



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA INDUSTRIALE DII

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN INGEGNERIA AEROSPAZIALE

Simulazioni alle grandi scale del trasporto di uno scalare passivo in flussi turbolenti di canale

TOFFANIN TOMMASO 2021384

Relatore:

Prof. Federico Dalla Barba

Correlatore:

Prof. Francesco Picano

Anno accademico 2022-2023

Ai miei nonni Elio, Nedda, Franca e Roberto

Indice

1	Introduzione	4
2	Metodologia	7
2.1	LES, DNS e RANS	7
2.2	Modelli per le Large Eddy Simulations	14
2.2.1	Modello filtrato di Smagorinsky	14
2.2.2	Modello WALE	15
2.3	Descrizione qualitativa del fenomeno	17
3	Modello e metodo numerico	21
3.1	Equazioni di Navier-Stokes	21
3.2	Equazioni di Navier-Stokes adimensionalizzate	24
3.3	Metodo risolutivo	26
3.3.1	Algoritmo di pressure-correction	28
3.3.2	Algoritmo risolutivo per la DNS	29
3.3.3	Algoritmo risolutivo per la LES	30
4	Simulazione	32
5	Risultati	35
5.1	Grandezza scalare	35
5.2	Velocità	38
5.3	Viscosità turbolenta	43
5.4	Validazione dei risultati	44
6	Conclusioni	47

Sommario

Il trasporto di uno scalare passivo ad opera di un flusso turbolento risulta di notevole importanza in molti ambiti delle scienze e dell'ingegneria. Un tipico esempio riguarda il trasporto di inquinanti ad opera del vento o, più in generale, delle correnti d'aria. In questo contesto, la presente tesi riguarda la simulazione alle grandi scale, *Large Eddy Simulation (LES)*, del trasporto di una grandezza scalare passiva in un flusso turbolento di canale. Le equazioni che governano il trasporto della grandezza scalare sono state implementate nel software open-source *CaNS*. Come modello di turbolenza per le scale non risolte è stato impiegato un modello Wall-Adapting Local Eddy-viscosity (*WALE*). L'algoritmo risolutivo per la *LES* è basato sulle equazioni di *Navier – Stokes* incomprimibili. Si è fatto inoltre uso del numero di *Schmidt* turbolento per calcolare la viscosità turbolenta. È stata infine eseguita una simulazione numerica diretta, *Direct Numerical Simulation (DNS)*, sempre basata sulle equazioni di *Navier – Stokes* a densità costante. Tutte le simulazioni considerate riproducono un canale periodico in direzione x e y , mentre, per quanto riguarda la direzione verticale, esso presenta due pareti a temperatura diversa, quella inferiore più fredda rispetto a quella superiore. La simulazione è stata eseguita in parallelo grazie a *OpenMPI*, utilizzando un approccio *many – CPUs*. Tramite la *LES* sono stati ricavati i risultati relativi al trasporto della grandezza scalare, alla velocità nelle tre componenti e alla viscosità turbolenta. I risultati della *LES* sono stati comparati con quelli della *DNS* e successivamente sono stati confrontati con i dati di riferimento, relativi allo studio effettuato da *Wang e Pletcher* nel 1996 al fine di validare l'implementazione delle equazioni.

1 Introduzione

L'argomento che verrà studiato ed analizzato in questa tesi è di alta rilevanza per la fluidodinamica computazionale. In particolare, le simulazioni alle grandi scale (*Large Eddy Simulation*) sono molto diffuse in applicazioni riguardo problematiche attuali, una delle principali è il trasporto dell'inquinamento nell'aria.

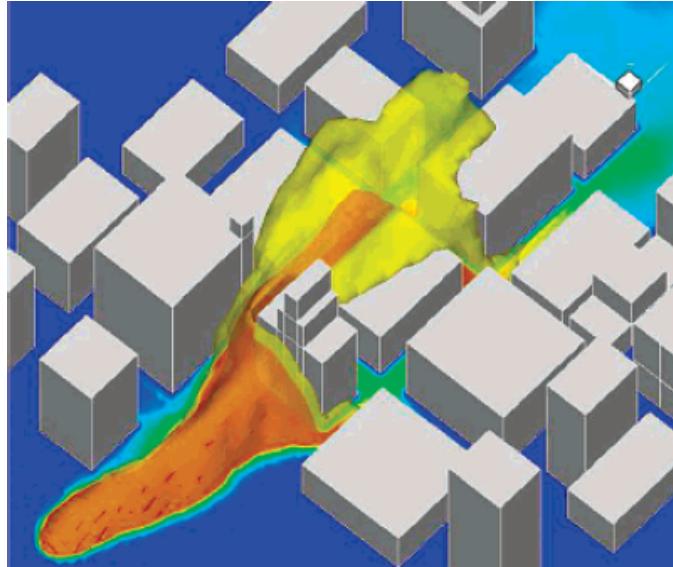


Figura 1: Isolivello della concentrazione di inquinamento in una città [1]

Questo esempio è molto importante per questo argomento, poichè all'inquinamento sono legati diversi parametri, rappresentati da grandezze scalari, che vengono trasportati grazie al flusso di un fluido, in questo caso dell'aria, per diffondersi ad esempio all'interno di una città, grazie alle correnti o al vento. Questo fenomeno è dovuto alla presenza di particolato, che può essere prodotto dall'uomo o a causa di eventi naturali. Alcuni esempi includono polvere, cenere e spruzzi di acqua marina. Il particolato (compresa la fuliggine) è emesso durante la combustione di combustibili solidi e liquidi, in processi per la produzione di energia elettrica, per il riscaldamento domestico e nei motori dei veicoli. Il particolato varia di dimensione (cioè il diametro o la larghezza della particella). Il $PM_{2.5}$ è un parametro rilevante e si riferisce alla massa per metro cubo di aria delle particelle, con un diametro generalmente inferiore a 2,5 micrometri (μm). Il $PM_{2.5}$ è anche noto come *fine particular matter*. Quest'ultimo è significativo tra gli indici di inquinamento perché è di grande preoccupazione per la salute delle persone, quando il suo livello nell'aria è relativamente alto. Il parametro $PM_{2.5}$ si riferisce a particelle minuscole nell'aria, che riducono la visibilità e causano foschia e/o nebbia quando i livelli sono elevati. Sono stati applicati diversi modelli di *machine learning* per rilevare l'inquinamento atmosferico e stimare/prevedere i livelli di $PM_{2.5}$, sulla base di un set di dati, composto da condizioni atmosferiche giornaliere. Ad esempio, *Dan Wei*, in un suo studio, ha applicato la classificazione di *Naive Bayes* (classificatori probabilistici, basati sull'applicazione del teorema di *Bayes*) e una macchina a vettori di supporto, per ottenere l'errore minimo rispetto alla previsione della qualità dell'aria fatta per la città di *Pechino*. Inoltre, *Jose Juan Carbajal* aveva introdotto il *Fuzzy Interference System* (detto *FIS*, questa tecnica fa uso degli insiemi sfumati, che rientrano in un'estensione della teoria classica degli insiemi), per eseguire la classificazione dei parametri, utilizzando un processo logico e integrandoli in un indice di qualità dell'aria.

I sistemi che rilevano il livello di inquinamento di una particolare città selezionata dall'utente,

raggruppano la qualità dell'aria in diverse categorie come buona, soddisfacente, moderata, scarsa, molto scarsa e grave, in base all'*AQI* (indice di qualità dell'aria). I dati vengono visualizzati su base mensile, settimanale o giornaliera. Inoltre, una volta che viene svolta una previsione di valori, questi non cambiano rispetto alle variazioni improvvise delle condizioni dell'atmosfera o in base ad un aumento imprevisto della circolazione dei mezzi a motore termico. I valori sono calcolati per l'intera città e non possono essere verificati per l'accuratezza della previsione dei valori successivi [2].

Inoltre, la crescente preoccupazione tra le organizzazioni governative e di primo soccorso, riguardo al rilascio intenzionale di un materiale pericoloso all'interno di un'area popolata, spinge a volgere uno sguardo più da vicino alla dispersione dell'inquinamento all'interno degli ambienti urbani. Questi ambienti sono caratterizzati da geometrie complesse, modelli di flusso intricati e maggiore miscelazione della turbolenza (secondo le ricerche di *Fernando* e altri collaboratori). La proliferazione del calcolo ad alte prestazioni e i codici di fluidodinamica computazionale paralleli non strutturati consentono l'applicazione della *LES* a domini di geometria di crescente complessità, secondo il lavoro svolto da *Moin*. Tuttavia, i modelli di dispersione gaussiana di ordine ridotto sono ancora di notevole importanza per il loro diffuso utilizzo in contesti operativi, al fine di fornire previsioni rapide degli eventi di dispersione. Ad esempio, la *United States Environmental Protection Agency* fornisce l'accesso e le linee guida per un set ideale di modelli di dispersione sul suo sito web (dichiarazione della *United States Environmental Protection Agency* nel 2012). Una difficoltà che si riscontra con questi modelli è che le parametrizzazioni della rugosità su cui si basano, possono diventare imprecise, se si considera la dispersione a corto raggio all'interno di una *urban canopy*.

Vengono condotte sempre più spesso delle simulazioni di dispersione ad alta affidabilità per fornire un set di dati di convalidazione ancora più fitti di quelli disponibili dai dati di laboratorio. Inizialmente, queste simulazioni si sono concentrate esclusivamente sulla cattura del campo di flusso. *Coceal* e collaboratori (2006) hanno eseguito una *DNS* del flusso su una disposizione di pareti uniformi cubiche. I risultati sono stati confrontati accuratamente con i dati della galleria del vento trovati da *Cheng & Castro* (2002) e si distinguono per la loro capacità di risolvere i dettagli del flusso all'interno della disposizione. *Xie & Castro* (2006) hanno utilizzato i risultati della *DNS* dell'insieme di cubi uniformi da *Coceal* e collaboratori, per valutare la capacità della *LES* di catturare i dettagli del flusso ad un costo computazionale più basso. Il confronto con la *DNS* a numeri di *Reynolds* simili ha mostrato un'ottima congruenza. Inoltre, anche una *LES* eseguita a numeri di *Reynolds* più elevati ha generato statistiche accurate. *Xie & Castro* (2006) hanno concluso lo studio affermando che la natura spigolosa della schiera cubica conduce ad un flusso dominato da strutture turbolente su larga scala, che sono poco dipendenti dal numero di *Reynolds*. *Claus* e collaboratori (2012) hanno esteso le analisi precedenti utilizzando simulazioni numeriche per studiare l'effetto del cambio di direzione del vento sul flusso sull'insieme uniforme di cubi. Hanno scoperto che le proprietà globali come la resistenza superficiale potrebbero cambiare in modo sostanziale, da cui la direzione media del flusso all'interno dell'insieme delle pareti cubiche può essere indipendente dalla direzione del flusso in entrata.

Recentemente, le simulazioni sono andate oltre ai calcoli del campo di flusso, per includere la dispersione dello scalare. *Rossi, Philips & Iaccarino* (2010) hanno eseguito simulazioni ad alta risoluzione del trasporto da una singola parete cubica per aiutare la valutazione dei modelli per il flusso turbolento dello scalare. Inoltre, sono stati inclusi nella *DNS* di *Branford* e colleghi (2011) i rilasci di sorgenti puntiformi dall'interno di un *array* (insieme) cubico uniforme. Sono stati notati diversi effetti della geometria dell'insieme di cubi sul comportamento del *plume* (pennacchio, un elemento verticale di un fluido che si sposta attraverso un altro fluido), poiché l'angolo di flusso è

stato variato, inclusa la canalizzazione e inclinazione con l'altezza.

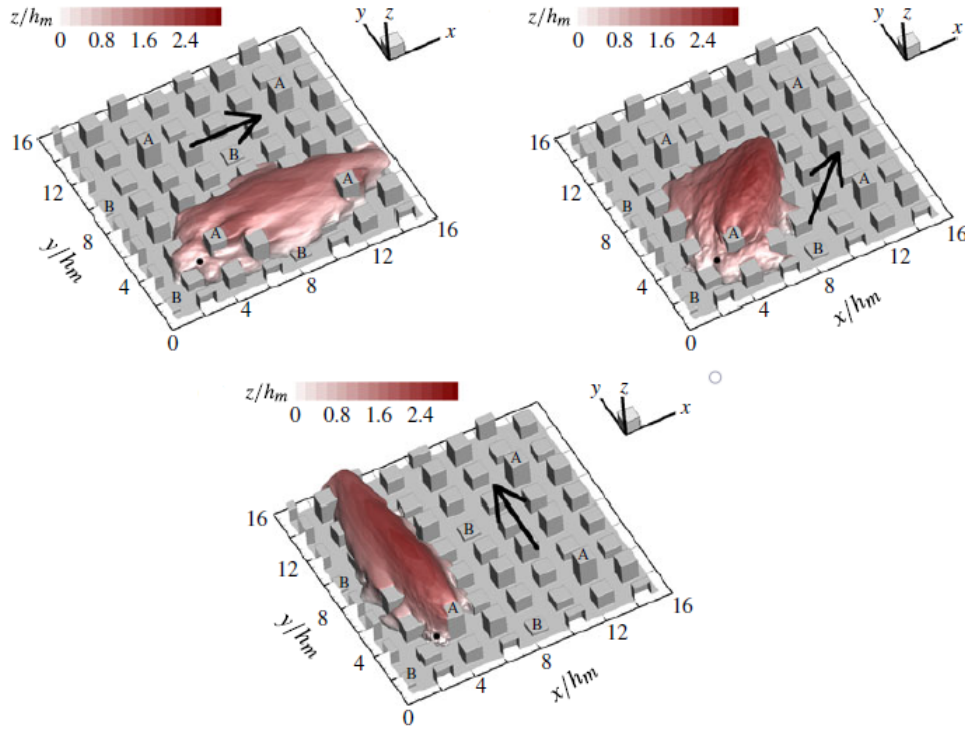


Figura 2: Isosuperficie della concentrazione dello scalare medio, per diverse direzioni di flusso su un insieme (*array*) di cubi [3]

La geometria attualmente presa in considerazione da *Cheng & Castro* (2002) aggiunge un ulteriore livello di complessità, variando l'altezza degli elementi cubici. *Xi, Coceal & Castro* (2008) hanno eseguito delle *LES* con questa geometria, per un singolo angolo di flusso, col fine di confrontarlo con quello del flusso sull'insieme uniforme di cubi. Essi hanno notato che gli ostacoli di altezza maggiore hanno contribuito in modo sproporzionato alla resistenza totale e all'energia cinetica turbolenta. Questa *LES* utilizza la geometria dell'insieme di cubi con altezza variata, con l'aggiunta di rilasci di grandezze scalari passive e localizzate, per fornire un contributo aggiuntivo allo studio discusso prima. In primo luogo, è stato osservato l'impatto della direzione media del flusso sulla struttura media del *plume* e viene studiato il comportamento della concentrazione al variare della distanza dalla sorgente. Successivamente, viene presentata una ricerca sulla posizione della fonte, che sfrutta la capacità di variare la geometria vicino alla sorgente [3].

Una volta riportati questi studi come esempi relativi all'argomento, è opportuno evidenziare l'obiettivo di questo lavoro. Risulta utile sottolineare nuovamente come il trasporto di uno scalare passivo sia di notevole rilevanza nei campi evidenziati in precedenza. In questa tesi ci si focalizzerà su una *Large Eddy Simulation* per il trasporto di uno scalare passivo, questo può essere rappresentato da una qualunque grandezza scalare, come la temperatura o un inquinante. Il trasporto dello scalare avverrà all'interno di un flusso, a densità costante, di canale turbolento, con parete superiore ed inferiore aventi condizioni al contorno differenti. Per fare ciò, verranno scelti dominio, modello per la simulazione e tutti i parametri necessari. Infine, i risultati verranno convalidati e confrontati tramite una *Direct Numerical Simulation* nonché dati di riferimento disponibili in letteratura.

2 Metodologia

2.1 LES, DNS e RANS

Quasi tutta l'ingegneria pratica e la stragrande maggioranza dei flussi che si verificano in natura sono turbolenti e quindi il centro della ricerca della fluidodinamica computazionale (*CFD*) è dedicata a flussi in cui la turbolenza gioca un ruolo dominante. La turbolenza è sempre un fenomeno tridimensionale e instabile, con una vasta gamma di moti di scala. Di conseguenza il problema principale con il calcolo numerico (oltre che con la misurazione) della turbolenza è l'enorme gamma di scale che devono essere risolte. Per una simulazione accurata, la dimensione del dominio computazionale deve essere tipicamente almeno un ordine di grandezza maggiore rispetto alle scale caratterizzanti l'energia della turbolenza, mentre la mesh computazionale deve essere abbastanza fine da risolvere la più piccola scala di lunghezza dinamicamente significativa (la scala di *Kolmogorov*). L'approccio più preciso per la simulazione dei flussi turbolenti è detto *Direct Numerical Simulation (DNS)* nel quale sono risolte numericamente le equazioni complete di *Navier – Stokes*, usando direttamente una griglia molto fine, con l'obiettivo di catturare tutte le scale che sono presenti in un dato flusso, dai vortici più piccoli a quelli più grandi. Pertanto la *DNS* dal punto di vista computazionale è molto dispendiosa e al momento può essere applicata solo a flussi con geometria semplice a basso numero di *Reynolds*.

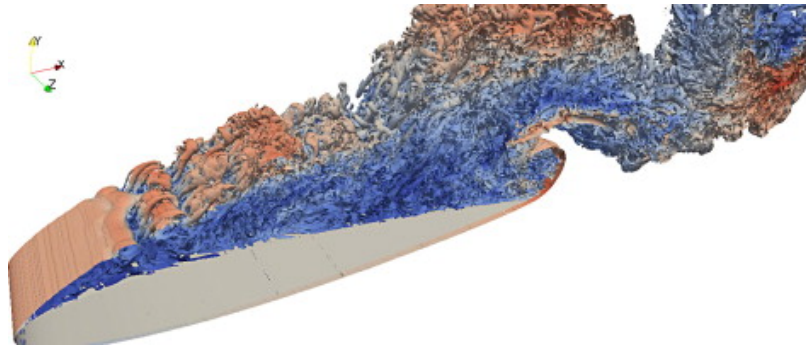


Figura 3: Esempio di una *DNS* di un profilo alare in condizioni di stallo [4]

In alcuni casi, l'interesse è principalmente rivolto al flusso di fluido stazionario e quindi non è necessario simulare nel dettaglio il flusso istantaneo, portando ad una grande riduzione del tempo computazionale. Queste sono le basi per l'approccio delle equazioni di *Navier – Stokes* mediate (*RANS*), in cui si risolve rispetto appunto alle quantità mediate, mentre l'effetto di tutte le scale del moto turbolento istantaneo è modellato da un modello di turbolenza. Questo approccio è stata la colonna portante dell'industria delle applicazioni della fluidodinamica computazionale negli ultimi decenni, grazie ai suoi modesti requisiti informatici. Tuttavia è necessaria la conoscenza del comportamento transitorio del flusso e l'approccio delle *RANS* non è quindi sufficiente e in molti casi non riesce a prevedere i comportamenti del flusso, come ad esempio la transizione.

Un approccio alternativo è chiamato *Large Eddy Simulation (LES)* e fu inizialmente proposto nel 1963 da Joseph Smagorinsky, per simulare le correnti d'aria atmosferiche, ed approfondito per la prima volta nel 1970 da Deardorff. La *LES* è attualmente impiegata in un'ampia varietà di applicazioni ingegneristiche, tra cui la combustione, l'acustica e le simulazioni dello strato limite atmosferico. La *LES* non adotta l'approccio temporale convenzionale delle *RANS* o della media di insieme con modellazione aggiuntiva delle equazioni di trasporto risolte, per ottenere i cosiddetti sforzi di Reynolds, che vengono ricavati dal processo di calcolo della media. Nelle *LES*, i moti su scala grande (per i grandi vortici) del flusso turbolento sono calcolati in maniera diretta e i moti

vengono modellati solo su piccola scala (*sub-grid scale (SGS)*), con conseguente riduzione significativa del costo computazionale, rispetto alla *DNS*. La *LES* è più accurata rispetto all'approccio *RANS*, poiché i grandi vortici contengono la maggior parte dell'energia turbolenta e sono responsabili della maggior parte del trasferimento della quantità di moto e della miscelazione turbolenta; le *LES* riescono a catturare questi vortici direttamente in pieno dettaglio, invece nell'approccio *RANS* sono modellati. Inoltre le scale più piccole tendono ad essere più isotropiche ed omogenee rispetto a quelle più grandi e quindi modellare i moti sulle *sub-grid scales* dovrebbe essere più facile che modellare tutte le scale all'interno di un singolo modello, come è fatto nell'approccio *RANS*.

Pertanto, per concludere, si può affermare che le *RANS* risolvono il campo di flusso mediato, la *DNS* risolve le equazioni di *Navier - Stokes* senza l'utilizzo di un modello di turbolenza, mentre la *LES* riduce il costo computazionale rispetto alla *DNS*, concentrando il suo focus sugli eventi di grande scala. Quindi la *LES* risulta essere un ottimo compromesso tra le tecniche di simulazione presentate fin'ora, come si può vedere dalla seguente figura.

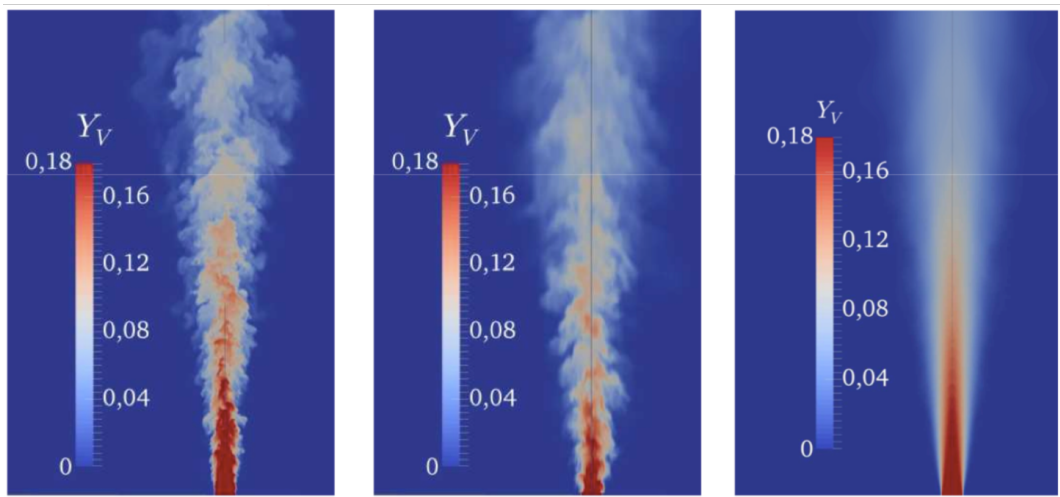


Figura 4: Confronto tra (da sinistra) *DNS*, *LES* e *RANS*

Negli ultimi vent'anni le *direct numerical simulations (DNS)* hanno modificato il modo in cui si studiano i flussi turbolenti. Fornendo nuovi strumenti per analizzare la struttura dei flussi turbolenti tridimensionali istantanei, le *DNS* hanno permesso progressi significativi sia nella comprensione che nella modellazione della turbolenza. Tuttavia, le *DNS* sono limitate a bassi numeri di *Reynolds*, in modo che le *large eddy simulations (LES)* siano preferite nelle applicazioni pratiche.

Infine, attualmente la *LES* è lo strumento numerico più praticabile e promettente per simulare in modo realistico i flussi turbolenti o di transizione.

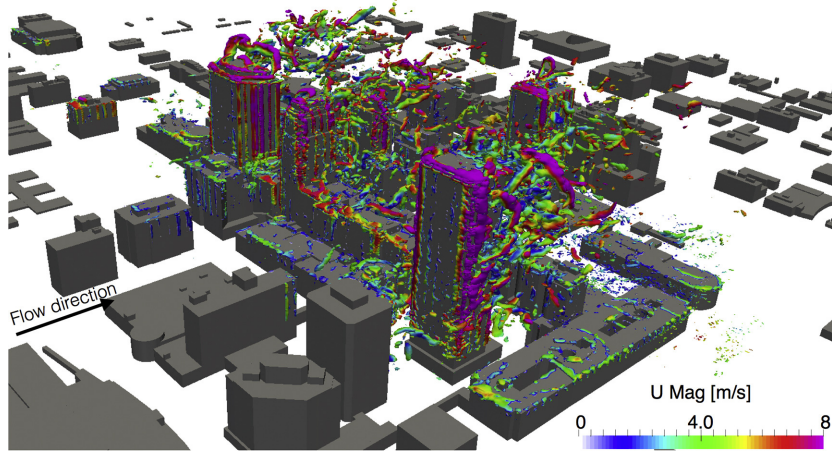


Figura 5: *LES* riguardante la diffusione dell'inquinamento in una città [5]

In pratica, l'idea principale alla base della *LES* è ridurre il costo computazionale ignorando le scale di lunghezza più piccole, che sono le più dispendiose da risolvere dal punto di vista computazionale, tramite l'utilizzo di un filtro passa-basso per le equazioni di *Navier – Stokes*. Tale filtraggio passa-basso, che può essere visto come una media temporale e spaziale, rimuove in maniera efficace le informazioni su piccola scala dalla soluzione numerica. Tuttavia queste informazioni non sono irrilevanti e il loro effetto sul campo di flusso deve essere modellato, compito che costituisce un'attiva area di ricerca per i problemi in cui le scale più piccole possono svolgere un ruolo importante, come i flussi vicino alla parete, flussi reagenti e flussi multifase [6].

Di seguito viene brevemente spiegato il concetto di filtraggio per le equazioni di *Navier – Stokes*. Si applica un filtro passa-basso ad una quantità generica ϕ , che è definita in questo modo:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mathbf{r}, \tau) G(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t - \tau) d\tau d\mathbf{r} \quad (1)$$

dove G è il filtro della matrice di convoluzione (*kernel*). Ad una matrice di convoluzione filtrata è associata una scala di lunghezza *cut – off* Δ e una scala temporale *cut – off* τ . Usando la definizione sopra, qualsiasi campo ϕ può essere scomposto in una parte filtrata e in una parte fluttuante:

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

Nelle *large eddy simulations* l'operazione di filtro può essere:

- **Implicita:** la griglia, o lo schema di discretizzazione numerico, è un filtro passa-basso implicito. Un'operazione di filtraggio implicita elimina il costo computazionale del calcolo di un termine del modello di scala del filtro secondario. Inoltre nel filtraggio implicito non è possibile determinare la forma del filtro.
- **Esplicita:** l'operatore di filtro viene direttamente applicato alle equazioni di *Navier–Stokes* discretizzate. Questo fornisce una forma ben definita del filtro. Inoltre richiede una griglia più fine rispetto al filtraggio implicito e il costo computazionale è maggiore.

Applicando un filtro passa-basso alle equazioni di *Navier – Stokes* incompressibili (ricavate det-

tagliatamente nel capitolo successivo), si ottiene (in notazione indiciale):

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4)$$

dove:

$$\tilde{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u(\mathbf{r}, \tau) G(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t - \tau) d\tau d\mathbf{r} \quad (5)$$

e

$$\tilde{p}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{r}, \tau) G(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t - \tau) d\tau d\mathbf{r} \quad (6)$$

Il secondo termine non lineare nel membro di sinistra può essere scomposto e l'equazione del momento può essere riformulata come:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial \tau_{i,j}^R}{\partial x_j} \quad (7)$$

dove l'ultimo termine rappresenta il tensore di scala della griglia secondaria:

$$\tau_{i,j}^R = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \widetilde{u_i u_j} \quad (8)$$

In analogia con gli stress turbolenti di *Reynolds* nelle *RANS*, il tensore degli stress della griglia secondaria rappresenta l'effetto delle strutture non risolte del flusso su quelle filtrate (risolte).

Le equazioni di *Navier – Stokes* mediate tramite la decomposizione di *Reynolds*, dette equazioni *RANS* (*Reynolds Averaged Navier – Stokes*), sono equazioni del moto mediate nel tempo per un flusso di fluido. L'idea che sta alla base di queste equazioni è la decomposizione di *Reynolds*, per cui una quantità istantanea viene scomposta nelle sue quantità mediate nel tempo e fluttuante, un'idea proposta per la prima volta da Osborne Reynolds. Le equazioni *RANS* sono utilizzate principalmente per descrivere flussi turbolenti. Queste possono essere utilizzate con approssimazioni basate sulla conoscenza delle proprietà della turbolenza del flusso, per fornire soluzioni approssimative mediate nel tempo alle equazioni di *Navier – Stokes*. La decomposizione di *Reynolds* è così definita:

$$u(x, t) = U(x, t) + u'(x, t) \quad (9)$$

Si considerino ora le equazioni di *Navier – Stokes* di un flusso stazionario di un fluido newtoniano incomprimibile:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2w e_{ij}) \quad (11)$$

Dove $w = 1/\eta = \rho/\mu$, che è l'inverso della viscosità cinematica.

Applicando la decomposizione di *Reynolds*, si ottengono le equazioni *RANS*.

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(U_i U_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2we_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\langle u'_i u'_j \rangle) \quad (13)$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (14)$$

Dove il termine $\langle u'_i u'_j \rangle$ rappresenta il tensore degli sforzi di *Reynolds*, che è così definito:

$$\langle u'_i u'_j \rangle = \langle u'_j u'_i \rangle = \begin{bmatrix} \langle u'^2 \rangle & \langle u'v' \rangle & \langle u'w' \rangle \\ \langle u'v' \rangle & \langle v'^2 \rangle & \langle v'w' \rangle \\ \langle u'w' \rangle & \langle v'w' \rangle & \langle w'^2 \rangle \end{bmatrix} \quad (15)$$

Il concetto di tensore degli sforzi di *Reynolds* verrà spiegato un po' più dettagliatamente in seguito.

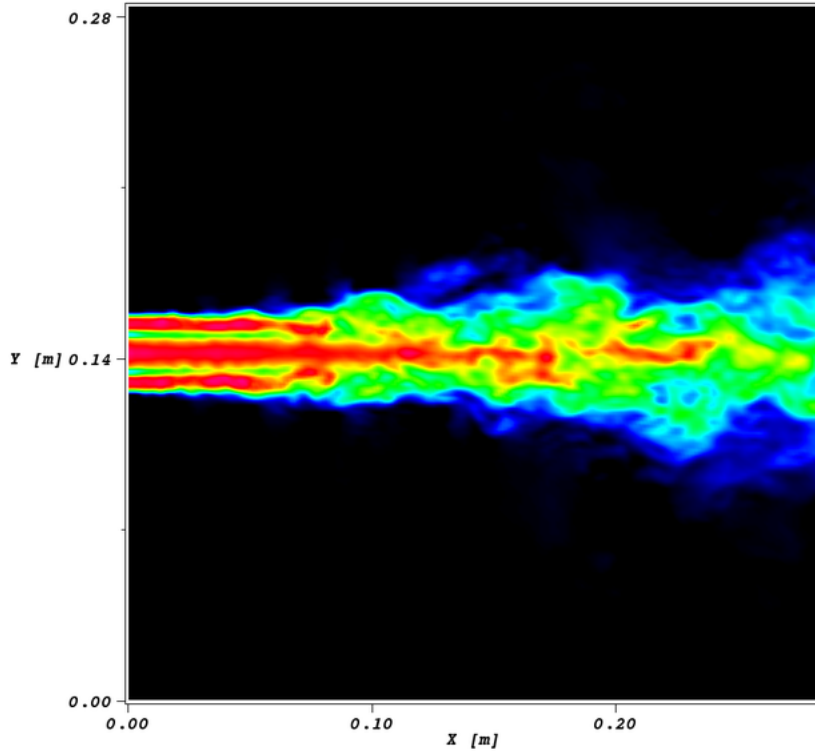


Figura 6: *Large eddy simulation* di un campo di velocità di un flusso turbolento

Nell'approccio delle *LES*, le scale inferiori alla dimensione della griglia non vengono risolte ma sono tenute conto attraverso il tensore di scala della griglia secondaria T_{ij} , dato da

$$T_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j} \quad (16)$$

dove la linea denota un filtro passa-basso opportunamente scelto, con l'ipotesi di incomprimibilità, come è stato fatto nella pagina precedente. La maggior parte dei modelli in scala di sottogriglia si basano su un'ipotesi di viscosità turbolenta per modellare il tensore di scala della griglia secondaria:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} T_{kk} \delta_{ij} = 2\nu_t \bar{S}_{ij} \quad (17)$$

dove

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (18)$$

è il tensore di deformazione del campo risolto. Nel modello di *Smagorinsky*, la viscosità turbolenta è assunta proporzionale alla scala di lunghezza caratteristica della sottogriglia e ad una caratteristica velocità turbolenta presa come velocità di deformazione locale $|\bar{S}|$:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|, \quad |\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad (19)$$

La costante C_s può essere ottenuta assumendo che il numero d'onda di *cut-off* $k_c = \pi/\Delta$ si trovi all'interno di una cascata di energia di Kolmogorov $k^{-5/3}$ per lo spettro di energia $E(k) = C_k \epsilon^2 k^{-5/3}$ e richiedendo che la dissipazione della sottogriglia media dell'insieme sia identica a ϵ . Un valore approssimativo per la costante può essere quindi:

$$C_s = \frac{1}{\pi} \left(\frac{3C_k}{2} \right)^{-3/4} \quad (20)$$

Per una costante di Kolmogorov di $C_k \simeq 1.4$, produce $C_s \simeq 0.18$.

Si noti che la scelta della velocità di deformazione locale per definire la scala di velocità corrispondente al *cut-off* è abbastanza arbitraria. Se si considera che il tensore del gradiente di velocità è un buon candidato per descrivere le fluttuazioni turbolente, potrebbero essere usati altri invarianti basati su questo tensore per definire la scala di velocità necessaria per la viscosità turbolenta ν_t . Lo scopo di quest'ultima quantità è quello di imitare il trasferimento di energia dalle scale risolte a quelle della sottogriglia, attraverso la dissipazione della sottogriglia (che è proporzionale a ν_t). Quindi definendo la viscosità turbolenta dalla velocità di deformazione locale, si mette in relazione la dissipazione della sottogriglia con la velocità di deformazione delle scale di moto risolte più piccole. Questa scelta non è in accordo con i risultati di *Wray* e *Hunt* sulle proprietà cinematiche e dinamiche delle strutture turbolente. Partendo dalle simulazioni numeriche dirette della turbolenza isotropa, questi autori hanno dimostrato che l'energia è concentrata nei flussi e viene dissipata nei vortici e nelle zone di convergenza. Chiaramente la formulazione classica di *Smagorinsky* non tiene conto del contributo delle prime, le quali sono regioni in cui la vorticità domina la tensione irrotazionale. D'altra parte la deformazione dominante nelle zone di convergenza è la tensione irrotazionale, così che la velocità di deformazione potrebbe essere una buona misura della loro attività dissipativa. Quindi un modello migliore di scala di sottogriglia dovrebbe basarsi sulla velocità di deformazione locale $|\bar{S}|$ e sulla velocità di rotazione. Questo requisito è soddisfatto dal modello di funzione della struttura che afferma:

$$\nu_t = \beta C_k^{-3/2} \Delta \sqrt{\bar{F}_2} \quad (21)$$

dove \bar{F}_2 è la funzione della struttura della velocità del secondo ordine del campo filtrato:

$$\bar{F}_2(\vec{x}, \Delta) = \left\langle \|\bar{\vec{u}}(\vec{x}, t) - \bar{\vec{u}}(\vec{x} + \vec{r}, t)\|^2 \right\rangle_{\|\vec{r}\|=\Delta} \quad (22)$$

e β è una costante che può essere fissata tramite considerazioni energetiche. Sono stati ottenuti risultati molto buoni con questo modello per la turbolenza omogenea isotropa. Sono state proposte altre formulazioni per valutare le tensioni della scala della griglia secondaria, in base ai tensori della deformazione locale e della velocità di rotazione e i loro prodotti.

Una seconda difficoltà per le *LES* è il comportamento della viscosità turbolenta in prossimità

della parete. Per costruzione, il modello di Smagorinsky fornisce un valore di ν_t diverso da zero non appena è presente un gradiente di velocità. Vicino alla parete, tuttavia, tutte le fluttuazioni turbolente sono smorzate in modo che ν_t sia zero. A tal fine, la funzione di smorzamento esponenziale di *Van Driest* $1 - e^{-y^+/A^+}$ con $A^+ = 25$, è stata ampiamente utilizzata nei primi studi sulle *large eddy simulations*. Questa modifica di base migliora notevolmente i risultati ed è molto facile da implementare per geometrie semplici. Tuttavia, si tratta di una modifica *ad hoc* basata sulla distanza dalla parete. Questa è difficile da implementare nel caso generale di geometrie complesse. Richiede anche l'uso di un valore inferiore per la costante di Smagorinsky ($C_s = 0.1$), per sostenere la turbolenza per un flusso in un canale. Si noti inoltre che a seconda della funzione di smorzamento utilizzata potrebbe non produrre il corretto ridimensionamento vicino alla parete per la viscosità del vortice. Il sopra citato smorzamento di *Van Driest* produce $\nu_t = O(y^2)$ invece di $O(y^3)$. Nemmeno la struttura classica del modello di funzione è adatto per flussi incanalati. Infatti, la funzione \overline{F}_2 è di ordine $O(1)$ vicino alla parete, se calcolato come media statistica locale delle differenze di velocità quadrate tra la posizione corrente e i sei punti circostanti più vicini sulla griglia computazionale (strutturata). Un possibile rimedio a ciò è calcolare \overline{F}_2 utilizzando solo i quattro punti più vicini paralleli ad un dato piano. Se il piano è parallelo alla parete, \overline{F}_2 è di ordine $O(y)$ e in uno strato limite si ottengono risultati migliori. Un altro modo per non produrre viscosità turbolenta in prossimità della parete è modificare la costante del modello (C_s per il modello Smagorinsky) in modo tale da far rispettare $C_s \simeq 0$ quando l'attività turbolenta è ridotta. Questo viene fatto dinamicamente dalla procedura proposta da *Germano*, in cui la variabile $C = C_s^2$ appare in cinque equazioni indipendenti. Il più delle volte, questa indeterminatezza viene affrontata scegliendo il valore di C (in funzione di spazio e tempo) che soddisfa al meglio il sistema sovradeterminato che deriva dall'identità di *Germano*. Tuttavia, questa procedura porta spesso ad una frazione significativa di valori negativi per C , quindi può generare instabilità numeriche. Un rimedio comune prevede di calcolare la media spaziale di C , ma questa procedura è ristretta a geometrie semplici poiché è richiesta la direzione di omogeneità del flusso (come in un flusso in un canale).

Una terza difficoltà nelle *LES* di oggi è la necessità di gestire geometrie complesse senza una direzione di omogeneità del flusso e/o con metodi numerici non strutturati. Il modello di Smagorinsky è adattato abbastanza bene a queste configurazioni, poiché sono coinvolti solo i gradienti locali nel calcolo della viscosità turbolenta. Una versione lagrangiana della sua forma dinamica è stata proposta da *Meneveau* per consentire il calcolo di configurazioni complesse senza direzione di omogeneità del flusso. Sono stati ottenuti ottimi risultati con questa formulazione, che richiede la risoluzione di altre due equazioni di trasporto. I modelli di localizzazione dinamica (forzati o con un'equazione di trasporto per l'energia cinetica) proposto da *Ghosal*, sono applicabili in linea di principio a flussi non omogenei generali e non richiedono una media spaziale. Eppure, la procedura dinamica si basa sul trasferimento di energia tra il campo risolto e il campo con il filtro passa-basso. In pratica, la larghezza del filtro è Δ per il primo campo e $\gamma\Delta$ per il secondo (è spesso usato $\gamma \simeq 2$). Nelle geometrie semplici, le operazioni di filtraggio possono essere eseguite in modo molto preciso nello spazio di *Fourier*, ma definire di un filtro di prova con larghezza 2Δ può rivelarsi un problema nelle geometrie complesse.

Tutti i modelli discussi sopra possono essere scritti nella forma generica:

$$\nu_t = C_m \Delta^2 \overline{OP}(\vec{x}, t) \quad (23)$$

dove C_m è la costante del modello, Δ è la scala di lunghezza caratteristica della griglia secondaria (in pratica la dimensione della mesh) e OP è un operatore di spazio e tempo, omogeneo ad una

frequenza e definito dai campi risolti. Si definisce quindi un nuovo operatore \overline{OP} con le quattro seguenti proprietà principali:

- invariante a qualsiasi traslazione o rotazione delle coordinate;
- è facilmente valutato su qualsiasi tipo di griglia computazionale;
- è una funzione sia della deformazione che della velocità di rotazione, in accordo con le scoperte recenti sul contributo delle strutture turbolente alla dissipazione globale;
- va naturalmente a zero in prossimità della parete, in modo che né la funzione di smorzamento né la procedura dinamica siano necessarie per riprodurre l'effetto della condizione *no-slip* (antiscivolo).

Il risultante modello *WALE* (*Wall – Adapting Local Eddy – viscosity*) è basato su un tensore invariante e riproduce la scala corretta da usare in prossimità della parete ($\nu_t = O(y^3)$). È anche adatto per le *LES* in geometrie complesse con metodi strutturati o non strutturati, perché non è necessario nessun filtraggio esplicito e sono necessarie solo le informazioni locali per costruire la viscosità del vortice. Infine, il modello è sensibile sia alla deformazione che alla velocità di rotazione delle piccole strutture turbolente. Sebbene la procedura dinamica potrebbe essere applicata anche al modello *WALE*, C_m è qui considerata come una vera costante, valutata dal caso canonico di turbolenza omogenea isotropa.

2.2 Modelli per le Large Eddy Simulations

2.2.1 Modello filtrato di Smagorinsky

Per chiarezza, il modello filtrato di Smagorinsky è brevemente presentato nella seguente sottosezione. Questo è un modello di Smagorinsky definito su campi di velocità con filtro passa-alto, che segue i lavori precedenti riguardanti il modello funzionale della struttura filtrata:

$$\nu_t = (C_2 \Delta)^2 \sqrt{2HP(\overline{S}_{ij})HP(\overline{S}_{ij})} \quad (24)$$

dove $HP(\overline{S}_{ij})$ sta per la velocità di deformazione risolta definita sui campi di velocità con filtro passa-alto.

Qui i campi di velocità filtrati con filtro passa-alto sono ottenuti utilizzando una stima delle derivate del quarto ordine di variabili conservate. La funzione di trasferimento del filtro passa-alto viene valutata numericamente, che fornisce:

$$\frac{E_{HP}(k)}{E(k)} = a \left(\frac{k}{k_c} \right)^b \quad (25)$$

dove $E_{HP}(k)$ sta per lo spettro dell'energia del campo filtrato con $a \approx 0.35$ e $b \approx 6.66$ sono due costanti determinate numericamente. La costante C_2 viene quindi determinata utilizzando lo stesso metodo di C_s , cioè prescrivendo:

$$\epsilon = \langle 2\nu_t \overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij} \rangle \quad (26)$$

e supponendo

$$\langle 2HP(\overline{S}_{ij})HP(\overline{S}_{ij}) \rangle = 2 \int_0^{k_c} k^2 E_{HP}(k) dk \quad (27)$$

che dà

$$C_2 = \left(\frac{2}{3} C_k^{-3/2} \sqrt{\frac{3b+4}{6a}} \frac{1}{\pi^2} \right)^{1/2} \approx 0.37 \quad (28)$$

Il modello filtrato di Smagorinsky è stato utilizzato per calcolare un flusso turbolento in un tubo con una mesh ibrida e i risultati si sono dimostrati coerenti sia con i precedenti valori numerici che con studi sperimentali.

2.2.2 Modello WALE

Nelle *LES*, la viscosità turbolenta ν_t non deve variare al cambiare del sistema di riferimento, quindi l'operatore \overline{OP} deve essere basato sugli invarianti di un tensore $\overline{\tau}_{i,\dots,j}$ che dovrebbe essere rappresentativo dell'attività turbolenta. Chiaramente, il tensore del gradiente di velocità $g_{ij} = \partial\overline{u}_i/\partial x_j$ è un buon candidato per rappresentare le fluttuazioni di velocità sulla scala di lunghezza Δ . Il modello di Smagorinsky si basa sul secondo invariante della parte simmetrica \overline{S}_{ij} di questo tensore. Ricordiamo i due principali svantaggi sono associati a questa scelta:

- questo invariante è correlato solo alla velocità di deformazione della struttura turbolenta ma non alla loro velocità di rotazione;
- questo invariante è di ordine $O(1)$ in prossimità di una parete.

Consideriamo prima il secondo punto. Se una lastra piana è posta a $y = 0$, la parte risolta del campo di velocità può essere sviluppato, nel limite $y \simeq 0$ e $y > 0$, come segue:

$$\begin{aligned}\overline{u} &= u_1 y + u_2 y^2 + O(y^3) \\ \overline{v} &= v_2 y^2 + O(y^3) \\ \overline{w} &= w_1 y + w_2 y^2 + O(y^3)\end{aligned}\tag{29}$$

dove u_1 , u_2 , v_2 , w_1 e w_2 sono funzioni dello spazio (x, z) e del tempo, mentre v_1 è nulla, dalla condizione cinematica $\partial\overline{u}_i/\partial x_i = 0$, che vale per flussi incomprimibili. Ciò significa che il primo invariante del tensore del gradiente di velocità \overline{g} è zero così come il primo invariante della sua parte simmetrica ($\overline{g}_{ii} = \overline{S}_{ii}$). Inoltre, nel caso di flusso incomprimibile omogeneo, la media dell'insieme del secondo invariante di \overline{g}_{ij} è identicamente zero (poiché $\overline{g}_{ii} = 0$ e $\langle \overline{g}_{ij}\overline{g}_{ji} \rangle = 0$, dove $\langle \rangle$ indica l'insieme media). D'altra parte, la seconda invariante di \overline{S} è $-\frac{1}{2}\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ji}$, fortemente imparentato con l'operatore spaziale utilizzato nel modello di Smagorinsky $\overline{OP} = \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ji}}$. Nel limite $y \simeq 0$, è ovvio mostrare dalle relazioni (29) che questa quantità rimane finita (di ordine $O(1)$). E' possibile ottenere lo stesso tipo di risultati per la terza invariante di \overline{g}_{ij} e \overline{S}_{ij} . Così, si possono costruire tutti gli operatori da questi tensori, che portano al comportamento non fisico $\nu_t = O(1)$ a parete. Un modo semplice per costruire un operatore migliore è considerare la parte simmetrica senza traccia del quadrato del tensore del gradiente di velocità:

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2}(\overline{g}_{ij}^2 + \overline{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\overline{g}_{kk}^2\tag{30}$$

dove $\overline{g}_{ij}^2 = \overline{g}_{ik}\overline{S}_{kj}$ e δ_{ij} è il delta di Kronecker.

Si noti $\overline{\Omega}$, la parte antisimmetrica di \overline{g} :

$$\overline{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}\right)\tag{31}$$

Il tensore definito dalla relazione (30) può essere riscritto in termini di \overline{S} e $\overline{\Omega}$. Si ottiene:

$$S_{ij}^d = \overline{S}_{ik}\overline{S}_{kj} + \overline{\Omega}_{ik}\overline{\Omega}_{kj} - \frac{1}{3}\delta_{ij}[\overline{S}_{mn}\overline{S}_{mn} - \overline{\Omega}_{mn}\overline{\Omega}_{mn}]\tag{32}$$

Per costruzione, la traccia di S^d è nulla e il suo secondo invariante rimane finito e proporzionale a $S_{ij}^d S_{ij}^d$. Usando la relazione (32) e facendo uso del teorema di *Cayley – Hamilton* dell'algebra lineare, questa quantità può essere sviluppata come (assumendo incomprimibilità):

$$S_{ij}^d S_{ij}^d = \frac{1}{6}(S^2 S^2 + \Omega^2 \Omega^2) + \frac{2}{3} S^2 \Omega^2 + 2IV_{S\Omega} \quad (33)$$

con le notazioni:

$$S^2 = \overline{S_{ij} S_{ij}}, \quad \Omega^2 = \overline{\Omega_{ij} \Omega_{ij}}, \quad IV_{S\Omega} = \overline{S_{ik} S_{kj} \Omega^2} = \overline{\Omega_{ji} \Omega_{li}} \quad (34)$$

Da quest'ultima relazione, un modello *LES* basato su $S_{ij}^d S_{ij}^d$ rileverà le strutture di turbolenza o con (grande) velocità di deformazione, velocità di rotazione o entrambe. Nel caso di taglio puro (per esempio $\overline{g_{ij}} = 0$ eccetto $\overline{g_{12}}$), si ottiene $S^2 = \Omega^2 = 4\overline{S_{12}}$ e $IV_{S\Omega} = \frac{1}{2} S^2 S^2$, in modo che l'invariante considerato sia zero. Questo punto è in accordo con il fatto che le zone di taglio contribuiscono alla dissipazione di energia in misura minore rispetto alle zone di convergenza e ai vortici. Inoltre questo significa che quasi nessuna viscosità turbolenta sarebbe prodotta nel caso di un flusso laminare delimitato da pareti (flusso di *Poiseuille*). Quindi la quantità di diffusione turbolenta sarebbe trascurabile in tal caso e sarebbe possibile lo sviluppo di onde linearmente instabili. Questo è un grande vantaggio rispetto al modello di Smagorinsky che non è in grado di riprodurre la transizione di tale flusso dal regime laminare a quello turbolento, perché l'invariante $\overline{S_{ij} S_{ij}}$ è grande nel caso di taglio puro. Si è dimostrato che il modello *WALE* basato sull'invariante $S_{ij}^d S_{ij}^d$ può gestire il flusso del tubo di transizione.

Nel limite $y \simeq 0$, si può dimostrare dalle relazioni (34) che $S_{ij}^d S_{ij}^d$ si comporta come y^2 . Quindi un modo semplice per costruire un operatore spaziale \overline{OP} che si comporti come y^3 in prossimità della parete significa assumere \overline{OP} proporzionale a $\overline{OP}_1 = (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}$. Poiché \overline{g} ha la dimensione di una frequenza, \overline{OP}_1 ha la dimensione di una frequenza alla sesta potenza e deve essere scalata prima di essere utilizzata nella formulazione del modello di scala della sottogriglia. Naturalmente, la scalatura deve essere di $O(1)$ vicino alla parete, per mantenere il comportamento a y^3 di tutto l'operatore. La prima scala possibile potrebbe essere $(\overline{S_{ij} S_{ij}})^{5/2}$ perché ha la dimensione di frequenza alla quinta potenza ed è di ordine $O(1)$ in prossimità di una parete. Tuttavia il rapporto $\overline{OP}_1 / (\overline{S_{ij} S_{ij}})^{5/2}$ non è ben condizionato numericamente, in quanto il denominatore può tendere a zero (localmente) mentre \overline{OP}_1 rimane finito. In realtà questo è il caso che si verifica all'interno dei vortici perché queste strutture turbolente non sono correttamente rilevate dall'operatore di Smagorinsky. Un modo per evitare una situazione del genere è ridimensionare \overline{OP}_1 con $\overline{OP}_2 = (\overline{S_{ij} S_{ij}})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}$. Il secondo termine in \overline{OP}_2 è trascurabile vicino ad una parete, ma evita instabilità numeriche perché \overline{OP}_2 non va a zero per il caso di puro taglio o per il caso di sforzo (ir)rotazionale. Infine, il modello *Wall – Adapting Local Eddy – viscosity* che è proposto per la viscosità dei vortici dice che:

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{\overline{OP}_1}{\overline{OP}_2} = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\overline{S_{ij} S_{ij}})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (35)$$

dove C_w è una (vera) costante. Un modo semplice per determinare questa costante è supporre che il nuovo modello fornisca la stessa dissipazione di energia cinetica della sottogriglia media

dell'insieme rispetto al modello classico di Smagorinsky. Si ottiene così:

$$C_w^2 = C_s^2 \frac{\left\langle \sqrt{2\overline{S_{ij}\overline{S_{ij}}}} \right\rangle^{3/2}}{\left\langle \overline{S_{ij}\overline{S_{ij}}\overline{OP_1}/\overline{OP_2}} \right\rangle} \quad (36)$$

C_w può essere valutato numericamente utilizzando diversi campi di turbolenza isotropica omogenea. I calcoli possono essere eseguiti con uno schema compatto del sesto ordine e con il modello classico di funzione struttura a numero di Reynolds molecolare infinito. Per esempio, un valore di C_w compreso nell'intervallo $0.55 \leq C_w \leq 0.60$ è appropriato per $C_s = 0.18$ [7].

2.3 Descrizione qualitativa del fenomeno

Il fulcro del presente lavoro è il trasporto dello scalare passivo. La grandezza scalare può rappresentare qualsiasi grandezza, un esempio potrebbe consistere nella frazione di massa del vapore. Lo scalare passivo può essere rappresentato dalla temperatura del fluido, come nel caso di questa tesi; in particolare, nel canale è presente un gradiente di temperatura, che si crea grazie alle pareti del canale stesso, aventi temperature molto diverse tra loro.

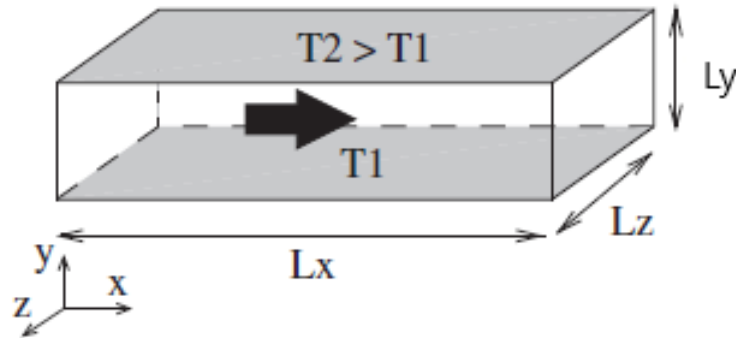


Figura 7: Esempio di dominio avente due pareti di diversa temperatura [8]

Il trasporto turbolento di uno scalare passivo (come piccole variazioni di temperatura, un tracciante singolo, colorante o fumo) è rilevante per molte applicazioni tecniche, ad esempio, per studiare la velocità di raffreddamento di un dispositivo tecnico in diverse condizioni operative. Le simulazioni numeriche correlate a studi di flusso sono rimaste un compito difficile a causa dei requisiti di risoluzione imposti dallo sviluppo di scale molto piccole nel flusso. Cioè, il campo scalare esibisce scale spaziali piccole quanto la scala di *Batchelor* $\eta_B = Sc^{-1/2} \eta_K$, che può essere molto più piccola della scala di *Kolmogorov* η_K quando il numero di *Schmidt* $Sc = \nu/\Gamma$ è molto più grande dell'unità (ν è la viscosità turbolenta e Γ è la diffusività scalare o molecolare, talvolta indicata anche con D). È fondamentale risolvere le dinamiche su piccola scala lungo tutto il flusso, per prevedere correttamente la distribuzione spazio-temporale dello scalare e, quindi, la velocità di trasferimento di massa scalare attraverso la parete. Il passato e recenti studi hanno studiato come il trasporto scalare turbolento dipende dal numero di *Schmidt* e *Reynolds*. Da questi studi si conclude che il trasporto scalare turbolento non è del tutto analogo al trasporto del momento turbolento, cosicché spesso non è consentita una “semplice parametrizzazione” del trasporto scalare.

Recenti studi numerici hanno utilizzato diversi metodi per studiare i fenomeni che regolano il trasporto scalare. I metodi comprendono strategie con risoluzioni multiple, approcci di risoluzione

ibrida o metodi lagrangiani. Tutti questi metodi sostanzialmente evitano una costosa sovrarisoluzione del campo di velocità calcolando solo lo scalare passivo su una griglia più fine. I metodi lagrangiani sfruttano in più il fatto che lo scalare passivo non abbia nessuna risposta sull'evoluzione del flusso, a causa del quale il campo di velocità è prescritto per l'evoluzione scalare. Questo disaccoppiamento dello scalare dall'evoluzione della quantità di moto non può essere utilizzato per il galleggiamento o per la reazione dei flussi, in modo che anche i metodi euleriani siano stati utilizzati per un'indagine del trasporto dello scalare passivo. Queste *DNS* o *LES* ad alta risoluzione sono attualmente fattibili solo per dati numeri di *Schmidt* $Sc \leq 1000$, in modo tale per cui il numero di *Reynolds* sia piuttosto piccolo. Negli esperimenti di laboratorio e nelle applicazioni, tuttavia, sia il numero di *Schmidt* che quello di *Reynolds* possono facilmente superare un valore dell'ordine di 10^4 [9].

Le simulazioni numeriche sono una metodologia utile per studiare questo problema. Negli ultimi anni sono state condotte simulazioni *RANS* (*Reynolds – Averaged – Navier – Stokes*), *LES* o *DNS* per studiare il trasporto turbolento di quantità di moto e scalari su superfici non lisce, con elementi di rugosità che riproducono strutture simili ad edifici o a *canyon* urbani. Dal momento che il costo computazionale della risoluzione dello strato viscoso (ad esempio nelle *DNS* o nelle *LES* svolte in prossimità di una parete) è troppo alto per applicazioni con numeri di *Reynolds* tipici alla realtà che ci circonda (limitando queste tecniche ai casi aventi numeri di *Reynolds* bassi, dove le stesse problematiche discusse sopra riemergono per le gallerie del vento), viene spesso adottata la modellazione della parete, per quanto riguarda le simulazioni *RANS* o simulazioni *LES wall – modeled*. Sono spesso adottati approcci relativi all'equilibrio, come la "law of the wall", che si basano sul concetto del comportamento universale della quantità di moto e degli scalari nell'*inertial sublayer*. Questi tipi di modelli di parete presentano alcuni noti accorgimenti nelle regioni di flusso complesse. L'applicazione di tali *wall – models* di equilibrio pongono ulteriori difficoltà nelle *LES* (rispetto alle *RANS*). Sono stati proposti altri *wall – models* più sofisticati, che in linea di principio dovrebbero offrire una *performance* migliore, come modelli che risolvono numericamente o analiticamente le equazioni dello strato limite, o ancora, modelli che utilizzano una "Customized temperature Wall Function" (*CWF*) (sebbene sia basata su risultati aventi bassi numeri di *Reynolds*). Tuttavia, la difficoltà della modellazione delle pareti nelle *large eddy simulations* rimane irrisolta, anche quando vengono ignorate l'influenza importante della galleggiabilità e il come rappresentarla correttamente nei modelli parietali (in particolare per le pareti verticali).

Gli studi di flusso turbolento e il trasporto su superfici con rugosità in una *LES wall – modeled* ad alto numero di *Reynolds* sono fattibile e molto interessanti, tuttavia c'è comunque un bisogno urgente e crescente nel valutare le abilità nel prendere in esame il trasporto turbolento dello scalare. La *performance* in prossimità della superficie è critica più per gli scalari che per la quantità di moto (di nuovo, a causa della predominanza della forma della resistenza, che è parzialmente risolta nelle *LES*, per la quantità di moto), e come tale è più prominente il ruolo del *wall – model*. Ma se le lacune degli attuali modelli di parete possono essere studiate, quantificate e potenzialmente superate, l'impatto sugli studi futuri che si concentrano sul trasporto dello scalare in un ambiente avente un alto numero di *Reynolds*, può essere importante. Vale la pena nuovamente sottolineare l'importanza di analizzare il problema del trasporto di calore/massa ad un numero di *Reynolds* rappresentativo del problema di reale interesse (che è possibile con una *LES wall – modeled*), dato che il trasporto dello scalare è intrinsecamente dipendente dal numero di *Reynolds* [10].

Sebbene le simulazioni alle grandi scale siano popolari nella comunità di ricerca, le *RANS* sono ancora il principale cavallo di battaglia del settore della fluidodinamica computazionale. Le simulazioni *Reynolds – averaged* di flussi complessi sono dominati dal semplice e potente modello

di chiusura *SGDH* (*standard gradient diffusion hypothesis*). Tuttavia, questo non può fornire previsioni realistiche di flussi scalari, anche per semplici flussi di taglio. Gli studi hanno rivelato che la diffusività turbolenta non è indipendente dall'orientazione del gradiente di temperatura medio. Nel caso della turbolenza di taglio omogenea, *Rogers* e collaboratori hanno mostrato che il numero turbolento di *Prandtl* è significativamente inferiore a 0.9, quando il gradiente di temperatura medio applicato è ortogonale al taglio medio. Da qui, la diffusività turbolenta dello scalare è grossolanamente errata in questi casi, mettendo così in discussione la rilevanza fisica dei modelli scalari della diffusività vorticoso. Tali considerazioni sostengono che la diffusività turbolenta sia rappresentata da un tensore. Nel corso degli anni sono stati proposti vari modelli con diffusività vorticoso tensoriale, tra cui, oltre al *SGDH*, il modello *GGDH* (*Generalized Gradient Diffusion Hypothesis*) [11].

Storicamente, le *LES* di flussi turbolenti e delimitati da pareti sono stati eseguiti per la prima volta in sistemi isotermitici e incomprimibili. Successivamente, sono stati studiati, tramite *LES*, i flussi di canale comprimibili (con numero di *Mach* diverso da zero); si veda, ad esempio, i lavori di *Hartel* e collaboratori (1994), *Lenormand* e collaboratori (2000), *Terracolo* e collaboratori (2000), *Okong'o* e collaboratori (2000) e *von Kaenel* e collaboratori (2002) e riferimenti in esso. Queste simulazioni richiedono l'uso di risolutori che si servono delle equazioni di *Navier – Stokes* completamente comprimibili.

Tuttavia, quando il numero di *Mach* si avvicina allo zero, le equazioni che lo governano diventano molto onerose e, quindi, i risolutori comprimibili diventano proibitivamente lenti. Alcune tecniche numeriche speciali, come il preconditionamento, possono rimuovere solo in parte le complessità numeriche derivate dalla complessità delle equazioni governanti. Un modo alternativo per la trattazione matematica dei flussi a basso numero di *Mach*, consiste nell'utilizzare la cosiddetta approssimazione a basso numero di *Mach* (*low Mach number approximation*), come riportano *Majda* e *Sethian* nei loro studi (1985). Tuttavia, fino a poco tempo fa, non era ancora stato sviluppato un algoritmo abbastanza robusto per queste equazioni, in modo da trattare flussi con gradienti di temperatura intensi. Di conseguenza, nella letteratura sono apparsi solo pochi studi di *LES* che riguardano flussi con un numero di *Mach* basso avente un trasferimento di calore. Si veda, per esempio, i lavori di *Wang* e *Pletcher* (1996), *Nicoud* (2000), *Vazquez* e *Metais* (2002), *Dalley* e collaboratori (2003) e *Xu* e collaboratori (2004).

In particolare, sono state presentate *large eddy simulations* di flussi incanalati con elevate velocità di trasferimento del calore a bassi numeri di *Mach* solamente negli studi di *Wang & Pletcher* (1996), di *Nicoud* (2000) e di *Dalley* e collaboratori (2003). Nel *paper* di *Wang & Pletcher*, gli autori hanno analizzato rapporti temperatura tra le due pareti del canale di 1.02 e 3, utilizzando un solutore totalmente comprimibile, combinato con preconditionamento (cioè l'applicazione di una trasformazione, chiamata preconditionatore, che condiziona un dato problema in una forma più adatta ai metodi di risoluzione numerica). Nell'analisi di *Nicoud* (2000), è stato adoperato un solutore incomprimibile a basso numero di *Mach*, per flussi aventi pareti con rapporti di temperatura fino a quattro. Infine, nello studio di *Dalley* e collaboratori (2003), gli autori hanno presentato i risultati di una *LES* per flussi in cui i flussi di calore di parete erano costanti, utilizzando un risolutore comprimibile.

Nel presente studio, verrà concentrata l'attenzione sui flussi di canale aventi elevati rapporti di temperatura parietale, in assenza degli effetti di compressibilità. Pertanto, l'effetto del numero di *Mach* sarà trascurato e non influenzerà le equazioni di bilancio di massa, bilancio della quantità di moto e bilancio dell'energia. In base a questa approssimazione, le variazioni di densità sarebbero dovute in caso solo a variazioni di temperatura e non a variazioni di pressione. Quindi, per un gas perfetto, la densità è inversamente proporzionale alla temperatura ed è indipendente dalla

pressione. Le *LES* per questi flussi possono essere eseguite tramite un risolutore di nuova generazione per equazioni numeriche a basso numero di *Mach*, come riportato nello studio di *Lessani* e *Papalexandris* (2006). Il risolutore da loro presentato è abbastanza robusto da trattare flussi di con rapporti di temperatura di parete fino a nove. Tali rapporti sono infatti molto superiori a quelli considerati fin'ora in letteratura.

Gli elevati gradienti di temperatura influenzano fortemente le proprietà termofisiche del fluido, come la densità, la viscosità dinamica e la conducibilità termica. Come conseguenza delle variazioni delle proprietà del fluido, è lecito affermare che il comportamento del flusso di canale non isoterma in prossimità della parete è molto diverso da quello isoterma. È dimostrato che le fluttuazioni di velocità e temperatura sono considerevolmente più deboli in corrispondenza della regione della parete più calda, rispetto che nella regione della parete più fredda. Ciò può essere attribuito all'aumento della viscosità dinamica con la temperatura.

Nella presente tesi, lo scalare passivo sarà rappresentato dalla temperatura. Saranno infatti presentati i risultati delle simulazioni alle grandi scale (*LES*) di flussi turbolenti di canale incomprimibili in presenza di un forte gradiente di temperatura [12].

3 Modello e metodo numerico

3.1 Equazioni di Navier-Stokes

Il punto di partenza per ricavare l'algoritmo che verrà risolto in questo studio sono le equazioni di *Navier – Stokes*. Queste sono un sistema di tre equazioni di bilancio della meccanica dei continui, che descrivono un flusso viscoso lineare; all'interno di esse sono introdotte come leggi costitutive del materiale la legge di *Stokes*, nel bilancio cinematico e la legge di *Fourier*, nel bilancio energetico. Il primo passo per ricavare le equazioni di *Navier – Stokes* è quello di considerare un bilancio di massa. Si consideri un sistema, rappresentato da un elemento finito di volume v_s e di massa m_s , nell'ipotesi di massa costante nel tempo, si può scrivere che

$$\frac{\partial}{\partial t} m_s = \frac{\partial}{\partial t} \int_{v_s(t)} \rho dv = 0 \quad (37)$$

l'integrale è esteso a tutto il volume. Applicando il teorema del trasporto di *Reynolds* si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v_s(t)} \rho dv = \frac{\partial}{\partial t} \int_{v_c} \rho dv + \int_{\partial v_c} \rho \mathbf{V} \cdot \hat{n} dS = 0 \quad (38)$$

e adoperando il teorema della divergenza:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v_s(t)} \rho dv = \int_{v_c} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{v_c} \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) dv = 0 \quad (39)$$

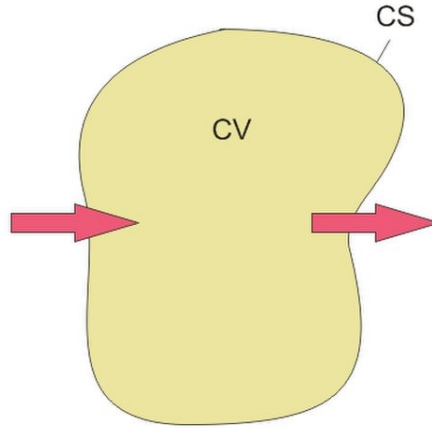


Figura 8: Esempio di volume e superficie di controllo

Questa relazione afferma che la variazione nel tempo della massa del sistema è uguale alla variazione nel tempo della massa del fluido contenuto nel volume di controllo (v_c) più il flusso totale di massa attraverso la superficie di controllo. Da questa, svolgendo i calcoli, si arriva alla seguente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (40)$$

che è la forma conservativa dell'equazione di bilancio della massa, detta anche equazione di continuità. ρ identifica la densità del fluido, mentre \mathbf{V} rappresenta il vettore velocità.

Successivamente si prosegue applicando il 2° principio della dinamica ad un sistema, sempre rap-

presentato dallo stesso elemento finito usato poco sopra. Questo principio afferma che la variazione nel tempo della quantità di moto in un sistema è pari alla somma delle forze esterne agenti su quel sistema. Si può scrivere pertanto:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{Q}_{SIS}) = \sum \mathbf{F}_{EXT} \quad (41)$$

Questa relazione vale sempre per i sistemi di riferimento inerziali. La quantità di moto del sistema di può riscrivere nella seguente maniera:

$$\mathbf{Q}_{SIS} = \int_{v_s(t)} \rho \mathbf{V} dv \quad (42)$$

mentre le forze esterne si possono suddividere in forze esterne agenti sul volume, dette forze di massa, e sulla superficie del sistema, dette forze di superficie

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{EXT} &= \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_s \\ \mathbf{F}_v &= \rho \mathbf{g} \\ \mathbf{F}_s &= \mathbf{t}_{(\hat{n})} \end{aligned} \quad (43)$$

dove \mathbf{g} è l'accelerazione di gravità, che non è altro che una forza per unità di massa, mentre $\mathbf{t}_{(\hat{n})}$ è la tensione, cioè una forza per unità di superficie che dipende dalla normale e dal punto di applicazione. Adoperando, come è stato fatto con l'equazione di continuità, il teorema del trasporto di *Reynolds*, si arriva alla seguente espressione

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v_c} \rho \mathbf{V} dv + \int_{\partial v_c} \rho \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \hat{n} dS = \int_{v_c} \rho \mathbf{g} dv + \int_{\partial v_c} \mathbf{t}_{(\hat{n})} dS \quad (44)$$

usando anche il teorema della divergenza si arriva a:

$$\int_{v_c} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) dv + \int_{v_c} \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) dv = \int_{v_c} \rho \mathbf{g} dv + \int_{\partial v_c} \mathbf{t}_{(\hat{n})} dS \quad (45)$$

Attraverso il teorema di *Cauchy* è possibile esprimere la tensione tramite il tensore delle tensioni

$$\mathbf{t}_{(\hat{n})} = \vec{\vec{T}} \cdot \hat{n} \quad (46)$$

dove $\vec{\vec{T}}$ è un tensore simmetrico, pari a

$$\vec{\vec{T}} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix} \quad (47)$$

dove 1,2,3 identificano le direzioni principali, che sono rappresentate da un sistema cartesiano. Le componenti sulla diagonale vengono dette tensioni normali e quelle fuori dalla diagonale tensioni tangenziali. Teoricamente le prime vengono indicate con il simbolo σ , mentre le seconde con τ ; tuttavia la scelta della notazione è riservata all'utente.

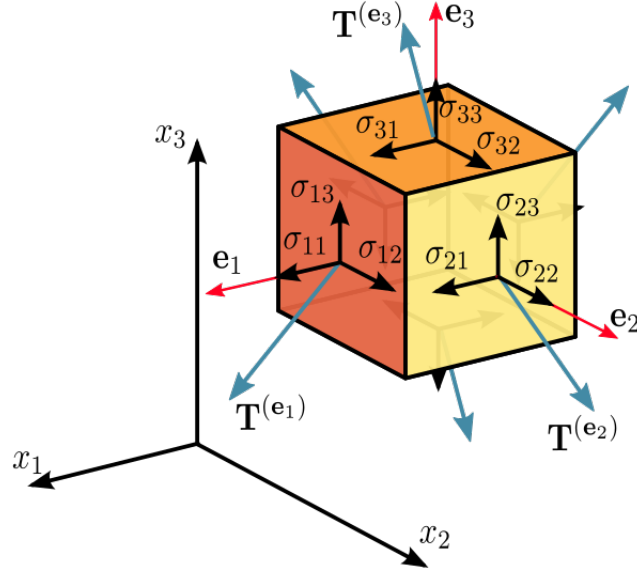


Figura 9: Componenti delle tensioni lungo le tre direzioni

Si può quindi scrivere il bilancio della quantità di moto in forma differenziale, ricavato dal 2° principio della dinamica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{V} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \vec{T} \quad (48)$$

Per proseguire, è necessario definire le leggi costitutive del materiale, in modo da esprimere il tensore delle tensioni in funzione delle sue velocità. Questo si può fare ipotizzando che il flusso in esame sia composto da un fluido newtoniano, ossia fluidi i quali sforzi viscosi sono proporzionali alle velocità delle deformazioni. La legge costitutiva è quindi la sottostante

$$\vec{T} = -p\vec{I} + 2\mu\vec{E} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{V})\vec{I} \quad (49)$$

Dove \vec{I} è la matrice identità, mentre \vec{E} è il tensore di deformazione, pari a

$$\vec{E} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \quad (50)$$

in forma indiciale

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{ii} & \varepsilon_{ij} & \varepsilon_{ik} \\ \varepsilon_{ji} & \varepsilon_{jj} & \varepsilon_{jk} \\ \varepsilon_{ki} & \varepsilon_{kj} & \varepsilon_{kk} \end{bmatrix} = E_{ji} \quad (51)$$

Inoltre, λ costituisce il coefficiente di viscosità, mentre μ identifica la viscosità dinamica. Tramite questi due parametri si esprime la legge o ipotesi di *Stokes*, che toglie la dipendenza della viscosità dalla posizione, valida per i fluidi newtoniani:

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (52)$$

quindi il tensore delle tensioni si può riformulare così (in forma indiciale):

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu E_{ij} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} = -p\delta_{ij} + \Sigma_{ij} \quad (53)$$

ove il tensore Σ_{ij} identifica gli sforzi viscosi. Andando a sostituire nell'espressione del bilancio

della quantità di moto si ha

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\mathbf{V} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) = \rho\mathbf{g} - \nabla \cdot (p\vec{I}) + \nabla \cdot \vec{\Sigma} \quad (54)$$

che diventa

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\mathbf{V} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) = \rho\mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \vec{\Sigma} \quad (55)$$

sviluppando il termine che identifica gli sforzi viscosi e raccogliendo la densità

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right] = \rho\mathbf{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{V}) \quad (56)$$

nella quale si è utilizzata l'identità $\nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V}$. In condizioni (idro-)statiche, l'accelerazione di gravità può essere inglobata all'interno del gradiente di pressione.

Si arriva infine a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}) = 0 \quad (57)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{V}) \quad (58)$$

Si sono pertanto ricavate quattro equazioni (una per il bilancio della massa e tre per il bilancio della quantità di moto) aventi cinque incognite (ρ , tutte e tre le componenti di \mathbf{V} e p). Per risolvere questo problema si introduce l'equazione di stato dei gas, con l'ipotesi di gas perfetto:

$$p = \rho RT \quad (59)$$

La temperatura T è però un'ulteriore incognita, che può essere trovata con l'equazione del bilancio dell'energia, ricavata usando il 1° principio della termodinamica, che in questo documento viene omessa, dato che il fulcro di questo capitolo sono solo le equazioni di *Navier – Stokes*. Quest'ultime, (57) e (58), sono nella forma comprimibile, tuttavia il focus di questo studio sono i fluidi incompressibili, pertanto nell'ipotesi secondo la quale $\rho = cost$, esse risultano:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (60)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} \quad (61)$$

Per concludere, le equazioni sopra ricavate, con densità costante, sono quelle che saranno implementate nella simulazione.

3.2 Equazioni di Navier-Stokes adimensionalizzate

E' possibile ottenere delle forme semplificate delle equazioni trascurando i termini che risultano di volta in volta meno importanti. I termini trascurabili possono essere individuati più facilmente mediante la scrittura delle equazioni in forma adimensionale. Una scelta corretta delle grandezze di riferimento (velocità, pressione, densità...) permette di ottenere che ciascun termine differenziale delle equazioni abbia un ordine di grandezza unitario. Davanti ad ogni termine comparirà allora un opportuno gruppo adimensionale il cui valore ne indicherà l'importanza. La scrittura delle equazioni in forma adimensionale permette di introdurre il concetto di *similitudine*. Due corpi si dicono *geometricamente simili* se possono essere resi coincidenti mediante una trasformazione di scala. In altre parole, se si sceglie come lunghezza di riferimento una dimensione caratteristica

del corpo e si dividono tutte le variabili geometriche per tale lunghezza, si ottiene sempre la stessa geometria per ciascun corpo.

Due campi fluidodinamici si definiscono in *similitudine cinematica* quando diventano uguali nel momento in cui le variabili dipendenti sono divise per opportuni valori di riferimento. In questo caso il rapporto tra la velocità in ciascun punto del campo e quella di riferimento risulterà uguale per i due flussi, ed allo stesso modo le linee di corrente saranno uguali.

Due campi fluidodinamici vengono detti in *similitudine dinamica* se verificano simultaneamente la similitudine geometrica e quella cinematica. Come conseguenza si ha che i coefficienti di portanza, resistenza e momento assumono gli stessi valori per i due flussi. Quindi si ottiene una rappresentazione del fenomeno attraverso un minor numero di parametri indipendenti (tutte le grandezze adimensionali assumono lo stesso valore in punti del campo corrispondenti). In altre parole il moto di un corpo A con velocità V_A e quello di un corpo B (geometricamente simile ad A) con velocità V_B saranno identici, in termini adimensionali, se i gruppi adimensionali presenti nelle equazioni assumono gli stessi valori. Dal punto di vista sperimentale ciò vuol dire che un dato risultato può essere utilizzato per un numero maggiore di problemi. Inoltre, per assicurare la similitudine dinamica devono realizzarsi le due condizioni seguenti:

- deve essere verificata la similitudine geometrica dei due campi (rapporto di scala);
- i gruppi adimensionali devono avere gli stessi valori per i due flussi.

Per ottenere la forma adimensionale delle equazioni e le espressioni dei gruppi adimensionali rilevanti, consideriamo le equazioni del moto per un fluido newtoniano. Di seguito, ci si riferirà ad un moto tridimensionale e si indicherà con $*$ le grandezze adimensionali. Le variabili adimensionali vengono definite introducendo delle grandezze di riferimento per ciascuna di esse. In questo studio le variabili adimensionali saranno la velocità \mathbf{V}^* , la pressione p^* , la densità ρ^* e le variabili indipendenti x^* , y^* , z^* e t^* . E' necessario pertanto introdurre un valore di riferimento V_∞ per la velocità, ρ_∞ per la densità, si definisce poi una lunghezza di riferimento L_∞ ed un tempo di riferimento t_∞ . Per la pressione viene assunto il valore di riferimento $\rho_\infty V_\infty^2$, per il tempo si sceglie $t_\infty = L_\infty/V_\infty$ e per la viscosità si impone un unico valore $\mu^* = \mu_\infty$.

Le grandezze adimensionali indipendenti e la velocità sono quindi:

$$x^* = \frac{x}{L_\infty} \quad (62)$$

$$y^* = \frac{y}{L_\infty} \quad (63)$$

$$z^* = \frac{z}{L_\infty} \quad (64)$$

$$t^* = \frac{t}{L_\infty V_\infty} \quad (65)$$

$$\mathbf{V}^* = \frac{\mathbf{V}}{V_\infty} \quad (66)$$

Gli operatori (derivata temporale, nabla e laplaciano) sono invece:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{V_\infty}{L_\infty} \frac{\partial}{\partial t} \quad (67)$$

$$\nabla^* = \frac{1}{L_\infty} \nabla \quad (68)$$

$$\nabla^{*2} = \frac{1}{L_\infty^2} \nabla^2 \quad (69)$$

Per quanto riguarda la pressione invece si ha che:

$$p^* = \rho V_\infty^2 p \quad (70)$$

Infine, per rappresentare la viscosità dinamica si fa uso del numero di *Reynolds* nel seguente modo:

$$Re = \frac{\rho V_\infty L_\infty}{\mu} \quad (71)$$

Una volta definite tutte queste relazioni tra variabili dimensionali ed adimensionali, si possono finalmente scrivere le equazioni di *Navier – Stokes* incomprimibili adimensionali [13].

$$\nabla^* \cdot \mathbf{V}^* = 0 \quad (72)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}^*}{\partial t^*} + (\mathbf{V}^* \cdot \nabla^*) \mathbf{V}^* = -\nabla^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{V}^* \quad (73)$$

3.3 Metodo risolutivo

In questa sottosezione verranno adoperare le equazioni alle derivate parziali per descrivere la dinamica della fase fluida incomprimibile. Quindi è stato adottato il quadro generale delle equazioni di *Navier – Stokes* è adottato per rappresentare numericamente la dinamica della fase fluida. Per semplicità, d'ora in poi il vettore della velocità sarà rappresentato in questo modo:

$$\mathbf{V} \equiv \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} \quad (74)$$

Dunque, le equazioni di *Navier – Stokes* incomprimibili diventano:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (75)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u} \quad (76)$$

dove \mathbf{u} è la velocità, p la pressione idrodinamica, ρ_f la densità e μ_f la viscosità dinamica del fluido. Per quanto riguarda il metodo risolutivo, le equazioni sopra riportate vengono risolte tramite una procedura di *pressure – correction* su un dominio computazionale rettangolare che si estende per $L_x \times L_y \times L_z$ lungo le direzioni x , y e z , rispettivamente. Il dominio viene discretizzato utilizzando una griglia *Euleriana* computazionale fissata e strutturata, avente i nodi $N_x \times N_y \times N_z$ lungo le rispettive direzioni. Per evitare disaccoppiamenti dispari tra pressione e la velocità, la griglia è sfalsata, come illustrata in figura (10), le quantità scalari sono valutate al centro delle celle della griglia, mentre le quantità vettoriali solo su un bordo (faccia) della cella.

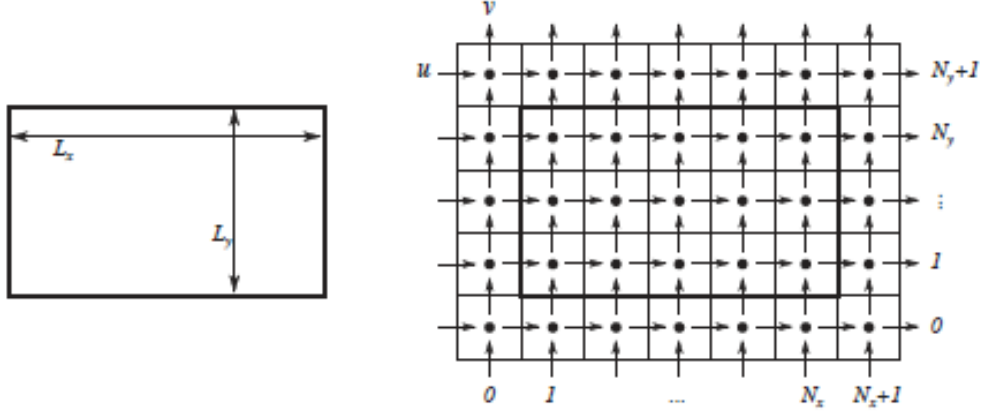


Figura 10: Sulla sinistra, uno schizzo del dominio computazionale nel caso bidimensionale. Sulla destra, discretizzazione del dominio mediante una griglia cartesiana sfalsata con uno strato di nodi fantasma

Tuttavia, ciò non è da considerarsi limitativo ai fini del presente documento, e l'estensione di tutte le procedure e degli algoritmi descritti di seguito sono possibili per una griglia generica non uniforme e non equispaziata. Le equazioni di *Navier – Stokes* incomprimibili sono discretizzate sulla griglia computazionale da schemi di differenze finite accurati al secondo ordine. E' impiegato uno schema temporale *Runge – Kutta* completamente esplicito per far avanzare la soluzione nel tempo con una accuratezza temporale del terzo ordine.

	$r = 1$	$r = 2$	$r = 3$
α_r	8/15	5/12	3/4
β_r	0	-17/60	-5/12
γ_r	8/15	2/15	1/3

Tabella 1: Coefficienti di *Runge – Kutta*, α_r , β_r e $\gamma_r = \alpha_r + \beta_r$ utilizzati dallo schema temporale di *Runge – Kutta* presentato, rispetto all'indice del sottopasso r

Le condizioni al contorno sono imposte ai confini limite del dominio computazionale, per mezzo di nodi fantasma. Per ogni confine del dominio rettangolare, viene definito uno strato di nodi fantasma, sia per le quantità sul centro cella, che per quelle su bordo cella, come mostrato nella figura (10). Lo schema che avanza nel tempo è riassunto nel seguito, in una notazione semi-discreta:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{r-1} + \frac{\Delta t}{\rho_f} (\alpha_r \mathbf{RHS}_f^{r-1} + \beta_r \mathbf{RHS}_f^{r-2} - \gamma_r \nabla p^{r-3/2}) \quad (77)$$

$$\nabla^2 \hat{p} = \frac{\rho_f}{\gamma_r \Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (78)$$

$$\mathbf{u}^r = \mathbf{u}^* - \frac{\gamma_r \Delta t}{\rho_f} \nabla \hat{p} \quad (79)$$

$$p^{r-1/2} = p^{r-3/2} + \hat{p} \quad (80)$$

Questo schema è da implementare in un ciclo *do* per $r = 1, 2, 3$.

Δt è il passo temporale, \mathbf{u}^* è un'approssimazione non solenoidale del campo di velocità, denotata come velocità di primo tentativo, mentre i coefficienti α_r , β_r e γ_r sono i coefficienti di *Runge – Kutta*, riportati nella tabella (1). L'apice r si riferisce ai sottopassi del ciclo *Runge – Kutta* e corrisponde al livello temporale t_n per $r = 0$ e t_{n+1} per $r = 3$. Il termine di destra, \mathbf{RHS}_f , valutato al sottopasso r è dato da:

$$\mathbf{RHS}_f^r = -\rho_f \nabla \cdot (\mathbf{u}^r \mathbf{u}^r) + \mu_f + \nabla^2 \mathbf{u}^r \quad (81)$$

Vale la pena notare che lo schema che avanza nel tempo descritto sopra produce risultati con un'accuratezza temporale e spaziale complessiva di secondo ordine, per entrambi i campi di velocità e di pressione.

Nel presente lavoro, si sono svolte due simulazioni: una *LES* e una *DNS*, quest'ultima al fine di validare i risultati della prima. Vengono quindi presentati due algoritmi risolutivi per entrambe le simulazioni.

3.3.1 Algoritmo di pressure-correction

Di seguito verrà spiegato un po' più nel dettaglio il metodo di pressure-correction, menzionato nel paragrafo precedente. Sia nella *Large Eddy Simulation* che nella *Direct Numerical Simulation*, la pressione viene calcolata con l'algoritmo di *pressure – correction*, menzionato poche pagine sopra. Dal momento che in flusso incomprimibile la pressione agisce istantaneamente sul campo di velocità (e abbiamo visto come il suo ruolo sia quello di garantire al campo di essere a divergenza nulla) da un punto di vista numerico è necessario riprodurre in modo accurato la fisica della pressione. Si suppone perciò di avanzare di un passo temporale le equazioni di *Navier – Stokes* a mezzo di un qualche algoritmo di integrazione temporale. Applicando uno schema siffatto si ottiene

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n = \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^{n+1}) \quad (82)$$

Qui con $\mathbf{C}^n = -\nabla \cdot \mathbf{u}\mathbf{u}$ e $\mathbf{D}^n = 1/Re \nabla^2 \mathbf{u}$ indichiamo rispettivamente il termine convettivo e il termine diffusivo al passo n mentre con ∇p^{n+1} indichiamo il gradiente di pressione al passo $n+1$. Tale scrittura prevede che il nuovo campo di velocità e il gradiente di pressione siano perfettamente sincroni ed entrambi dipendenti dall'iterata $n+1$. Ciò rispetta la fisica ma vincola la conoscenza del gradiente di pressione al passo $n+1$, rendendo la pratica numerica del tutto impossibile. Bisogna quindi trovare un metodo al fine di rendere il conto esplicito.

Il metodo di *pressure – correction* (o *fractional step method*) prevede che l'integrazione delle equazioni di *Navier – Stokes* incomprimibili venga svolta in due sotto-step, in una logica *predictor – corrector*. Indichiamo quindi con \mathbf{u}^* un campo di velocità di tentativo a divergenza non-nulla, che viene sommato e sottratto a primo membro della (82). Pertanto si ottiene:

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(n)} = \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^{n+1}) \quad (83)$$

Analogamente si somma e si sottrae al termine destro la quantità ∇p^n , da cui

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(n)} = \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^{n+1} + \nabla p^n - \nabla p^n) \quad (84)$$

Tale equazione è del tutto equivalente a quella originaria. Si definisce quindi $p^* = p^{n+1} - p^n$ da cui è possibile scrivere

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(n)} = \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^* - \nabla p^n) \quad (85)$$

questa equazione può quindi essere srotolata in due somme parziali ottenendo

$$\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(n)} = \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^n) \quad (86)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^* = \Delta t(-\nabla p^*) \quad (87)$$

si noti che la prima equazione è del tutto esplicita per il campo \mathbf{u}^* , avendo il termine destro che dipende solo da quantità al passo n . Quindi:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(n)} + \Delta t(\mathbf{C}^n - \mathbf{D}^n - \nabla p^n) \quad (88)$$

La seconda equazione del sistema presenta due incognite \mathbf{u}^{n+1} e p^* . E' noto però che \mathbf{u}^{n+1} deve essere solenoidale ($\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$). Applicando quindi la divergenza a tale equazione si ha

$$\nabla^2 p^* = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} \quad (89)$$

equazione che può essere risolta determinando il campo di pressione p^* . Tale set di equazioni consente di formulare l'algoritmo di *pressure - correction*, il quale è riassunto nei seguenti step:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t(\mathbf{C}^n + \mathbf{D}^n - \nabla p^n) \quad (90)$$

$$\nabla^2 p^* = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} \quad (91)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla p^* \quad (92)$$

$$p^{n+1} = p^n + p^* \quad (93)$$

3.3.2 Algoritmo risolutivo per la DNS

L'analisi si focalizza sul trasporto dello scalare passivo, indicata qui per semplicità col simbolo Y . L'equazione riscritta con questa grandezza rappresenta l'equazione dello scalare passivo, del quale se ne studia il trasporto:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \nabla \cdot (\rho Y \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla Y) \quad (94)$$

con l'ipotesi di densità ρ costante, si ottiene

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \nabla \cdot (Y \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla Y) \quad (95)$$

svolgendo i calcoli si ricava la forma:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \nabla \cdot (Y \mathbf{u}) = \mathcal{D} \nabla^2 Y \quad (96)$$

Riscrivendo in notazione indiciale

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(Y u_i) = \mathcal{D} \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i^2} \quad (97)$$

e sviluppando i calcoli:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + u_i \frac{\partial Y}{\partial x_i} + Y \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i^2} \quad (98)$$

Considerando la densità costante, l'equazione del bilancio di massa diventa:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (99)$$

pertanto si conclude che la divergenza del campo di velocità è nulla. L'espressione che quindi si ottiene è

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + u_i \frac{\partial Y}{\partial x_i} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i^2} \quad (100)$$

Ritornando alla forma vettoriale, in componenti, e isolando il primo termine a destra dell'uguale, è possibile evidenziare l'espressione che rappresenta l'algoritmo che regola il problema

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -u \frac{\partial Y}{\partial x} - v \frac{\partial Y}{\partial y} - w \frac{\partial Y}{\partial z} + \mathcal{D} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \right) \quad (101)$$

Dove u, v e w sono le componenti della velocità rispettivamente lungo la direzione x, y e z . Una volta ricavata la forma dell'algoritmo, è possibile discretizzare il termine convettivo e il termine diffusivo tramite differenze finite del primo e del secondo ordine.

Per quanto riguarda il termine convettivo, questo è costituito dalle derivate prime $\frac{\partial Y}{\partial x}, \frac{\partial Y}{\partial y}$ e $\frac{\partial Y}{\partial z}$, che possono essere discretizzate con differenze finite centrate del primo ordine:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y}{\partial x} &= \frac{Y(i+1, j, k) - Y(i-1, j, k)}{2\Delta x} \\ \frac{\partial Y}{\partial y} &= \frac{Y(i, j+1, k) - Y(i, j-1, k)}{2\Delta y} \\ \frac{\partial Y}{\partial z} &= \frac{Y(i, j, k+1) - Y(i, j, k-1)}{2\Delta z} \end{aligned}$$

D'altro canto, il termine diffusivo consta dei contributi della derivata seconda $\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}$ e $\frac{\partial^2 Y}{\partial z^2}$ ed è premoltiplicato dal coefficiente di diffusione di massa binaria \mathcal{D} . La componente diffusiva viene quindi discretizzata facendo uso delle differenze finite centrate del secondo ordine:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} &= \frac{Y(i+1, j, k) - 2Y(i, j, k) + Y(i-1, j, k)}{\Delta x^2} \\ \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} &= \frac{Y(i, j+1, k) - 2Y(i, j, k) + Y(i, j-1, k)}{\Delta y^2} \\ \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} &= \frac{Y(i, j, k+1) - 2Y(i, j, k) + Y(i, j, k-1)}{\Delta z^2} \end{aligned}$$

3.3.3 Algoritmo risolutivo per la LES

Per quanto riguarda lo schema risolvete per la *Large Eddy Simulation*, valgono tutte le assunzioni fatte per lo scalare e per la densità; inoltre, come punto di partenza, si prende come prima l'equazione di continuità (equazione del bilancio di massa). Data l'identità, scritta in forma vettoriale per semplicità

$$\nabla \cdot (Y \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \nabla Y \quad (102)$$

l'algoritmo si può scrivere nel seguente modo:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y = \nabla \cdot [(D + D_t) \nabla Y] \quad (103)$$

Dove la diffusività molecolare totale si può scomporre nella somma di diffusività molecolare e diffusività turbolenta. Tenendo conto che il numero di *Schmidt* è così definito

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (104)$$

nel caso in esame, si adopererà un valore pari a $Sc = 0.7$.

Substance	Formula	Schmidt Number Sc for $T = 25\text{ }^\circ\text{C}$	
		Air	Water
Methane	CH_4	0.99	570
Oxygen	O_2	0.84	441
Nitrogen	N_2	—	240
Carbon dioxide	CO_2	1.14	410
Ammonia	NH_3	0.57	360
Ethanol	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	1.50	540
Methanol	CH_3OH	1.14	540
Cyclohexane	C_6H_{12}	—	985

Figura 11: Valori del numero di *Schmidt* nell'aria e nell'acqua, per diverse sostanze [14]

Si può analogamente definire un numero di *Schmidt* turbolento, nel seguente modo:

$$Sc_t = \frac{\nu_t}{D_t} \quad (105)$$

Di solito, questo numero si attesta più o meno attorno a $Sc_t = 0.9$. Infine, la (103) diventa quindi:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\nu^*}{Sc} + \frac{\nu_t^*}{Sc_t} \right) \nabla Y \right] \quad (106)$$

Dove ν_t^* non è altro che la viscosità cinematica turbolenta (adimensionale).

E' noto che la grandezza scalare passiva dipende dallo spazio e dal tempo $Y = (x, y, z, t)$. Tuttavia, per la *LES*, viene fatto uso della decomposizione di *Reynolds*, già accennata nel secondo capitolo. Il canale dove scorre il flusso è un canale periodico lungo x e y , pertanto la grandezza scalare viene mediata lungo x e y e nel tempo. Si ottiene pertanto:

$$\langle Y(x, y, z, t) \rangle = \langle Y \rangle(z) \quad (107)$$

Scrivendo quindi usando la notazione della scomposizione di *Reynolds* si ricava:

$$Y(x, y, z, t) = \langle Y \rangle(z) + Y'(x, y, z, t) \quad (108)$$

Dove il primo termine a destra dell'uguale rappresenta il campo medio della grandezza scalare, mentre il secondo termine è la quantità fluttuante. Si noti come il campo medio dipende solo da z , questo perchè la grandezza scalare, come detto sopra, è mediata nel tempo e lungo x e y .

4 Simulazione

Una volta ricavata l'equazione che rappresenta il modello numerico, è opportuno precisare come si svolgerà la simulazione. Il punto di partenza è *CaNS* (*Canonical Navier – Stokes*), un software *open – source*, efficiente e veloce, per le *DNS* di flussi canonici, realizzato da *Pedro Costa* e da altri contributori (<https://github.com/CaNS-World/CaNS>).



Figura 12: Logo di CaNS

L'algoritmo esplora tutte le combinazioni di condizioni al contorno di pressione valide per un tale risolutore, in un quadro unico e generale. Il metodo è implementato in Fortran90/95 ed esteso con una parallelizzazione ibrida *MPI – OpenMPI*, che consente simulazioni massivamente parallele ed efficienti [15]. Mira a risolvere qualsiasi flusso fluido costituito da un fluido newtoniano incomprimibile, che può beneficiare di un risolutore basato sulle *FFT* (*Fast Fourier Transform*) per l'equazione di *Poisson* alle differenze finite di secondo ordine, in una griglia cartesiana tridimensionale. Di seguito è riportata l'equazione di *Poisson*, in forma generale.

$$\nabla^2 \varphi = f \quad (109)$$

Inoltre, la griglia è regolare lungo due direzioni e il risolutore supporta la seguente combinazione di condizioni al contorno (omogenee):

- *Neumann – Neumann*
- *Dirichlet – Dirichlet*
- *Dirichlet – Neumann*
- Periodiche

Nella terza direzione del dominio, il risolutore è più flessibile in quanto utilizza l'eliminazione di Gauss. Lì la griglia può anche essere non uniforme (ad esempio più precisa al confine e più grossolana al centro). *CaNS* consente anche di scegliere una discretizzazione temporale implicita dei termini di diffusione dell'equazione momento, completamente implicita o solo lungo l'ultima direzione del dominio. Ciò si traduce nella risoluzione di un'equazione di Helmholtz 3D/1D per ogni componente di velocità. Nel caso completamente implicito, vengono utilizzati anche risolutori basati su *FFT* e le stesse opzioni descritte sopra per le condizioni al contorno di pressione si applicano alla velocità. Il flusso di fluido è risolto con uno schema di correzione della pressione alle differenze finite del secondo ordine, discretizzato in una disposizione a griglia *MAC* (*Marker – And – Cell*). Il tempo avanza con uno schema *Runge – Kutta* a tre fasi a bassa memorizzazione. Per una maggiore stabilità a bassi numeri di Reynolds, al prezzo di un maggior carico computazionale, il termine di diffusione può essere trattato implicitamente [16].

Di seguito è spiegata brevemente l'implementazione originale di *CaNS* nei gruppi di *CPU* per le *DNS* massivamente parallele. Come menzionato sopra, l'algoritmo numerico è implementato

in Fortran90/95, esteso con la libreria *MPI – OpenMPI*, per la parallelizzazione della memoria distribuita. Il dominio è partizionato in diversi sottodomini computazionali, in una scomposizione *2D pencil – like*. Nella maggior parte delle fasi del calcolo, il dominio è suddiviso in x e y nei nodi $N_p^x \times N_p^y$, allineati nella direzione z . La libreria *2DECOMP&FFT* viene utilizzata per eseguire le trasposizioni dei dati sui nodi allineati lungo x e y , necessari per calcolare le trasformate di tipo *FFT*.

L’obiettivo principale di questo studio è quello di implementare l’equazione dello scalare all’interno di *CaNS*, eseguire prima una simulazione *LES* e successivamente una *direct numerical simulation*, per validare i risultati ottenuti. Per quanto riguarda la *large eddy simulation*, si sono scelte 200000 iterate, delle condizioni al contorno di tipo *Dirichlet – Dirichlet* per la velocità, *Neumann – Neumann* per la pressione e *Dirichlet – Dirichlet* per lo scalare. Inoltre il numero di *Reynolds* è stato fissato a 5640, mentre il numero di *Reynolds* di attrito è pari a 180. Si ricordi che quest’ultimo è definito nel seguente modo

$$Re_\tau = \frac{u_\tau \delta}{\nu} \quad (110)$$

dove u_τ è la velocità d’attrito, mentre δ è l’altezza del canale.

Le dimensioni del dominio scelte sono $l_x = 3$, $l_y = 1.5$ e $l_z = 1$, mentre la scomposizione della griglia prevede i seguenti valori: $N_x = 64$, $N_y = 64$ e $N_z = 64$. Sono scelti inoltre valori di riferimento per la velocità e la lunghezza unitari, il numero di *Schmidt* pari a 0.7, mentre quello turbolento di 0.9. Come condizione iniziale per il profilo della velocità è stato scelto il profilo di velocità di *Poiseuille*, che identifica il flusso laminare nei canali.

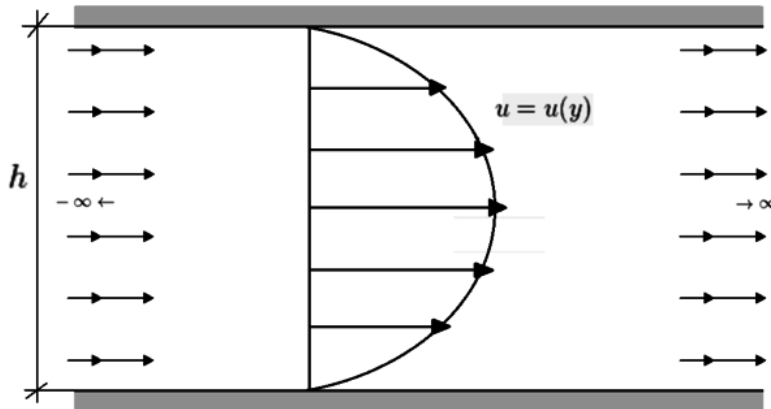


Figura 13: Profilo di velocità di *Poiseuille*

Infine, la simulazione è stata lanciata in parallelo grazie ad *MPI – OpenMPI* con 8 micro-processori; tuttavia, è possibile lanciarla per qualunque numero di *cores*, anche in seriale. Agendo sul file di input di *CaNS* (*dns.in*), è possibile cambiare tutti i parametri sopra descritti, dalle condizioni al contorno al numero di *Reynolds*. Per i risultati, ci si concentrerà maggiormente su quelli relativi alla grandezza scalare e alla velocità lungo x ; inoltre verranno riportati quelli relativi alla viscosità turbolenta e le altre due componenti della velocità.

Per quanto concerne la *DNS*, a causa dei requisiti computazionali intrinsecamente grandi di queste simulazioni (sia in termini di memoria che di potenza di elaborazione), le *workstation* parallele sono state le macchine preferite da usare per le *DNS* di flussi fluidi turbolenti. Questi computer sono basati sull’impiego di più *CPU* (*Central Processing Units*) [15]. In questo caso per la *DNS* sono state scelte 50000 iterazioni, un numero di *Reynolds* pari a 5640 (come per la *LES*)

e il numero di *Reynolds* di attrito sempre uguale a 180. Le dimensioni del dominio sono le stesse della *LES*, mentre la scomposizione della griglia ha i valori: $N_x = 128$, $N_y = 128$ e $N_z = 160$. Valori di riferimento e profilo iniziale della velocità sono gli stessi per entrambe le simulazioni. Di seguito è raffigurato il dominio adoperato per le simulazioni.

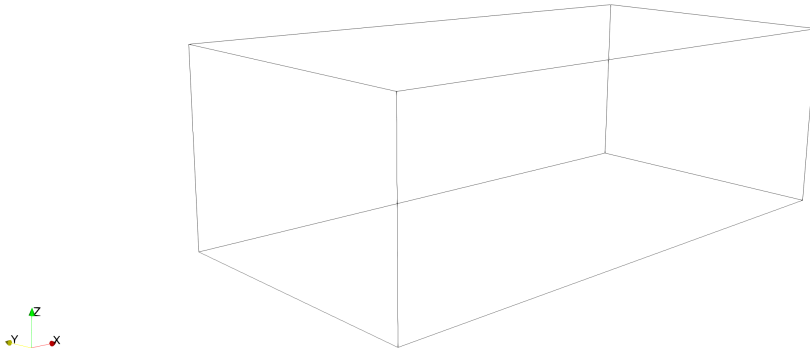


Figura 14: Dominio per *LES* e *DNS*

Infine, come già accennato sopra, il dominio che si usa riprodurrà un canale avente un gradiente di temperatura, grazie alle differenti temperature delle due pareti orizzontali. Per la parete più fredda, cioè quella alla base, si è scelto $T_{bottom} = 292 K$, mentre per quella più calda ossia quella superiore $T_{top} = 590 K$.

Entrambe le simulazioni sono state eseguite con una macchina avente le seguenti caratteristiche:

- **processore:** Intel core i7-9700K 4,90 *GHz* (9° generazione)
- **scheda grafica:** NVIDIA GeForce RTX 2070 Super
- **memoria RAM:** 32 GB

Grazie al processore avente 8 *cores*, è possibile lanciare le simulazioni in parallelo ottenendo dei risultati piuttosto precisi in tempi relativamente brevi (circa 30 minuti per la *LES*).

5 Risultati

Di seguito vengono riportati i risultati relativi alla *Large Eddy Simulation*. La simulazione, come già accennato sopra, è stata eseguita con 200000 iterazioni, il codice è stato settato in modo che la simulazione salvi i risultati ottenuti ogni 2000 iterate, così da avere 100 step temporali. Per analizzare il risultato in modo visivo si è adoperato *ParaView*, un'applicazione open-source per la visualizzazione interattiva, molto utile per tutta la branca della fluidodinamica computazionale. Sono pertanto illustrati i risultati per la grandezza scalare e per la velocità in direzione x .

5.1 Grandezza scalare

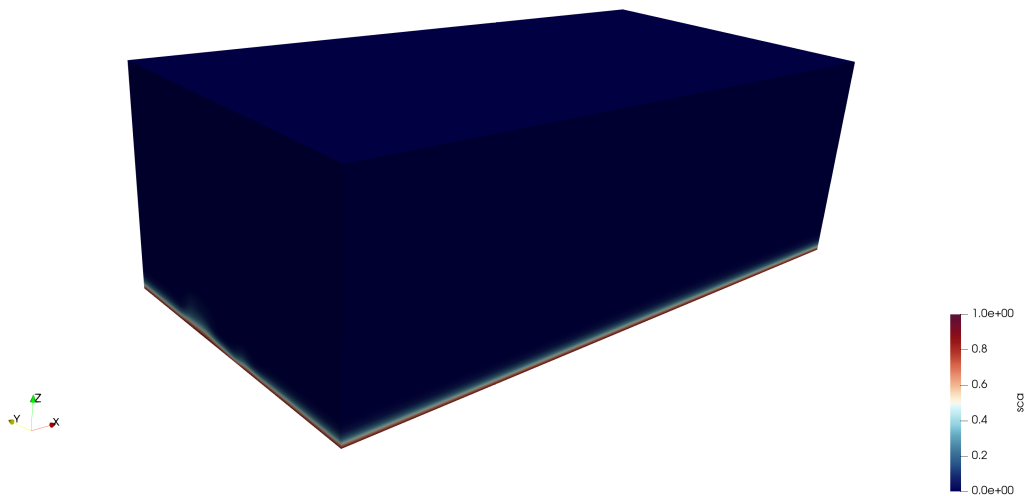


Figura 15: Primo step

L'immagine relativa al primo step di risultati mette in evidenza il fatto che lo scalare sia ovunque nullo, tranne che sul fondo del canale, dove assume il valore unitario. Questo perchè nelle condizioni al contorno è stato imposto che lo scalare sia nullo in corrispondenza di $z = 1$, mentre è unitario a $z = 0$. Dal punto di vista qualitativo, è come se venisse immesso lo scalare sul fondo del canale, per poi essere diffuso grazie al flusso.

Di seguito sono riportati gli step successivi:

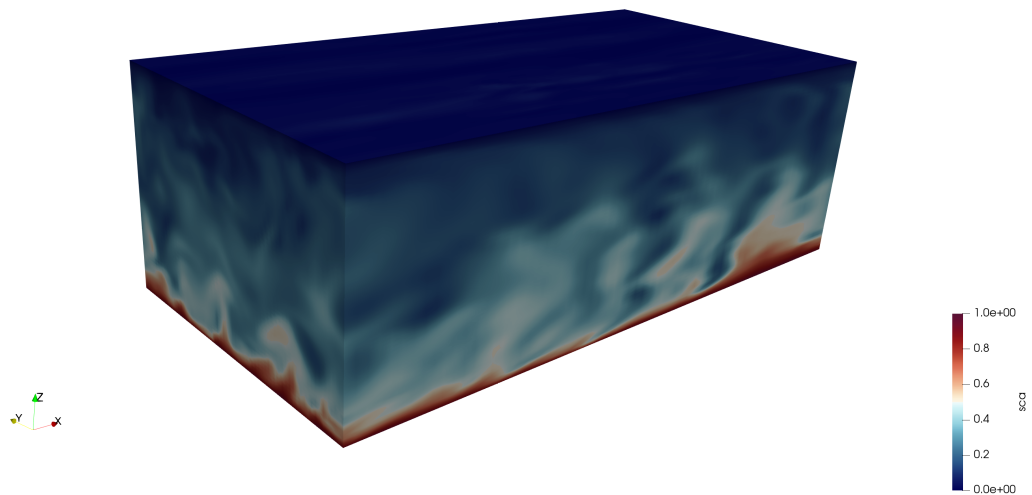


Figura 16: Ventesimo step

Come quanto aspettato dalla teoria, con l'avanzare della simulazione e quindi dell'algoritmo temporale, lo scalare inizia ad essere trasportato nel canale. Questo fatto è molto evidente una volta che ci si avvicina agli ultimi step. Dal punto di vista qualitativo del fenomeno, è come se la grandezza scalare si diffondesse lungo tutta l'altezza del flusso nel canale. Nella figura relativa al ventesimo step si può notare che c'è ancora una scarsissima concentrazione della grandezza scalare in tutto il canale, mentre nella figura relativa al quarantesimo step, la grandezza scalare aumenta di intensità, soprattutto nella parte inferiore del dominio. Nelle due figure presenti in questa pagina, si può anche notare la nascita di alcuni vortici.

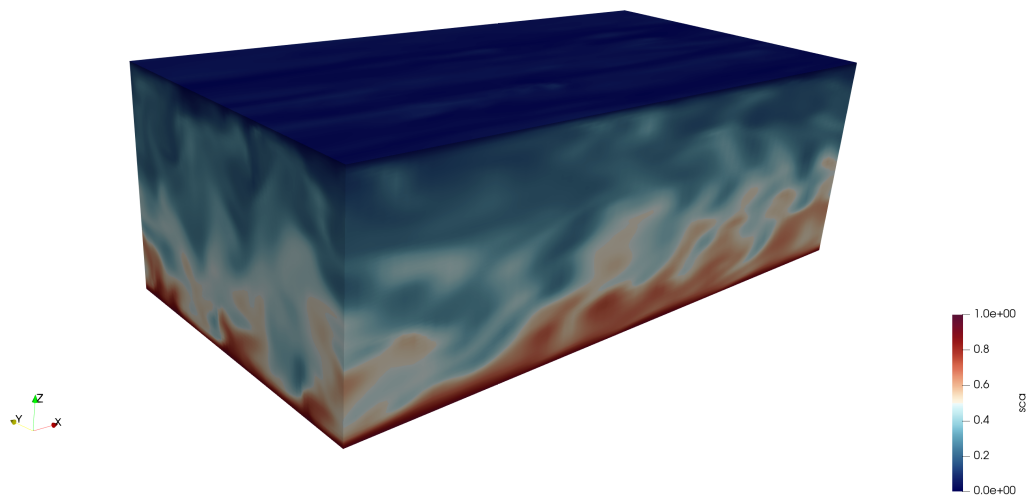


Figura 17: Quarantesimo step

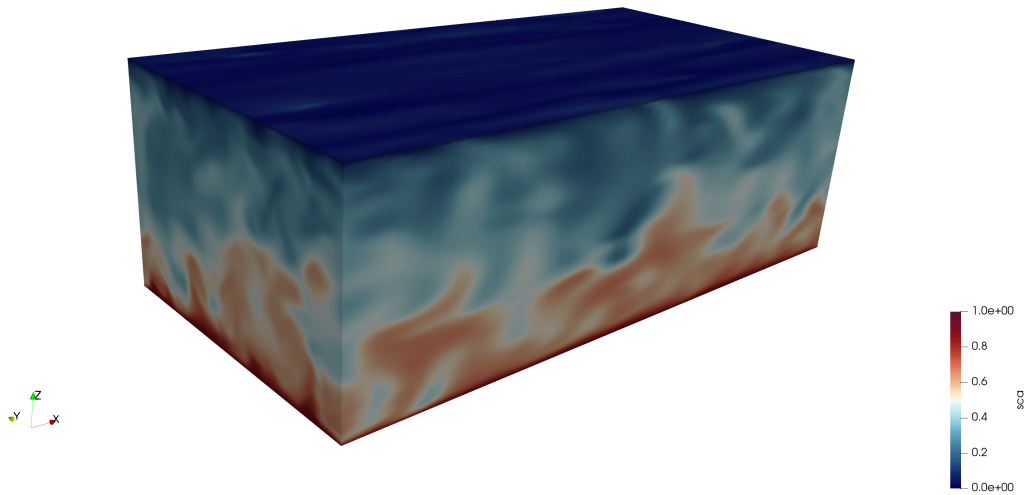


Figura 18: Sessantesimo step

Per quanto riguarda le immagini presenti in questa pagina, è immediato evincere che la grandezza scalare si sia diffusa in tutta la metà inferiore del canale, con una maggiore intensità sul fondo del canale. Nella zona coincidente con la metà superiore del canale, lo scalare ha ancora una bassa intensità, in particolare essendo nullo sulla parete superiore.

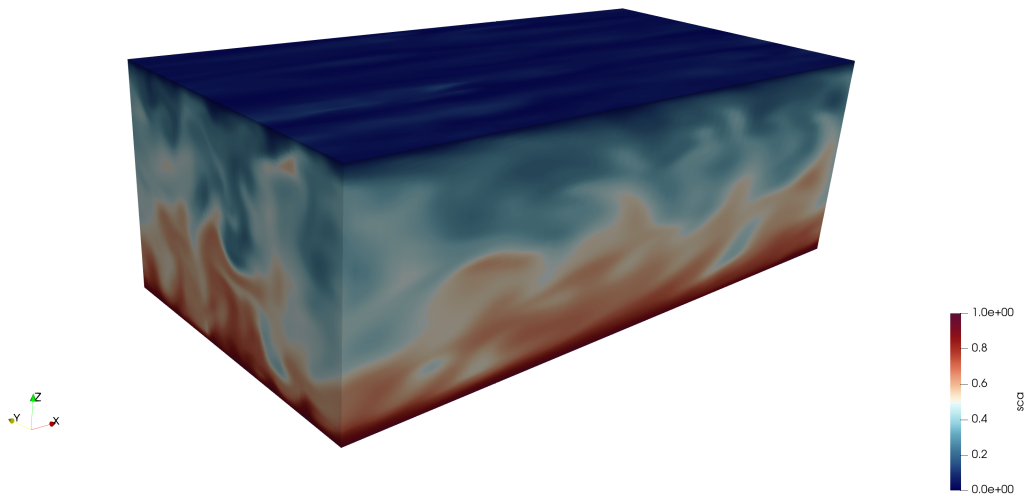


Figura 19: Ottantesimo step

Dall'ottantesimo step della simulazione in poi si può affermare che la grandezza scalare sia stata trasportata in modo abbastanza uniforme in tutta l'altezza del dominio.

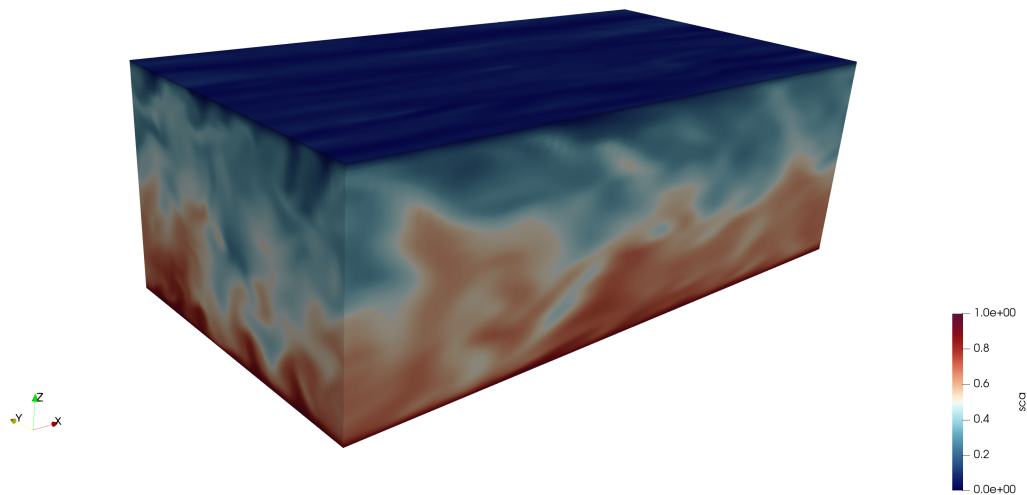


Figura 20: Ultimo step

Una volta terminata la simulazione, è possibile notare che lo scalare sia stato trasportato in tutto il canale, con una minore concentrazione in prossimità della parete superiore. Si noti inoltre come la grandezza scalare assuma ancora un valore circa unitario sulla parete inferiore del canale, mentre circa nullo sulla parete superiore. Infine il valore massimo raggiunto dallo scalare è 1, mentre il minimo è 0, indice che la simulazione rispecchia quanto viene riportato nella teoria.

5.2 Velocità

Successivamente, si passa ai risultati relativi alla velocità. Verrà analizzata un po' più in dettaglio la componente lungo x , rispetto alle altre due componenti spaziali, essendo non rilevanti. Sotto, è presente il primo step di risultati per la velocità lungo x .

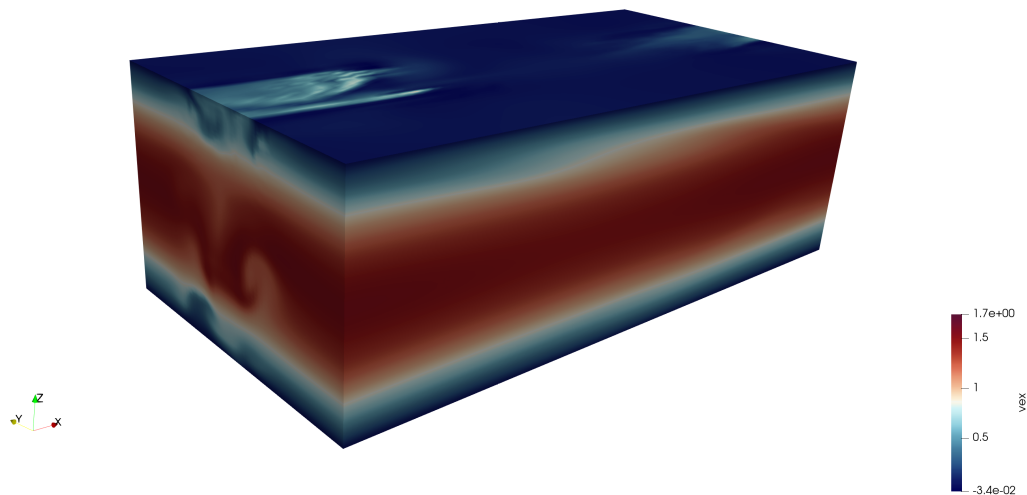


Figura 21: Primo step

Si osservi come, all'inizio, il profilo di velocità assomigli ad un profilo laminare, ad eccezione di piccoli vortici presenti nella mezzeria del canale, in prossimità della sezione $x = 0$. Questo è dovuto al fatto che la condizione iniziale della velocità corrisponda ad un profilo di velocità di *Poiseuille*, come già spiegato nel paragrafo precedente. Inoltre, si noti che il valore della velocità va da un

massimo di 1.7 ad un minimo di -0.034 , ci si avvicina al minimo soprattutto vicino alle pareti del canale.

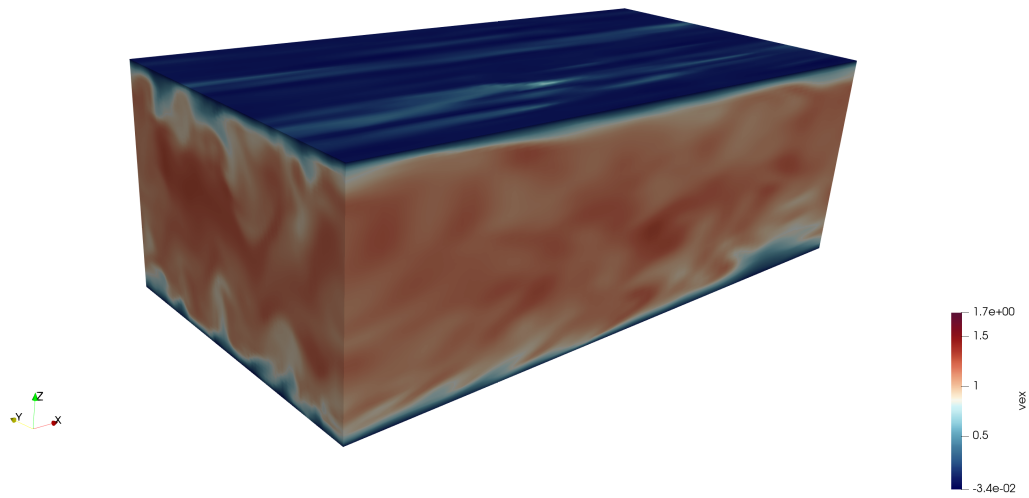


Figura 22: Ventesimo step

Per quanto riguarda le immagini relative agli step qui mostrati, il profilo di velocità si è allargato e sono comparsi diversi vortici. La presenza di questi mette in evidenza il comportamento turbolento del flusso. Si osservi che la velocità ha un valore che si avvicina all'unità in quasi tutto il canale, mantenendo invece un valore di due ordini di grandezza inferiore in vicinanza alle pareti, a causa degli effetti della viscosità.

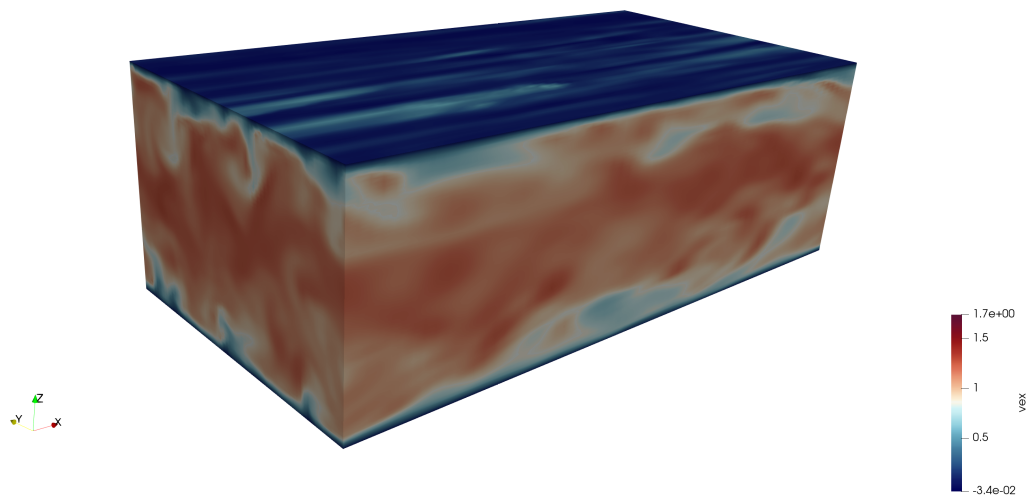


Figura 23: Quarantesimo step

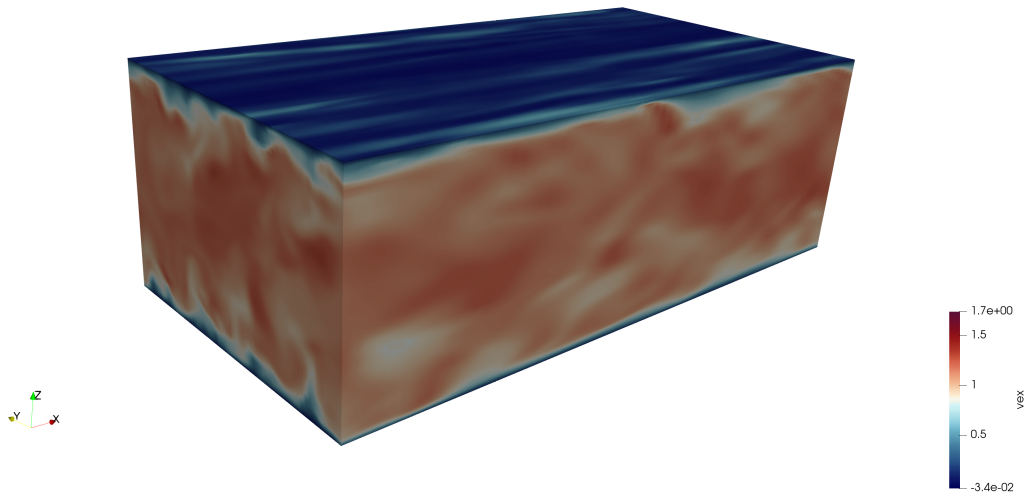


Figura 24: Sessantesimo step

Man mano che la simulazione procede, il profilo di velocità assume sempre di più un carattere turbolento, in accordo con quanto ci si aspettava. Il carattere turbolento del profilo di velocità è evidenziato dalla presenza di vortici nella quasi totalità del dominio. Questo è molto evidente nell'ottantesimo e nell'ultimo step di risultati. Inoltre, intorno all'ottantesimo step, si formano diverse zone nel flusso aventi velocità superiori al valore unitario.

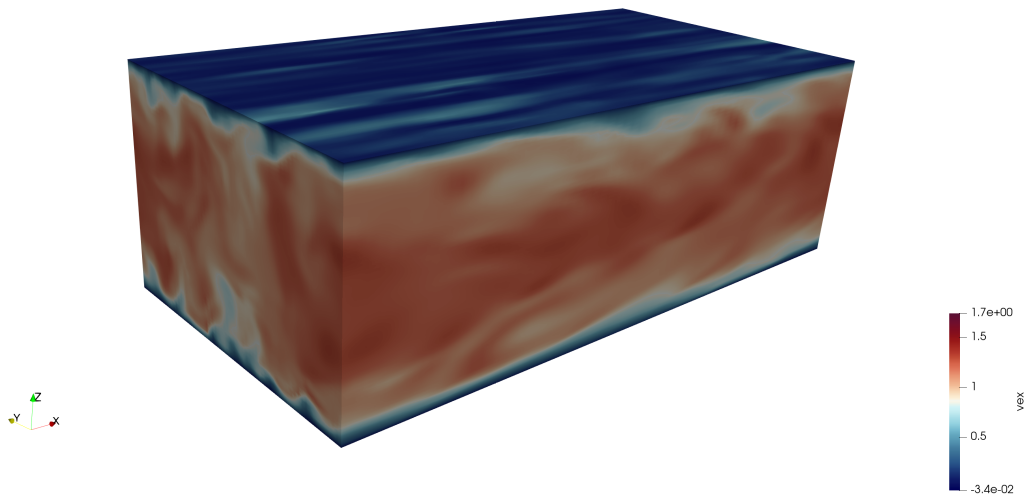


Figura 25: Ottantesimo step

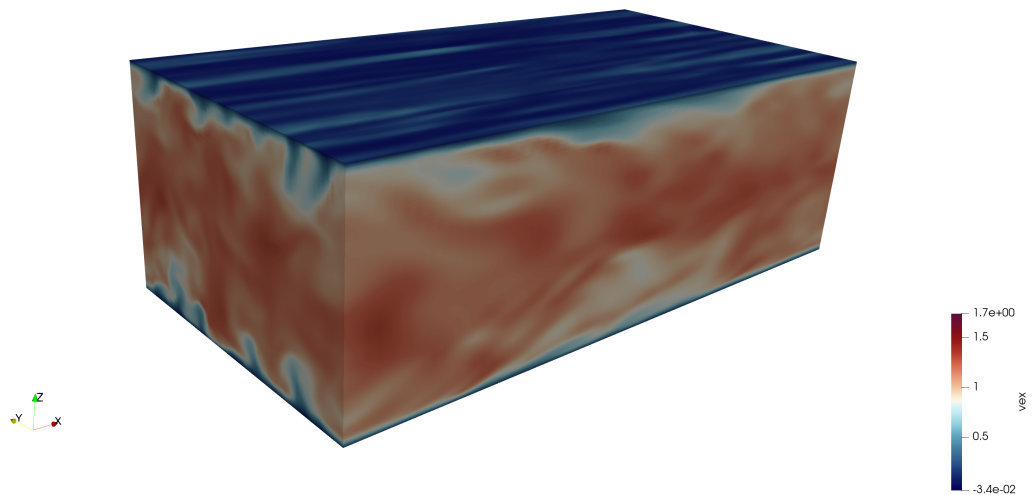


Figura 26: Ultimo step

Una volta finita la simulazione, si noti come il comportamento del flusso sia turbolento lungo tutto il canale. La presenza di vortici occupa tutte le zone del dominio e ci sono inoltre alcune parti del canale che presentano valori di velocità media superiori all'unità. Interessanti sono i numerosi ricircoli di flusso in corrispondenza della sezione $x = 0$.

Successivamente, vengono presentati anche i risultati per le altre due componenti di velocità, riguardanti solo gli step iniziale e finale.

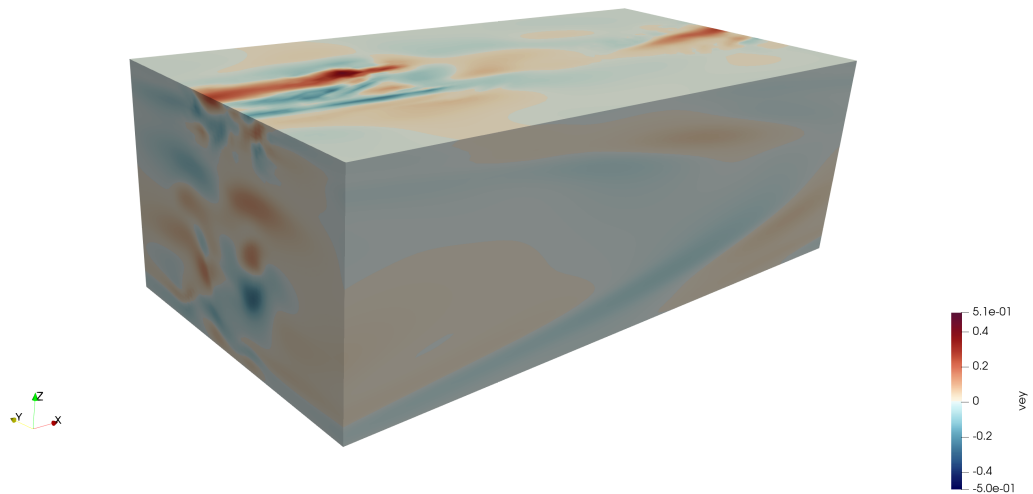


Figura 27: Primo step per la componente della velocità lungo y

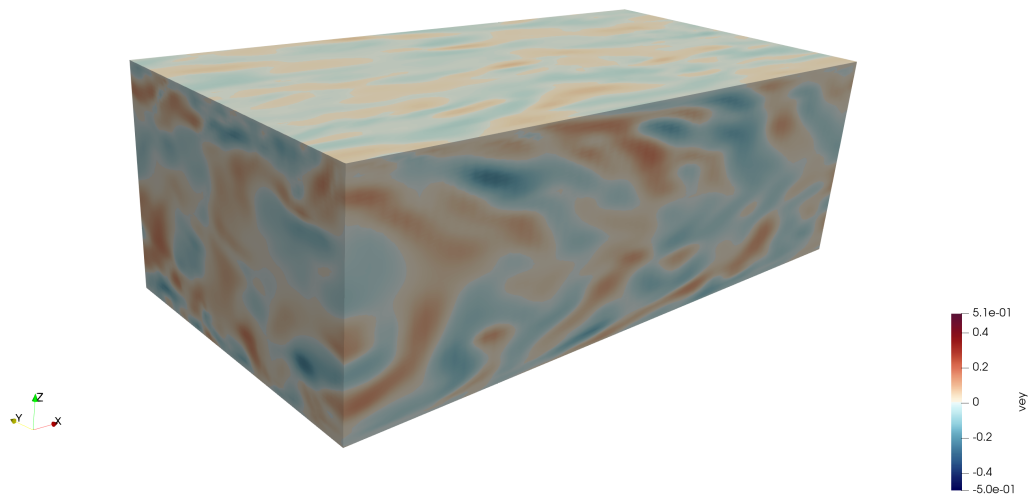


Figura 28: Ultimo step per la componente della velocità lungo y

La velocità media lungo y finale è più elevata rispetto a quella iniziale; nonostante ciò, il valore della velocità lungo y si mantiene basso durante tutta la simulazione. All’inizio della simulazione il profilo di velocità lungo y è quasi ovunque nullo eccezion fatta per zone ristrette sulla parete superiore. Alla fine della simulazione invece il dominio è alternato da zone con valori positivi della velocità e da zone con valori negativi, sempre più piccoli in modulo rispetto alla velocità lungo x .

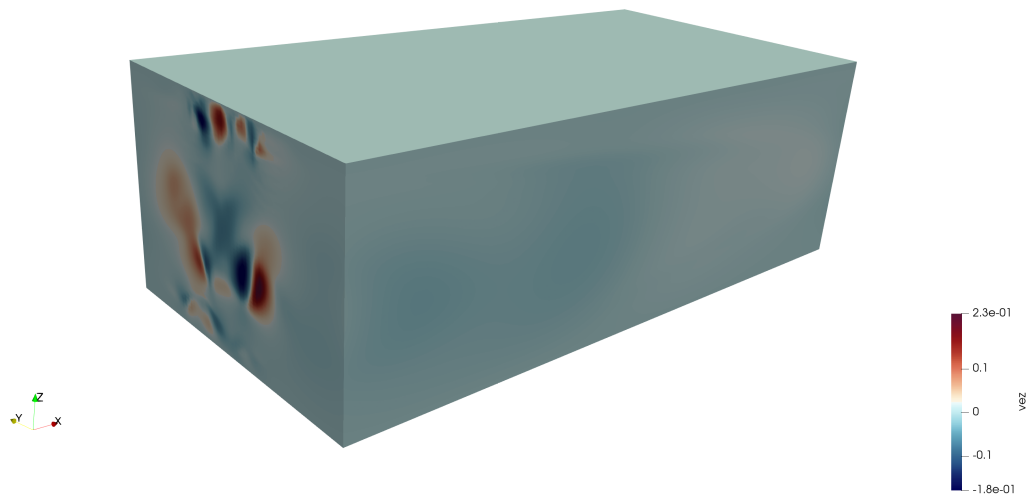


Figura 29: Primo step per la componente della velocità lungo z

Si noti come le componenti di velocità lungo y e z abbiano un comportamento molto simile. Inoltre mantengono un valore che si può assumere costante e basso rispetto alla velocità lungo x , soprattutto per la componente lungo z , che presenta un valore massimo di 0.23, mentre quella lungo y presentava un valore massimo pari a 0.51. Allo step iniziale, la velocità media assume quasi ovunque nel canale un valore prossimo allo zero, eccezion fatta per piccole zone di concentrazione.

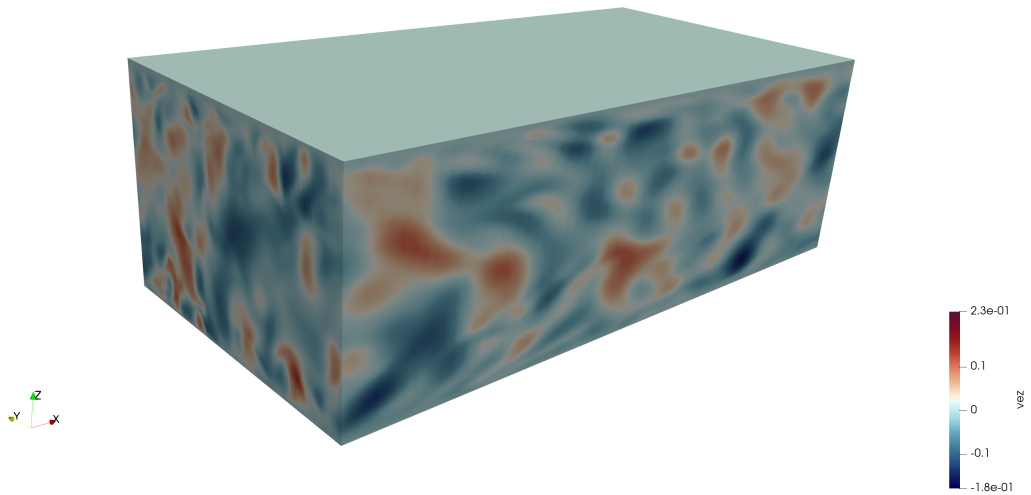


Figura 30: Ultimo step per la componente della velocità lungo z

Si noti infine la presenza di vortici nell'ultimo step per la componente della velocità lungo z , praticamente assenti nell'iterazione iniziale. Anche qui, all'iterazione finale sono presenti zone con valori di velocità positivi e zone con valori negativi.

5.3 Viscosità turbolenta

Infine, per completezza, vengono presentati i risultati della viscosità. Si ricordi che la viscosità turbolenta è così definita:

$$\nu_t = Sc_t D_t \tag{111}$$

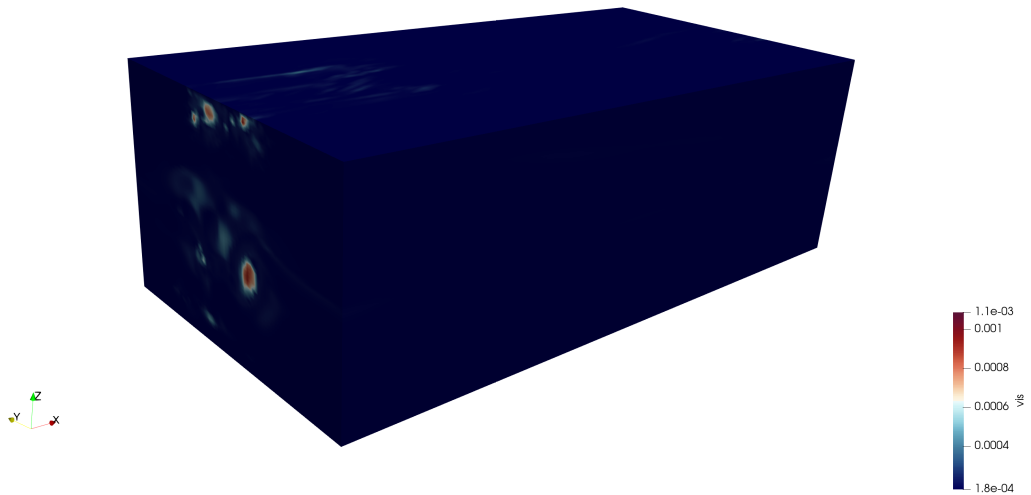


Figura 31: Primo step

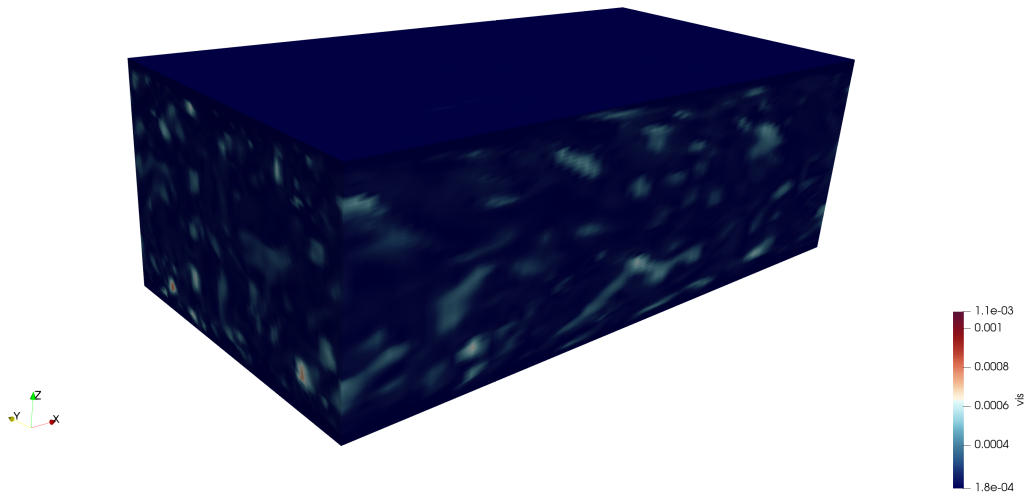


Figura 32: Ultimo step

Nel caso della viscosità, essa presenta valori molto piccoli in tutto il canale, sia all'iterazione iniziale che a quella finale. All'inizio della simulazione sono presenti pochi e piccoli ricircoli nella sezione $x = 0$, dove la viscosità turbolenta si avvicina ad un valore dell'ordine di 10^3 , mentre nel resto del canale il valore si attesta intorno a 1.8×10^4 . Alla fine della simulazione, l'andamento della viscosità è circa uguale rispetto all'inizio, ad eccezione dei vortici che sono molto più numerosi e distribuiti all'interno del dominio. Infine si può concludere affermando che la viscosità turbolenta, senza contare i vortici, mantiene un valore pressochè costante per tutta la durata della simulazione.

5.4 Validazione dei risultati

Essendo la tesi concentrata sulle *LES*, non verranno riportati i risultati della *DNS* in maniera dettagliata. Infatti, in seguito alla *LES*, è stata eseguita la *Direct Numerical Simulation* per confrontare i risultati della *Large Eddy Simulation* ed effettuare quindi una validazione. E' stato scelto di effettuare il confronto solamente per la grandezza scalare, che per questo studio è costituita dalla temperatura. Di seguito è pertanto illustrato il confronto dei risultati del campo di temperatura medio.

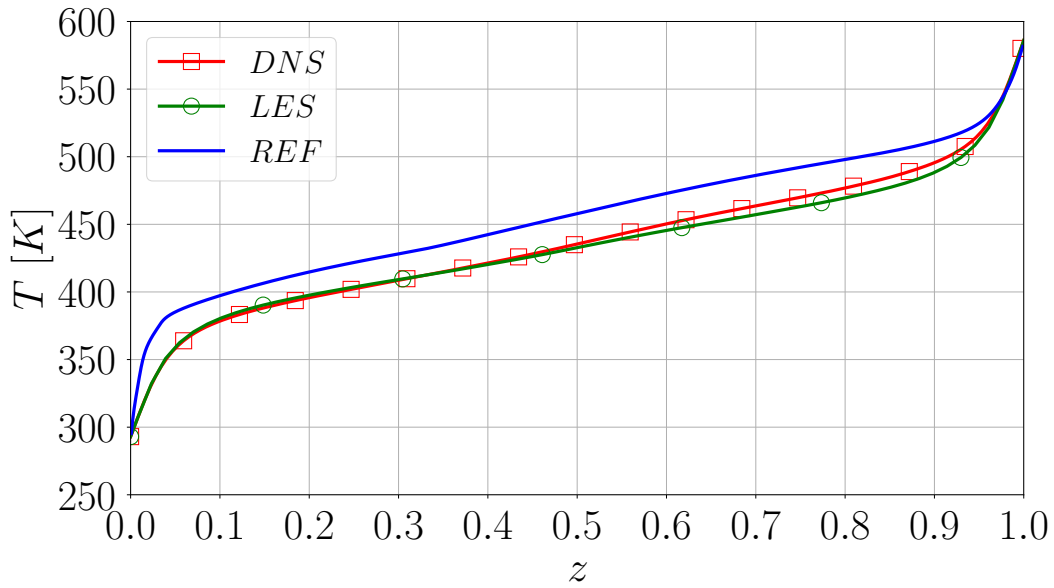


Figura 33: Andamento del campo medio della temperatura

Come si può notare dalla figura, in ascissa è riportata l'altezza del canale; il fondo del canale e la parte superiore hanno temperature diverse, rispettivamente $T_{bottom} = 292 K$ e $T_{top} = 588 K$; mentre in ordinata il valore della temperatura. La linea rossa rappresenta i risultati della *DNS*, quella verde quelli della *LES* e in blu sono riportati dei dati numerici di riferimento, estrapolati da una simulazione di un lavoro svolto di *Wang e Pletcher* del 1996 ([17]).

In figura quindi sono presentati i profili di temperatura media in coordinate globali; i risultati delle due simulazioni effettuate in questa tesi (*LES* e *DNS*) quasi combaciano, e a loro volta sono molto simili ai dati di riferimento. Infatti, anche per una differenza consistente tra le temperature delle pareti, il profilo di velocità non si discosta molto dai risultati estrapolati dal *paper* di riferimento. Infine, le condizioni al contorno termiche richiedono che il flusso termico a parete sia lo stesso su entrambe le pareti.

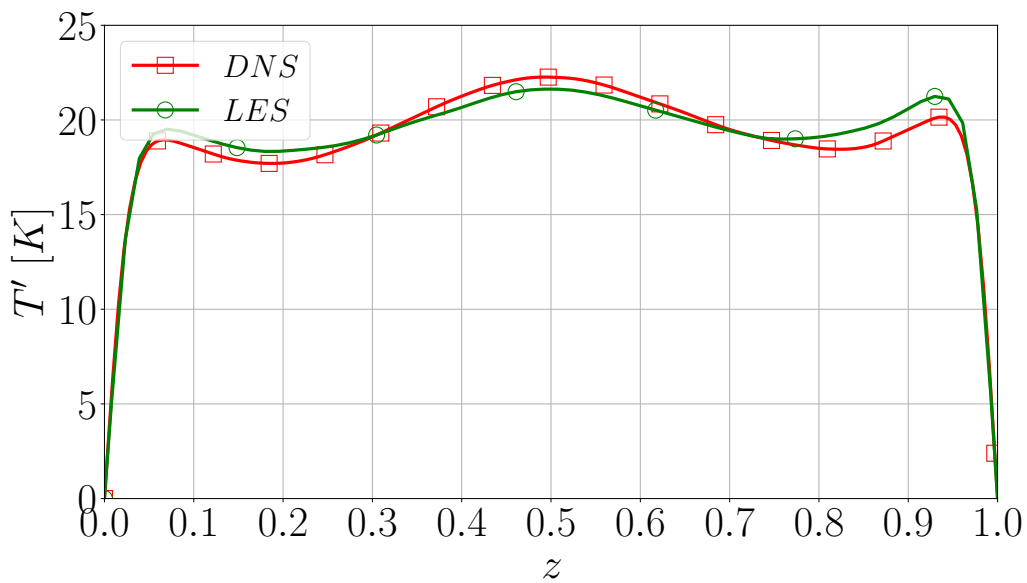


Figura 34: Fluttuazioni della temperatura

Per concludere, sono riportati i campi fluttuanti della temperatura, anche qui i risultati della *DNS* sono confrontati con quelli della *LES*. E' giusto ricordare che la parte fluttuante di una grandezza qualsiasi è ottenibile grazie alla scomposizione di *Reynolds* in questo modo

$$T(x, y, z, t) = \langle T \rangle(z) + T'(x, y, z, t) \quad (112)$$

la grandezza scalare, nel caso in esame è la temperatura, viene mediata lungo x e y e nel tempo, questo perchè il flusso scorre in un canale periodico lungo x e y e pertanto i risultati relativi al campo medio della temperatura sono solo in funzione di z . Per quanto riguarda la componente fluttuante della temperatura, si è scelto per semplicità di graficarla in funzione solo di z . Osservando la figura, è immediato evincere che i risultati delle due simulazioni sono piuttosto simili tra loro, soprattutto nelle zone relative al fondo e al tetto del canale, dove la pendenza è maggiore e i risultati sono praticamente identici. Un po' più distaccato dalla parete, gli andamenti delle fluttuazioni della temperatura risultano comunque simili, tuttavia la *LES* (evidenziata in verde) ha una fluttuazione leggermente inferiore rispetto alla *DNS* (in rosso) e pertanto si può concludere che la *Large Eddy Simulation* è di poco più precisa rispetto alla *DNS*.

6 Conclusioni

Il trasporto di uno scalare passivo ad opera di un flusso turbolento risulta di notevole importanza in molti ambiti delle scienze e dell'ingegneria. Un tipico esempio riguarda il trasporto di inquinanti ad opera del vento o, più in generale, delle correnti d'aria. In questo contesto, la presente tesi riguarda la simulazione alle grandi scale, *Large Eddy Simulation* (LES), del trasporto di una grandezza scalare passiva in un flusso turbolento di canale. La LES è ampiamente usata per studiare e rappresentare diversi fenomeni di natura ingegneristica, rivolta a qualsiasi settore, come ad esempio quello ambientale, accennato nell'introduzione.

In questa tesi in particolare si è simulato e rappresentato il trasporto di una grandezza scalare passiva all'interno di un flusso incanalato di densità costante. La grandezza scalare può essere costituita da qualsiasi scalare, come la frazione di massa di una specie chimica o la temperatura. In questa tesi si è scelta la temperatura e si è riprodotto un flusso turbolento incanalato, avente le pareti superiore ed inferiore a temperatura diversa, con l'obiettivo di studiare come variano le caratteristiche e le proprietà del flusso, come il campo di velocità e la viscosità turbolenta, oltre che alla temperatura. Le equazioni che governano il trasporto della grandezza scalare sono state implementate nel software open-source *CaNS*. Come modello di turbolenza per le scale non risolte è stato impiegato un modello Wall-Adapting Local Eddy-viscosity (WALE). Per fare ciò, è stato necessario l'uso di un software open-source tramite il quale eseguire la simulazione: si è utilizzato *CaNS*, capace di risolvere un qualsiasi flusso costituito da un fluido newtoniano incompressibile, grazie ad un risolutore basato sulle *FFT* per l'equazione di *Poisson* alle differenze finite di secondo ordine, facendo uso di una griglia tridimensionale. Il passo più importante di questa tesi è stato quello di inserire le equazioni della grandezza scalare in *CaNS*, modificando opportunamente diversi codici, in modo da avere un algoritmo risolutivo che avanza nel tempo e da poter effettuare la simulazione con le caratteristiche e i parametri desiderati. Sono stati adoperati due diversi algoritmi per *LES* e *DNS*, in particolare per la *LES* è stato usato il numero di *Schmidt* turbolento pari a $Sc_t = 0.9$, necessario per calcolare la viscosità turbolenta.

Una volta eseguita la *LES* si è svolta anche una *DNS* e si sono confrontati i risultati di entrambe con il documento di riferimento, costituito da uno studio eseguito da *Wang e Pletcher* nel 1996, riguardante una *LES* di un flusso di canale soggetto a trasferimento di calore. Tramite la validazione dei risultati fatta e confrontando i dati ottenuti tramite le simulazioni con i dati di riferimento, si è giunti alla conclusione che il lavoro svolto in questa tesi è stato corretto, in quanto sono stati utilizzati algoritmi efficaci e modelli affidabili per la *LES*. Inoltre anche le condizioni al contorno e il corretto uso del software open-source *CaNS* hanno riprodotto risultati coerenti e in linea con lo studio effettuato da *Wang e Pletcher*.

Infine, per quanto riguardano gli sviluppi futuri, uno studio di questo genere può essere ampliato ed applicato per flussi di canale avente densità variabile nel tempo, in modo da poter simulare la dinamica di qualsiasi tipo di flusso subsonico.

Elenco delle figure

1	Isolivello della concentrazione di inquinamento in una città [1]	4
2	Isosuperficie della concentrazione dello scalare medio, per diverse direzioni di flusso su un insieme (<i>array</i>) di cubi [3]	6
3	Esempio di una <i>DNS</i> di un profilo alare in condizioni di stallo [4]	7
4	Confronto tra (da sinistra) <i>DNS</i> , <i>LES</i> e <i>RANS</i>	8
5	<i>LES</i> riguardante la diffusione dell'inquinamento in una città [5]	9
6	<i>Large eddy simulation</i> di un campo di velocità di un flusso turbolento	11
7	Esempio di dominio avente due pareti di diversa temperatura [8]	17
8	Esempio di volume e superficie di controllo	21
9	Componenti delle tensioni lungo le tre direzioni	23
10	Sulla sinistra, uno schizzo del dominio computazionale nel caso bidimensionale. Sulla destra, discretizzazione del dominio mediante una griglia cartesiana sfalsata con uno strato di nodi fantasma	27
11	Valori del numero di <i>Schmidt</i> nell'aria e nell'acqua, per diverse sostanze [14]	31
12	Logo di CaNS	32
13	Profilo di velocità di <i>Poiseuille</i>	33
14	Dominio per <i>LES</i> e <i>DNS</i>	34
15	Primo step	35
16	Ventesimo step	36
17	Quarantesimo step	36
18	Sessantesimo step	37
19	Ottantesimo step	37
20	Ultimo step	38
21	Primo step	38
22	Ventesimo step	39
23	Quarantesimo step	39
24	Sessantesimo step	40
25	Ottantesimo step	40
26	Ultimo step	41
27	Primo step per la componente della velocità lungo y	41
28	Ultimo step per la componente della velocità lungo y	42
29	Primo step per la componente della velocità lungo z	42
30	Ultimo step per la componente della velocità lungo z	43
31	Primo step	43
32	Ultimo step	44
33	Andamento del campo medio della temperatura	45
34	Fluttuazioni della temperatura	45

Riferimenti bibliografici

- [1] Y.-H. Tseng, C. Meneveau, and M. B. Parlange, “Modeling flow around bluff bodies and predicting urban dispersion using large eddy simulation,” *Environmental science & technology*, vol. 40, no. 8, pp. 2653–2662, 2006.
- [2] C. Aditya, C. R. Deshmukh, D. Nayana, and P. G. Vidyavastu, “Detection and prediction of air pollution using machine learning models,” *International Journal of Engineering Trends and Technology (IJETT)*, vol. 59, no. 4, pp. 204–207, 2018.
- [3] D. Philips, R. Rossi, and G. Iaccarino, “Large-eddy simulation of passive scalar dispersion in an urban-like canopy,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 723, pp. 404–428, 2013.
- [4] I. Rodríguez, O. Lehmkuhl, R. Borrell, and A. Oliva, “Direct numerical simulation of a naca0012 in full stall,” *International journal of heat and fluid flow*, vol. 43, pp. 194–203, 2013.
- [5] C. García-Sánchez, J. van Beeck, and C. Gorié, “Predictive large eddy simulations for urban flows: Challenges and opportunities,” *Building and Environment*, vol. 139, pp. 146–156, 2018.
- [6] Y. Zhiyin, “Large-eddy simulation: Past, present and the future,” *Chinese journal of Aeronautics*, vol. 28, no. 1, pp. 11–24, 2015.
- [7] F. Nicoud and F. Ducros, “Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor,” *Flow, turbulence and Combustion*, vol. 62, no. 3, pp. 183–200, 1999.
- [8] A. Toutant and F. Bataille, “Turbulence statistics in a fully developed channel flow submitted to a high temperature gradient,” *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 74, pp. 104–118, 2013.
- [9] M. Klein and H. Schmidt, “Stochastic modeling of passive scalar transport in turbulent channel flows at high schmidt numbers,” in *Tenth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Begel House Inc., 2017.
- [10] Q. Li, E. Bou-Zeid, W. Anderson, S. Grimmond, and M. Hultmark, “Quality and reliability of les of convective scalar transfer at high reynolds numbers,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 102, pp. 959–970, 2016.
- [11] S. H. Bader, Z. Yin, and P. A. Durbin, “Large eddy simulation of passive scalar transport in transitional boundary layer and development toward improving models,” *Computers & Fluids*, vol. 241, p. 105485, 2022.
- [12] B. Lessani and M. V. Papalexandris, “Numerical study of turbulent channel flow with strong temperature gradients,” *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 2008.
- [13] G. Graziani, *Aerodinamica (quarta edizione)*, vol. 2. Sapienza Università Editrice, 2010.
- [14] C. Gualtieri, A. Angeloudis, F. Bombardelli, S. Jha, and T. Stoesser, “On the values for the turbulent schmidt number in environmental flows,” *Fluids*, vol. 2, no. 2, p. 17, 2017.
- [15] P. Costa, E. Phillips, L. Brandt, and M. Fatica, “Gpu acceleration of cans for massively-parallel direct numerical simulations of canonical fluid flows,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 81, pp. 502–511, 2021.

- [16] <https://github.com/CaNS-World/CaNS>, 2022.
- [17] W.-P. Wang and R. H. Pletcher, “On the large eddy simulation of a turbulent channel flow with significant heat transfer,” *Physics of Fluids*, vol. 8, no. 12, pp. 3354–3366, 1996.