{\rho_f} \quad (3.33)$$

$$p^{n+1} = \hat{p} - p^n. \quad (3.34)$$

Il dominio di calcolo per la simulazione della fase fluida è rappresentato da una regione rettangolare di dimensioni  $L_x \times L_y \times L_z$ , rispettivamente lungo le direzioni x, y e z. La discretizzazione di questa regione viene effettuata utilizzando una griglia computazionale Euleriana, fissa e strutturata, con  $N_x \times N_y \times N_z$  nodi lungo le tre direzioni. La griglia è uniforme ed equidistante, con dimensione  $\Delta f = \Delta x = \Delta y = \Delta z$ , il che facilita l'applicazione delle condizioni al contorno nel contesto del *Immerse Boundary Method* (IBM), descritto nella sezione successiva.

Per prevenire problemi come il disaccoppiamento tra pressione e velocità, la griglia è costruita in modo sfalsato: le quantità scalari, come la pressione, sono valutate al centro delle celle, mentre le quantità vettoriali, come la velocità, sono valutate sulle facce delle celle. Per discretizzare le equazioni di Navier-Stokes sulla griglia di calcolo, vengono utilizzati schemi alle differenze finite di secondo ordine. Per lo schema di avanzamento temporale si utilizza un *Velocity-Verlet*, data la sua maggiore velocità di convergenza rispetto ad un Runge-Kutta classico. Per imporre le condizioni al contorno ai limiti del dominio rettangolare, viene introdotto uno strato di nodi *ghost* sia per le quantità centrate sulle celle sia per quelle centrate sulle facce.

La seguente figura rappresenta il dominio di calcolo e illustra un esempio bidimensionale della griglia cartesiana adottata.

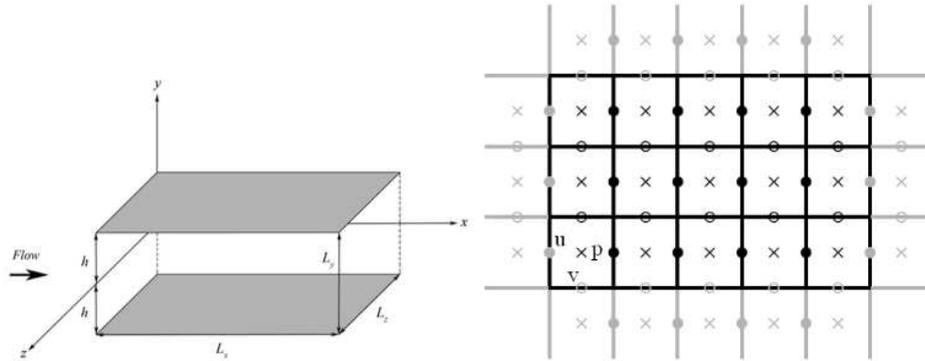


Figura 3.6: a sinistra è rappresentato il dominio computazionale, a destra la rappresentazione bidimensionale della discretizzazione del dominio attraverso una griglia cartesiana sfalsata, dove si possono notare anche i *nodii ghost*. Immagine da [3]

Lo schema di avanzamento temporale utilizzato della soluzione è riassunto come segue:

do for  $r = 1,3,$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{r-1} + \frac{\Delta t}{\rho_f} (\alpha_r \mathbf{RHS}_f^{r-1} + \beta_r \mathbf{RHS}_f^{r-2} - \gamma_r \nabla p^{r-3/2}), \quad (3.35)$$

$$\nabla^2 \hat{p} = \frac{\rho_f \nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\gamma_r \Delta t} \quad (3.36)$$

$$\mathbf{u}^r = \mathbf{u}^* - \frac{\gamma_r \Delta t}{\rho_f} \nabla \hat{p}, \quad (3.37)$$

$$p^{r-1/2} = p^{r-3/2} + \hat{p}, \quad (3.38)$$

end do

In questo contesto,  $\Delta t$  rappresenta il passo temporale, e  $\mathbf{u}^*$  è un'approssimazione non solenoidale del campo di velocità, secondo il metodo *pressure-correction*. I coefficienti  $\alpha_r$ ,  $\beta_r$  e  $\gamma_r$  sono i parametri dello schema di Runge-Kutta, e l'indice  $r$  si riferisce ai sottopassi dello schema, con  $r=0$  corrispondente al tempo  $t_n$  e  $r=3$  corrispondente al tempo  $t_{n+1}$ . Infine, il termine destro  $\mathbf{RHS}_f^r$ , valutato al sottopasso  $r$ , viene calcolato come:

$$\mathbf{RHS}_f^r = -\rho_f \nabla \cdot (\mathbf{u}^r \mathbf{u}^r) + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u}^r \quad (3.39)$$

### 3.5. Immersed Boundary Method

L'*Immerse Boundary Method* (IBM) è una tecnica ampiamente utilizzata per simulare fluidi bifasici o, più in generale, per studiare il comportamento dei fluidi in presenza di elementi con geometrie complesse. Questa metodologia è stata inizialmente introdotta da Peskin nel 1972 per descrivere fenomeni legati alla meccanica cardiaca, in particolare il flusso sanguigno. Successivamente, il metodo è stato perfezionato e applicato per affrontare le crescenti sfide di numerose applicazioni industriali, in cui corpi solidi deformabili e con geometrie intricate sono immersi in un flusso fluido. Come noto in fluidodinamica, quando un oggetto solido si trova all'interno di un fluido, è necessario impostare condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità sull'interfaccia tra solido e fluido, un compito che, dal punto di vista numerico, può risultare complesso.

In passato, per risolvere problemi di interazione fluido-struttura (FSI), veniva utilizzato principalmente il metodo *Arbitrary Lagrangian-Eulerian* (ALE). Questo metodo stabiliva direttamente valori specifici per le grandezze scalari e vettoriali nei nodi della griglia posti sull'interfaccia solido-fluido, sfruttando una griglia adattata alla forma del corpo, che veniva aggiornata a ogni intervallo di tempo per mantenere la conformità con le superfici solide. Tuttavia, la necessità di ricalcolare la griglia e tutti i campi fluidodinamici a ogni passo temporale, specialmente nelle analisi DNS, rendeva il costo computazionale di queste simulazioni molto elevato, rendendo il metodo ALE poco praticabile per i casi più complessi. In contrasto, il metodo IBM non richiede che la griglia di calcolo per la fase fluida sia conforme alla geometria dei solidi immersi. Viene quindi impiegata una griglia euleriana non adattata al corpo, che copre l'intero dominio fluido senza considerare la superficie del corpo solido. Tuttavia, esiste ancora una griglia lagrangiana di superficie, poiché alcuni nodi sono posizionati sull'interfaccia del corpo, il che significa che i confini solidi tagliano gli elementi della griglia, ostacolando l'incorporazione tradizionale delle condizioni al contorno.

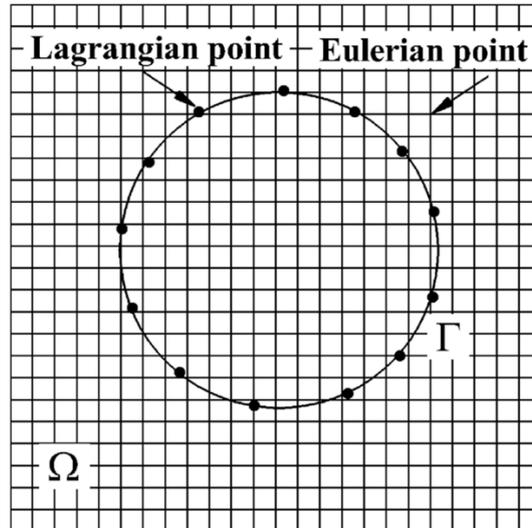


Figura 3.7: Rappresentazione schematica della griglia Euleriana non conforme al corpo impiegata nel metodo IBM. Immagine da [5]

A causa della natura non conforme della griglia, le condizioni di aderenza e impermeabilità sulle interfacce fluido-solido vengono applicate in modo indiretto. Questo approccio obbliga il flusso a muoversi alla stessa velocità locale del solido nelle sue vicinanze (quindi con velocità relativa pari a zero). Per ottenere questo risultato è necessario applicare una forza aggiuntiva per unità di massa  $q$  al lato destro dell'equazione della quantità di moto della fase fluida, che può essere espressa come segue:

$$\rho_f \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_f \mathbf{q}$$

(3.40)

Un aspetto importante da considerare è che l'uso di griglie strutturali non conformi e stazionarie presenta un limite significativo: non è possibile controllare la risoluzione della griglia nelle vicinanze del corpo solido. Di conseguenza, per eseguire un'analisi DNS, è necessario utilizzare una griglia molto densa in tutto il dominio fluido. Tuttavia, il costo computazionale rimane contenuto poiché non è necessario effettuare un *remeshing* a ogni intervallo temporale e le equazioni del fluido non vengono risolte nei nodi situati all'interno del corpo solido.

Per poter imporre le condizioni di aderenza e impermeabilità sulle interfacce solido-fluido, il che equivale a garantire che la velocità relativa sia nulla, è necessario modificare lo schema di avanzamento temporale descritto in precedenza. Viene quindi incluso il contributo della forza  $q$  alla velocità di previsione. Questo termine aggiuntivo viene calcolato attraverso operazioni di interpolazione e diffusione, basate sulla funzione delta di Dirac regolarizzata  $\delta_\Delta$ , tra i nodi fluidi della griglia cartesiano-euleriana e i nodi peridinamici della griglia lagrangiana di

interfaccia. Questo processo avviene tramite uno schema iterativo noto come *multidirect forcing method* [22].

Successivamente, questa forza aggiuntiva viene incorporata nella prima velocità di previsione, calcolata dall'equazione precedente, per ottenere la seconda velocità di previsione  $\hat{\mathbf{u}}$ , che viene poi utilizzata nell'equazione di Poisson per calcolare  $\hat{\mathbf{p}}$ .

Come sopra accennato, per poter interpolare la velocità del fluido nella griglia lagrangiana di interfaccia per il calcolo del termine di forzatura utilizzato per imporre la condizione al contorno, e poi diffonderla nella griglia euleriana per poterla aggiungere all'equazione della quantità di moto del fluido, è necessario utilizzare una funzione delta di Dirac regolarizzata  $\delta_\Delta$ , definita da Roma nel modo seguente: [21]:

$$\delta_\Delta(x - x_0) = \delta'_\Delta(x - x_0)\delta'_\Delta(y - y_0)\delta'_\Delta(z - z_0), \quad (3.41)$$

$$\delta'_\Delta(s - s_0) = \frac{1}{\Delta_f} \Phi\left(\frac{s - s_0}{\Delta_f}\right), \quad (3.42)$$

$$\Phi(t) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{1 - 3t^2}) & t \leq 0.5, \\ \frac{1}{6}(5 - 3|t| - \sqrt{1 - 3(1 - |t|^2)}) & 0.5 < |t| < 1.5, \\ 0 & |t| > 1.5 \end{cases} \quad (3.43)$$

Una caratteristica della funzione delta è che ha un raggio di azione pari a tre spaziature di griglia ( $3\Delta_f$ ) in ogni direzione dello spazio. La conseguenza dell'utilizzo di tale funzione per le operazioni di interpolazione e diffusione comporta la sostituzione delle interfacce solido-fluido nitide del caso continuo con un sottile guscio poroso di "fluido solidificato" nella loro rappresentazione discreta. Quest'ultimo è centrato sulle interfacce nominali fluido-solido e ha un'estensione spaziale pari a tre celle nel caso in cui si utilizzi la funzione delta di Dirac regolarizzata precedentemente. Di conseguenza, le dimensioni degli oggetti solidi immersi risultano più grandi perché sono proiettati verso l'esterno di una lunghezza di  $3\Delta_f/2$  rispetto alla loro dimensione nominale. Questo effetto influenza le forze fluidodinamiche compressive che agiscono sui corpi immersi e deve quindi essere mitigato. Per risolvere questo problema, come suggerito da Breugem [22], si impiega una distanza di retrazione  $d_r = 0,5\Delta_f$  che comporta una retrazione verso l'interno delle superfici solide, in modo che la stima delle forze fluide compressive che agiscono sul corpo immerso sia più accurata.

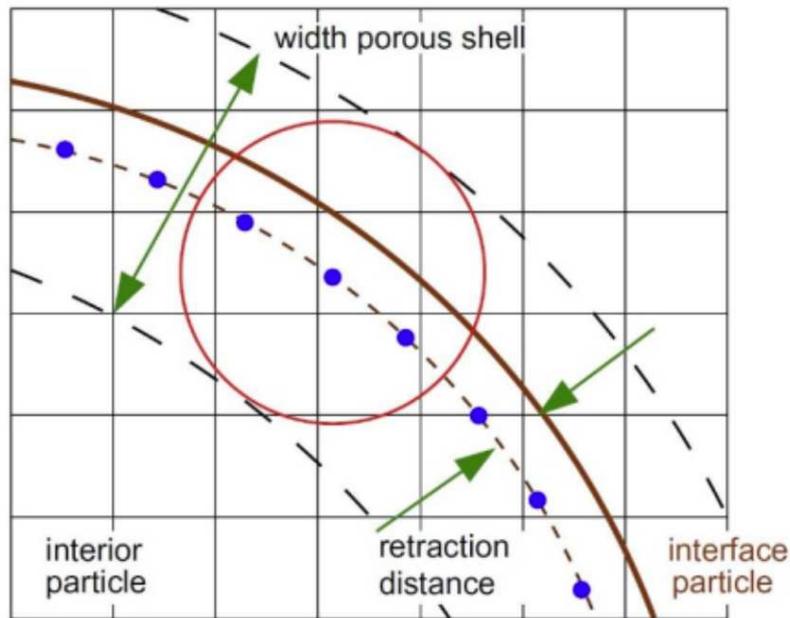


Figura 3.7: rappresentazione dell'interfaccia e del guscio poroso che ricopre una particella solida. Si nota la retrazione dei nodi della griglia Lagrangiana rispetto all'interfaccia nominale. Il cerchio rappresenta il raggio d'azione della funzione delta di Dirac. Immagine da [4]

### 3.5.1. Metodo della forzante multidiretta

L'*immersed boundary method* (IBM) mira a imporre condizioni di parete di aderenza e impermeabilità sulle interfacce solido-fluido. Per fare ciò, si introduce un termine di forzatura aggiuntivo  $q$  nell'equazione discreta della quantità di moto del fluido. Questo termine garantisce che la velocità del fluido nei pressi delle interfacce solide, ottenuta tramite interpolazione, coincida entro una certa tolleranza con la velocità lagrangiana delle particelle di materiale presenti sull'interfaccia. L'uso della funzione delta di Dirac regolarizzata per le operazioni di diffusione consente di distribuire il termine di forzatura intorno all'interfaccia del corpo solido.

Nella figura illustrativa, i cerchi rappresentano il raggio d'azione della funzione delta per due punti dell'interfaccia lagrangiana (indicati da triangoli). Si osserva che i cerchi si sovrappongono in alcune aree, il che significa che i punti euleriani nella zona di sovrapposizione influenzano contemporaneamente entrambi i punti lagrangiani. Di conseguenza, la velocità del fluido imposta in corrispondenza di un punto lagrangiano potrebbe non essere correttamente determinata dal termine di forzatura aggiuntivo. Per rendere questo calcolo il più accurato possibile, si adotta una procedura iterativa chiamata *multidirect forcing method*.

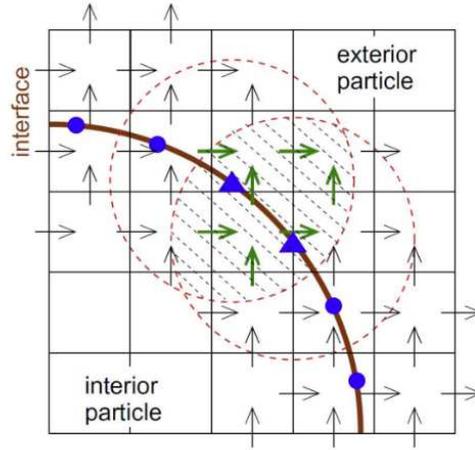


Figura 3.8: Distribuzione della forza intorno all'interfaccia di una particella. I cerchi rappresentano il raggio d'azione della funzione delta di Dirac applicata ai punti lagrangiani (triangoli). La zona tratteggiata rappresenta la zona di sovrapposizione. Immagine da [4]

In pratica, considerando un oggetto solido immerso nel dominio di calcolo a un livello temporale generico  $t_n$ , la forza  $q$  e la seconda velocità di previsione  $\hat{u}$  vengono calcolate dopo la soluzione dell'equazione (3.35) e prima della soluzione dell'equazione (3.36) utilizzando lo schema di *multidirect forcing*, come riportato di seguito:

do for  $s=1, N_s$ ,  
do for  $h=1, N_p$ ,

$$\hat{u}_h^{s-1} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \hat{u}_{i,j,k}^{s-1} \delta_{\Delta}(\mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{x}_h^n) \Delta_f^3,$$

(3.44)

$$\mathbf{q}_h^{r-1/2,s} = \mathbf{q}_h^{r-1/2,s-1} + \frac{\mathbf{v}_h^n - \hat{\mathbf{u}}_h^{s-1}}{\Delta t},$$

(3.45)

end do,  
do for  $[i,j,k] = [1,1,1], [N_x, N_y, N_z]$ ,

$$\mathbf{q}_{i,j,k}^{r-1/2,s} = \sum_{h=1}^{N_p} \mathbf{q}_h^{q-1/2,s} \delta_{\Delta}(\mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{x}_h^n) \Delta V_h,$$

(3.45)

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j,k}^s = \mathbf{u}_{i,j,k}^* + \Delta t \mathbf{q}_{i,j,k}^{r-1/2,s},$$

(3.46)

end do,  
end do.

Qui,  $s$  è l'indice dello schema iterativo, con  $\hat{\mathbf{u}}^0 = \mathbf{u}^*$  come valore iniziale di  $\hat{\mathbf{u}}$ .  $\hat{\mathbf{U}}_h^s$  rappresenta la variabile lagrangiana ottenuta interpolando la seconda velocità di previsione del fluido  $\hat{\mathbf{u}}^s$  a ciascuna coordinata lagrangiana  $\mathbf{X}_h^n$  situata sull'interfaccia solido-fluido e valutata al livello temporale  $t_n$ .  $\mathbf{Q}_h^{r-1/2,s}$  è la forza lagrangiana calcolata nella posizione  $\mathbf{X}_h^n$ , ottenuta dal rapporto tra la velocità relativa  $\mathbf{V}_h^n - \hat{\mathbf{U}}_h^{s-1}$  e il passo temporale dello schema di avanzamento temporale del fluido, dove  $\mathbf{V}_h^n$  è la velocità lagrangiana al tempo  $t_n$ .

L'espressione euleriana del termine di forzatura  $\mathbf{q}^{r-1/2,s}$  è ottenuta diffondendo la quantità lagrangiana  $\mathbf{Q}_h^{r-1/2,s}$  sulla griglia euleriana. Infine, la seconda velocità di previsione viene ricalcolata su ogni nodo della griglia euleriana, aggiornando la velocità di previsione  $\mathbf{u}^*$ .

Il numero totale di iterazioni  $N_s$  può essere scelto arbitrariamente, ma si consiglia un valore basso per limitare i tempi di calcolo. Studi di Breugem suggeriscono che  $N_s = 2$  è sufficiente per ottenere risultati soddisfacenti, garantendo un secondo ordine di accuratezza per la velocità del fluido in prossimità dei confini solidi con un costo computazionale ragionevole.

### 3.5.2. Metodo della sonda normale

Nel contesto dello studio dei corpi solidi deformabili immersi in un fluido, è essenziale determinare come le sollecitazioni si distribuiscono sulle superfici solide a causa dell'interazione con il fluido circostante. Questo permette di prevedere il comportamento dinamico di tali corpi. In questo lavoro, l'obiettivo viene raggiunto tramite il cosiddetto *normal probe-method*. Questo metodo consente di stimare la retroazione del fluido sul solido valutando la pressione idrodinamica e le sollecitazioni viscosse in prossimità delle interfacce fluido-solido, ipotizzando una variazione lineare dei campi di pressione e velocità nella direzione normale. Tale ipotesi è valida quando la griglia utilizzata è sufficientemente fine da risolvere completamente lo strato limite interno delle interfacce, un requisito che è già necessario per le simulazioni numeriche dirette trattate in questo studio.

Per semplificare l'analisi, è stato considerato il caso dello strato limite laminare, che ha una vasta applicabilità. In questo contesto, il flusso può essere descritto utilizzando le equazioni dello strato limite con un sistema di coordinate curvilinee ortogonali locali  $(\xi-\eta-\zeta)$ , che corrispondono alle direzioni definite dai vettori tangente, normale e binormale dell'interfaccia.

Utilizzando questo quadro di riferimento ortogonale locale per ciascuna posizione lagrangiana sull'interfaccia  $\mathbf{X}_h$ , viene estesa una sonda di lunghezza  $\Delta l = 2\Delta f$  lungo il vettore normale. Questa sonda ha una punta  $T$  e una base  $R$ , come illustrato nella figura per il caso bidimensionale. Per ottenere una stima accurata della pressione e della velocità alla punta e alla base della sonda, così come all'interfaccia solido-fluido, si utilizza uno stencil  $2 \times 2 \times 2$  con spaziatura  $\Delta f$  centrato sulla punta  $T$ .

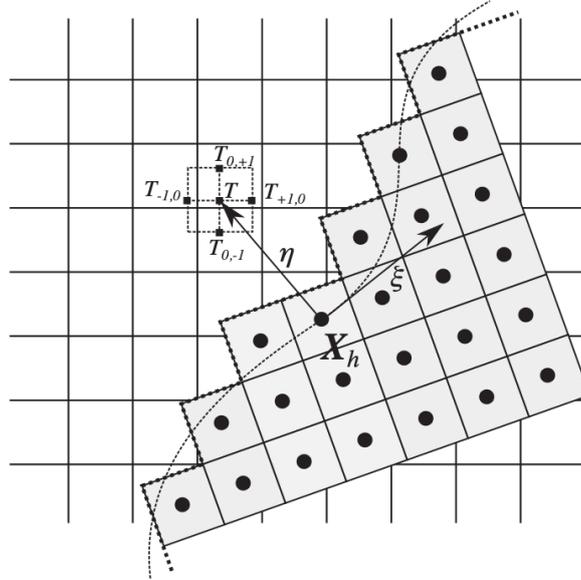


Figura 3.9: Schema del sistema di coordinate curvilinee locali nel caso bidimensionale, definito dai vettori tangente e normale e del modello utilizzato per il calcolo dei gradienti di pressione e di velocità sulla punta della sonda, T.

L'impiego dello stencil consente di approssimare in modo più preciso i valori di pressione e velocità in questi punti. Questi valori sono calcolati tramite una funzione delta di Dirac regolarizzata, come definito nell'equazione (3.43):

$$p|_{T_{a,b}} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} p_{i,j,k} \delta_{\Delta} (x_{i,j,k} - \mathbf{X}_{T_{a,b}}) \Delta_f^3, \quad (3.47)$$

$$\mathbf{u}|_{T_{a,b}} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \mathbf{u}_{i,j,k} \delta_{\Delta} (x_{i,j,k} - \mathbf{X}_{T_{a,b}}) \Delta_f^3, \quad (3.48)$$

dove  $T_{a,b}$  rappresenta un punto generico dello stencil. I gradienti di pressione e velocità  $\nabla_{p|_T}$  e  $\nabla_{\mathbf{u}|_T}$  sono calcolati utilizzando schemi alle differenze finite centrati basati sui punti dello stencil. Considerando una variazione lineare del gradiente di pressione nella direzione normale, la pressione alla base della sonda  $R$  è determinata secondo Wang [23]:

$$p|_R = p|_T + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_R + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_T \right], \quad (3.49)$$

$$p|_T = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} p_{i,j,k} \delta_{\Delta} (x_{i,j,k} - \mathbf{X}_{T_{a,b}}) \Delta_f^3, \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_R \approx \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \Big|_R \cdot \hat{\mathbf{n}}_h \cong \frac{d\mathbf{U}_h}{dt} \cdot \hat{\mathbf{n}}_h, \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_T = \nabla_{p|_T} \cdot \hat{\mathbf{n}}_h. \quad (3.52)$$

Assumendo una variazione lineare del campo di velocità lungo la direzione normale vicino all'interfaccia solido-fluido, lo sforzo di taglio viscoso alla base della sonda  $R$  è valutato basandosi sui gradienti di velocità alla punta della sonda  $T$ :

$$\frac{\partial \mu_{\xi}}{\partial \eta} \Big|_R = \nabla_{\mathbf{u}|_T} \cdot \hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{n}}, \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial \mu_{\eta}}{\partial \eta} \Big|_R = \nabla_{\mathbf{u}|_T} \cdot \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}, \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial \mu_{\zeta}}{\partial \eta} \Big|_R = \nabla_{\mathbf{u}|_T} \cdot \hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$$

(3.55)

$$\tau_\xi = \mu \frac{\partial \mu_\xi}{\partial \eta} \Big|_R,$$

(3.56)

$$\tau_\eta = \mu \frac{\partial \mu_\eta}{\partial \eta} \Big|_m - p \Big|_R,$$

(3.57)

$$\tau_\zeta = \mu \frac{\partial \mu_\zeta}{\partial \eta} \Big|_R.$$

(3.58)

Questi sforzi vengono poi espressi nel sistema di riferimento globale (x-y-z):

$$\begin{bmatrix} \tau_x \\ \tau_y \\ \tau_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{t}_x & \hat{n}_x & \hat{b}_x \\ \hat{t}_y & \hat{n}_y & \hat{b}_y \\ \hat{t}_z & \hat{n}_z & \hat{b}_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_\xi \\ \tau_\eta \\ \tau_\zeta \end{bmatrix}$$

(3.59)

Una volta ottenuta la distribuzione degli sforzi sull'interfaccia solido-fluido, si può calcolare la forza per unità di volume che agisce su ciascuna particella del materiale all'interfaccia  $\mathbf{X}_h$ :

$$\mathbf{F}_h = -\tau_h \frac{A_h}{\Delta_s^3},$$

(3.60)

dove  $A_h$  rappresenta l'area della faccia delle particelle di materiale interfacciale  $\mathbf{X}_h$ , calcolata all'inizio del processo. In caso di formazione di cricche, si generano nuove particelle di materiale interfacciale, per le quali l'area  $A_h$  è impostata come:  $A_h = \Delta_s^{2/3}$ , con  $\Delta_s$  che rappresenta la spaziatura della griglia.

# Capitolo 4

## Implementazione

In questo capitolo, viene descritta l'applicazione delle metodologie illustrate nel capitolo precedente. L'intero programma è sviluppato in Fortran 90, utilizza la compilazione in doppia precisione ed è suddiviso in tre moduli distinti: un solutore fluido, un solutore perid dinamico e un modulo per la sincronizzazione e l'accoppiamento delle equazioni, oltre allo scambio di quantità di moto attraverso l'interfaccia. Il solutore fluido è stato sviluppato partendo dal solutore open source CaNS di Costa, mentre sia il solutore perid dinamico sia il modulo di accoppiamento sono stati sviluppati dall'Ingegnere Dalla Barba [24], che ha anche verificato l'accuratezza di tutti i risolutori. Il codice è interamente compilato in parallelo utilizzando la libreria MPI (*Message Passing Interface*).

### 4.1. Solutore fluido

Le equazioni di Navier-Stokes vengono risolte su una griglia sfalsata e uniforme in un dominio rettangolare; l'integrazione temporale viene effettuata utilizzando uno schema *Velocity Verlet*, che permette di avanzare le equazioni di Navier-Stokes dal tempo discreto  $t_n$  a  $t_{n+1}$  con un passo temporale  $\Delta t_f$ . L'integrazione spaziale, invece, è realizzata attraverso uno schema alle differenze finite accurato al secondo ordine, come descritto nella sezione 3.4.2. Ai confini esterni del dominio di calcolo, è possibile applicare diverse condizioni al contorno, come arbitrarie, periodiche, di Neumann o di Dirichlet, utilizzando dei *ghost nodes*. Il dominio computazionale risulta contornato da una o più righe e colonne di questi nodi fittizi che permettono di discretizzare le condizioni al contorno di Neumann o Dirichlet nell'ambito del metodo alle differenze finite.

Per la griglia sfalsata impiegata nel problema, le condizioni di Dirichlet possono essere applicate facilmente nel seguente modo:

- Per la velocità:

$$u_{x(i,j,k)} = \frac{u_{x(i+1/2,j,k)} + u_{x(i-1/2,j,k)}}{2} = 0 \Rightarrow u_{x(i+\frac{1}{2},j,k)} = u_{x(i-\frac{1}{2},j,k)}, \quad (4.1)$$

- Per la pressione:

$$p_{(i,j,k)} = 0,$$

(4.2)

con la pressione imposta ai nodi interessati.

Le condizioni di Neumann sono invece impostate come segue:

1. Per la velocità:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{u_{x(i+1/2,j,k)} - u_{x(i-1/2,j,k)}}{\Delta x} = 0 \Rightarrow u_{x(i+1/2,j,k)} = u_{x(i-1/2,j,k)},$$

(4.3)

- Per la pressione:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_{(i,j,k)} - p_{(i-1,j,k)}}{\Delta x} = 0 \Rightarrow p_{(i,j,k)} = p_{(i-1,j,k)}.$$

(4.4)

Le condizioni iniziali sono assegnate al campo di velocità impostando direttamente il valore della velocità sui nodi considerati, ad esempio  $u_{x(i,j,k)} = c$ .

Le condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità sulle interfacce fluido-solido immerse sono imposte tramite lo schema di *multidirect forcing immersed boundary method*, descritto nella sezione 3.5.1, che viene implementato direttamente nel solutore delle equazioni di Navier-Stokes. Le forze per unità di volume che agiscono sui solidi immersi sono calcolate secondo le equazioni (3.60).

## 4.2. Solutore perid dinamico e accoppiamento

Il codice esegue separatamente i blocchi relativi alla perid dinamica e alle equazioni di Navier-Stokes. Questi blocchi sono completamente indipendenti l'uno dall'altro e scambiano informazioni riguardo ai carichi applicati alle interfacce fluido-solido e alle posizioni istantanee dei punti lagrangiani dei corpi solidi. Le equazioni che governano la perid dinamica avanzano nel tempo per ottenere la sincronizzazione con la dinamica del fluido. Le equazioni avanzano dal tempo  $t_n$  a  $t_{n+1}$  con passo temporale  $\Delta t_f$  e in seguito le posizioni delle interfacce solido-fluido vengono aggiornate, in modo da far avanzare nel tempo le equazioni di Navier-Stokes fino allo

step temporale successivo. In particolare, le forze fluidodinamiche calcolate dal solutore fluido, che dipendono dal campo di velocità del fluido e dalla posizione e velocità istantanea dei punti lagrangiani, vengano fornite come input al solutore peridinamico. Allo stesso tempo le posizioni dei punti lagrangiani vengano calcolate immediatamente prima di risolvere il modulo fluidodinamico.

È importante notare che il minimo passo temporale che mi garantisce stabilità nel caso del solutore fluido è dell'ordine di  $\Delta t_f \propto \Delta f / U_f$ , mentre per il solido è  $\Delta t_s \propto \Delta s / U_s$ , con  $U_f$  che rappresenta la velocità caratteristica del fluido e  $U_s = \sqrt{E/\rho_s}$  la velocità caratteristica del solido. In generale, poiché  $\Delta f = \Delta s$  e  $U_s \gg U_f$ , la condizione di stabilità per lo schema di avanzamento peridinamico è più stringente rispetto alla condizione di stabilità per il fluido. Di conseguenza, il passo temporale utilizzato dal solutore peridinamico è  $\Delta t_s = R \Delta t_f$ , dove  $R$  è un numero reale, con  $R \leq 1$ . Il fattore  $R = \Delta t_f / \Delta t_s \propto U_f / U_s$  viene utilizzato per garantire la stabilità numerica. Poiché la scala temporale caratteristica del solido è molto più breve di quella del fluido, il numero di iterazioni necessarie per lo schema peridinamico al fine di sincronizzarsi con quello del fluido può essere piuttosto elevato e cresce con la diminuzione di  $R$ . Inoltre, l'accoppiamento completamente esplicito influisce sull'accuratezza temporale e sulla stabilità numerica dello schema, imponendo un limite inferiore al rapporto di densità solido-fluido  $\rho_s / \rho_f > 1$ , per evitare problemi di stabilità dovuti all'effetto di massa aggiunta.

Di seguito viene fornito l'algoritmo che mostra lo schema globale di avanzamento temporale che comprende all'interno del solutore fluido l'aggiornamento delle posizioni e delle velocità dei solidi:

do for n = 1, N<sub>t</sub>

t<sub>n+1</sub> = t<sub>n</sub> + Δt<sub>f</sub>

do for r=1,3

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{r-1} + \frac{\Delta t_f}{\rho_f} (\alpha_r \mathbf{FRHS}_f^{r-1} + \beta_r \mathbf{FRHS}_f^{r-2} - \gamma_r \nabla p^{r-3/2})$$

$$\hat{\mathbf{u}}^0 = \mathbf{u}^*$$

do for s=1, N<sub>s</sub>

do for h=1, N<sub>p</sub>

$$\widehat{\mathbf{U}}_h^{s-1} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \widehat{\mathbf{u}}_{i,j,k}^{s-1} \delta_{\Delta}(\mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{X}_h^n) \Delta_f^3$$

$$\mathbf{Q}_h^{r-\frac{1}{2},s} = \mathbf{Q}_h^{r-\frac{1}{2},s-1} + \frac{\mathbf{v}_h^n - \widehat{\mathbf{U}}_h^{s-1}}{\Delta t}$$

end do

do for [i,j,k] = [1,1,1], [N<sub>x</sub>, N<sub>y</sub>, N<sub>z</sub>],

$$\mathbf{q}_{i,j,k}^{r-\frac{1}{2},s} = \sum_{h=1}^{N_p} \mathbf{Q}_h^{r-\frac{1}{2},s} \delta_{\Delta}(\mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{X}_h^n) \Delta V_h$$

$$\widehat{\mathbf{u}}_{i,j,k}^{s-1} = \mathbf{u}_{i,j,k}^* + \Delta t \mathbf{q}_{i,j,k}^{r-\frac{1}{2},s}$$

end do

end do

$$\nabla^2 \hat{p} = \frac{\rho_f}{\gamma_r \Delta t_f} \nabla \cdot \widehat{\mathbf{u}}^{N_s}$$

Si risolve per trovare  $\hat{p}$

$$\mathbf{u}^r = \widehat{\mathbf{u}}^{N_s} - \frac{\gamma_r \Delta t_f}{\rho_f} \nabla \hat{p}$$

$$p^{r-1/2} = p^{r-3/2} + \hat{p}$$

end do

Calcolo delle forze fluide sul solido:  $\mathbf{F}_h^n$

Aggiornamento delle posizioni e delle velocità dei solidi. Il ciclo procede fino a quando non si è arrivati a sincronizzazione,  $t_s = t_{n+1}$ , con  $t_{n+1}$  il tempo del ciclo globale

do while  $t_s \leq t_{n+1}$

$$t_s = t_s + \Delta t_s$$

do for r = 1, 3

do for h = 1, N<sub>p</sub>

$$\mathbf{X}_h^r = \mathbf{X}_h^{r-1} + \Delta t_f (\alpha_r \mathbf{V}_h^{r-1} + \beta_r \mathbf{V}_h^{r-2} - \gamma_r \mathbf{V}_h^{r-3})$$

$$\mathbf{V}_h^r = \mathbf{V}_h^{r-1} + \frac{\Delta t_s}{\rho_s} (\alpha_r \mathbf{PRHS}_h^{r-1} + \beta_r \mathbf{PRHS}_h^{r-2} - \gamma_r \mathbf{PRHS}_h^{r-3})$$

Verificare lo stato dei legami

end do

end do

end do

Aggiornamento delle interfacce fluido-solido al tempo  $t_f^{n+1}$

end do

Il termine  $\mathbf{PRHS}_h^r$ , viene calcolato utilizzando l'equazione di equilibrio del momento lineare valutata allo step  $r$ :

$$\mathbf{PRHS}_h^r = \sum_{l=1}^{N_h} (\mathbf{t}_{h,l}^r - \mathbf{t}_{l,l}^r) \Gamma_{h,l} \Delta V_l + \mathbf{F}_h^r + \mathbf{C}_h^r + \mathbf{D}_h^r$$

dove  $\mathbf{t}_{h,l}^r$  è la *bond force density*, calcolata tramite il modello costitutivo *bond-based* (sezione 3.3.2). I pedici  $h$  e  $l$  si riferiscono a due particelle materiali discrete  $\mathbf{X}_{0,h}$  e  $\mathbf{X}_{0,l}$ , mentre  $\mathbf{F}_h^r$  è la forza esterna per unità di volume.  $\mathbf{C}_h^r$  è la forza per unità di volume dovuta al contatto della particella con i confini o con altre particelle al di fuori del suo intorno. Infine,  $\mathbf{D}_h^r$  è la forza di smorzamento, necessaria per introdurre una dinamica dissipativa nel movimento di un solido peridinamico.

### 4.3. Organizzazione dell'architettura parallela del codice

Gli algoritmi appena descritti sono stati progettati per i sistemi a memoria distribuita e sono stati parallelizzati utilizzando la libreria MPI. Il dominio fluido è stato discretizzato utilizzando una griglia Euleriana equispaziata ed uniforme, con nodi fissati nello spazio, mentre il dominio

solido è stato rappresentato attraverso un insieme finito di particelle cubiche. Ogni particella è associata a un nodo peridynamico situato nel centroide della particella stessa, con la sua posizione monitorata in un sistema di riferimento lagrangiano che varia nel tempo. Questa distinzione rende la progettazione del codice parallelo complessa, poiché richiede l'adozione di strategie differenti per le fasi Euleriana e Lagrangiana, in modo da garantire una distribuzione equilibrata delle operazioni di calcolo tra i vari processi MPI; infatti, una strategia di decomposizione basata sullo spazio non è conveniente per la griglia Lagrangiana, in quanto il moto delle particelle porterebbe ad una distribuzione non uniforme delle operazioni.

Il dominio Euleriano viene suddiviso in una griglia di sottodomini, definiti lungo le direzioni  $x$  e  $y$  in base ai parametri  $N_{MPI,x} \times N_{MPI,y}$ . Ciascun sottodominio viene gestito da un singolo processo MPI, che esegue tutti i calcoli necessari e memorizza i dati in una memoria privata. Per facilitare la comunicazione tra i sottodomini adiacenti, vengono utilizzate delle celle "halo", che contengono copie dei dati necessari per la discretizzazione spaziale di secondo ordine mediante schemi alle differenze finite. Queste celle sono fondamentali per scambiare informazioni tra i confini dei sottodomini durante i calcoli.

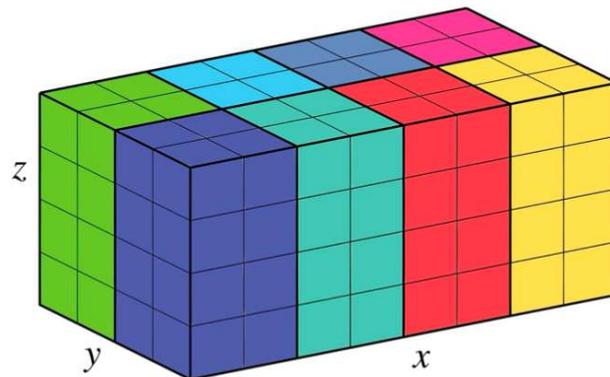


Figura 4.1: suddivisione del dominio Euleriano in  $N_{MPI,x} \times N_{MPI,y}$  sottodomini, lungo le direzioni  $x$  e  $y$  rispettivamente, utilizzando una decomposizione bidimensionale *pencil-like*.

Nel dominio Lagrangiano è stata fatta una decomposizione basata sugli indici. Le particelle sono numerate in modo sequenziale da 1 a  $N_p$ . Queste particelle vengono poi distribuite in gruppi, ciascuno con lo stesso numero di particelle, e ogni gruppo viene assegnato a un processo MPI. I dati relativi alle posizioni e alle velocità delle particelle, che si trovano vicine ma appartengono a gruppi differenti, vengono condivisi tra i processi MPI per facilitare i calcoli necessari.

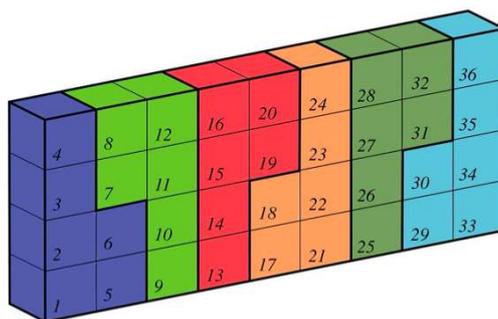


Figura 4.2: esempio di partizione delle particelle discrete in gruppi associati a diversi processi MPI, dove i colori rappresentano sottodomini diversi appartenenti a processi MPI diversi. Per minimizzare la quantità di comunicazione dei dati, le particelle vicine nello spazio sono identificate da ID interi vicini.

Un aspetto chiave è che il numero di processi MPI utilizzato per la decomposizione spaziale del dominio Euleriano è lo stesso utilizzato per la decomposizione del dominio Lagrangiano. Dato che sono necessarie numerose comunicazioni tra i processi MPI per entrambe le fasi Euleriana e Lagrangiana, specialmente per le operazioni di interpolazione e diffusione usate per impostare le condizioni al contorno di aderenza e impermeabilità alle interfacce fluido-solido e per calcolare le forze fluidodinamiche sui confini solidi, è cruciale adottare una strategia efficiente di decomposizione degli indici. Numerare le particelle in modo che quelle vicine nello spazio abbiano ID contigui riduce il numero di comunicazioni tra i processi, ottimizzando la distribuzione del carico di lavoro e minimizzando il traffico di dati.

Infine, è importante sottolineare che le comunicazioni tra i processi sono principalmente limitate alle particelle situate sulle interfacce, riducendo così il numero complessivo di scambi di dati necessari.

## Capitolo 5

# Configurazione della simulazione e risultati

Questo capitolo illustra la simulazione dell'interazione tra un mezzo poroso sottoposto all'azione di un fluido incomprimibile, tipico problema di interazione fluido-struttura. Viene fornita una panoramica dettagliata sulle metodologie utilizzate per configurare il problema e impostare i vari parametri della simulazione.

Nel presente studio è stata condotta una simulazione DNS tridimensionale di un flusso laminare all'interno di un canale, in cui è stato inserito un mezzo solido poroso composto da un materiale elastico lineare e fragile. L'obiettivo principale è rappresentare l'interazione tra la fase fluida e quella solida, replicando fenomeni come l'innesco di cricche, la ramificazione delle fratture e il loro sviluppo. Le simulazioni includono sia il solutore per il solido che quello per il fluido, così come l'algoritmo *multidirect forcing* e il *normal probe method*, utilizzato per il calcolo delle forze fluidodinamiche che agiscono sulle interfacce.

### 5.1. Configurazione del dominio computazionale

Il mezzo solido poroso è modellato con particelle sferiche di materiale avente diametro  $D=0.01$  m e disposte in modo casuale in un numero tale da garantire la porosità desiderata. Il rapporto tra l'orizzonte perid dinamico e la distanza tra le particelle è  $m=\delta/\Delta s=3$ , con  $\delta=4,6875 \times 10^{-3}$  m e  $\Delta s=\Delta f$ , dove  $\Delta s$  rappresenta la spaziatura nella griglia del quadro lagrangiano. Il modello perid dinamico utilizzato è di tipo tridimensionale basato sui legami. Il mezzo poroso è ancorato alla parete inferiore del canale, con un vincolo applicato a uno strato fantasma di materiale solido che impedisce lo spostamento in tutte e tre le direzioni lungo tre strati di particelle, estendendosi oltre il dominio euleriano nella direzione  $y$  negativa. Lo spessore dello strato fantasma è  $\Delta g=\delta$ . Le dimensioni del mezzo solido sono  $0,375L \times h \times h$  lungo le tre rispettive direzioni, rispettivamente, con l'angolo inferiore del mezzo posizionato a  $0,125L$  dall'ingresso.

Le proprietà meccaniche del mezzo poroso sono fissate come segue:

- Modulo di Young  $E=10^9 \text{ N/m}^2$ ,
- Coefficiente di Poisson  $\nu_s=0,25$ ,
- Densità del solido  $\rho_s=2500 \text{ kg/m}^3$ .

I valori del tasso critico di rilascio dell'energia di frattura  $G_0$  sono variabili a seconda del caso che si vuole trattare.

Il dominio euleriano per il flusso all'interno del canale è rappresentato da una scatola rettangolare con dimensioni  $L_x \times L_y \times L_z = L \times h \times h$ . Le dimensioni sono  $L=2 \cdot L_{ref}$  e  $h=1 \cdot L_{ref}$ , dove  $L_{ref}=0,1 \text{ m}$  è la scala di lunghezza di riferimento. La discretizzazione del dominio euleriano è stata effettuata utilizzando una griglia cartesiana uniforme composta da  $N_x \times N_y \times N_z = 128 \times 64 \times 64$  nodi lungo le rispettive direzioni, generando una griglia con dimensioni di cella pari a  $\Delta f = 1,5635 \times 10^{-3} \text{ m}$ .

Per configurare le simulazioni si inseriscono i vari parametri in un file predisposto (*opt.dat*). Nel presente elaborato i parametri del fluido sono stati impostati nel modo seguente:

- Numero di Reynolds  $Re_b = U_b h / \nu_f = 10$ ,

dove  $U_b = 0,1 \text{ m/s}$  è la velocità assiale e  $\nu_f = 1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$  la viscosità cinematica del fluido.

La scelta di utilizzare un numero di Reynolds relativamente basso serve per evitare di incorrere in problemi di instabilità numerica dovuti a possibili turbolenze. Le condizioni al contorno prevedono l'aderenza e l'impermeabilità sui lati superiore e inferiore del dominio. All'ingresso, il flusso segue un profilo di Poiseuille, mentre all'uscita è applicata una condizione di *outflow*. La gravità e la spinta idrostatica sono state trascurate.

## 5.2. Inizializzazione del fluido e del solido

Nella fase iniziale della simulazione essa viene fatta avanzare dall'iterazione 0 all'iterazione 10000 senza la possibilità del solido di essere deformato, con il solo modulo IBM attivo mentre il solutore perid dinamico rimane disattivato; questo passaggio è necessario per far arrivare a regime la fase fluida e raggiungere una condizione stabile. In questa fase il solido viene interpretato come un corpo rigido che rappresenta un ostacolo per il flusso fluido.

Successivamente viene attivato anche il solutore perid dinamico, mentre la possibilità di rottura del legame rimane disattivata, e la simulazione viene fatta avanzare fino all'iterazione 15000. Durante questa fase le particelle perid dinamiche che compongono il mezzo poroso sono costrette a rimanere collegate, e ci consente che il solido nell'istante prima della rottura sia arrivato ad una configurazione deformata di equilibrio, per evitare salti bruschi nella simulazione.

Come si può osservare nella figura, la zona centrale del mezzo poroso è quella che subisce la deformazione maggiore, mentre le aree vicine alle pareti risultano più rigide. Questo fenomeno è causato dalla condizione di flusso di Poiseuille applicata, dove il profilo della velocità del fluido assume una forma parabolica, con il massimo lungo l'asse di simmetria del canale e un valore nullo vicino alle pareti. Di conseguenza, l'azione del fluido è più intensa al centro del mezzo e più lieve nelle vicinanze delle pareti. Inoltre, le particelle di materiale nella parte posteriore del mezzo poroso sono meno vincolate rispetto a quelle posizionate dietro di loro, non essendo sottoposte alle stesse forze di legame. Perciò, è ragionevole ipotizzare che la frattura inizi nella parte posteriore del mezzo e si propaghi verso il centro, mentre la porzione vicina alle pareti rimane intatta o si rompe per ultima.

### 5.3. Abilitazione della frattura

Nell'ultima fase, è stata attivata la rottura del legame, proseguendo la simulazione per ulteriori 5000 iterazioni. In figura 5.1 è possibile osservare le configurazioni finali dei solidi porosi, dove la faccia posta a valle del canale risulta essere quella maggiormente danneggiata.

Prima di procedere con la simulazione, è necessario però determinare il valore del *critical fracture energy release rate*. Per il calcolo di questo parametro, è stato utilizzato un programma scritto in Fortran, che fornisce i valori degli stress, della *Probability Density Function* (PDF) e della *Cumulative Distribution Function* (CDF), salvati in un file chiamato "pdf.dat". Successivamente, tramite un codice Python, è stato possibile individuare i valori di *stretch* corrispondenti a due specifici valori di CDF. Questi due valori fanno riferimento ai casi  $G_{0,A}$  e  $G_{0,B}$  studiati.

Come già menzionato in precedenza nel paragrafo 3.3.3, il principio fondamentale della teoria peridinamica è che le fratture si generano quando i legami si rompono. Questo avviene quando l'allungamento di un legame supera un valore limite, noto come *limit bond stretch*  $s_0$ . Nel caso tridimensionale (3D), questo valore critico di stiramento è definito dalla seguente espressione:

$$s_0 = \sqrt{\frac{5G_0}{6E\delta}}$$

(5.1)

Va notato che la rottura dei legami può avvenire soltanto in condizioni di trazione pura, in conformità con il materiale lineare-elastico e fragile (*Prototype microelastic brittle material*, PMB), che rappresenta il modello peridinamico basato sui legami.

Utilizzando l'equazione 5.1, possiamo quindi calcolarci il valore di  $G_0$ . La formula è la seguente:

$$G_0 = \frac{6E\delta}{5} s_0^2,$$

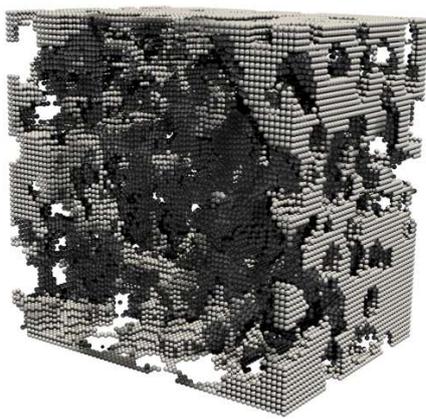
(5.2)

dove  $E$  rappresenta il modulo di Young,  $\delta$  l'orizzonte perid dinamico, e  $s_0$  è lo stretch del legame.

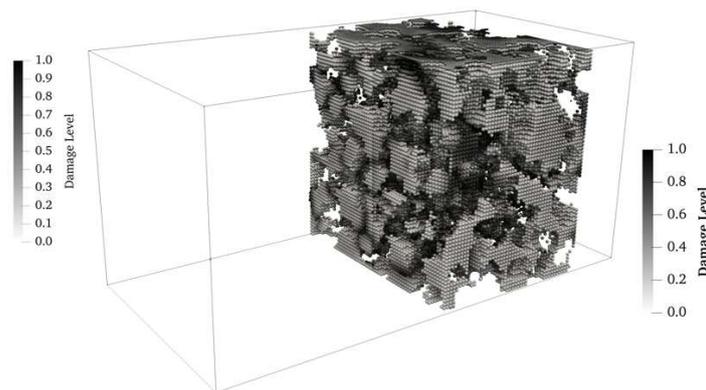
Come indicato nell'equazione 5.1, il valore del *limit bond stretch*  $s_0$  dipende direttamente da  $G_0$ . Questo implica che a valori più bassi di  $G_0$  corrispondono valori inferiori di  $s_0$ . Di conseguenza, i materiali con un valore ridotto di  $s_0$  risultano essere più fragili e tendono a rompersi più facilmente rispetto a quelli con un  $s_0$  più elevato. Pertanto, modificando il valore di  $G_0$ , è possibile influenzare la resistenza del materiale, rendendolo più o meno fragile, e determinare diverse distribuzioni di tensioni, come è stato fatto in questo studio.

Nel presente studio, per ogni livello di porosità sono stati selezionati due valori distinti di  $s_0$ , corrispondenti rispettivamente alla probabilità di superare gli stretch limite dello 0.1% (caso  $G_{0,A}$ ) e dello 0.3% (caso  $G_{0,B}$ ).

Analizzando le configurazioni finali, il mezzo poroso risulta più o meno danneggiato a seconda del *critical fracture energy release rate* considerato e in base al valore di porosità analizzato. Come ci aspettiamo la faccia maggiormente danneggiata risulta essere quella a valle del canale.



a) Porosità 0.55



b) Porosità 0.60

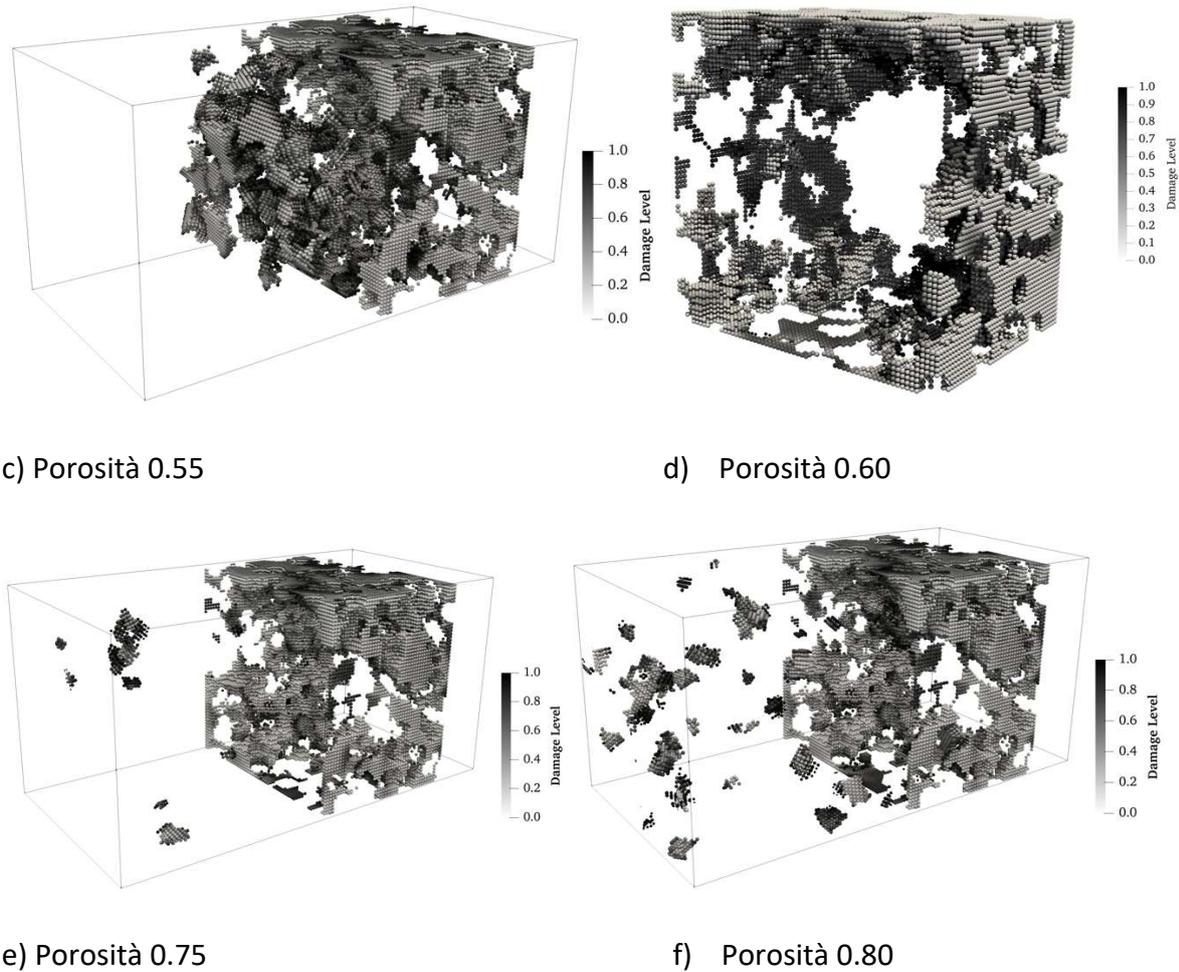


Figura 5.1: configurazioni finali dei solidi porosi per i sei gradi di porosità analizzati.

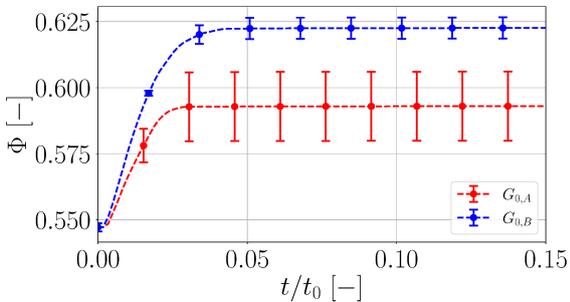
## 5.4. Risultati

L'interazione con la fase fluida e la conseguente rottura del mezzo poroso causano un cambiamento delle sue proprietà fisiche. Nel seguente capitolo verranno esposti i principali risultati ottenuti dalle simulazioni, analizzando in dettaglio alcuni parametri fondamentali quali la porosità, la permeabilità, e gli andamenti degli stress prima e dopo la rottura del mezzo poroso.

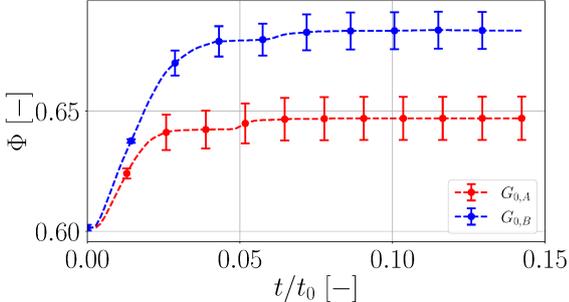
### 5.4.1 Porosità

In questa sezione vengono analizzate le variazioni di porosità che si hanno come conseguenza della rottura del mezzo poroso, per entrambi i casi di *critical fracture energy release rate*, e per i sei casi di porosità iniziale analizzati. I vari andamenti della porosità sono stati graficati in funzione del tempo  $t/t_0$ , dove  $t$  è il tempo misurato dall'attivazione della rottura del legame e  $t_0$  è la scala temporale di riferimento calcolata come  $t_0=L_{ref}/U_b$ .

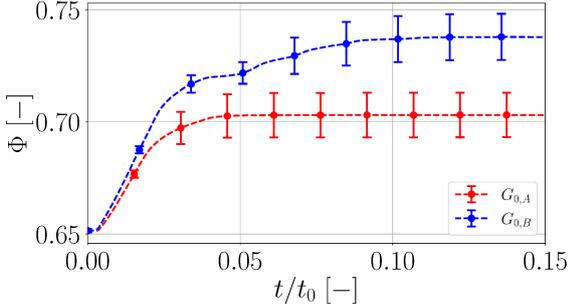
Quando il mezzo poroso si rompe, i frammenti cominciano a lasciare il dominio solido, il volume dello spazio vuoto inizia ad aumentare e di conseguenza anche la porosità, poiché è definita come il rapporto tra il volume dello spazio vuoto e il volume totale del mezzo (equazione 2.1). Questa tendenza viene confermata dai grafici di figura 5.2, dove possiamo vedere che per tutti i gradi di porosità analizzati, e per entrambi i casi di *critical fracture energy release rate*, la porosità finale aumenta rispetto a quella iniziale. Inoltre possiamo anche notare che per il caso  $G_{0,B}$  la porosità finale è maggiore rispetto al caso  $G_{0,A}$ . Infatti, per quanto detto in precedenza, il caso  $G_{0,B}$  è quello che comporta una maggior rottura del materiale; di conseguenza la porosità finale risulta maggiore in quanto un numero più grande di frammenti lasciano il dominio solido, con un aumento del volume di spazio vuoto e quindi della porosità.



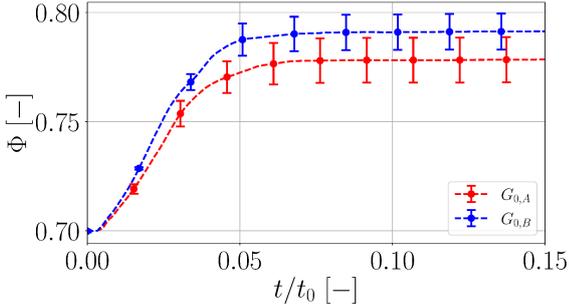
a) Porosità 0.55



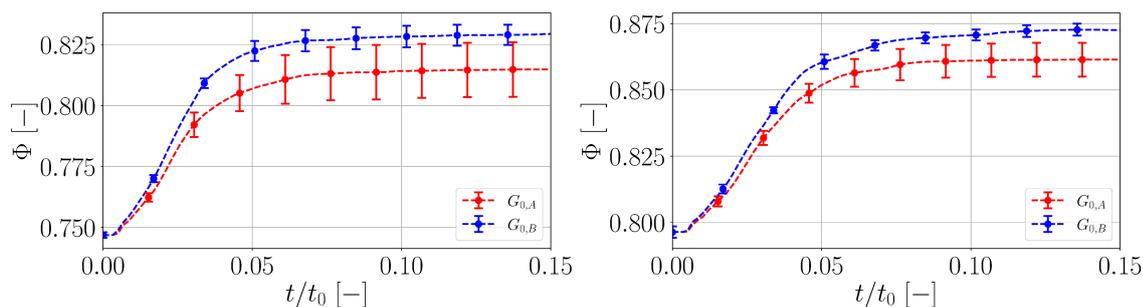
b) Porosità 0.60



c) Porosità 0.65



d) Porosità 0.70



e) Porosità 0.75

f) Porosità 0.80

Figura 5.2: andamenti della porosità confrontati con la sollecitazione critica prima e dopo la frattura, per i due differenti *critical fracture energy release rate* e per i sei gradi di porosità analizzati.

I grafici ottenuti ci permettono di fare un'analisi complessiva del comportamento del mezzo poroso, riportando alla conclusione che la porosità aumenta con la rottura del mezzo poroso, tendenza rispettata per tutti i casi analizzati, notando anche, come ci aspettiamo, che la porosità finale è tanto più grande quanto più è alta la porosità iniziale; inoltre, a valori maggiori di *critical fracture energy release rate* sono associati livelli minori di rottura e quindi minori gradi di porosità finale. Possiamo infine notare che lo scostamento tra le porosità finali dei due diversi casi di  $G_0$  diminuisce con l'aumentare della porosità iniziale. Questo si spiega con il fatto che se la porosità iniziale è molto grande, i livelli di danneggiamento sono talmente grandi che anche per diversi casi di *critical fracture energy release rate* le porosità finali tendono a confondersi.

Infine, vale la pena notare che i valori forniti sono calcolati come media su diverse simulazioni effettuate, per mitigare l'impatto del comportamento statistico dei casi sfavorevoli, e dai grafici è possibile notare la presenza degli *errors bars*, calcolati come deviazione standard della media per i valori interpolati tramite la seguente formula:

$$\chi_{err}(t) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\chi_i(t)^2) - \chi_{avg}(t)^2}{N}}$$

dove  $t$  indica il tempo su cui sono stati interpolati i vari dati,  $N$  è il numero totale di valori (pari al numero di simulazioni effettuate),  $\chi_i(t)$  sono i valori interpolati e  $\chi_{avg}(t)$  rappresenta la media dei valori interpolati. Gli *error bars* sono utili per vedere lo scostamento dai valori medi dei dati analizzati.

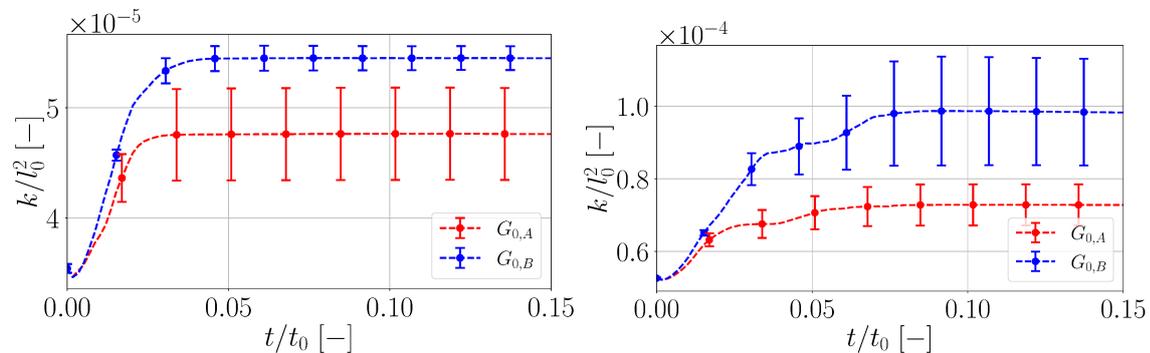
## 5.4.2. Permeabilità

Per quanto riguarda la permeabilità, come descritto nella sezione 2, essa rappresenta la resistenza che un fluido incontra nel passare attraverso un mezzo poroso, e rappresenta un

altro parametro fondamentale nello studio di problemi di interazione fluido-struttura. In questo studio, la permeabilità è determinata applicando la legge di Darcy (equazione 2.3) ed è calcolata nel seguente modo:

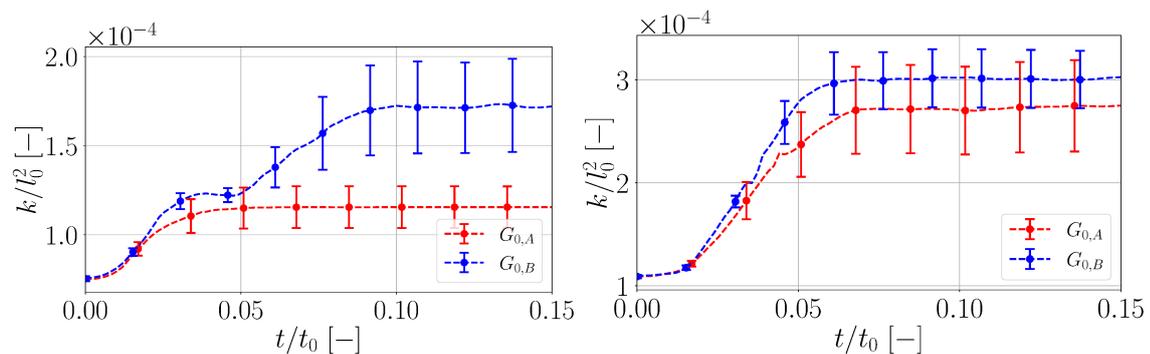
$$k = \frac{QL}{S} \frac{\mu}{\Delta p} \quad (5.3)$$

dove  $Q$  indica la portata del fluido,  $S$  è l'area della sezione attraverso cui il fluido fluisce,  $k$  è la permeabilità,  $\mu$  rappresenta la viscosità dinamica del fluido, e  $\Delta p$  è la differenza di pressione tra la parte anteriore e posteriore del mezzo. Il principale fattore che influisce sul valore della permeabilità è la differenza di pressione  $\Delta p$ , in quanto  $\mu$ ,  $L$  e  $S$  rimangono costanti e  $Q$  è un valore prefissato. Ci aspettiamo quindi che l'andamento della permeabilità sia proporzionale a  $1/\Delta p$ . Nella figura successiva vengono mostrati i grafici che rappresentano l'andamento temporale della permeabilità per unità di superficie, adimensionalizzata con il parametro di scala  $L^2$ , seguendo un approccio simile a quello utilizzato per la porosità, in cui il tempo è stato misurato dall'attivazione della rottura del legame e adimensionalizzato con  $t_0$ . Sono stati graficati gli andamenti della permeabilità per i sei casi di porosità analizzati e per i due diversi *critical fracture energy release rate*.

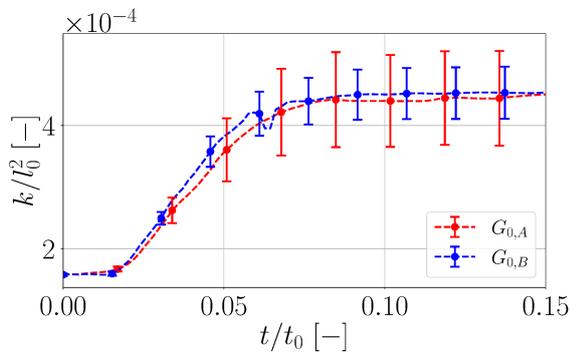


a) Porosità 0.55

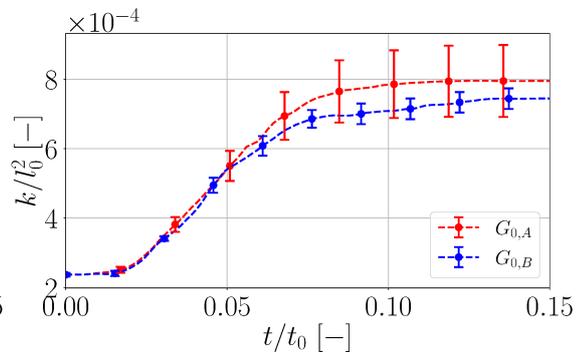
b) Porosità 0.60



c) Porosità 0.55



d) Porosità 0.60



e) Porosità 0.55

f) Porosità 0.60

Figura 5.3: andamenti della permeabilità confrontata con la sollecitazione critica prima e dopo la frattura, per i due differenti *critical fracture energy release rate* e per i sei gradi di porosità analizzati.

Dai grafici possiamo notare che il caso  $G_{0,B}$  presenta una permeabilità maggiore in quasi tutti i casi di porosità iniziale, fatta eccezione per il caso di porosità 0.8. Materiali con un *critical fracture energy release rate* più basso tendono infatti ad avere una permeabilità più alta in quanto soggetti a maggior rottura, mentre quelli con un  $G_0$  più alto, rompendosi meno, tendono a sviluppare percorsi preferenziali per il flusso, risultando in una minore connettività tra i pori. L'eccezione del caso con porosità iniziale 0.8 si spiega con il fatto che a porosità elevate la connettività tra i pori aumenta in modo significativo, indipendentemente dal valore di  $G_0$ . Tale effetto risulta dominante sulla permeabilità, motivo per cui la tendenza può invertirsi a livelli di porosità elevate.

### 5.4.3. Distribuzione degli stress

Il presente studio numerico si concentra sull'effetto delle sollecitazioni del fluido sul mezzo poroso con materiale lineare-elastico e fragile, in particolare mira a rappresentare l'innescò di cricche, la ramificazione delle cricche e fratture che si verificano quando gli allungamenti del legame superano l'allungamento limite  $s_0$  del materiale. Un risultato interessante che è possibile studiare con questa analisi è l'andamento degli stress prima e dopo la rottura del mezzo poroso. In questo paragrafo, per ogni caso di porosità, e per i due differenti casi di *critical fracture energy release rate* verrà presentata la *probability density function* (PDF) degli stress, che viene poi confrontata con la resistenza a rottura  $\sigma_f$ . La *probability density function* descrive la densità di probabilità di una variabile casuale in ogni punto dello spazio

campionario. Quindi, la probabilità che una variabile casuale  $X$ , che ha una densità di probabilità  $\rho_x(X)$ , sia inclusa in un sottoinsieme  $A$  del suo spazio campionario è data da:

$$P(X \in A) = \int_A \rho_x(X) dx.$$

Un post-processore scritto in Fortran permette di ottenere la PDF degli stress prima e dopo la rottura. In particolare la PDF degli stress prima della rottura risulta indipendente dal valore di  $G_0$  per ogni grado di porosità, mentre dopo la rottura vengono fornite due PDF differenti che si riferiscono ai due casi di *critical fracture energy release rate* analizzati ( $G_{0,A}$  e  $G_{0,B}$ ).

Partendo dalla definizione di forza per unità di superficie, si procede al calcolo del tensore degli sforzi per ogni particella di materiale. Quest'ultimo viene ottenuto utilizzando il prodotto tensoriale delle proiezioni della forza di legame per i legami che passano geometricamente attraverso il punto, ed è dato dalla seguente formula:

$$\sigma(R) = \frac{1}{2v_R} \sum_{R_1 \neq R} \mathbf{F}(R_1, R) \times (R_1 - R),$$

dove  $v_R$  rappresenta il volume della particella,  $\mathbf{F}$  è la forza per unità di volume che la particella  $R_1$  esercita sulla particella  $R$ .

Il tensore viene riscritto in un sistema di riferimento principale, associando a ciascuna coordinata un unico valore rappresentativo della sollecitazione locale. Infine, viene considerata la componente massima del tensore diagonalizzato.

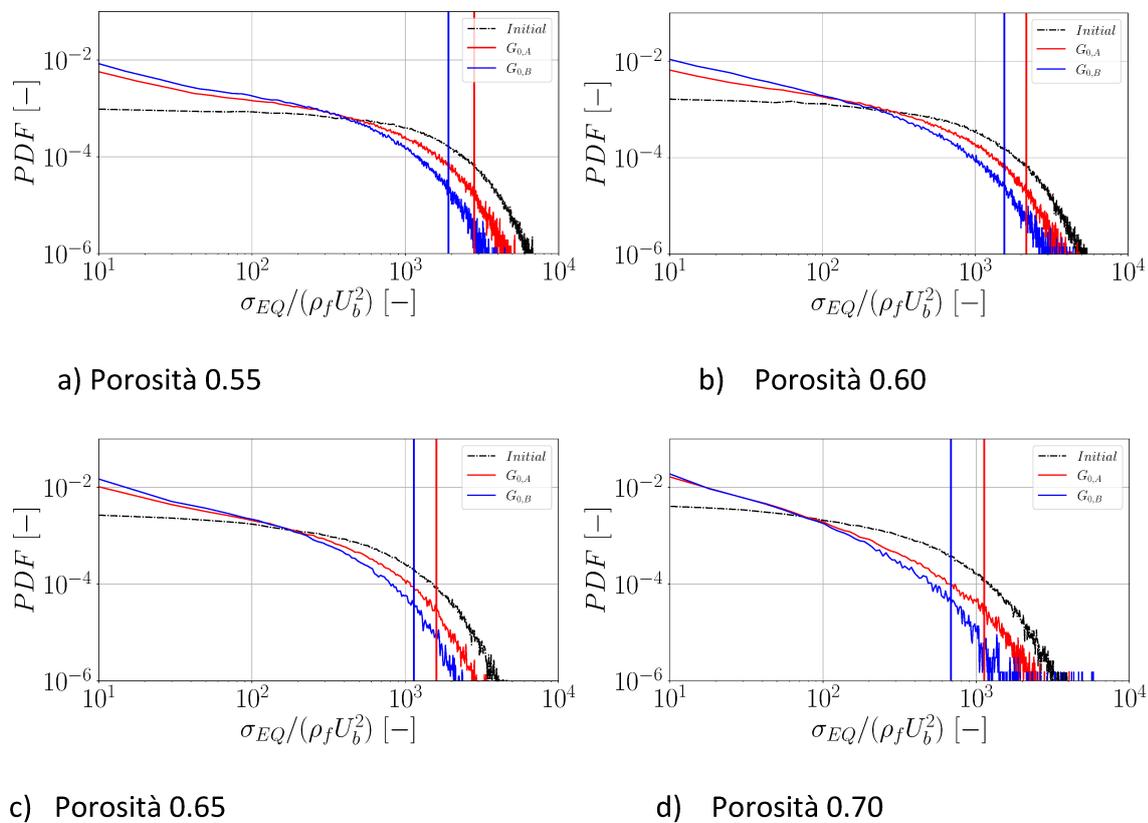
La distribuzione degli stress viene poi confrontata con la resistenza a rottura  $\sigma_f$ . L'approccio più semplice consiste nell'utilizzare la formula seguente:

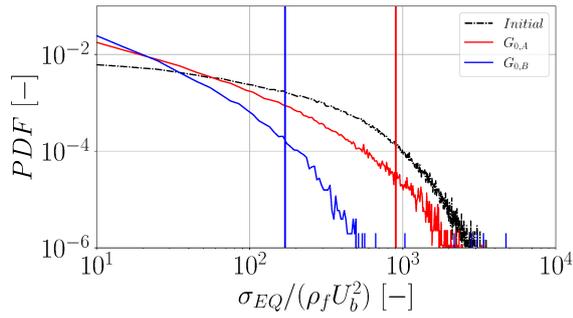
$$\sigma_f = E \cdot s_0,$$

che utilizza solo le informazioni provenienti dal modulo di Young  $E$  e dall'allungamento limite  $s_0$ . Tuttavia, impiegando questo criterio si ottengono delle sollecitazioni limite molto sovrastimate, con il rischio che il mezzo rimanga apparentemente intatto nelle rappresentazioni dei grafici, in contrasto con la configurazione finale del mezzo ottenuta. La resistenza a rottura  $\sigma_f$  viene quindi calcolata utilizzando un diverso approccio, basato sullo studio della *Probability density function* (PDF) e della *Cumulative density function* (CDF) degli stress. Secondo questa strategia la tensione critica si riferisce ad uno specifico valore del livello di probabilità cumulativa (CDF). Tale valore è stato scelto pari a 0.997 per il caso di *critical fracture energy release rate*  $G_{0,A}$ , che significa una probabilità di avere sollecitazioni maggiori del valore limite dello 0.1%, e del 0.999 per il caso  $G_{0,B}$ , che significa una probabilità di avere

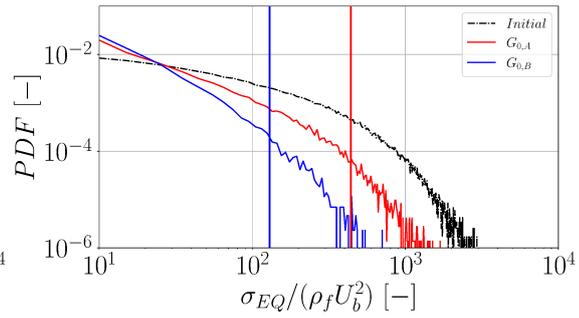
sollecitazioni maggiori del valore limite dello 0.3%. Per trovare questo specifico stress associato ad un livello di probabilità cumulativa, si utilizza un codice Python; il codice va a ricercare all'interno di un file .dat, contenente tre colonne che contengono i valori di  $\sigma$ , PDF e CDF, un valore di CDF tal per cui  $CDF_i \leq 0.997 \leq CDF_{i+1}$  e  $CDF_i \leq 0.999 \leq CDF_{i+1}$ , rispettivamente per il caso  $G_{0,A}$  e  $G_{0,B}$ . Per trovare infine il valore della resistenza a rottura  $\sigma_f$  il codice fa una media tra i valori  $\sigma_{f,i}$  e  $\sigma_{f,i+1}$ , che corrispondono alle *Cumulative Distribution Function*  $CDF_i$  e  $CDF_{i+1}$ .

Nei grafici di figura 5.4 queste sollecitazioni critiche appena calcolate sono rappresentate da due linee verticali, corrispondenti ai due valori di  $G_0$  analizzati. In particolare, si possono osservare le distribuzioni degli stress prima dell'innesco della frattura (curva nera) e dopo la rottura, per ognuno dei casi di *critical fracture energy release rate*, e per ogni grado di porosità analizzato. Tali grafici mostrano le varie PDF delle sollecitazioni all'interno del mezzo in funzione di una sollecitazione adimensionalizzata tramite  $\rho_f U^2$ , dove  $\rho_f$  è la densità del fluido e  $U$  è la velocità di scala.





e) Porosità 0.75



f) Porosità 0.80

Figura 5.4: andamenti degli stress confrontati con la sollecitazione critica prima e dopo la frattura, per i due differenti *critical fracture energy release rate* e per i sei gradi di porosità analizzati.

Dai grafici rappresentati in figura 5.4 si può notare come la resistenza a rottura, per entrambi i casi di *critical fracture energy release rate*, diminuisce con l'aumentare della porosità. Inoltre per tutti sei i casi di porosità analizzati possiamo vedere che la rottura arriva prima per il caso di  $G_{0,B}$ , confermando quanto detto precedentemente, ovvero che un valore più basso di  $G_0$  implica che il materiale tende a rompersi più facilmente.

# Capitolo 6

## Conclusioni

L'obiettivo di questo lavoro è quello trattare la problematica FSI (*Fluid Structure Interaction*) applicata ai materiali porosi. In particolare, si vuole analizzare numericamente l'interazione tra il flusso di un canale laminare, caratterizzato da un basso numero di Reynolds, e un mezzo poroso in cui è immerso, allo scopo di riprodurre l'avvio di cricche, la loro ramificazione e la frattura del materiale solido. Lo scopo dell'elaborato è quello di fornire una visione completa dell'interazione tra fluidi e mezzi porosi, analizzando nel dettaglio le metodologie utilizzate per impostare e configurare le simulazioni. I dati ottenuti sono stati analizzati per studiare il comportamento della rottura di mezzi porosi.

Tale fenomeno, in particolare l'analisi della rottura del mezzo poroso, risulta di particolare interesse nell'ambito dell'ingegneria aeronautica e spaziale, grazie alle sue particolari proprietà come leggerezza, permeabilità e capacità di dissipare energia che permettono di ottenere numerosi vantaggi in termini di prestazioni ed efficienza. I materiali ablativi vengono utilizzati per proteggere i veicoli spaziali durante il rientro atmosferico, disgregandosi sotto l'effetto delle forze fluidodinamiche. I mezzi porosi permettono infatti la dissipazione del calore e la protezione delle componenti interne. In ambito aeronautico i mezzi porosi sono invece utilizzati nei sistemi di filtrazione del carburante al fine di rimuovere le impurità presenti e garantire un corretto flusso di carburante. Oppure vengono impiegati per filtrare l'aria nei sistemi di ventilazione e condizionamento degli aerei, migliorando la qualità dell'aria nella cabina, o anche come componenti strutturali.

La tecnica numerica proposta in questo studio consente di analizzare dettagliatamente problemi FSI che coinvolgono flussi incomprimibili e materiali fragili, elastici-lineari, in cui la meccanica della frattura ha un ruolo centrale. La dinamica dei fluidi è stata risolta utilizzando le equazioni incomprimibili di Navier-Stokes attraverso una discretizzazione diretta, effettuando delle Simulazioni Numeriche Dirette (DNS), mentre la dinamica dei solidi e la frattura vengono trattate mediante la peridamica, un'estensione della teoria del continuo che incorpora intrinsecamente in essa l'inizio e la ramificazione delle cricche. L'accoppiamento tra fluidi e solidi è realizzato tramite l'*Immerse Boundary Method* (IBM), il quale applica le condizioni aderenza e impermeabilità sulle interfacce fluido-solido, identificate tramite un algoritmo specifico. Le forze superficiali esercitate dal fluido sui solidi sono poi calcolate con il

metodo della sonda normale, che permette di determinare la distribuzione delle sollecitazioni sulla superficie, fondamentale per prevedere il comportamento dei solidi deformabili.

Il codice utilizzato è scritto in Fortran 90, esteso con il *Message Passing Interface* (MPI), standard per il calcolo tramite processi in parallelo. Esso è composto da tre moduli principali: un solutore per i fluidi, uno per la peridinamica e un terzo che gestisce l'accoppiamento delle equazioni di Navier-Stokes con quelle peridinamiche tramite IBM.

Sono state effettuate 12 simulazioni, considerando sei gradi di porosità diversi e, per ogni grado di porosità, sono stati considerati due differenti valori di *critical fracture energy release rate* ( $G_0$ ). In particolare, sono stati considerati i gradi di porosità 0.55, 0.60, 0.65, 0.70, 0.75, 0.80, mentre per quanto riguarda il parametro  $G_0$  sono stati scelti due valori, corrispondenti alla probabilità di superare gli stretch limite dello 0.1% (caso  $G_{0,A}$ ) e dello 0.3% (caso  $G_{0,B}$ ), corrispondenti rispettivamente ad un livello di *Cumulative density function* di 0.997 e 0.999.

La simulazione parte dall'inizializzazione del flusso all'interno del canale, attivando solo il solutore fluido per raggiungere una condizione stabile, per poi abilitare il solutore peridinamico, quindi la deformazione del solido, e infine la rottura del solido stesso.

In ciascun caso sono state analizzate le distribuzioni degli sforzi prima e dopo la fratturazione e le modifiche di porosità e permeabilità del mezzo poroso. Per prevedere l'inizio della frattura, è stato applicato un criterio di rottura basato sullo studio della *Probability density function* (PDF) e della *Cumulative density function* (CDF) degli stress, criterio che ha fornito dei buoni risultati, confermando quanto atteso, ovvero che la resistenza a frattura diminuisce con la rottura del mezzo poroso e che un valore più basso di  $G_0$  implica che il materiale tende a rompersi più facilmente. Per quanto riguarda le distribuzioni degli stress è stato utilizzato il criterio di sollecitazione massima principale. L'analisi ha fornito dei buoni risultati anche per quanto riguarda gli andamenti di porosità e permeabilità, confermando la solidità dei criteri utilizzati.

Per possibili lavori futuri al fine di ottenere un miglioramento della simulazione DNS della frattura del mezzo poroso, potrebbe includere l'inserimento di un modello per considerare l'effetto del sottile strato di fluido che si forma nelle aree interstiziali causate dalle fessure non risolte nella griglia di calcolo. Attualmente, il modello rileva solo le regioni interstiziali sottili che superano tre celle della griglia euleriana.

Un altro miglioramento potrebbe riguardare l'implementazione di un modello di turbolenza, come quello di Smagorinsky, nell'ambito delle Large Eddy Simulations (LES). Questo permetterebbe di simulare situazioni in cui il numero di Reynolds è più alto, scenario in cui l'uso delle simulazioni DNS non sarebbe pratico a causa dell'elevato costo computazionale e del lungo tempo richiesto per le simulazioni stesse.

# Bibliografia

- [1] Liu, Minghao & Wang, Qing & Lu, Wei. "Peridynamic simulation of brittle-ice crushed by a vertical structure". In *"International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering"* 9, 2016. DOI: 10.1016/j.ijnaoe.2016.10.003.
- [2] Tong, Yue & Shen, Wanqing & Shao, Jianfu & Chen, Jueliang. "A new bond model in peridynamics theory for progressive failure in cohesive brittle materials". In *"Engineering Fracture Mechanics"* 223. 106767, 2019. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2019.106767.
- [3] Yangyang Qiao and Steinar Evje. "A general cell-fluid Navier-Stokes model with inclusion of chemotaxis". In *"Mathematical Models and Methods in Applied Sciences"* 30 (Feb. 2020). DOI: 10.1142/S0218202520400096
- [4] Wim-Paul Breugem. "A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows". In: *"Journal of Computational Physics"* 231.13 (2012), pp. 4469–4498.
- [5] Cai, Yunan & Lu, Jianhua & Li, Sheng. "Direct simulation of acoustic scattering problems involving fluid-structure interaction using an efficient immersed boundary-lattice Boltzmann method". In *"The Journal of the Acoustical Society of America"* 144. 2256-2268, 2018. DOI: 10.1121/1.5063349.
- [6] Bao-Lian Su, Clement Sanchez, and Xiao-Yu Yang. "Insights into hierarchically structured porous materials: from nanoscience to catalysis, separation, optics, energy, and life science". In: *Hierarchically Structured Porous Materials* (2012), pp. 1–27.
- [7] Behzad Ghanbarian et al. "Tortuosity in porous media: a critical review". In *"Soil science society of America journal"*, 77.5 (2013), pp. 1461–1477.
- [8] Mayken Espinoza et al. "Analysis of porosity and tortuosity in a 2D selected region of solid oxide fuel cell cathode using the lattice Boltzmann method". In *"ECS Transactions"* 65.1 (2015), p. 59.
- [9] Erdogan Madenci and Erkan Oterkus. "Peridynamic theory". In: *Peridynamic theory and its applications*. Springer, 2013, pp. 19–43.
- [10] Stewart A Silling and Richard B Lehoucq. "Peridynamic theory of solid mechanics". In *"Advances in applied mechanics"* 44 (2010), pp. 73–168.

- [11] Stewart A Silling. "Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces". In *"Journal of the Mechanics and Physics of Solids"* 48.1 (2000), pp. 175–209.
- [12] Stewart A Silling and Ebrahim Askari. "A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics". In *"Computers & structures"* 83.17-18 (2005), pp. 1526–1535.
- [13] Nicolas Moës, John Dolbow, and Ted Belytschko. "A finite element method for crack growth without remeshing". In *"International journal for numerical methods in engineering"* 46.1 (1999), pp. 131–150.
- [14] Peter A Cundall. "A computer model for simulating progressive, large-scale movement in blocky rock system". In *"Proceedings of the international symposium on rock mechanics"*, Vol. 8. 1971, pp. 129–136.
- [15] Cyrill W Hirt, Anthony A Amsden, and JL Cook. "An arbitrary Lagrangian- Eulerian computing method for all flow speeds". In *"Journal of computational physics"* 14.3 (1974), pp. 227–253.
- [16] Rajat Mittal and Gianluca Iaccarino. "Immersed boundary methods". In *"Annu. Rev. Fluid Mech"*. 37 (2005), pp. 239–261.
- [17] Stewart A Silling and Richard B Lehoucq. "Convergence of peridynamics to classical elasticity theory". In *"Journal of Elasticity"*, 93 (2008), pp. 13– 37.
- [18] Piermario Campagnari. "Studio dell'interazione fluido-struttura con un metodo immersed boundary" accoppiato alla peridinamica". In: (2017).
- [19] Michael Thomadakis and Michael Leschziner. "A pressure-correction method for the solution of incompressible viscous flows on unstructured grids". In *"International journal for numerical methods in fluids"* 22.7 (1996), pp. 581– 601
- [20] John L Lumley and Akiva M Yaglom. "A century of turbulence". In *"Flow, turbulence and combustion"*, 66 (2001), pp. 241–286.
- [21] Alexandre M Roma, Charles S Peskin, and Marsha J Berger. "An adaptive version of the immersed boundary method". In *"Journal of computational physics"*, 153.2 (1999), pp. 509–534.
- [22] Wim-Paul Breugem. "A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows". In *"Journal of Computational Physics"*, 231.13 (2012), pp. 4469–4498.

- [23] Shizhao Wang, Marcos Vanella, and Elias Balaras. “A hydrodynamic stress model for simulating turbulence/particle interactions with immersed boundary methods”. In: *Journal of Computational Physics* 382 (2019), pp. 240–263.
- [24] Federico Dalla Barba. A novel numerical method for fluid-structure interaction problems. 2021.

