

POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria Industriale

Corso di Laurea Specialistica in
Ingegneria Energetica



MODELLAZIONE CFD IN OPENFOAM DEL PROCESSO D'INIEZIONE ACQUA/UREA CON FORMAZIONE ED EVAPORAZIONE DI FILM LIQUIDO A PARETE PER APPLICAZIONI SCR

Relatore: Prof. Gianluca MONTENEGRO

Tesi di Laurea di:

Simone CONTI Matr. 750240

Alessio SALCICCIA Matr. 750654

Anno Accademico 2010-2011

*La verità è una cosa troppo complicata perchè permetta
qualcosa di differente dalle approssimazioni*

John von Neumann

Ringraziamenti

Desideriamo ringraziare il nostro relatore, il prof. Gianluca Montenegro, per le conoscenze che ci ha saputo trasmettere, per la disponibilità e soprattutto per la pazienza dimostrataci ogni qualvolta abbiamo chiesto aiuto. Un sentito ringraziamento va al prof. Giancarlo Ferrari che ci ha trasmesso l'interesse per le problematiche relative ai motori a combustione interna attraverso la sua inesauribile passione.

Un doveroso e caloroso ringraziamento è dedicato ai nostri genitori che ci hanno permesso, non senza sacrifici, di frequentare l'università e arrivare al raggiungimento di un obiettivo importante per la nostra vita.

Infine, ma non meno importanti, ringraziamo le nostre fidanzate che ci hanno incoraggiato e sopportato nei momenti di crisi e con le quali condividiamo la gioia per il raggiungimento di questo risultato.

Grazie

Indice

Ringraziamenti	V
Sommario	XIV
1 Introduzione	1
1.1 Principali inquinanti del motore Diesel	1
1.2 Tecniche di abbattimento degli inquinanti del motore Diesel	2
2 Equazioni della fase gassosa	5
2.1 Leggi costitutive	5
2.1.1 Legge di Newton	6
2.1.2 Legge di Fourier e flusso di energia	6
2.1.3 Legge di Fick	7
2.1.4 Equazioni di stato	7
2.2 Equazioni di conservazione	8
2.2.1 Equazione di conservazione della massa	9
2.2.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche	9
2.2.3 Equazione di conservazione della quantità di moto	10
2.2.4 Equazione di conservazione dell'energia	10
2.3 Equazioni di Navier-Stokes	11
2.4 Turbolenza	13
2.4.1 Caratteristiche della turbolenza	14
2.4.2 Modellazione della turbolenza	15
2.4.2.1 Mediazione secondo Reynolds	15
2.4.2.2 Mediazione secondo Favre	16
2.4.3 Equazioni della turbolenza	17
2.4.3.1 Sforzi di Reynolds	18
2.4.3.2 Flussi turbolenti di specie ed entalpia	18
2.4.4 Modelli di chiusura	19
2.4.4.1 Funzioni di parete	21

3	Equazioni dello spray	23
3.1	Equazione della massa della goccia	23
3.2	Equazione di moto della goccia	25
3.3	Equazione dell'energia della goccia	27
3.4	Modelli di atomizzazione	28
3.5	Modelli di breakup	29
3.6	Modelli di collisione	31
3.7	Modelli di trattamento a parete	33
3.7.1	Stick	34
3.7.2	Rebound	34
3.7.3	Spread	35
3.7.4	Splash	36
4	Equazioni del film liquido	39
4.1	Equazione di conservazione della massa	40
4.2	Equazione di conservazione delle specie chimiche	40
4.3	Equazione di conservazione della quantità di moto	41
4.4	Equazione di conservazione dell'energia	42
4.5	Equazione della conduzione nella parete solida	43
4.6	Espressione dei termini sorgente	43
4.6.1	Termini sorgente di massa	43
4.6.2	Termine sorgente di quantità di moto	44
4.6.3	Termine sorgente di entalpia	44
5	Implementazione	45
5.1	Metodo ai volumi finiti	46
5.2	Metodo della rappresentazione lagrangiana	48
5.2.1	Tracking	49
5.3	Metodo alle aree finite	51
5.4	Il software OpenFOAM	52
5.4.1	Discretizzazione delle equazioni del film	52
5.4.2	Struttura di calcolo del solutore	56
5.4.2.1	Loop di calcolo della temperatura del film	59
6	Verifica dei risultati ottenuti	61
6.1	Setup delle prove	61
6.2	Risultati delle prove	64
6.2.1	Caso A	64
6.2.2	Caso B	65
6.2.3	Caso C	66
6.2.4	Caso D	67

6.2.5	Caso E	68
6.2.6	Caso F	68
6.2.7	Caso G	69
7	Conclusioni e sviluppi futuri	95
	Nomenclatura	97
	Bibliografia	101

Elenco delle figure

2.1	Differenti regimi di flusso: laminare (in alto) e turbolento (in basso)	13
2.2	Oscillazioni di una componente del vettore velocità intorno al suo valore medio	14
2.3	Esempio di macroscale L	15
3.1	Deformazione della goccia a causa delle forze aerodinamiche . . .	27
3.2	Esempi di regimi di breakup	29
3.3	Rappresentazione schematica dell'instabilità del meccanismo KH	30
3.4	Differenti configurazioni aventi la stessa probabilità di collisione secondo la formulazione di O'Rourke	32
3.5	Schematizzazione di due gocce impattanti	33
3.6	Schematizzazione del fenomeno di stick	34
3.7	Schematizzazione del fenomeno di rebound	35
3.8	Schematizzazione del fenomeno di spread	35
3.9	Schematizzazione del fenomeno di splash	36
4.1	Schematizzazione del film liquido a parete	39
5.1	Esempio di cella computazionale del metodo ai volumi finiti . . .	46
5.2	Instabilità dell' algoritmo LF causata da un eccessivo time-step . .	49
5.3	Schematizzazione di una parcel in una cella	50
5.4	Esempio di configurazione per cui l' algoritmo di ricerca standard fallisce	51
5.5	Esempio di celle computazionali del metodo alle aree finite	51
5.6	Diagramma di flusso del solutore scrFilmFoam	57
5.7	Diagramma di flusso della libreria wallFilmPolimi	58
5.8	Diagramma di flusso del calcolo della temperatura di film	59
6.1	Griglia computazionale di volume	62
6.2	Sezione della griglia computazionale di superficie con visualizzazione dello spray	62
6.3	Profilo di temperatura dello spray, caso B, 2 ms	65

6.4	Confronto tra le frazioni massiche di acqua nei gas, casi B e C, 20 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)	67
6.5	Confronto tra le frazioni massiche di acqua e urea nei gas, caso F, 20 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)	69
6.6	Confronto tra le frazioni massiche di acqua e urea nei gas, caso G, 10 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)	70
6.7	Spessore di film, caso A	71
6.8	Temperatura di film, caso A	72
6.9	Confronto tra diversi time-step per il caso A, 2 ms	73
6.10	Spessore di film, caso B	74
6.11	Temperatura di film, caso B	75
6.12	Temperatura di parete, caso B	76
6.13	Spessore di film, caso C	77
6.14	Temperatura di film, caso C	78
6.15	Temperatura di parete, caso C	79
6.16	Spessore di film, caso D	80
6.17	Temperatura di film, caso D	81
6.18	Frazione massica di urea del film, caso D	82
6.19	Spessore di film, caso E	83
6.20	Temperatura di film, caso E	84
6.21	Frazione massica di urea del film, caso E	85
6.22	Frazione massica di acqua del film, caso E	86
6.23	Spessore di film, caso F	87
6.24	Temperatura di film, caso F	88
6.25	Temperatura di parete, caso F	89
6.26	Frazione massica di urea del film, caso F	90
6.27	Spessore di film, caso G	91
6.28	Temperatura di film, caso G	92
6.29	Temperatura di parete, caso G	93

Elenco delle tabelle

2.1	Costanti dei modelli $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$	21
6.1	Condizioni operative delle prove monocomponente	63
6.2	Condizioni operative delle prove bicomponente	63
6.3	Caratteristiche della parete solida	64

Sommario

Nel presente lavoro di tesi è stato sviluppato un nuovo modello fluidodinamico per la simulazione di film liquidi a parete utilizzando il metodo alle aree finite finalizzato allo studio di sistemi d'iniezione d'urea. Particolare attenzione è stata posta all'implementazione e alla risoluzione dell'equazione di conservazione dell'energia e della conduzione nella parete solida. Il modello è stato implementato come libreria da utilizzare nel pacchetto CFD OpenFOAM[®]. Il codice è stato sviluppato in maniera tale da poter simulare la formazione e l'evoluzione di un film liquido dovuto all'impatto di uno spray su una superficie solida. Sono inoltre considerate le interazioni di tipo termofluidodinamico tra il film e la fase gassosa circostante. Vengono presentati i modelli teorici di riferimento, la discretizzazione numerica delle equazioni e lo schema concettuale di risoluzione del sistema di equazioni di governo del fenomeno. Sono infine presentati i risultati di alcune simulazioni di prova allo scopo di indagare il comportamento del modello implementato.

Parole chiave: Film liquido, Metodo alle aree finite, Modello fluidodinamico, OpenFOAM[®]

Abstract

In this thesis work, a new multidimensional model has been developed to study the hydrodynamics of liquid wall films using the finite area method finalized to the analysis of urea injection systems. Particular attention was paid to implementation and resolution of the equation of energy conservation and thermal conduction in the solid wall. The model was implemented as a library to be used in the CFD software package OpenFOAM[®]. The code has been developed in order to simulate the formation and evolution of a liquid film due to the impact of a spray onto a solid surface. We also considered the thermofluidodynamic interactions between the film and the surrounding gas phase. We presented the theoretical models, the numerical discretization of the equations and the conceptual resolution scheme of the governing equations system of the phenomenon. In the end we presented the results of some test cases in order to investigate the behavior of the implemented model.

Key words: Liquid film, Finite area method, Hydrodynamics model, OpenFOAM[®]

Capitolo 1

Introduzione

La sempre crescente preoccupazione per gli effetti sull'ambiente, sulle persone e sul clima globale delle emissioni inquinanti, legate all'attività umana, ha portato, negli ultimi anni, alla promulgazione di numerose normative, sempre più stringenti, atte a regolamentare e ridurre tali emissioni.

Tra i maggiori responsabili della produzione di queste sostanze inquinanti vi è il settore dei trasporti, il quale utilizza come fonte energetica principale i combustibili fossili.

La combustione degli idrocarburi comporta la formazione di varie tipologie di inquinanti, di cui i principali sono: idrocarburi incombusti (HC), ossidi di azoto (NO_x), particolato (PM), monossido di carbonio (CO) e anidride carbonica (CO₂); quest'ultima, pur non avendo effetti immediati e dannosi per la salute (è un prodotto di molti processi biologici degli esseri viventi), è comunque considerata un inquinante a causa della sua stretta correlazione con l'effetto serra e con il conseguente riscaldamento globale.

L'entità di queste emissioni nocive è strettamente legata al combustibile e al tipo di ciclo termodinamico adottato; allo stato attuale le maggiori emissioni specifiche sono imputabili al motore Diesel, il quale trova impiego sia su molteplici categorie di veicoli (in particolare di grossa taglia) sia per applicazioni stazionarie.

1.1 Principali inquinanti del motore Diesel

La combustione realizzata nel motore Diesel avviene con elevato eccesso d'aria e per la gran parte in fase diffusiva (a causa della bassa volatilità dei combustibili maggiormente utilizzati in questo tipo di motori); ciò comporta che le emissioni di HC e CO siano molto ridotte (praticamente nulle), mentre sono molto elevate le emissioni di NO_x e particolato.

La formazione degli NO_x è legata principalmente alla prima fase della combustione, durante la quale si ha che una piccola frazione del combustibile evapora

e si miscela con l'aria aspirata, dando luogo ad una combustione che avviene in fase premiscelata con una carica mediamente magra; questa condizione, unita all'elevato incremento di temperatura, risulta estremamente favorevole per la formazione degli NO_x.

La formazione del particolato è invece legata alle fasi successive della combustione; la maggior parte del combustibile, infatti, evapora soltanto dopo l'ignizione a causa del calore generato; ciò dà luogo ad una combustione in fase diffusiva, e gli elevati gradienti termici nell'intorno delle gocce, uniti ad un ambiente povero di ossigeno provocano fenomeni di pirolisi del combustibile allo stato liquido, causando la perdita degli atomi di idrogeno e formando i nuclei che daranno origine ai complessi molecolari di atomi di carbonio costituenti il particolato solido.

1.2 Tecniche di abbattimento degli inquinanti del motore Diesel

La riduzione delle emissioni di particolato è affidata ad un filtro, detto filtro antiparticolato (DPF – Diesel Particulate Filter), il quale consiste in una struttura a nido d'ape i cui canali sono alternativamente aperti e chiusi alle estremità e la cui porosità permette il passaggio dei soli gas. L'accumulo di depositi solidi causa l'aumento della contropressione allo scarico con una conseguente riduzione delle prestazioni del motore, rendendo quindi necessaria la rigenerazione del filtro, la quale si realizza mediante combustione del particolato accumulato.

Più complesso risulta invece l'abbattimento degli NO_x; infatti l'eliminazione di questo inquinante avviene mediante reazioni chimiche di riduzione; la difficoltà in questo caso sta nel fatto che il motore Diesel opera con elevato eccesso d'aria, e quindi obbliga ad effettuare le reazioni di riduzione in presenza di elevate concentrazioni di ossigeno (le quali favorirebbero invece le reazioni di ossidazione).

Le tecniche sviluppate ricadono in due categorie: la prima consiste nell'utilizzo di convertitori catalitici ad accumulo e riduzione di NO_x (NAC – NO_x Adsorber Catalysts), la seconda invece si basa sulla riduzione selettiva catalitica degli NO_x (SCR – Selective Catalytic Reduction) e impiega un agente riducente iniettato dall'esterno (generalmente ammoniaca).

L'utilizzo diretto dell'ammoniaca risulta problematico per le applicazioni mobili, sia sotto il profilo della sicurezza (essa è tossica e infiammabile) sia sotto il profilo della logistica (essa è allo stato gassoso, con tutte le criticità che ciò comporta); per tali motivi generalmente (ed in particolare nelle applicazioni mobili) si utilizza una soluzione di acqua e urea, dalla quale si ricava l'ammoniaca per mezzo di reazioni di termolisi. Oggetto di questa tesi sarà lo sviluppo e l'im-

plementazione, all'interno del pacchetto CFD (Computational Fluid Dynamics) OpenFOAM[®], di un modello di calcolo per l'analisi di film liquidi a parete da utilizzare nelle simulazioni di sistemi di iniezione di miscele di acqua e urea.

Capitolo 2

Equazioni della fase gassosa

Il primo passo per lo sviluppo di un codice per simulazioni fluidodinamiche è la modellazione e la messa in equazioni matematiche dei fenomeni in esame. Il problema oggetto di questa tesi vede la presenza contemporanea di una fase gassosa, una fase liquida e di reciproche interazioni chimico-fisiche tra le due (evaporazione del liquido, reazioni chimiche, ecc.).

Inizialmente verranno presentate le leggi costitutive e le ipotesi utilizzate nella modellazione del comportamento delle varie specie coinvolte, quindi si passerà alla scrittura delle equazioni di conservazione delle grandezze di interesse per il nostro studio; particolare attenzione verrà poi dedicata al fenomeno della turbolenza, sia nei suoi caratteri generali sia evidenziando le peculiarità di alcune modellizzazioni di uso comune.

L'utilizzo congiunto delle leggi costitutive, dei modelli di trasporto e delle equazioni di conservazione in forma generale ci permetterà infine di scrivere il sistema di equazioni differenziali che governa i fenomeni in esame e le cui tecniche risolutive verranno presentate nei capitoli successivi.

2.1 Leggi costitutive

Le leggi costitutive permettono di descrivere matematicamente il comportamento del sistema o di parte di esso in relazione a determinati fenomeni; inoltre, dal momento che il sistema di equazioni di conservazione è indeterminato avendo un numero di incognite superiore al numero di equazioni, le leggi costitutive risultano fondamentali per la buona posizione del problema.

Per quanto riguarda il caso in esame, sarà necessario disporre di un modello matematico per il tensore degli sforzi $\underline{\underline{\sigma}}$, per il flusso di energia \vec{q} , per il flusso diffusivo molecolare \vec{j}_k e per il comportamento termodinamico delle specie coinvolte (equazione di stato).

2.1.1 Legge di Newton

La legge di Newton della viscosità permette di correlare il tensore degli sforzi $\underline{\underline{\sigma}}$ al tensore delle deformazioni $\underline{\underline{D}}$, il quale è funzione del gradiente di velocità.

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{D}} - \left(p + \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{u} \right) \underline{\underline{I}} = \left(2\mu\underline{\underline{D}} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{u} \underline{\underline{I}} \right) - p\underline{\underline{I}} = \underline{\underline{\tau}} - p\underline{\underline{I}} \quad (2.1)$$

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} \left[\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right] \quad (2.2)$$

Nelle due precedenti espressioni μ rappresenta la viscosità dinamica, p è la pressione statica, $\underline{\underline{I}}$ è il tensore identità e $\underline{\underline{\tau}}$ prende il nome di parte viscosa del tensore degli sforzi. Le precedenti formulazioni sono state ricavate sotto l'ipotesi di Stokes:

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.3)$$

dove λ è il secondo coefficiente di viscosità.

2.1.2 Legge di Fourier e flusso di energia

Il flusso totale di energia può essere visto come la somma di due contributi, un flusso termico, espresso mediante la legge di Fourier, e un flusso entalpico di tipo diffusivo (presente solo nel caso si considerino delle miscele).

La legge di Fourier esprime il flusso termico come funzione della temperatura T e della conducibilità termica λ_t :

$$\vec{q}_t = -\lambda_t \nabla T \quad (2.4)$$

mentre il flusso entalpico diffusivo può essere espresso in funzione della velocità di diffusione \vec{V}_k ricavata mediante la legge di Fick, la quale verrà esposta in seguito.

$$\vec{q}_d = \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \quad (2.5)$$

dove ρ è la densità, \hat{H}_k e ω_k sono rispettivamente l'entalpia specifica e la frazione massica della k-esima specie e N_C è il numero di specie chimiche presenti nel sistema.

Il flusso totale di energia risulta allora così definito:

$$\vec{q} = \vec{q}_t + \vec{q}_d = -\lambda_t \nabla T + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \quad (2.6)$$

2.1.3 Legge di Fick

Il calcolo delle velocità di diffusione e dei flussi diffusivi può essere effettuato direttamente risolvendo un sistema di equazioni lineari; tuttavia questo metodo risulta molto oneroso dal punto di vista computazionale in quanto tale sistema deve essere risolto per ogni specie, in ogni punto e direzione spaziali e in ogni istante temporale. Per modellizzare il flusso diffusivo di massa così definito:

$$\vec{j}_k = \rho \omega_k \vec{V}_k \quad (2.7)$$

si preferisce quindi ricorrere alla legge di Fick, la quale stabilisce quanto segue:

$$\omega_k \vec{V}_k = -\Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (2.8)$$

Sostituendo la 2.8 nella 2.7 si ottiene l'espressione del flusso diffusivo in termini di incognite del problema, in quanto la velocità di diffusione non è di alcun interesse ai fini dell'analisi:

$$\vec{j}_k = -\rho \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (2.9)$$

$\Gamma_{k,mix}$ è il coefficiente di diffusione della k-esima specie nella miscela.

2.1.4 Equazioni di stato

L'equazione di stato permette di stabilire un legame tra una variabile di stato e le variabili del sistema, ad esempio:

$$\rho = \rho(p, T) \quad (2.10)$$

Nel caso in esame può essere ritenuta valida, per la fase gassosa, l'ipotesi di gas ideale la cui equazione di stato è la seguente:

$$\rho = \frac{p}{R^* T} \quad (2.11)$$

essendo

$$R^* = \frac{R}{MM} \quad (2.12)$$

con R costante universale dei gas (pari a $8,314 \frac{J}{molK}$) e MM è la massa molare della specie considerata (oppure la massa molare media nel caso di una miscela).

Per la fase liquida si ritiene valida l'ipotesi di liquido incomprimibile.

2.2 Equazioni di conservazione

Le equazioni che descrivono il comportamento della fase gassosa sono ricavate seguendo l'approccio euleriano, ossia tutte le variabili (\vec{u} , T , p , ecc) e le proprietà del fluido (ρ , μ , λ_t , ecc) sono funzioni delle coordinate spaziali e del tempo. La scelta di questo approccio è giustificata dalla necessità di determinare l'intero campo di moto, senza considerare il moto, e quindi la traiettoria, della singola particella di fluido (i quali sono facilmente determinabili utilizzando l'approccio lagrangiano).

Considerato un volume di controllo V , delimitato dalla superficie di contorno S con versore normale \underline{n} , considerato positivo uscente, le equazioni di conservazione sono riconducibili alla seguente formulazione generale:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int_S \rho\phi\vec{u} \cdot \underline{n} dS = \int_S \vec{Q}_S(\phi) \cdot \underline{n} dS + \int_V Q_V(\phi) dV \quad (2.13)$$

dove ϕ è la generica grandezza che si conserva. Il primo addendo al primo membro rappresenta il tasso di variazione di ϕ mentre il secondo addendo è il flusso convettivo di ϕ attraverso il contorno del sistema. I termini al secondo membro sono il flusso diffusivo e il termine di generazione (o distruzione) di ϕ rispettivamente attraverso la superficie di contorno e nel volume.

La formulazione precedente è di tipo globale e non permette di conoscere ciò che avviene all'interno del volume di controllo; per poter determinare la distribuzione spaziale di ϕ in ogni punto del dominio è necessario ricondurre l'equazione ad una formulazione differenziale; per fare ciò applichiamo il teorema della divergenza di Gauss agli integrali di superficie trasformandoli in integrali di volume e, dovendo essere la formulazione valida per qualsiasi volume di controllo, si ricava:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\phi) = \nabla \cdot (\vec{Q}_S(\phi)) + Q_V(\phi) \quad (2.14)$$

Sostituendo opportunamente ϕ , \vec{Q}_S , Q_V nella 2.14 è possibile ottenere le equazioni di trasporto necessarie per lo studio del sistema.

2.2.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di conservazione della massa, o di continuità, è ottenuta sostituendo $\phi = 1$, $Q_V = \dot{\Omega}$ nella 2.14 e considerando \vec{Q}_S nullo, essendo nulli i flussi diffusivi.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.15)$$

Il termine di generazione $\dot{\Omega}$ è stato scomposto in due contributi, uno chiamato $\dot{\Omega}^{Spray}$, dovuto all'evaporazione delle gocce dello spray e uno chiamato $\dot{\Omega}^{WallFilm}$, dovuto all'evaporazione del film liquido a parete.

2.2.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche

Nel sistema in esame, essendo esso multicomponente e reagente, oltre alla conservazione della massa, è necessario considerare anche la conservazione delle singole specie chimiche. Sostituendo nella 2.14 $\phi = \omega_k$ otteniamo l'equazione di trasporto per la specie k-esima:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega_k) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \omega_k) = -\nabla \cdot \vec{j}_k + \dot{\Omega}_k^{Chemistry} + \dot{\Omega}_k^{Spray} + \dot{\Omega}_k^{WallFilm} \quad (2.16)$$

Il termine $-\nabla \cdot \vec{j}_k$ rappresenta il flusso diffusivo ed è modellato secondo la legge di Fick, mentre il termine $\dot{\Omega}_k^{Chemistry}$ rende conto della generazione o distruzione della k-esima specie per effetto delle reazioni chimiche (per la sua modellazione si ricorre alla legge di Arrhenius che esplicheremo successivamente). Gli effetti dell'evaporazione dello spray e del film liquido a parete sono considerati rispettivamente nei termini $\dot{\Omega}_k^{Spray}$ e $\dot{\Omega}_k^{WallFilm}$.

Dovendo risolvere un'equazione del tipo della 2.16 per tutte le N_C specie presenti si ottiene un sistema di equazioni che deve rispettare le seguenti condizioni, necessarie per verificare la conservazione della massa:

$$\sum_{k=1}^{N_C} \vec{j}_k = 0 \quad (2.17)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{Chemistry} = 0 \quad (2.18)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{Spray} = \dot{\Omega}^{Spray} \quad (2.19)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{WallFilm} = \dot{\Omega}^{WallFilm} \quad (2.20)$$

Sommando tra loro tutte le N_C equazioni di trasporto delle specie chimiche, rispettando le condizioni 2.17, 2.18, 2.19 e 2.20 e ricordando che $\sum_{k=1}^{N_C} \omega_k = 1$, si ricava l'equazione di continuità.

2.2.3 Equazione di conservazione della quantità di moto

L'equazione di conservazione della quantità di moto si ricava sostituendo $\phi = \vec{u}$ nella 2.14 e ponendo $\vec{Q}_S = \underline{\underline{\sigma}}$ e $Q_V = \rho \vec{f} + \xi$.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \vec{f} + \xi \quad (2.21)$$

È utile esplicitare il significato dei termini sorgente a destra dell'uguale: $\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}$ rappresenta l'effetto sulla quantità di moto del tensore degli sforzi (gradienti di pressione, di velocità, ecc), \vec{f} tiene conto delle forze di campo o volumetriche (forza di gravità, di Coriolis, elettromagnetiche, ecc) e ξ esprime l'influenza dello spray liquido.

Considerando come sola forza di volume la gravità allora \vec{f} coincide con il vettore accelerazione di gravità \vec{g} , rendendo indispensabile conoscere l'orientazione della geometria.

2.2.4 Equazione di conservazione dell'energia

L'energia totale \hat{E} posseduta da una particella di fluido è la risultante di due componenti: l'energia cinetica specifica \hat{E}_k , associata al moto convettivo e l'energia interna \hat{U} funzione invece del suo stato termodinamico (funzione quindi di pressione, temperatura e composizione chimica).

$$\hat{E} = \hat{E}_k + \hat{U}(p, T, \omega_k) = \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} + \hat{U}(p, T, \omega_k) \quad (2.22)$$

Sostituendo nella 2.14 $\phi = \hat{E}$, $\vec{Q}_S = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u})$ e $Q_V = \dot{Q} +$

$\rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k)$ otteniamo l'equazione di conservazione dell'energia in forma differenziale:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{E}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{E}) = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \quad (2.23)$$

La potenza generata per unità di volume \dot{Q} è data da due contributi: spray \dot{Q}^{Spray} e film liquido a parete $\dot{Q}^{WallFilm}$.

$$\dot{Q} = \dot{Q}^{Spray} + \dot{Q}^{WallFilm} \quad (2.24)$$

L'equazione 2.23 traduce in forma differenziale il primo principio della termodinamica, il quale afferma che la variazione di energia nel tempo è uguale alla somma dei flussi di energia dovuti al moto convettivo, del lavoro meccanico $\nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k)$ e dell'apporto di calore $-\nabla \cdot \vec{q} + \dot{Q}$.

2.3 Equazioni di Navier-Stokes

L'unione delle equazioni di conservazione e delle leggi costitutive crea il sistema di equazioni differenziale descrittivo della miscela di fluidi Newtoniani oggetto del problema.

Conservazione della massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.25)$$

Conservazione delle specie chimiche

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega_k) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \omega_k) &= \nabla \cdot (\rho \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k) + \\ &+ \dot{\Omega}_k^{Chemistry} + \dot{\Omega}_k^{Spray} + \dot{\Omega}_k^{WallFilm} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Conservazione della quantità di moto

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) &= \rho \vec{f} - \left(\nabla p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \underline{\underline{I}} \right) + \\ &+ \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right) \right] + \xi \end{aligned} \quad (2.27)$$

Conservazione dell'energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{E}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{E}) &= \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \nabla \cdot \left(\lambda_t \nabla T - \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \right) + \\ &+ \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Definendo l'entalpia specifica \hat{H} come:

$$\hat{H} = \hat{U} + \frac{p}{\rho} \quad (2.29)$$

e introducendola nell'equazione di conservazione dell'energia otteniamo la seguente formulazione:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{H}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{H}) &= \frac{Dp}{Dt} + \underline{\underline{\tau}} : \nabla \vec{u} - \nabla \cdot \vec{q} + \\ &+ \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Il termine $\Psi = \underline{\underline{\tau}} : \nabla \vec{u}$, chiamato funzione di dissipazione, rappresenta il doppio prodotto interno tra la parte viscosa del tensore degli sforzi e il gradiente della velocità; dal punto di vista fisico esprime la dissipazione di energia meccanica in energia termica dovuta agli effetti viscosi. Normalmente l'equazione di conservazione dell'energia è espressa in termini di entalpia sensibile specifica \hat{H}_s così definita:

$$\hat{H}_s = \hat{H} - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot \omega_k \quad (2.31)$$

dove $\Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot \omega_k$ è l'entalpia di formazione standard della k-esima specie. Ricordando la 2.26 è possibile riscrivere la 2.28 in termini di entalpia sensibile specifica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{H}_s) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{H}_s) &= \frac{Dp}{Dt} + \Psi - \nabla \cdot \vec{q} + \\ &+ \dot{Q} + \dot{Q}^{Chemistry} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Il termine $\dot{Q}^{Chemistry}$ è l'energia per unità di tempo liberata o richiesta dalle reazioni chimiche.

$$\dot{Q}^{Chemistry} = - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \dot{\Omega}_k \quad (2.33)$$

Si osservi che nella stesura del sistema di equazioni di Navier-Stokes non è stata formulata alcuna ipotesi sul regime di moto, quindi esso è valido sia per flussi in regime laminare che per flussi in regime turbolento. Inoltre si noti che la temperatura non appare esplicitamente come incognita (almeno nella formulazione più generale): essa dovrà essere ricavata, secondo le leggi costitutive, a valle della risoluzione del sistema stesso.

2.4 Turbolenza

I fluidi possono presentare due regimi di flusso differenti: laminare e turbolento. Il regime laminare è caratterizzato da un moto ordinato, in cui sono prevalenti gli effetti viscosi e i filetti infinitesimi di fluido scorrono l'uno sull'altro senza alcun tipo di rimescolamento, né macroscopico né microscopico; nel regime turbolento invece gli effetti viscosi non sono sufficienti a compensare gli effetti inerziali causando un flusso caotico e rimescolamenti su piccola e grande scala.

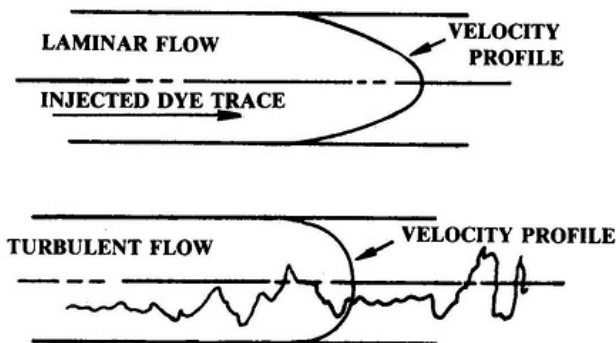


Figura 2.1: Differenti regimi di flusso: laminare (in alto) e turbolento (in basso)

Il principale parametro che consente di discriminare tra i differenti regimi di moto è il numero di Reynolds, risultato dell'adimensionalizzazione dell'equazione della quantità di moto.

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.34)$$

U e L sono rispettivamente la velocità e la dimensione lineare caratteristiche del problema; dal punto di vista fisico il numero di Reynolds è il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze d'inerzia e l'ordine di grandezza delle forze viscosi. Il numero di Reynolds critico che separa il regime laminare da quello turbolento è un valore convenzionale che varia in funzione del problema, in quanto tra il moto assolutamente laminare e il moto turbolento completamente sviluppato esiste una transizione caratterizzata da un intervallo di numeri di Reynolds.

2.4.1 Caratteristiche della turbolenza

I flussi turbolenti presentano delle caratteristiche peculiari: essi infatti sono fortemente instazionari e intrinsecamente tridimensionali, con fluttuazioni delle varie grandezze distribuite su un ampio intervallo di lunghezze e tempi caratteristici; inoltre la turbolenza incrementa tutti i fenomeni diffusivi e di mescolamento (specie chimiche, quantità di moto, energia).

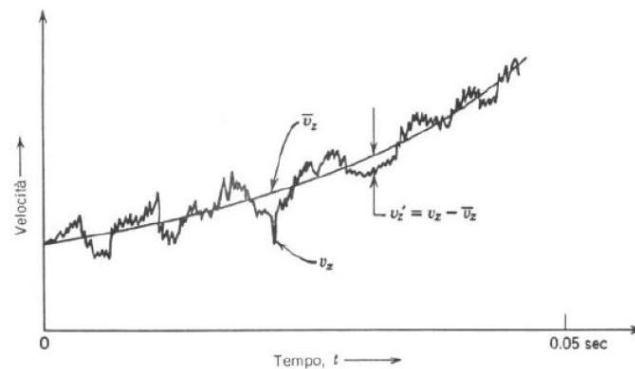


Figura 2.2: Oscillazioni di una componente del vettore velocità intorno al suo valore medio

All'interno dei moti turbolenti è possibile identificare delle strutture coerenti, le quali interagiscono tra di loro trasferendo energia dalle strutture più grandi a quelle più piccole. Questo processo, che porta alla dissipazione dell'energia meccanica in calore per effetto della viscosità, è oggetto della *Teoria di Kolmogorov*. Essa individua due scale limite per le dimensioni dei vortici: la macroscale L , che rappresenta la dimensione dei vortici più grandi ed è dello stesso ordine della grandezza caratteristica del sistema, e la scala di Kolmogorov l_d , che identifica la dimensione più piccola che possono assumere i vortici e al di sotto della quale non è più possibile trasferire energia, ma solo dissiparla. La condizione che permette di determinare la microscala di Kolmogorov è $Re_{l_d} = \frac{l_d u_{l_d}}{\nu} \simeq 1$, identificando co-

sì la scala al di sotto della quale gli effetti viscosi prevalgono sugli effetti inerziali. u_{l_d} indica l'ampiezza delle fluttuazioni di velocità alla microscala di Kolmogorov.

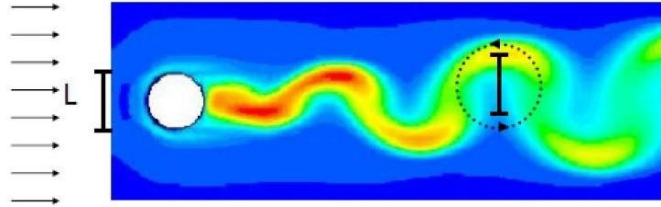


Figura 2.3: Esempio di macroscale L

2.4.2 Modellazione della turbolenza

Le equazioni di Navier-Stokes, come precedentemente sottolineato, non necessitano di ipotesi sul tipo di flusso preso in esame; tuttavia, la simulazione diretta di un flusso turbolento richiederebbe una discretizzazione spazio-temporale tanto raffinata da risolvere il moto fino alla microscala di Kolmogorov e ai tempi caratteristici ad essa associati. Tale approccio risulta però estremamente oneroso dal punto di vista computazionale in quanto la microscala è tanto più piccola quanto più elevato è il numero di Reynolds del problema in esame, e quindi non è attualmente applicabile alla maggioranza dei problemi riscontrati nella pratica. Si rende pertanto necessaria una modellizzazione della turbolenza che consenta contemporaneamente di ottenere dei risultati accurati e di ridurre il costo computazionale delle simulazioni.

Nell'ambito della fluidodinamica computazionale il metodo più utilizzato è la mediazione temporale: il valore istantaneo di ogni grandezza può essere incorporato nella somma di un opportuno termine medio e di un termine fluttuante. La scelta dell'intervallo di tempo utilizzato nella mediazione è particolarmente critica in quanto esso deve essere sufficientemente grande da non risentire delle fluttuazioni istantanee, ma non eccessivamente grande da perdere traccia delle fluttuazioni stesse. La tecnica più semplice è la mediazione secondo Reynolds, la quale però non viene utilizzata nei codici CFD in quanto in essa compaiono dei termini difficili da gestire; per ovviare a questo inconveniente si preferisce utilizzare la mediazione secondo Favre.

2.4.2.1 Mediazione secondo Reynolds

La generica grandezza ϕ , funzione della posizione spaziale e del tempo, può essere espressa come somma di una componente media $\bar{\phi}$ e un termine fluttuante ϕ' :

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i, t) + \phi'(x_i, t) \quad (2.35)$$

Il valore medio $\bar{\phi}$ è definito come media temporale sull'intervallo Δt sufficientemente maggiore della scala temporale dei vortici turbolenti:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(x_i, t) dt \quad (2.36)$$

Per definizione le fluttuazioni sono a media temporale nulla:

$$\bar{\phi}'(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t) dt = 0 \quad (2.37)$$

Si osservi che la media del prodotto di due componenti fluttuanti non è nulla:

$$\overline{\phi'\psi'}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t) \psi'(x_i, t) dt \neq 0 \quad (2.38)$$

Riportiamo a titolo esemplificativo l'equazione di conservazione della massa mediata secondo Reynolds:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{u} + \overline{\rho' u'}) = 0 \quad (2.39)$$

2.4.2.2 Mediazione secondo Favre

La mediazione secondo Reynolds produce molti termini incogniti, che necessitano di essere modellati, della forma $\overline{\rho' \phi'}$ costituiti dalla fluttuazione di densità e dalla fluttuazione della generica grandezza ϕ . La mediazione secondo Favre risolve questo problema essendo una mediazione pesata sulla massa.

$$\phi(x_i, t) = \tilde{\phi}(x_i, t) + \phi''(x_i, t) \quad (2.40)$$

dove la grandezza mediata $\tilde{\phi}$ è definita come:

$$\tilde{\phi}(x_i, t) = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.41)$$

Le fluttuazioni ϕ'' così ottenute godono di alcune importanti proprietà:

$$\widetilde{\phi}''(x_i, t) = \frac{\overline{\rho(\phi - \widetilde{\phi})}}{\bar{\rho}} = 0 \quad (2.42)$$

$$\overline{\rho\phi}''(x_i, t) = 0 \quad (2.43)$$

$$\overline{\phi}''(x_i, t) = -\frac{\overline{\rho'\phi'}}{\bar{\rho}} \neq 0 \quad (2.44)$$

2.4.3 Equazioni della turbolenza

Applicando la mediazione di Favre alle equazioni di Navier-Stokes otteniamo il seguente sistema di equazioni mediate nel tempo:

Conservazione della massa mediata

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.45)$$

Conservazione delle specie chimiche mediata

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{\omega}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}\widetilde{\omega}_k) &= \nabla \cdot (\overline{\rho\Gamma_{k,mix}\nabla\omega_k}) + \\ &+ \bar{\Omega}_k^{Chemistry} + \dot{\Omega}_k^{Spray} + \dot{\Omega}_k^{WallFilm} - \nabla \cdot (\overline{\rho\omega_k''\widetilde{u}''}) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Conservazione della quantità di moto mediata

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{u}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}\widetilde{u}) = \bar{\rho}\widetilde{f} - \nabla\bar{p} + \nabla \cdot \widetilde{\underline{\underline{\tau}}} + \xi + \nabla \cdot (\overline{\rho\widetilde{u}''\widetilde{u}''}) \quad (2.47)$$

Conservazione dell'energia mediata

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{H}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{u}\widetilde{H}_s) &= \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \bar{\Psi} - \nabla \cdot \bar{q} + \\ &+ \bar{Q} + \bar{Q}^{Chemistry} - \nabla \cdot (\overline{\rho\widetilde{u}''\hat{H}_s''}) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Si noti che nell'equazione dell'energia si è trascurato, per semplicità, il termine dovuto alle forze esterne di volume.

Le equazioni mediate presentano dei termini aggiuntivi incogniti rispetto alla formulazione del capitolo precedente:

- il tensore degli sforzi turbolenti o sforzi di Reynolds $\nabla \cdot (\overline{\rho \widetilde{u''u''}})$
- il flusso turbolento delle specie $\nabla \cdot (\overline{\rho \omega_k'' \widetilde{u''}})$
- il flusso turbolento di entalpia $\nabla \cdot (\overline{\rho \widetilde{u'' \hat{H}_s''}})$

La determinazione dei termini incogniti prende il nome di *chiusura* o *modellazione della turbolenza* e viene realizzata introducendo delle relazioni aggiuntive dipendenti dal modello di chiusura scelto.

Il termine $\overline{\Omega_k^{Chemistry}}$, che rappresenta la velocità di formazione della k-esima specie, necessita anch'esso di una modellazione che descriva l'interazione tra la cinetica chimica e la turbolenza; data la non linearità di questo termine la sua modellazione risulta molto problematica e fondamentale per la buona riuscita delle simulazioni numeriche.

2.4.3.1 Sforzi di Reynolds

Applicando l'ipotesi di Bousinesq, secondo la quale anche i flussi turbolenti sono funzione del gradiente che li ha generati, possiamo esprimere il flusso della quantità di moto turbolento in funzione del gradiente di velocità, in analogia con il trasporto molecolare. Si introduce quindi la *viscosità turbolenta* μ_t e si esprimono gli sforzi di Reynolds con una formulazione che richiama la legge di Newton presentata nel capitolo precedente:

$$\overline{\rho \widetilde{u''u''}} = \mu_t \underline{\underline{\tilde{\tau}}} + \frac{2}{3} \overline{\rho} k \underline{\underline{I}} \quad (2.49)$$

dove k rappresenta l'energia cinetica turbolenza così definita:

$$k = \frac{1}{2} \overline{\widetilde{u''u''}} \quad (2.50)$$

Il problema della chiusura si traduce allora nella stima della viscosità turbolenta; più avanti mostreremo le formulazioni più utilizzate analizzando nel dettaglio alcune di esse.

2.4.3.2 Flussi turbolenti di specie ed entalpia

Come ipotizzato per gli sforzi di Reynolds, anche i flussi turbolenti di specie ed entalpia sono considerati funzione di un gradiente e per essi vengono date le seguenti formulazioni:

$$\overline{\rho \omega_k'' \tilde{u}''} = -\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \nabla \tilde{\omega}_k \quad k = 1, \dots, N_C \quad (2.51)$$

$$\overline{\rho \tilde{u}'' \hat{H}_s''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{H}_s \quad (2.52)$$

I termini $Sc_{t,k}$ e Pr_t sono rispettivamente il numero di Schmidt turbolento della k-esima specie e il numero di Prandtl turbolento.

$$Sc_{t,k} = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} \Gamma_{t,k,mix}} \quad Pr_t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} \alpha_t} \quad (2.53)$$

$\Gamma_{t,k,mix}$ è la diffusività materiale turbolenta della k-esima specie nella miscela e α_t è la diffusività termica turbolenta.

2.4.4 Modelli di chiusura

Come già accennato in precedenza il problema della chiusura della turbolenza consiste nell'ottenere un'espressione della viscosità turbolenta. A tal proposito sono stati sviluppati vari approcci, comunemente classificati in base al numero di equazioni differenziali di trasporto aggiuntive utilizzate nel modello.

Lo schema più semplice è quello proposto da Prandtl il quale utilizza delle equazioni algebriche (quindi un modello a zero equazioni) basate sul tensore delle deformazioni medio $\underline{\underline{\tilde{D}}}$ e la lunghezza di miscelazione l_{mix} .

$$\mu_t = \bar{\rho} l_{mix}^2 |\underline{\underline{\tilde{D}}}| \quad (2.54)$$

La lunghezza di miscelazione rappresenta una specie di libero cammino medio ed è fortemente dipendente dal problema: essa viene calcolata mediante formule empiriche e non può pertanto essere generalizzata.

Un esempio di modello ad una equazione è quello di Prandtl-Kolmogorov. Esso calcola la viscosità turbolenta in funzione della lunghezza di miscelazione e dell'energia cinetica turbolenta, per la quale è necessario scrivere un'equazione di trasporto.

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l_{mix} \sqrt{k} \quad (2.55)$$

C_μ è una costante del modello posta pari a 0.09.

I modelli più comunemente utilizzati sono tuttavia a due equazioni, i quali consentono di ottenere risultati accurati con costi computazionali non eccessivi.

In questi modelli vengono considerate sia l'energia cinetica turbolenta k sia la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ϵ e per questo motivo sono anche chiamati modelli $k-\epsilon$. La formulazione della viscosità turbolenta per questi modelli è la seguente:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.56)$$

L'equazione di trasporto per k è ottenuta partendo dalle equazioni di Navier-Stokes opportunamente modificate e mediate mentre l'equazione di trasporto per ϵ è derivata empiricamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \bar{\rho} \epsilon + \dot{W}^{Spray} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \epsilon) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \epsilon) &= \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \\ &+ \frac{\epsilon}{k} \left(C_{1\epsilon} P_k - C_{2\epsilon} \bar{\rho} \epsilon + C_s \dot{W}^{Spray} \right) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Il termine sorgente P_k è dato dalla seguente espressione:

$$P_k = -\bar{\rho} \widetilde{u'' u''} \nabla \vec{u} \quad (2.59)$$

$C_\mu, \sigma_k, \sigma_\epsilon, C_{1\epsilon}, C_{2\epsilon}$ sono costanti empiriche che dipendono dal modello scelto mentre C_s e \dot{W}^{Spray} tengono conto degli effetti dello spray sulla turbolenza.

Una variazione rispetto al modello $k-\epsilon$ *standard* è il modello $k-\epsilon$ *RNG* (*Re-Normalization Group*): esso deriva da una complessa base matematica teorica e si contraddistingue per avere dei diversi valori delle costanti, in particolare, il parametro $C_{1\epsilon}$ non è più una costante ma è espresso come:

$$C_{1\epsilon} = C_{1\epsilon}^0 - \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3} \quad (2.60)$$

Il termine η è definito come:

$$\eta = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{\frac{P_k}{\mu}} \quad (2.61)$$

Per le due nuove costanti β e η_0 la teoria suggerisce rispettivamente i valori 0.015 e 4.4. La costante $C_{1\epsilon}^0$ è assunta uguale alla costante $C_{1\epsilon}$ del modello standard.

Riportiamo nella seguente tabella i valori delle costanti per il modello $k - \epsilon$ *standard* e il modello $k - \epsilon$ *RNG*:

	C_μ	σ_k	σ_ϵ	$C_{1\epsilon}$	$C_{2\epsilon}$	C_s
<i>Standard</i>	0.09	1.0	1.3	1.44	1.92	1.5
<i>RNG</i>	0.0845	0.7194	0.7194	<i>equazione 2.60</i>	1.42	1.5

Tabella 2.1: Costanti dei modelli $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$

Il modello $k - \epsilon$ *RNG* presenta risultati più in accordo con le misure sperimentali rispetto al modello *standard* e inoltre può essere esteso alle regioni essenzialmente laminari di parete in quanto il termine di produzione di ϵ tiene conto dell'accresciuta dissipazione di queste zone attraverso il coefficiente $C_{1\epsilon}$ (equazione 2.60). Il modello $k - \epsilon$ *RNG* può essere pertanto utilizzato per bassi numeri di Reynolds e non necessita delle funzioni di parete, indispensabili invece per il modello *standard*.

Oltre alla famiglia $k - \epsilon$ sono stati sviluppati molti altri modelli di turbolenza, i quali considerano al posto di ϵ delle altre grandezze caratteristiche; citiamo ad esempio i modelli $k - \omega$ i quali si basano sulla grandezza ω definita come il rapporto tra ϵ e k rappresentando quindi l'inverso del tempo medio di vita dei vortici turbolenti.

2.4.4.1 Funzioni di parete

Le equazioni di trasporto di k ed ϵ 2.57, 2.58 e la relazione 2.55 non sono applicabili alle regioni di parete, cioè nelle zone in cui il fluido, arrivando a contatto con una parete solida, deve assumere la velocità e la temperatura della stessa (condizione di aderenza). In queste regioni i fenomeni di trasporto sono dominati dalle proprietà molecolari essendo esse caratterizzate da strati in cui il moto è laminare. Occorre quindi utilizzare delle funzioni che raccordino la zona di parete con la zona di flusso indisturbato.

Nel substrato viscoso/conduittivo (laminare) lo scambio di quantità di moto, calore o altri scalari è governato dalle proprietà molecolari del fluido e i profili di velocità, temperatura ecc. sono funzioni lineari della distanza y dalla parete. Tra il substrato laminare e la zona pienamente turbolenta esiste un substrato di transizione nel quale i profili variano logaritmicamente con y . Considerando pareti lisce si possono definire i seguenti profili universali:

Profili universali di velocità

$$u^+ = y^+ \quad (y^+ \leq y_u^+) \quad (2.62)$$

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad (y^+ > y_u^+) \quad (2.63)$$

Profili universali di temperatura

$$T^+ = Pr y^+ \quad (y^+ \leq y_T^+) \quad (2.64)$$

$$T^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Fy^+) \quad (y^+ > y_T^+) \quad (2.65)$$

La costante $\kappa \approx 0.42$ è detta *costante di von Kármán* e $y_u^+ \approx 11$ è lo spessore adimensionale del substrato viscoso. Per ricavare il valore della costante $E \approx 9.8$ è sufficiente ricordare i due profili 2.62 e 2.63 in $y^+ = y_u^+$. I valori di F e y_T^+ dipendono dal numero di Prandtl e sono oggetto di molta letteratura.

Le grandezze adimensionali u^+ , y^+ , T^+ utilizzate nei profili universali sono ottenute utilizzando come termini di riferimento la velocità di attrito $u_\tau = (\tau_w/\rho)^{1/2}$, la lunghezza ν/u_τ e la temperatura $q_w/(\rho c_p u_\tau)$.

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (2.66)$$

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \quad (2.67)$$

$$T^+ = \frac{(T - T_w) \rho c_p u_\tau}{q_w} \quad (2.68)$$

τ_w è lo sforzo tangenziale a parete, ν è la viscosità cinematica (μ/ρ), T_w è la temperatura di parete e q_w è il flusso termico a parete.

Data l'enorme importanza delle funzioni di parete, soprattutto nello studio di problemi con scambio termico, sono state sviluppate molte formulazioni, che non vengono qui riportate, modificando opportunamente le relazioni tenendo conto ad esempio della rugosità superficiale della parete.

Le funzioni di parete non sono necessarie nel caso in cui il modello di turbolenza scelto riesca a simulare anche le zone con bassi numeri di Reynolds, risolvendo quindi le equazioni anche nello strato limite.

Capitolo 3

Equazioni dello spray

La fase liquida presente nel sistema viene trattata in due modi diversi: per lo spray si ricorre ad un approccio lagrangiano mentre per il film liquido a parete si utilizza un approccio euleriano.

La scelta dell'approccio lagrangiano per lo spray è legata ai costi computazionali necessari per il calcolo: utilizzando un approccio euleriano infatti sarebbe necessaria una discretizzazione spaziale più piccola della dimensione dell'iniettore in grado di cogliere tutti i fenomeni legati all'iniezione di un liquido. Essendo la dimensione dell'iniettore molto piccola rispetto alle dimensioni caratteristiche del sistema si avrebbe un numero eccessivo di celle di calcolo, rendendo eccessivamente onerosa la risoluzione del sistema di equazioni differenziali.

L'evoluzione dello spray è descritta dagli stessi principi di conservazione già visti per la fase gassosa, applicati alla singola goccia: conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Per descrivere completamente le interazioni interne alla fase liquida e le interazioni con la fase gassosa circostante sono introdotti ulteriori modelli, basati su correlazioni sperimentali, che consentono di quantificare l'evaporazione, lo scambio termico, l'atomizzazione, il breakup, le collisioni tra le gocce e il trattamento a parete dello spray.

3.1 Equazione della massa della goccia

L'unico termine di variazione di massa della goccia è dato dall'evaporazione (non essendo considerata in questo caso la condensazione). L'equazione ha quindi la seguente forma:

$$\frac{dm_d}{dt} = \dot{m}_d \quad (3.1)$$

dove \dot{m}_d rappresenta il tasso di evaporazione. Esso è calcolato mediante la seguente relazione:

$$\dot{m}_d = -\pi D \Gamma \rho_v Sh \ln \frac{p - p_{v,\infty}}{p - p_{v,s}} = -\pi D \Gamma \rho_v Sh \ln \left(1 + \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \right) \quad (3.2)$$

D è il diametro della goccia, ρ_v è la densità dei vapori vicino alla goccia, Γ è il coefficiente di diffusione massico e Sh è il numero di Sherwood. La densità dei vapori è calcolata secondo le legge dei gas perfetti mentre il numero di Sherwood è stimato con la correlazione di Ranz-Marshall:

$$Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (3.3)$$

Re è il numero di Reynolds definito nel capitolo seguente e Sc è il numero di Schmidt definito dal rapporto tra la viscosità cinematica ν e il coefficiente di diffusione massico Γ .

I termini che compongono l'argomento del logaritmo sono rispettivamente la pressioni parziale p_v e la frazionei molare X_v dei vapori; il pedice ∞ indica che la grandezza è valutata in un punto sufficientemente lontano dalla goccia mentre il pedice s indica che la grandezza è valutata in condizioni di saturazione.

Nella pratica l'equazione 3.1 è risolta introducendo un *tempo caratteristico dell'evaporazione* τ_e così definito:

$$\tau_e = \frac{\dot{m}_d}{\pi D \Gamma Sh \rho_v \ln(1 + B)} \quad (3.4)$$

dove B è il numero di Spalding

$$B = \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \quad (3.5)$$

L'equazione di conservazione della massa risulta quindi:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{\dot{m}_d}{\tau_e} \quad (3.6)$$

Le equazioni 3.1 e 3.6 sono valide solo nel caso in cui sia presente solo l'evaporazione e non l'ebollizione.

In caso di ebollizione infatti la pressione di saturazione tende alla pressione ambiente e quindi $B \rightarrow \infty$, $\tau_e \rightarrow 0$ e il tasso di evaporazione tende a infinito,

condizione non fisicamente accettabile. Il tasso di evaporazione, in queste condizioni, è allora governato dalla rapidità con cui viene fornito calore al liquido. L'equazione di conservazione della massa della goccia assume allora la seguente forma:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{\pi D \lambda_t Nu}{c_{p,v}} \ln \left(\frac{c_{p,v}}{\hat{H}_v} (T - T_d) + 1 \right) \quad (3.7)$$

Nu è il numero Nusselt definito più avanti, $c_{p,v}$ è il calore specifico dei vapori, \hat{H}_v è il calore latente di vaporizzazione, $T - T_d$ è la differenza di temperatura tra l'ambiente circostante e la goccia.

Definendo un *tempo caratteristico dell'ebollizione* τ_b otteniamo:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_b} \quad (3.8)$$

dove

$$\tau_b = \frac{m_d c_{p,v}}{\pi D \lambda_t Nu \ln \left(\frac{c_{p,v}}{\hat{H}_v} (T - T_d) + 1 \right)} \quad (3.9)$$

La transizione da evaporazione ad ebollizione avviene quando $\tau_b > \tau_e$ e $p_{v,s} \rightarrow p$, passando dall'equazione 3.6 all'equazione 3.8.

3.2 Equazione di moto della goccia

L'equazione della quantità di moto della goccia è data dalla seconda legge di Newton:

$$m_d \frac{d\vec{u}_d}{dt} = \vec{F} \quad (3.10)$$

dove \vec{u}_d è la velocità della goccia e \vec{F} è la risultante delle forze ad essa applicate; considerando la resistenza aerodinamica (forze di drag) e la forza di gravità otteniamo:

$$\vec{F} = -\frac{\pi D^2}{8} \rho C_D |\vec{u}_d - \vec{u}| (\vec{u}_d - \vec{u}) + m_d \vec{g} \quad (3.11)$$

C_D è il coefficiente di drag stimato attraverso opportune correlazioni; ad esempio,

ignorando gli effetti di deformazione, di evaporazione e di prossimità (quest'ultimi dovuti ad un'elevata frazione volumetrica di liquido) otteniamo:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \right) & Re_d < 1000 \\ 0.424 & Re_d > 1000 \end{cases} \quad (3.12)$$

in cui Re_d rappresenta il numero di Reynolds della goccia valutato alla velocità relativa tra goccia e flusso esterno.

$$Re_d = \frac{\rho |\vec{u}_d - \vec{u}| D}{\mu} \quad (3.13)$$

O'Rourke e Bracco [13] suggeriscono la seguente modifica all'equazione 3.12 per tenere in considerazione gli effetti legati ad un'elevata frazione volumetrica di liquido (la quale può aumentare il coefficiente di drag effettivo, tipicamente nella zona vicina all'iniettore):

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} \left(\theta^{-2.65} + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \theta^{-1.78} \right) & Re_d < 1000 \\ 0.424 & Re_d > 1000 \end{cases} \quad (3.14)$$

θ è la frazione di vuoto locale la quale quantifica la frazione di volume occupata dai gas e sarà quindi tanto più piccola quanto maggiore è la quantità di liquido presente nell'intorno della goccia.

Inoltre bisogna considerare che, a causa delle forze aerodinamiche, la goccia non mantiene una forma sferica ma si deforma con una conseguente variazione del coefficiente di drag calcolabile secondo la seguente relazione:

$$C_D = C_{D,sfera} (1 + 2.632 y) \quad (3.15)$$

dove C_D è il coefficiente di drag della perfetta forma sferica e y quantifica la deviazione dalla forma sferica (si veda la figura 3.1).

Nella pratica l'equazione 3.10 è risolta introducendo un *tempo caratteristico della quantità di moto* τ_u così definito:

$$\tau_u = \frac{8m_d}{\pi \rho C_D D^2 |\vec{u}_d - \vec{u}|} = \frac{4}{3} \frac{\rho_d D}{\rho C_D |\vec{u}_d - \vec{u}|} \quad (3.16)$$

Combinando la 3.10, 3.11 e 3.16 otteniamo l'equazione risolutiva:

$$\frac{d\vec{u}_d}{dt} = -\frac{\vec{u}_d - \vec{u}}{\tau_u} + \vec{g} \quad (3.17)$$

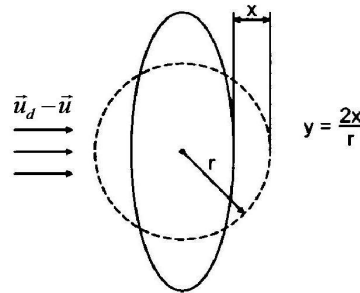


Figura 3.1: Deformazione della goccia a causa delle forze aerodinamiche

3.3 Equazione dell'energia della goccia

La goccia riceve energia dai gas la quale viene utilizzata per incrementarne la temperatura e per fornire il calore latente di evaporazione.

L'evaporazione è sempre presente fintanto che i gas attorno alla goccia non siano saturi, quindi il tasso di evaporazione è sempre negativo, ossia $\dot{m}_d < 0$. Nel caso in cui il calore proveniente dai gas fosse insufficiente la quantità mancante verrebbe prelevata dall'energia della goccia, diminuendone la temperatura. L'equazione per lo scambio termico risulta:

$$m_d \frac{d\hat{H}_d}{dt} = \dot{m}_d \hat{H}_v(T_d) + \pi D \lambda_t Nu (T - T_d) f \quad (3.18)$$

dove h_d rappresenta l'entalpia sensibile della goccia, Nu è il numero di Nusselt e f è un fattore correttivo che tiene conto del contemporaneo scambio di calore e di massa.

Il numero di Nusselt rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza dello scambio termico convettivo e l'ordine di grandezza dello scambio termico conduttivo nel fluido. Esso è calcolato con la seguente correlazione:

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.19)$$

Si noti che le correlazioni 3.3 e 3.19 hanno la stessa forma, sostituendo al numero di Sherwood il numero Nusselt e al numero di Schmidt il numero di Prandtl; ciò è dovuto al fatto che esiste un'analogia tra lo scambio di massa e lo scambio di calore.

Il numero di Prandtl Pr è definito come il rapporto tra la viscosità cinematica ν e la diffusività termica α .

Il fattore correttivo f è definito come:

$$f = \frac{z}{e^z - 1} \quad z = -\frac{c_{p,v}\dot{m}_d}{\pi D\lambda_t Nu} \quad (3.20)$$

Come per le precedenti equazioni si definisce un *tempo caratteristico dello scambio termico* τ_h :

$$\tau_h = \frac{m_d c_{l,d}}{\pi D\lambda_t Nu} \quad (3.21)$$

Ricordando l'equazione 3.6 si può ricavare l'equazione dell'energia nella forma finale:

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{T - T_d}{\tau_h} f - \frac{1}{c_{l,d}} \frac{\hat{H}_v(T_d)}{\tau_e} \quad (3.22)$$

Si noti che la formulazione presentata considera contemporaneamente lo scambio di calore sensibile e latente e non è possibile disaccoppiare i due contributi, ossia se non si considera l'evaporazione delle gocce esse non scambieranno nemmeno calore con i gas.

3.4 Modelli di atomizzazione

Dal momento che lo scopo dell'approccio lagrangiano è quello di evitare di dover risolvere la regione dell'iniettore, risulta necessario specificare le condizioni iniziali delle gocce dello spray. Questo può essere fatto sia ricorrendo ad un modello di atomizzazione sia imponendo le dimensioni iniziali delle gocce (calcolate mediante un'opportuna distribuzione statistica) e l'angolo di apertura dello spray. Entrambe le opzioni devono essere ottimizzate al fine di ottenere dei risultati accurati; va tuttavia osservato che, mentre l'imposizione delle condizioni iniziali risulta più semplice, veloce e diretto, l'utilizzo di un modello di atomizzazione è più corretto dal punto di vista fisico.

La maggior accuratezza dei modelli di atomizzazione è attualmente offuscata dalle incertezze legati ai modelli di breakup; alla luce di ciò in questo lavoro si è proceduto imponendo le condizioni iniziali per lo spray.

3.5 Modelli di breakup

Quando le gocce di liquido vengono iniettate iniziano a deformarsi e a frammentarsi sotto l'azione delle forze aerodinamiche; questo fenomeno è detto *breakup*. Lo scopo dei modelli di breakup è di descrivere la riduzione della dimensione delle gocce e, se il modello lo prevede, la formazione di nuove gocce più piccole a partire dalle gocce più grandi.

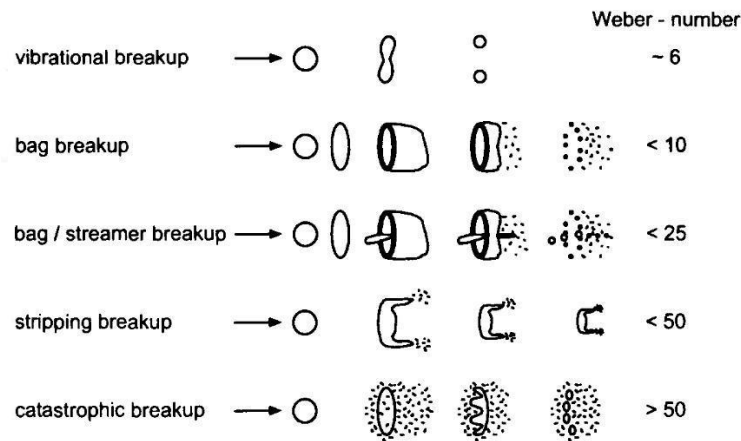


Figura 3.2: Esempi di regimi di breakup

I modelli di breakup ricorrono a una serie di numeri adimensionali caratteristici delle interazioni presenti:

- *numero di Weber*

$$We = \frac{\rho |\vec{u}_{rel}|^2 r}{\sigma} \quad (3.23)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze d'inerzia e l'ordine di grandezza delle forze dovute alla tensione superficiale;

- *numero di Ohnesorge*

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma r}} = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l} \quad (3.24)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze viscosive e l'ordine di grandezza delle forze elastiche che agiscono sulla superficie del fluido (in questo caso il liquido);

- numero di Taylor

$$Ta = \frac{\Omega r^4}{\nu_l^2} = Oh\sqrt{We} \quad (3.25)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze centrifughe e l'ordine di grandezza delle forze viscosi.

σ è la tensione superficiale del liquido, \vec{u}_{rel} è la velocità relativa tra la goccia e i gas circostanti, r è il raggio della goccia, Ω è la pulsazione caratteristica e il pedice l indica che le proprietà termofisiche devono essere riferite al liquido. L'influenza del numero di Weber sulla fenomenologia del breakup è esemplificata nella figura 3.2.

Il modello utilizzato in questo lavoro è il *Reitz KHRT (Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor)*, il quale si basa su due schematizzazioni relative a due diversi regimi di breakup: il KH è tipico di un'instabilità superficiale mentre l'RT è caratteristico di una rottura catastrofica delle gocce. Il meccanismo dominante è quello che prevede il minor tempo di breakup.

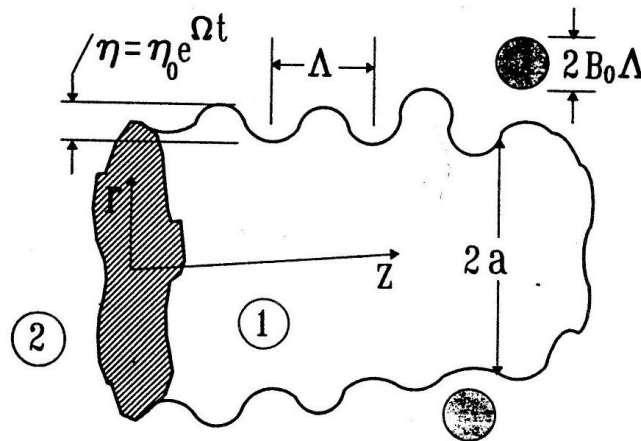


Figura 3.3: Rappresentazione schematica dell'instabilità del meccanismo KH

Il meccanismo KH genera le nuove gocce con il seguente raggio:

$$r_c = B_0 \Lambda_{kh} \quad (3.26)$$

Le nuove gocce si separano dalle gocce di partenza, il cui raggio si riduce secondo la seguente legge:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_c}{\tau_{kh}} \quad \tau_{kh} = \frac{3.788 B_1 D}{\Omega_{kh} \Lambda_{kh}} \quad (3.27)$$

dove $B_0 = 0.61$ e $B_1 = 40$ sono costanti del modello e inoltre:

$$\Omega_{kh} = \frac{0.34 + 0.38We^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + Ta^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_d r^3}} \quad (3.28)$$

$$\Lambda_{kh} = 9.02r \frac{(1 + 0.45\sqrt{Oh})(1 + 0.4Ta^{0.7})}{(1 + 0.865We^{1.67})^{0.6}} \quad (3.29)$$

Λ_{kh} è la lunghezza d'onda dell'onda, di pulsazione Ω_{kh} , che cresce più rapidamente.

Nel meccanismo RT la lunghezza d'onda Λ_{rt} è così calcolata:

$$\Lambda_{rt} = \frac{\pi}{K} \quad (3.30)$$

con

$$K = \sqrt{\frac{|g_t(\rho_l - \rho)|}{3\sigma}} \quad g_t = \left(\vec{g} + \frac{d\vec{u}_d}{dt} \right) \cdot \frac{\vec{u}_d}{|\vec{u}_d|} \quad (3.31)$$

Se Λ_{rt} diventa minore di r si assume che inizino a svilupparsi delle onde sulla superficie delle gocce; da questo istante in poi viene considerato il tempo di vita delle onde e quando esso supera il valore caratteristico $\tau_{rt} = 1/\Omega_{rt}$, con

$$\Omega_{rt} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{27}\sigma} \frac{|g_t(\rho_l - \rho)|^{3/2}}{\rho_l + \rho}} \quad (3.32)$$

si verifica una rottura catastrofica delle gocce, la quale crea istantaneamente numerose gocce più piccole. Infine il modello RT suddivide le gocce in modo tale che il nuovo numero statistico sia incrementato di un fattore r/Λ_{rt} e la nuova dimensione delle gocce viene corretta per assicurare la conservazione della massa.

Tipicamente il meccanismo RT risulta dominante nella regione vicina all'iniettore dove le velocità e le accelerazioni sono più elevate, mentre il meccanismo KH prevale nelle regioni più distanti.

3.6 Modelli di collisione

Esistono due possibili modellizzazioni delle collisioni tra due gocce. Il primo modello di collisione è quello di O'Rourke il quale stabilisce quanto segue:

la collisione tra due gocce avviene quando esse occupano la stessa cella computazionale e la probabilità di collisione è superiore ad un valore soglia basato sulla frequenza di collisione.

La frequenza di collisione è inversamente proporzionale al volume della cella computazionale e quindi un infittimento della griglia di calcolo ne comporta un aumento; per contro si riduce la dimensione del dominio in cui due gocce possono incontrarsi, fino al caso limite in cui le celle hanno dimensioni dello stesso ordine delle gocce e quindi è impossibile avere due gocce nella stessa cella. Un altro limite della formulazione di O'Rourke è che le probabilità di collisione sono le stesse sia che le gocce si stiano avvicinando sia che si stiano allontanando in quanto la frequenza di collisione dipende dai moduli delle velocità e non considera direzione e verso.

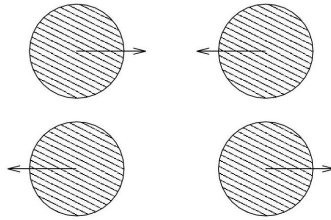


Figura 3.4: Differenti configurazioni aventi la stessa probabilità di collisione secondo la formulazione di O'Rourke

Per tutti questi motivi è stata suggerita la seguente definizione (utilizzata in questo lavoro), indipendente dalla griglia di calcolo:

la collisione tra due gocce avviene se le loro traiettorie si intersecano e il punto di intersezione viene raggiunto nello stesso istante e all'interno del passo di integrazione.

Queste condizioni sono molto onerose dal punto di vista computazionale se applicate a tutte le possibili coppie di gocce. Per eliminare tutte le collisioni impossibili devono allora essere verificati due prerequisiti: il primo è che, affinché si verifichi una collisione, le gocce devono muoversi una verso l'altra, ossia:

$$u_{12} > 0 \quad u_{12} = (\vec{u}_1 - \vec{u}_2) \cdot \frac{\vec{x}_2 - \vec{x}_1}{|\vec{x}_2 - \vec{x}_1|} \quad (3.33)$$

\vec{u} e \vec{x} sono rispettivamente la velocità e la posizione delle gocce 1 e 2 considerate.

Il secondo prerequisito è che lo spostamento relativo delle gocce sia maggiore della loro distanza:

$$u_{12}\Delta t > |\vec{x}_2 - \vec{x}_1| - (r_1 + r_2) \quad (3.34)$$

dove Δt è il passo di integrazione temporale, r_1 e r_2 sono i raggi delle gocce.

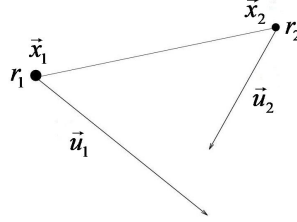


Figura 3.5: Schematizzazione di due gocce impattanti

Se le due condizioni sono verificate entrambe, esiste una probabilità di collisione e la definizione espressa in precedenza può essere formulata in termini matematici. Siano $\alpha_0 \in [0, \Delta t]$ e $\beta_0 \in [0, \Delta t]$ le soluzioni del seguente sistema:

$$\begin{cases} \vec{p}_1 = \vec{x}_1 + \alpha \vec{u}_1 \\ \vec{p}_2 = \vec{x}_2 + \beta \vec{u}_2 \\ \frac{\partial |\vec{p}_2 - \vec{p}_1|}{\partial \alpha, \beta}(\alpha_0, \beta_0) = 0 \end{cases} \quad (3.35)$$

allora la collisione si verifica se un numero casuale $\Upsilon \in [0, 1]$ risulta minore della probabilità di collisione \mathcal{P} così calcolata:

$$\mathcal{P} = \left(\frac{r_1 + r_2}{\max(r_1 + r_2, \Delta_{12})} \right)^{C_1} e^{-C_2 |\alpha_0 - \beta_0| / \Delta t} \quad (3.36)$$

dove $\Delta_{12} = |\vec{p}_2(\beta_0) - \vec{p}_1(\alpha_0)|$ è la minima distanza tra le due traiettorie, C_1 e C_2 sono costanti del modello e rappresentano rispettivamente il decadimento spaziale all'esterno del cilindro descritto dalle gocce e il decadimento nel tempo della probabilità. Sostanzialmente C_1 fa sì che solo le traiettorie sufficientemente vicine possano avere delle probabilità di collisione mentre C_2 fa sì che solo le gocce che si incontrano nello stesso punto e nello stesso istante possano collidere.

3.7 Modelli di trattamento a parete

Quando le gocce dello spray raggiungono una parete solida possono verificarsi diversi tipi di interazione; la modellizzazione presa a riferimento in questo lavoro è quella di Bai-Gosman, nella quale vengono distinti quattro diversi regimi d'impatto (*stick*, *rebound*, *spread* e *splash*). I parametri considerati in questo modello

sono il numero di Weber della goccia (We_d), calcolato utilizzando la componente della velocità normale alla superficie d'impatto, e il numero di Laplace (La).

$$We_d = \frac{\rho_d D_d (\vec{u}_d \cdot \underline{n})^2}{\sigma} \quad (3.37)$$

$$La = \frac{\rho_d \sigma D_d}{\mu_d^2} = \frac{1}{Oh^2} \quad (3.38)$$

Il numero di Laplace rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze dovute alla tensione superficiale e l'ordine di grandezza del trasporto della quantità di moto (principalmente dovuto alle dissipazioni) all'interno del fluido.

I vari regimi d'impatto sono caratterizzati da distinti intervalli di numeri di Weber determinati da analisi teoriche e numerose prove sperimentali.

3.7.1 Stick

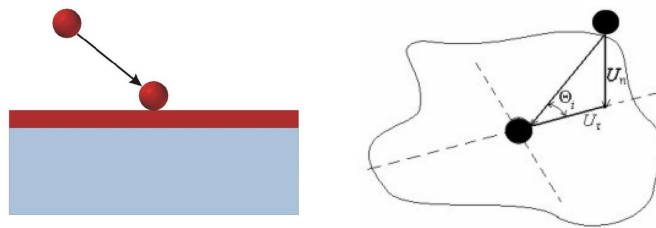


Figura 3.6: Schematizzazione del fenomeno di stick

Il regime di stick è caratterizzato da basse energie d'impatto, quindi le gocce aderiscono alla parete mantenendo la loro forma e non riuscendo a penetrare un eventuale film liquido. In questo caso tutta la massa della goccia contribuisce alla massa del film.

La condizione per cui si verifica lo stick è $We_d < 2$.

3.7.2 Rebound

Il regime di rebound si presenta quando $2 < We_d < 5$; l'energia d'impatto inizia ad essere consistente ma tuttavia insufficiente per permettere alla goccia di immergersi nel film, essa quindi rimbalza sulla superficie e si allontana senza dare alcun apporto di massa.

Per descrivere compiutamente il fenomeno del rebound occorre determinare le componenti della velocità della goccia dopo l'impatto in funzione dei parametri iniziali. Facendo riferimento alla figura 3.7 indichiamo con \vec{U}_n e \vec{U}_τ le componenti

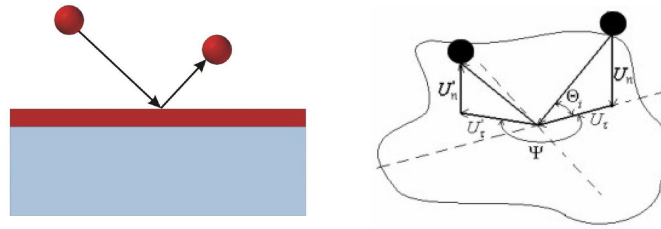


Figura 3.7: Schematizzazione del fenomeno di rebound

della velocità in direzione normale e tangenziale (rispetto al piano del film) prima dell'impatto, con \vec{U}'_n e \vec{U}'_t quelle dopo l'impatto e con Ψ l'angolo di deviazione della goccia uscente rispetto a quella entrante.

Nell'ipotesi di piccole gocce che impattano contro superfici bagnate sussistono le seguenti relazioni tra parametri d'ingresso e parametri d'uscita:

$$|\vec{U}'_t| = \frac{5}{7}|\vec{U}_t| \quad (3.39)$$

$$|\vec{U}'_n| = -e|\vec{U}_n| \quad (3.40)$$

dove e il coefficiente di restituzione così definito:

$$e = 0.993 - 1.76\Theta_i + 1.56\Theta_i^2 - 0.49\Theta_i^3 \quad (3.41)$$

Θ_i è l'angolo d'incidenza dell'urto espresso in radianti misurato a partire dalla superficie della parete.

Il valore di Ψ viene assunto in modo casuale tra 90 e 270 gradi.

3.7.3 Spread

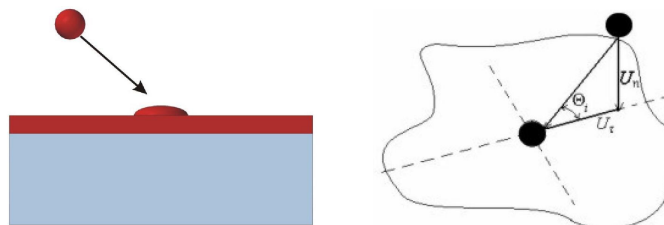


Figura 3.8: Schematizzazione del fenomeno di spread

Il regime di spread è simile a quello di stick ma avviene per numeri di Weber più alti. L'energia cinetica posseduta dalla goccia è tale da consentirle di penetrare

nel film e formare nuova superficie. L'intervallo di numeri di Weber caratteristico del regime di spread è $5 < We < We_c$, dove We_c è dato dalla seguente correlazione:

$$We_c = 1320La^{-0.183} \quad (3.42)$$

La massa della goccia contribuisce interamente all'aumento di massa del film.

3.7.4 Splash

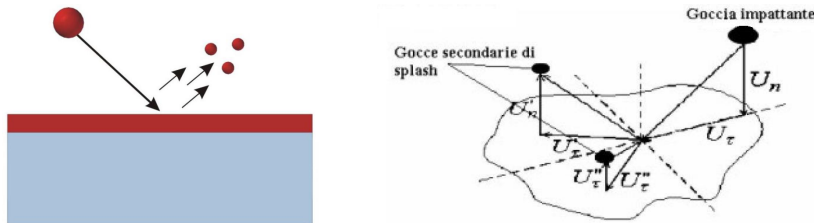


Figura 3.9: Schematizzazione del fenomeno di splash

Aumentando ulteriormente l'energia d'impatto si verifica il fenomeno dello splash: in seguito all'urto della goccia con il film si forma una corona di liquido instabile che tende a staccarsi formando tante goccioline secondarie. La condizione limite per cui si innesca questo regime è $We > We_c$, con We_c calcolato con la 3.42.

Il punto di partenza è la determinazione della distribuzione statistica dei diametri medi delle gocce secondarie, ottenuta mediante una funzione di distribuzione χ^2 (caso particolare della più generale funzione di distribuzione di Rosin-Rammler):

$$f(d) = \frac{1}{\bar{d}} \exp\left(-\frac{d}{\bar{d}}\right) \quad (3.43)$$

dove \bar{d} rappresenta il diametro medio il quale è correlato al diametro medio volumetrico d_v nel seguente modo:

$$\bar{d} = \frac{d_v}{6^{1/3}} = \frac{1}{6^{1/3}} \left(\frac{r_m}{N_S}\right)^{1/3} d_I \quad (3.44)$$

d_I è il diametro della goccia incidente, $r_m = m_S/m_I$ è il rapporto tra la massa totale che esce dal film a causa dello splash e la massa della goccia incidente e

N_S è il numero di gocce secondarie. La quantità N_S è ottenibile dalla seguente relazione:

$$N_S = 5 \left(\frac{We}{We_c} - 1 \right) \quad (3.45)$$

La funzione densità di probabilità 3.43 può quindi essere integrata per ottenere la funzione di probabilità cumulata la quale viene utilizzata per determinare le dimensioni di p gocce secondarie, d_i ($i = 1, \dots, p$), prendendo p campioni casuali ciascuno con probabilità γ_i ($0 < \gamma_i < 1$).

Infine il numero di gocce secondarie di una data dimensione si determina imponendo la conservazione della massa:

$$n_i d_i^3 = \frac{r_m d_I^3}{p} \quad (3.46)$$

La determinazione delle velocità delle gocce secondarie utilizza la stessa scomposizione già vista per il regime di rebound, indicando con il pedice S le grandezze relative alle gocce secondarie e con I le grandezze relative alle gocce incidenti. Per quanto riguarda le componenti tangenziali, esse sono legate tra loro dalla seguente relazione:

$$\vec{U}_{S,\tau} = C_f \vec{U}_{I,\tau} \quad (3.47)$$

dove il coefficiente d'attrito C_f è assunto pari a 0.8 (determinato sperimentalmente).

Le direzioni delle gocce secondarie sono determinate mediante correlazioni sperimentali e distribuzioni statistiche. Più complesso è il calcolo della componente normale delle velocità delle gocce secondarie; si assume che l'energia necessaria a rompere il film e produrre le gocce secondarie sia prelevata principalmente dall'energia cinetica legata alla componente normale della velocità della goccia incidente.

Partendo dalla conservazione dell'energia:

$$\frac{1}{2} \frac{m_S}{p} \left[\left| \vec{U}_{S,n,1} \right|^2 + \dots + \left| \vec{U}_{S,p,1} \right|^2 \right] = E_{S,K} \quad (3.48)$$

$E_{S,K}$ è l'energia cinetica dovuta allo splash, la quale può essere così espressa:

$$E_{S,K} = E_{I,K} + E_{I,\sigma} - E_D - E_{S,\sigma} \quad (3.49)$$

$E_{I,K} = \frac{1}{2}m_I|\vec{U}_{I,n}|^2$ è l'energia cinetica delle gocce incidente, $E_{I,\sigma}$ ed $E_{S,\sigma}$ sono rispettivamente l'energia superficiale della goccia incidente e l'energia superficiale totale delle gocce secondarie, E_D è una perdita di energia dovuta alle dissipazioni.

$$E_D = \frac{We_c}{12}\pi\sigma d_I^2 \quad (3.50)$$

Introducendo la seguente correlazione tra i diametri delle gocce secondarie e le componenti normali delle velocità è possibile calcolare tutte le grandezze secondarie.

$$\left(\frac{\vec{U}_{S,n,1}}{\vec{U}_{S,n,i}}\right) \approx \frac{\ln\left(\frac{D_1}{D_I}\right)}{\ln\left(\frac{D_i}{D_I}\right)} \quad i = 2, \dots, p \quad (3.51)$$

La massa apportata al film è data dalla differenza tra la massa impattante e la massa delle gocce che si separano dal film.

Capitolo 4

Equazioni del film liquido

Il film liquido a parete viene modellizzato con un approccio euleriano simile alla metodologia applicata alla fase gassosa. Verranno prima di tutto presentate le equazioni di conservazione della massa, delle specie chimiche, della quantità di moto e dell'energia in forma locale e successivamente i modelli che descrivono le interazioni gas-film, spray-film, film-parete e le modalità di calcolo dei termini sorgente delle equazioni.

Le equazioni del film liquido sono ottenute sotto le seguenti ipotesi:

- fluido incomprimibile e newtoniano;
- film sottile;
- moto laminare;
- profili di velocità e temperatura nel film in direzione normale alla parete considerati parabolici.

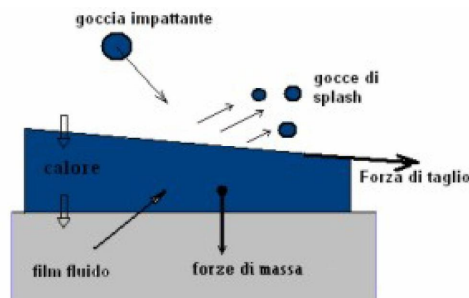


Figura 4.1: Schematizzazione del film liquido a parete

La formulazione presentata rispecchia il metodo numerico risolutivo implementato: tutte le grandezze che si conservano sono moltiplicate per lo spessore di

film, in quanto, a differenza delle equazioni per la fase gassosa, il film liquido a parete viene risolto con il metodo alle aree finite.

4.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione della massa è ottenuta considerando come termini sorgente le gocce impattanti (S_M) e l'evaporazione del film stesso (S_V). Sotto le ipotesi già presentate l'equazione diventa:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h\vec{u}_f) = S_M + S_V \quad (4.1)$$

dove h è lo spessore del film normale alla parete e \vec{u}_f è la velocità del film in direzione parallela alla parete.

4.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche

L'equazione di conservazione delle specie chimiche è ricavata sotto l'ulteriore ipotesi semplificativa che siano trascurabili i flussi diffusivi e quindi l'unico termine di trasporto sia quello convettivo:

$$\frac{\partial hY_{f,k}}{\partial t} + \nabla \cdot (h\vec{u}_f Y_{f,k}) = S_{M,k} + S_{V,k} \quad (4.2)$$

indicando con $Y_{f,k}$ la frazione massica della k -esima specie nel film e ponendo $S_{M,k} = S_M Y_{d,k}$, dove $Y_{d,k}$ è la frazione massica della k -esima specie nelle gocce impattanti.

Al fine di garantire il bilancio di massa devono valere le seguenti relazioni:

$$\sum_{k=1}^{N_{f,C}} Y_{f,k} = 1 \quad (4.3)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{d,C}} Y_{d,k} = 1 \quad (4.4)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{d,C}} S_{M,k} = S_M \quad (4.5)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{f,C}} S_{V,k} = S_V \quad (4.6)$$

dove $N_{f,C}$ e $N_{d,C}$ sono rispettivamente il numero di specie presenti nel film e nelle gocce impattanti.

4.3 Equazione di conservazione della quantità di moto

La variazione di quantità di moto del film è determinata dalle interazioni meccaniche tra il film e i gas, dalla condizione di aderenza alla parete e il contributo cinetico delle gocce impattanti. L'equazione di conservazione della quantità di moto risulta allora:

$$\frac{\partial h \vec{u}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (h \vec{u}_f \vec{u}_f) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla (h p_f) + \vec{\tau}_g - \vec{\tau}_w + h \vec{g} + \vec{S}_U \quad (4.7)$$

p_f è la pressione del film, ρ_f è la densità del film, $\vec{\tau}_g$ è lo sforzo di taglio all'interfaccia gas-liquido, $\vec{\tau}_w$ è lo sforzo di taglio alla parete e \vec{S}_U è il termine sorgente dovuto alle gocce impattanti.

La pressione p_f è data dalla somma di tre contributi:

$$p_f = p_d + p_g + p_c \quad (4.8)$$

- p_d pressione dovuta all'impatto delle gocce sulla superficie del film

$$p_d = \frac{4\pi\rho_d}{3A\Delta t} \sum_{i=1}^{N_d} r_i^3 (\vec{u}_i \cdot \underline{n}) \quad (4.9)$$

- p_g pressione dovuta all'azione dei gas sulla superficie del film (contributo dinamico legato all'impatto e contributo statico)

$$p_g = \rho_g (\vec{u}_{rel} \cdot \underline{n}) + p_{amb} \quad (4.10)$$

- p_c pressione dovuta a fenomeni di capillarità (legati alla curvatura della superficie del film)

$$p_c = -\sigma \nabla^2 h \quad (4.11)$$

A è la superficie d'impatto delle gocce, \vec{u}_i è la velocità relativa dell' i -esima goccia impattante rispetto al film, \underline{n} è il versore normale alla superficie del film, \vec{u}_{rel} è la velocità relativa tra i gas e la superficie del film e p_{amb} è la pressione statica dei gas. Il termine $\nabla^2 h$ rappresenta la curvatura della superficie del film.

Lo sforzo $\vec{\tau}_g$ è dato dalla legge di Newton valutata all'interfaccia liquido-gas e alla velocità relativa tra gas e liquido:

$$\vec{\tau}_g = \frac{\mu_g}{\rho_f} \frac{\partial \vec{u}_{rel}}{\partial z} \Big|_{z=h} \quad (4.12)$$

$\vec{\tau}_w$ è lo sforzo a parete la cui espressione si ricava dall'assunzione di profilo di velocità parabolico:

$$\vec{\tau}_w = \frac{3}{2} \frac{\mu_l \vec{u}_f}{\rho_f h} - \frac{1}{2} \vec{\tau}_g \quad (4.13)$$

4.4 Equazione di conservazione dell'energia

L'equazione dell'energia del film, espressa in termini di entalpia sensibile $\hat{H}_{s,f}$, è la seguente:

$$\frac{\partial h \hat{H}_{s,f}}{\partial t} + \nabla \cdot (h \vec{u}_f \hat{H}_{s,f}) = j_g - j_w + S_H \quad (4.14)$$

I due flussi j_g e j_w rappresentano rispettivamente il flusso termico all'interfaccia con i gas e il flusso termico alla parete:

$$j_g = \frac{\lambda_{t,l}}{\rho_f} \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{z=h} + S_V h_{v,f} = j_s + S_V h_{v,f} \quad (4.15)$$

$$j_w = 3 \frac{\lambda_{t,l} (T_f - T_w)}{\rho_f h} - \frac{1}{2} j_g \quad (4.16)$$

Il flusso j_g è calcolato con il gradiente di temperatura normale alla superficie $\partial T / \partial n$, $h_{v,f}$ è il calore di evaporazione del film (pesato sulla composizione chimica), T_f è la temperatura media del film, T_w è la temperatura di parete e il flusso j_w è calcolato assumendo un profilo di temperatura parabolico.

4.5 Equazione della conduzione nella parete solida

Per meglio considerare l'effetto della presenza del film sulla temperatura della parete solida è necessario risolvere l'equazione della conduzione all'interno della stessa. Nell'ipotesi di una parete a spessore costante δ , adiabatica verso l'esterno, con proprietà termofisiche costanti, la temperatura della parete è ricavabile dalla seguente equazione (il pedice w indica che le proprietà sono riferite alla parete solida):

$$\rho_w c_w \frac{\partial T_w}{\partial t} - \lambda_{t,w} \nabla^2 T_w = \frac{j_{w/g} \rho_f}{\delta} \quad (4.17)$$

$j_{w/g}$ è uguale al flusso termico a parete j_w nel caso in cui sia presente del film mentre è uguale al flusso termico tra gas e parete j_g nel caso contrario.

4.6 Espressione dei termini sorgente

In questa sezione vengono descritti i termini sorgente che modellizzano le complesse interazioni tra il film, lo spray e i gas.

4.6.1 Termini sorgente di massa

L'apporto e la rimozione di massa dal film sono rappresentati da due termini sorgente modellizzati in modo differente.

Il contributo S_M , legato all'impatto delle gocce, ha la seguente formulazione:

$$S_M = \frac{4\pi\rho_d}{3A\rho_f\Delta t} \sum_{i=1}^{N_d} r_i^3 \quad (4.18)$$

Si noti che nella formulazione precedente non vengono considerate esplicitamente le gocce che escono dal film per fenomeni di splash o rebound; il loro effetto è quantificato attraverso i modelli di trattamento a parete dello spray, i quali determinano il numero effettivo di gocce che aderiscono al film apportando massa.

Il termine S_V è legato all'evaporazione all'interfaccia gas-liquido e alla vaporizzazione a parete che si verifica quando la temperatura è superiore alla temperatura di ebollizione. A sua volta il tasso di evaporazione sulla superficie del film può essere ricondotto a due distinte formulazioni:

- quando prevalgono gli effetti dinamici (elevata velocità dei gas)

$$S_{V,k} = \frac{|\vec{r}_g|}{\rho_f |\vec{u}_\infty - \vec{u}_s|} \left((B_k + 1)^{1/Sc_k} - 1 \right) \quad (4.19)$$

- quando prevalgono gli effetti termici (elevata temperatura dei gas)

$$S_{V,k} = \frac{j_s}{\rho_f c_p (T_\infty - T_s)} \left((B_k + 1)^{1/Le_k} - 1 \right) \quad (4.20)$$

Il pedice ∞ indica le grandezze valutate nel flusso indisturbato dei gas, il pedice s indica le grandezze valutate sulla superficie del film, il pedice k indica che le proprietà sono riferite alla k -esima specie, c_p è il calore specifico dei gas e Le è il numero di Lewis definito come il rapporto tra la diffusività termica α e la diffusiva massica Γ . Ricordando le definizioni del numero di Prandtl e del numero di Schmidt si ricava:

$$Le = \frac{Sc}{Pr} \quad (4.21)$$

Nel caso in cui oltre all'evaporazione si verifichi anche l'ebollizione del film, al termine $S_{V,k}$ calcolato in precedenza occorre aggiungere la massa di vapore ottenuta tramite il primo principio della termodinamica.

Il termine S_V dell'equazione di conservazione della massa è calcolato con la 4.6.

4.6.2 Termine sorgente di quantità di moto

Il contributo alla quantità di moto del film dovuto alle gocce impattanti è stato scorporato in due: la componente in direzione normale è inclusa nella pressione del film (4.9), mentre la componente in direzione tangenziale è considerata nel termine S_U .

$$\vec{S}_U = \frac{4\pi\rho_d}{3A\rho_f\Delta t} \sum_{i=1}^{N_d} r_i^3 (\vec{u}_i \cdot \underline{t}) \underline{t} \quad (4.22)$$

\underline{t} è il versore tangente alla superficie del film.

4.6.3 Termine sorgente di entalpia

L'unico apporto energetico dato dalle gocce al film è di tipo termico sensibile essendo la temperatura dell' i -esima goccia diversa dalla temperatura del film.

$$S_H = \frac{4\pi\rho_d}{3A\rho_f\Delta t} \sum_{i=1}^{N_d} r_i^3 \hat{H}_{d,i} \quad (4.23)$$

$\hat{H}_{d,i}$ è l'entalpia specifica dell' i -esima goccia impattante.

Capitolo 5

Implementazione

Le equazioni differenziali viste nei capitoli precedenti non sono risolvibili in forma chiusa se non per una gamma di problemi estremamente semplici e in definitiva di scarsa utilità pratica. Sarà quindi necessario ricorrere a procedure di risoluzione numeriche al fine di ottenere delle soluzioni per i problemi più complessi comunemente incontrati.

In questo lavoro presenteremo i tre approcci risolutivi più diffusi: il metodo ai volumi finiti (per la fase gassosa), il metodo della rappresentazione lagrangiana (per lo spray) e il metodo alle aree finite (per il film liquido). Questi tre approcci non risolvono il problema analitico (continuo e di tipo differenziale) ma ricorrono ad una discretizzazione spaziale e temporale, risolvendo quindi un problema approssimato (discreto e di tipo algebrico).

Il risultato finale sarà quindi dipendente, oltre che dalle ipotesi teoriche, anche dal tipo e dalla qualità della discretizzazione e dai metodi numerici di risoluzione impiegati.

Tre concetti matematici sono molto utili per stabilire il successo di un algoritmo numerico: *convergenza*, *consistenza* e *stabilità*.

- Un metodo numerico si dice convergente se al tendere ad infinito del numero N di celle computazionali la differenza tra la soluzione approssimata ϕ_N e la soluzione esatta ϕ tende a zero

$$\|\phi_N - \phi\| \rightarrow 0 \quad N \rightarrow \infty \quad (5.1)$$

- Un metodo numerico si dice consistente se al tendere ad infinito del numero N di celle computazionali la soluzione esatta è soluzione anche del problema approssimato P_N

$$P_N(\phi, BC) \rightarrow 0 \quad N \rightarrow \infty \quad (5.2)$$

dove BC indica le condizioni al contorno

- Un metodo numerico si dice stabile se piccole variazioni delle condizioni al contorno comportano piccole variazioni della soluzione numerica

$$\|\phi_{N,1} - \phi_{N,2}\| \leq C \|BC_1 - BC_2\| \quad C > 0 \quad (5.3)$$

5.1 Metodo ai volumi finiti

Il metodo ai volumi finiti consiste sostanzialmente nell'integrare le equazioni di Navier-Stokes su un dominio (la cella computazionale) il cui volume ha una dimensione finita e non infinitesima.

Le celle computazionali si ottengono suddividendo la geometria del problema in un numero finito di elementi dando origine ad una griglia di calcolo chiamata *mesh*. Successivamente tutti i termini delle equazioni vengono discretizzati e sostituiti con espressioni approssimate; in questo modo si passa da un problema di tipo differenziale ad un problema di tipo algebrico risolvibile mediante metodi iterativi. I valori delle grandezze discretizzate sono riportati nei centri delle celle computazionali, anche chiamati centroidi. Un esempio di cella computazionale con evidenziati gli elementi caratteristici è mostrato in figura 5.1.

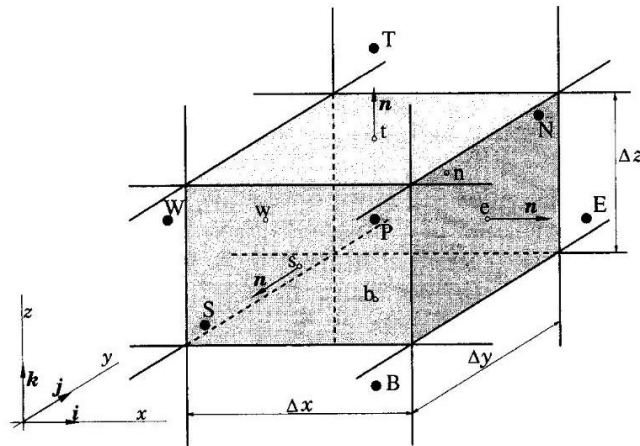


Figura 5.1: Esempio di cella computazionale del metodo ai volumi finiti

Ne consegue una rappresentazione che evidenzia la conservazione di importanti proprietà all'interno della cella di calcolo; vi è quindi un chiaro collegamento tra i principi di conservazione definiti nei capitoli precedenti e l'algoritmo risolutivo ottenuto. Questa caratteristica rende molto interessante l'applicazione di questo metodo alle equazioni della fluidodinamica in forma euleriana.

Partendo dall'equazione di conservazione della generica grandezza ϕ (equazione 2.14) è possibile scrivere un'equazione di bilancio all'interno del volume di controllo costituito dalla cella computazionale:

$$\begin{aligned}
\left[\begin{array}{c} \text{variazione di } \phi \\ \text{nell'unit\`a di tempo} \end{array} \right] &= \left[\begin{array}{c} \text{flusso netto entrante di } \phi \\ \text{dovuto alla convezione} \end{array} \right] \\
+ \left[\begin{array}{c} \text{flusso netto entrante di } \phi \\ \text{dovuto alla diffusione} \end{array} \right] &+ \left[\begin{array}{c} \text{tasso netto di} \\ \text{formazione di } \phi \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Esistono delle tecniche appositamente create per la discretizzazione dei fenomeni tipici della fluidodinamica come la *convezione* (cioè trasporto dovuto al campo di moto macroscopico del fluido), la *conduzione* (cioè trasporto dovuto alla diversa distribuzione di ϕ punto per punto) e i termini *sorgente* (associati alla formazione e distruzione di ϕ). Per ottenere una formulazione algebrica è quindi necessario discretizzare gli integrali di superficie (legati ai flussi attraverso il contorno della cella) e gli integrali di volume.

L'integrale di superficie totale è dato dalla sommatoria degli integrali sulle singole facce di contorno:

$$\int_S f dS = \sum_k \int_{S_k} f dS \tag{5.5}$$

Per calcolare l'integrale sulle singole facce sarebbe necessario conoscere la funzione integranda f , informazione ovviamente non disponibile in quanto sono noti solo i valori delle grandezze nei centroidi. La ricostruzione dell'integrale passa quindi attraverso due approssimazioni: prima di tutto si utilizza un numero finito di punti per valutare l'integrale sulla faccia e in secondo luogo i valori scelti sono ottenuti per interpolazione a partire dai valori nei centroidi. L'approssimazione più semplice, detta *regola del punto di mezzo*, consiste nel calcolare l'integrale di superficie come il prodotto tra il valore nel centro della faccia (opportunosamente interpolato) e l'area della faccia considerata. Altre approssimazioni utilizzano la *regola del trapezio* e la *regola di Simpson* le quali considerano un diverso numero di punti e diverse formulazioni per il calcolo dell'integrale.

L'integrale di volume è ottenuto come prodotto tra un opportuno valore medio della funzione integranda e il volume di controllo. La criticità del metodo risiede quindi nella determinazione del valore medio. L'approssimazione più semplice è considerare come valore medio il valore nel centro cella essendo esso già noto e non essendo quindi necessaria alcuna interpolazione. Approssimazioni più accurate sono ottenute considerando più punti nello spazio discretizzato; le principali tecniche sono:

- *Interpolazione Upwind*: è di tipo lineare backward o forward a seconda del verso del vettore della velocità. Il valore della funzione nel centro della faccia di interfaccia tra due celle è pari al valore di uno dei due centroidi

scelto a monte rispetto al verso del vettore velocità. Questa tecnica è l'unica che soddisfa il criterio di *boundedness* in modo incondizionato cioè garantisce sempre l'impossibilità che si presentino oscillazioni numeriche. Tuttavia è un'approssimazione poco accurata in quanto introduce un'eccessiva diffusività numerica nelle soluzioni.

- *Interpolazione lineare centrata*: prende in considerazione i due centri cella già individuati dal metodo upwind ma interpola linearmente per ottenere il valore sulla faccia. È uno schema accurato al secondo ordine e l'errore è proporzionale al quadrato del passo della griglia. Si tratta dello schema del secondo ordine più semplicemente implementabile e quindi più usato anche se può comportare oscillazioni numeriche nelle soluzioni, come tutti i metodi di ordine superiore al primo.
- *Interpolazione quadratica Upwind (QUICK)*: l'approssimazione successiva consistente nel considerare una parabola anziché una retta come funzione interpolante. È necessario quindi utilizzare un maggior numero di punti per determinare la parabola interpolante complicando ulteriormente la procedura di calcolo. Questo metodo risulta generalmente del terzo ordine ma se affiancato a integrali di superficie calcolati con la *regola del punto di mezzo* l'approssimazione globale risulta del secondo ordine. L'accuratezza del metodo *QUICK* risulta praticamente comparabile con l'interpolazione lineare centrata.
- *Schemi di ordine superiore*: il loro utilizzo è sensato solo se anche gli integrali di superficie sono approssimati con metodi di ordine elevato, ad esempio utilizzando la *regola di Simpson* è necessario interpolare con polinomi almeno del terzo ordine.

5.2 Metodo della rappresentazione lagrangiana

Un primo e fondamentale concetto che deve essere introdotto parlando di simulazione numerica dello spray è la *parcel*. Essa rappresenta una classe di gocce aventi tutte le stesse caratteristiche (diametro, velocità, temperatura ecc...) e viene utilizzata per discretizzare la massa di liquido iniettata. Applicando le equazioni di conservazione e i modelli visti nel capitolo 3 alle *parcel* è possibile dare una descrizione di tipo statistico dell'evoluzione dello spray.

L'utilizzo delle *parcel* è giustificato dall'ipotesi che gocce vicine tra loro presentano caratteristiche e percorsi evolutivi simili e pertanto è possibile utilizzare un numero ridotto di elementi (le *parcel*) per descrivere il comportamento di un

numero molto più elevato di gocce. A seguito poi dei vari fenomeni che coinvolgono lo spray il numero e le caratteristiche delle parcel possono variare nel tempo come nelle realtà variano il numero e le caratteristiche delle gocce.

Il punto focale del trattamento numerico dello spray è la determinazione, per ogni intervallo di integrazione, della posizione di ogni singola parcel; questa funzione è svolta dagli algoritmi di tracking che saranno oggetto della prossima sezione.

5.2.1 Tracking

Esistono due possibili approcci per effettuare la ricerca delle parcel: l'algoritmo Lose-Find (LF) e l'algoritmo Face-To-Face (F2F).

L'algoritmo LF muove la parcel lungo la propria traiettoria, $\vec{u}_d \Delta t$, senza considerare la mesh, e quindi cerca la cella d'arrivo. Questo approccio è molto semplice da implementare ed è adatto se si utilizzano metodi numerici espliciti, i quali devono impiegare dei passi di integrazione molto piccoli e quindi gli spostamenti delle parcel sono contenuti. L'algoritmo di ricerca inizia dalla cella di partenza e investiga le celle limitrofe finché la parcel non viene individuata o finché la ricerca non ha coperto tutto il dominio. L'utilizzo di passi d'integrazione molto piccoli risulta allora vantaggioso in quanto la parcel potrà compiere solo piccoli spostamenti e non sarà necessaria una ricerca in tutto il dominio, operazione questa estremamente onerosa dal punto di vista dei tempi computazionali e che dovrebbe essere evitata.

Se si utilizzasse un metodo numerico implicito, a causa dei passi d'integrazione utilizzabili, notevolmente maggiori, l'algoritmo LF risulterebbe inadeguato, in quanto non c'è garanzia che la parcel passi attraverso tutte le celle lungo la propria traiettoria. Questo, oltre allo svantaggio già descritto sopra, comporta che i termini sorgente dovuti allo spray presentino dei picchi di eccessiva intensità tra un time-step e l'altro. Occorre quindi limitare il passo di integrazione annullando di fatto il vantaggio di usare un metodo implicito.

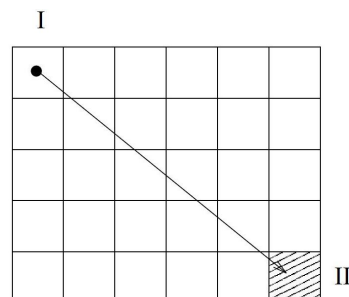


Figura 5.2: Instabilità dell'algoritmo LF causata da un eccessivo time-step

L'algoritmo F2F richiede di effettuare una sola ricerca quando la parcel viene introdotta per la prima volta nel sistema. Da questo istante in poi il percorso della parcel è seguito cella per cella attraverso il seguente parametro:

$$\lambda_i = \frac{(\vec{c}_i - \vec{x}) \cdot \underline{n}_i}{(\vec{u}_d \Delta t) \cdot \underline{n}_i} \quad (5.6)$$

dove \vec{c}_i e \underline{n}_i sono rispettivamente la posizione del centro e il versore normale alla i -esima faccia della cella in cui si trova la parcel. Se per qualunque faccia i si ha $\lambda_i > 1$ allora la parcel non lascia la cella e quindi i termini di sorgente legati allo spray possono essere calcolati direttamente; la posizione della parcel viene aggiornata. Se esiste almeno una faccia per cui $\lambda_i < 1$ allora la parcel colpisce la faccia i in corrispondenza della quale si ha il minimo valore positivo di λ_i . La parcel è mossa per un tempo pari a $\lambda \Delta t$ dove $\lambda = \min(\lambda_i) > 0$ e la sua nuova posizione è $\vec{x}_{new} = \vec{x}_{old} + \lambda \vec{u}_d \Delta t$. I termini sorgente sono calcolati per la cella di destinazione e la procedura precedente viene ripetuta fino a che la parcel non si è mossa per tutto il passo d'integrazione. Questo metodo garantisce che la parcel passi attraverso tutte le celle senza errori nel calcolo dei termini sorgente legati al passaggio da una cella all'altra e senza restrizioni sul passo d'integrazione.

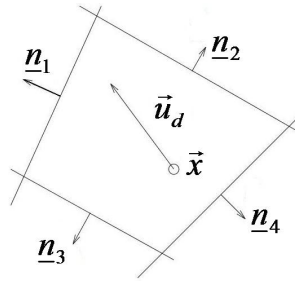


Figura 5.3: Schematizzazione di una parcel in una cella

La determinazione della cella in cui si trova una parcel viene effettuata utilizzando la seguente relazione:

$$\beta_i \leq 0 \quad \beta_i = (\vec{x} - \vec{c}_i) \cdot \underline{n}_i \quad (5.7)$$

Questa relazione funziona bene per celle tetraedriche, mentre presenta dei problemi nel caso di celle concave, in quanto la relazione può risultare non verificata anche se la parcel si trova all'interno della cella (come mostrato in figura 5.4).

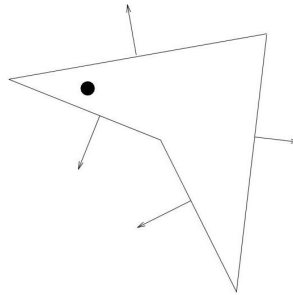


Figura 5.4: Esempio di configurazione per cui l'algoritmo di ricerca standard fallisce

5.3 Metodo alle aree finite

Dal punto di vista concettuale il metodo alle aree finite è semplicemente la trasposizione su un dominio di calcolo in due dimensioni del metodo ai volumi finiti. La cella computazionale è rappresentata non più da un volume ma da una superficie il cui contorno è delimitato dagli spigoli che racchiudono la faccia. Gli integrali di volume diventano allora integrali di superficie e gli integrali di superficie, rappresentativi dei flussi in ingresso e uscita, diventano integrali di linea.

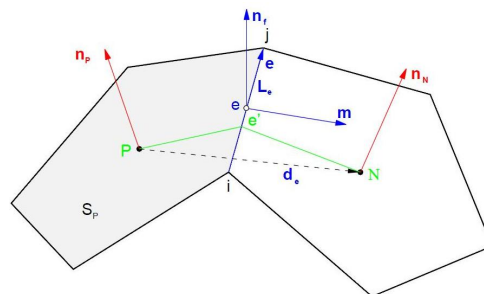


Figura 5.5: Esempio di celle computazionali del metodo alle aree finite

La scelta di questo metodo per la simulazione del film liquido presenta il vantaggio di non richiedere un eccessivo infittimento della mesh in corrispondenza della parete; infatti se risolvessimo il film con il metodo ai volumi finiti sarebbero necessarie delle celle di dimensione paragonabile allo spessore del film, con un aggravio dei costi computazionali sia in termini di memoria, tempi di calcolo e complessità del modello di calcolo (a causa della necessità di risolvere le interazioni all'interfaccia tra le due fasi).

Con il metodo alle aree finite non è necessario risolvere la mesh nella zona del film in quanto lo spessore viene considerato come un'incognita del problema

e viene pertanto ricavato contestualmente alla risoluzione delle equazioni esposte nel capitolo 4. Le interazioni all'interfaccia sono modellizzate per simulare gli scambi di massa, quantità di moto ed energia tra film liquido e gas circostante con un ulteriore risparmio computazionale.

Le tecniche di discretizzazione e i modelli numerici di risoluzione ricalcano, con le ovvie differenze, le tecniche e i metodi già esistenti per il metodo ai volumi finiti.

5.4 Il software OpenFOAM

Il modello numerico del film liquido è stato implementato nel pacchetto open source OpenFOAM[®] (Field Operation And Manipulation). Questo è una libreria di calcolo sviluppata in C++ e basata sulla meccanica dei continui e particolarmente adatto alla risoluzione di problemi di fluidodinamica computazionale. Essendo fortemente orientato sulla programmazione ad oggetti è estremamente agevole implementare nuove funzionalità e nuove librerie, come ad esempio il modello di film liquido a parete oggetto di questo lavoro.

La simulazione vera e propria è affidata a dei pacchetti eseguibili chiamati *solutori* i quali si basano su alcune ipotesi sulla fisica del problema (flusso comprimibile o incompressibile, subsonico o supersonico, monofase o multifase, presenza o assenza di reazioni chimiche ecc...) e su librerie sviluppate ad hoc per varie classi di problemi.

Il solutore sviluppato per l'applicazione ai sistemi ad ignizione di urea è stato chiamato *scrFilmFoam* ed effettua i calcoli per flussi comprimibili, reagenti, con spray lagrangiano e film liquido a parete.

Nelle prossime sezioni esporremo la discretizzazione matematica delle equazioni del film e la loro corrispondente rappresentazione nella sintassi del codice OpenFOAM[®]; verrà poi presentata la struttura di calcolo seguita dal risolutore con particolare attenzione alla risoluzione del film liquido.

5.4.1 Discretizzazione delle equazioni del film

Equazione di conservazione della massa

$$\frac{\Delta h}{\Delta t} + \frac{1}{A_w} \sum_i^{N_{edge}} (\vec{u}_f \cdot \underline{n})_i h_i l_i = S_M + S_V \quad (5.8)$$

A_w rappresenta l'area della cella computazionale in esame, N_{edge} è il numero di

lati (edge) che racchiudono la superficie della cella, h_i ed l_i sono rispettivamente lo spessore di film e la lunghezza dell' i -esimo lato.

All'interno dell'ambiente OpenFOAM® l'equazione risulta così scritta:

```
faScalarMatrix hEqn
(
    fam::ddt (hs_)
    + fam::div (phis_, hs_)
    ==
    Sm_
    + Sv_
);
```

$phis_$ è il prodotto scalare tra la velocità e il versore normale al lato della cella computazionale (rappresenta quindi il flusso volumetrico).

Equazione di conservazione delle specie chimiche

$$\frac{\Delta h Y_{f,k}}{\Delta t} + \frac{1}{A_w} \sum_i^{N_{edge}} (\vec{u}_f \cdot \underline{n})_i h_i Y_{f,k,i} l_i = S_{M,k} + S_{V,k} \quad (5.9)$$

$Y_{f,k,i}$ è la frazione massica della k -esima specie valutata sull' i -esimo lato.

All'interno dell'ambiente OpenFOAM® l'equazione risulta la seguente:

```
faScalarMatrix hfilmiEqn
(
    fam::ddt (hsYif)
    + fam::div (phis_, hsYif)
    ==
    Smi
    + Svi
);
```

$hsYif$ è il prodotto tra lo spessore del film e la frazione massica dell' i -esima specie chimica presente nel liquido.

Equazione di conservazione della quantità di moto

$$\begin{aligned} \frac{\Delta h \vec{u}_f}{\Delta t} + \frac{1}{A_w} \sum_i^{N_{edge}} \vec{u}_f (\vec{u}_f \cdot \underline{n})_i h_i l_i = \\ - \frac{1}{\rho_f A_w} \sum_i^{N_{edge}} (p_f \underline{n})_i h_i l_i + \vec{\tau}_g - \vec{\tau}_w + h \vec{g} + \vec{S}_U \end{aligned} \quad (5.10)$$

Lo sforzo all'interfaccia τ_g è così calcolato:

$$\vec{\tau}_g = \frac{\mu_g}{\rho_f} \frac{\vec{u}_g - \vec{u}_{f,s}}{\delta_{mesh} - h} \quad (5.11)$$

dove \vec{u}_g e $\vec{u}_{f,s}$ sono rispettivamente le velocità dei gas e del film valutati all'interfaccia mentre δ_{mesh} è l'altezza della cella computazionale in direzione normale alla parete.

Lo sforzo alla parete $\vec{\tau}_w$ è ottenuto discretizzando l'equazione 4.13.

L'equazione implementata nel programma è la seguente:

```
faVectorMatrix UsEqn
(
    fam::ddt (hs_, Us_)
    + fam::div(phi2s_, Us_)
    + profile_.tauW()
    ==
    profile_.tauFs()
    + Gs_*hs_
    + Su_
);
```

$\text{phi2s}_$ è il prodotto tra il flusso volumetrico $\text{phis}_$ e lo spessore del film $\text{hs}_$, mentre $\text{Gs}_$ è la componente dell'accelerazione di gravità in direzione tangenziale al film. La variabile $\text{profile}_$ della quale vengono richiamate le funzioni $\text{tauW}()$ e $\text{tauFs}()$ (le quali restituiscono rispettivamente $\vec{\tau}_w$ e $\vec{\tau}_g$) contiene le informazioni sul profilo di velocità lungo lo spessore del film.

Equazione di conservazione dell'energia

$$\frac{\Delta h \hat{H}_{s,f}}{\Delta t} + \frac{1}{A_w} \sum_i^{N_{edge}} \hat{H}_{s,f} (\vec{u}_f \cdot \underline{n})_i h_i l_i = j_g - j_w + S_H + \frac{S_V h \hat{H}_{s,f}}{h} \quad (5.12)$$

I termini sorgente sono ottenibili dalle equazioni 4.15, 4.16, 4.23, sostituendo i rispettivi valori discretizzati. L'ultimo termine a destra dell'uguale rappresenta il flusso di entalpia sensibile uscente dal film a causa dell'evaporazione: esso compare solo nell'equazione discretizzata, in quanto nelle equazioni scritte in forma analitica tale contributo è considerato nella variazione di spessore del film.

Nel programma l'equazione ha la seguente rappresentazione:

```

faScalarMatrix TfilmEquation
(
    fam::ddt(hHfilm_)
    + fam::div(phis_, hHfilm_)
    ==
    jg
    - jw
    + SH
    + fam::Sp(Sv_ / hs_, hHfilm_)
);

```

`hHfilm_` è la variabile che rappresenta il prodotto dell'entalpia sensibile del film per lo spessore. L'operatore `fam::Sp()` permette di inserire il termine sorgente direttamente nella matrice risolvete del sistema (e non nel vettore dei termini noti). Al denominatore dell'ultimo termine sorgente è necessario sommare allo spessore un termine chiamato `SMALL`, il quale rappresenta lo zero macchina e serve ad evitare che vi sia una divisione per zero, operazione non gestibile dal calcolatore, quando lo spessore del film tende a zero.

Equazione della conduzione nella parete solida

$$\rho_w c_w \frac{\Delta T_w}{\Delta t} - \lambda_{t,w} \frac{1}{A_w} \sum_i^{N_{edge}} (\nabla T_w \cdot \underline{n})_i l_i = \frac{j_w / g \rho_f}{\delta} \quad (5.13)$$

Si noti che lo spessore della parete δ non presenta l'indice i perchè è stata supposta parete a spessore costante.

L'equazione in codice OpenFOAM® risulta:

```

faScalarMatrix TWallEquation
(
    wallHeatCapacity_*fam::ddt(wallT_)
    - K_*fam::laplacian(wallT_)
    ==
    (jw*rhol_/wallThickness_)
);

```

`wallHeatCapacity_`, `K_` e `wallThickness_` sono rispettivamente la capacità termica (prodotto tra la densità e il calore specifico), la conduttività termica e lo spessore della parete solida; essi sono impostabili tramite il dizionario di controllo del film liquido. `wallT_` è la variabile rappresentativa della temperatura di parete.

Si noti che la rappresentazione delle equazioni all'interno della sintassi di OpenFOAM® è molto simile alla loro rappresentazione nel linguaggio matematico, rendendo quindi molto semplice ed intuitiva l'implementazione di nuove equazioni e nuovi modelli.

5.4.2 Struttura di calcolo del solutore

Il processo di simulazione può essere concettualmente suddiviso in tre fasi: risoluzione dello spray, risoluzione del film e risoluzione della fase gassosa. I risultati di ciascuna di queste fasi vengono poi utilizzati come dati di input per i calcoli nella fase successiva. Il funzionamento generale del solutore è mostrato nel diagramma di flusso di figura 5.6.

Tutti i richiami ai metodi numerici, alla gestione della mesh e ai controlli relativi allo svolgimento della simulazione (time-step, algoritmi di calcolo, numero di Courant, correttori, ecc...) vengono effettuati in automatico dal programma all'avvio della simulazione. Durante la fase di evoluzione dello spray vengono risolte le equazioni viste nel capitolo 3, le quali consentono di calcolare i termini sorgente legati allo spray sia per quello che riguarda la fase gassosa, sia per quanto concerne il film liquido. In particolare è possibile conoscere la posizione delle parcel costituenti lo spray discretizzato e quindi determinare se si verificano degli impatti sulle pareti.

In caso vi sia almeno un impatto o sia già presente del film si passa alla fase di risoluzione del film liquido a parete. La simulazione di quest'ultimo è affidata ad una libreria, chiamata *wallFilmPolimi*, che risolve le equazioni viste nel capitolo 4 e discretizzate come visto nelle precedenti sezioni. Una volta risolto il sistema di equazioni che descrivono il film liquido è possibile calcolare i relativi termini sorgente e quindi passare alla fase di calcolo della fase gassosa.

Il diagramma concettuale della libreria di simulazione del film è il seguente:

La prima operazione che viene effettuata è una mappatura dei campi volumetrici sulla griglia computazionale utilizzata per la simulazione del film. Questa operazione risulta necessaria in quanto le equazioni e le grandezze dei gas e dello spray sono riferite a un dominio di calcolo tridimensionale, mentre il film viene risolto in un dominio bidimensionale (come già mostrato nell'esposizione del metodo alle aree finite). Si procede quindi al calcolo delle proprietà termofisiche del liquido inizializzandole se necessario o aggiornandole per tenere conto delle nuove condizioni del film (temperatura e pressione). Noti i termini sorgenti ricavati dallo spray e conoscendo le grandezze della fase gassosa relative al passo temporale precedente è possibile calcolare i termini sorgenti che compaiono nelle equazioni della massa e della quantità di moto del film. Nel caso del termine di evaporazione/ebollizione il calcolo è affidato ad una procedura che può essere attivata o disattivata dall'utente (tramite una entry nel dizionario di control-

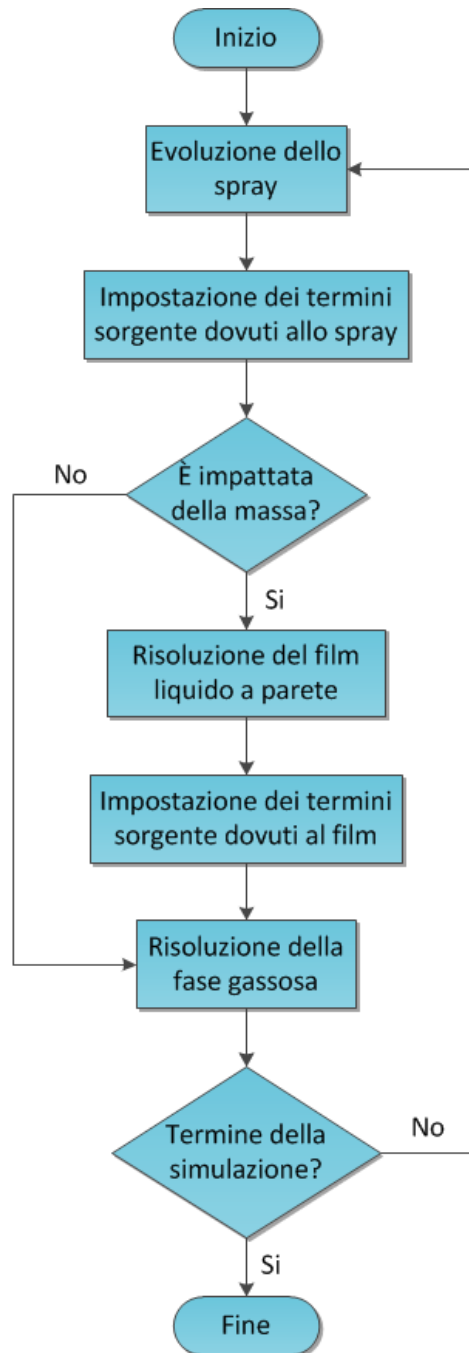


Figura 5.6: Diagramma di flusso del solutore scrFilmFoam

lo del wallFilm). Vengono quindi risolte le equazioni nell'ordine presentato nel diagramma in figura 5.7; l'aggiornamento dei flussi viene effettuato per considerare l'effetto della curvatura del film e dei conseguenti gradienti di pressione sul

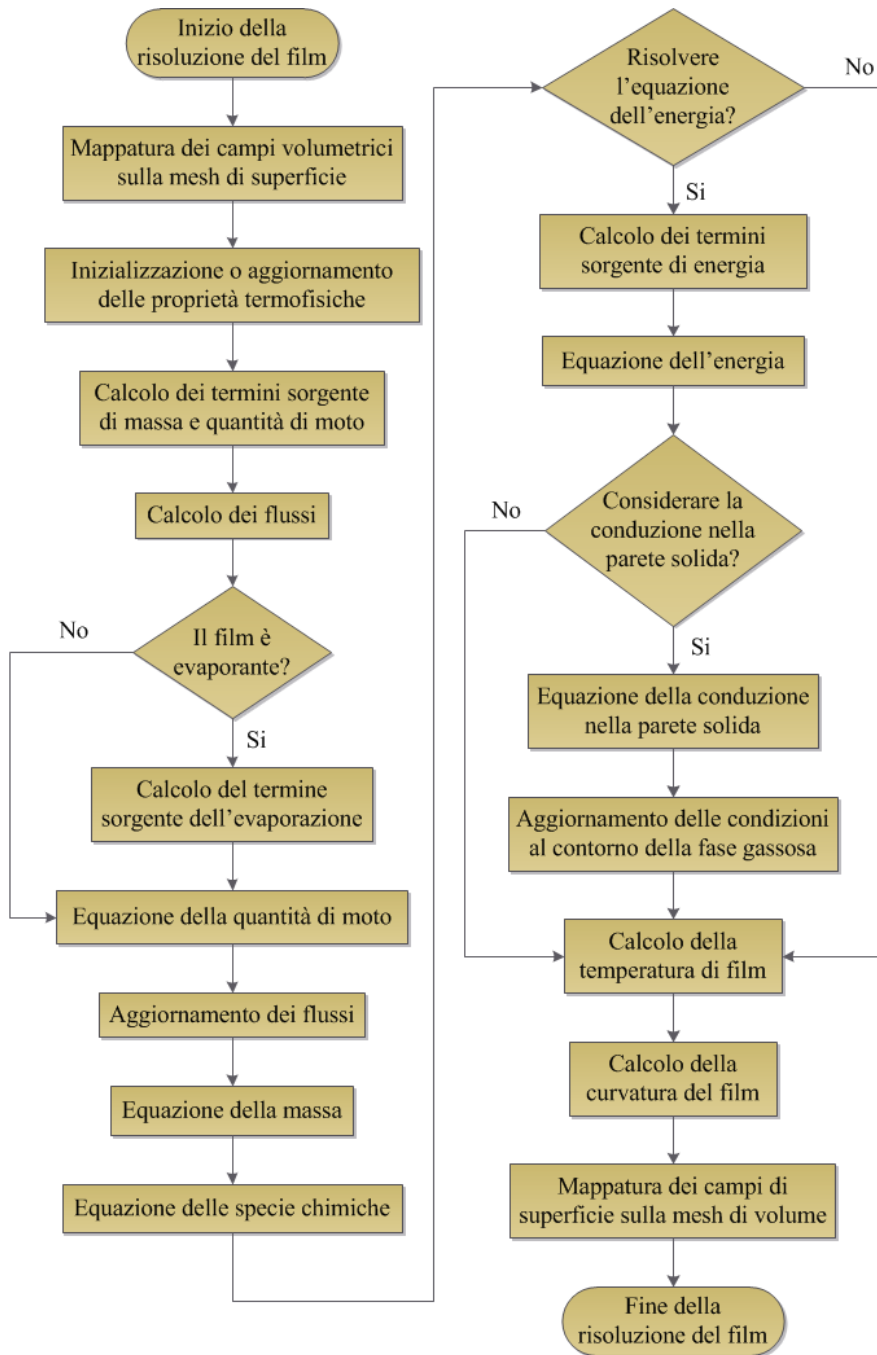


Figura 5.7: Diagramma di flusso della libreria wallFilmPolimi

trasporto convettivo.

Sempre tramite dizionario è possibile scegliere se considerare oppure no l'equazione di conservazione dell'energia e della conduzione nella parete solida. Nel

caso in cui queste opzioni siano attivate vengono calcolati i relativi termini sorgente e risolte le equazioni. I risultati dell'equazione di conduzione nella parete sono utilizzati per aggiornare i valori al contorno della temperatura della fase gassosa. Infine è possibile calcolare la temperatura del film mediante una procedura iterativa di bisezione che permette di invertire la funzione entalpia del liquido.

Terminata la simulazione del film i campi di superficie relativi al film vengono mappati sulla mesh di volume per poter utilizzare i risultati nella simulazione della fase gassosa e permetterne la visualizzazione in fase di post-processing.

5.4.2.1 Loop di calcolo della temperatura del film

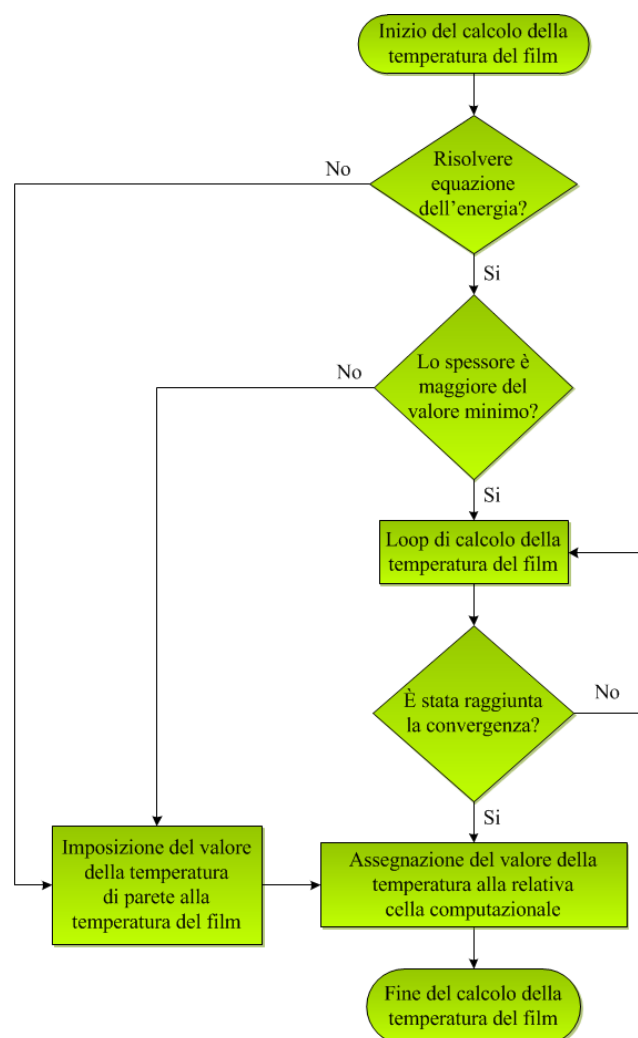


Figura 5.8: Diagramma di flusso del calcolo della temperatura di film

Riportiamo nella figura 5.8 lo schema concettuale utilizzato per il calcolo della temperatura del film. Per motivi di stabilità numerica è stato necessario definire uno spessore minimo (chiamato *minEvaporationThickness*) al di sotto del quale i termini j_w e j_g sono posti uguali a zero e la temperatura del film non viene calcolata ma le viene imposto il valore alla parete dei gas. La scelta di questo valore risulta particolarmente critica e attualmente non esistono dei criteri che ne stabiliscano il valore ottimale (nelle nostre simulazioni è stato considerato un valore dello spessore minimo di $10^{-6} m$).

Capitolo 6

Verifica dei risultati ottenuti

Dal momento che non sono disponibili dei dati sperimentali per validare il modello e non è stato possibile effettuare direttamente delle prove sperimentali, al fine di verificare il comportamento del modello implementato è stata effettuata una campagna di simulazioni, complicando gradualmente le condizioni operative in modo da analizzare singolarmente l'influenza dei vari fenomeni (scambio termico, evaporazione, ecc...) sui risultati delle simulazioni numeriche.

Allo scopo di rendere confrontabili i risultati e per una miglior comprensione degli stessi è stato necessario fissare alcune condizioni; in particolare in tutte le prove si sono utilizzati lo stesso dominio computazionale e le stesse impostazioni dello spray. Altre condizioni (temperatura, condizioni al contorno, ecc...) sono state di volta in volta modificate in funzione del problema.

6.1 Setup delle prove

La geometria scelta per le prove è un cilindro orizzontale di 5 cm di diametro e 30 cm di lunghezza; l'iniettore dello spray è posto ad una distanza di 10 cm dalla sezione d'ingresso dei gas ed è inclinato di 60° rispetto all'asse del cilindro con direzione del getto uguale al flusso dei gas. La griglia computazionale di volume conta 170372 celle esaedriche, mentre la griglia computazionale di superficie (sulla quale vengono risolte le equazioni del film) conta 19100 celle rettangolari aventi tutte la stessa superficie pari a $5 \cdot 10^{-6}\text{ m}^2$.

Nella figura 6.1 è rappresentata la mesh di volume, mentre la figura 6.2 mostra una sezione della mesh di superficie con evidenziato anche lo spray.

Il flusso dei gas è orientato come l'asse z positivo mostrato nelle figure e l'accelerazione di gravità è diretta come l'asse y negativo.

Per quanto riguarda le prime tre prove (casi A, B e C) è stata effettuata un'iniezione continua della durata di $0,5\text{ s}$ con una massa iniettata di $4 \cdot 10^{-3}\text{ kg}$ di acqua, mentre per le altre quattro simulazioni (casi D, E, F e G) è stata iniettata

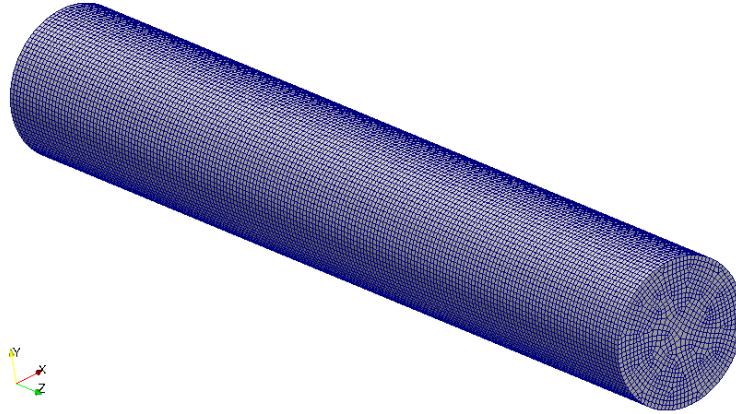


Figura 6.1: Griglia computazionale di volume

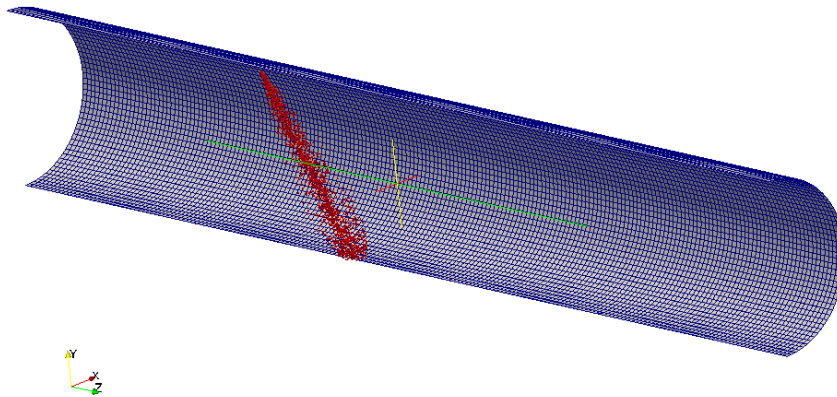


Figura 6.2: Sezione della griglia computazionale di superficie con visualizzazione dello spray

una massa di $4 \cdot 10^{-3} \text{ kg}$ di una miscela di acqua e urea. Le frazioni massiche sono circa 0.69 per l'acqua e 0.31 per l'urea, si noti che le approssimazioni sono dovute all'imposizione delle frazioni molari nello spray. Per le proprietà termofisiche dell'urea si è fatto riferimento a [27]. La temperatura di iniezione è stata modificata a seconda della prova effettuata. Il modello di break-up utilizzato è il *Reitz KHRT*, mentre non è stato utilizzato alcun tipo di modello di atomizzazione, in quanto è stata imposta una distribuzione dei diametri di *Rosin-Rammler* (con

diametro medio pari a 10^{-5} m) con un'apertura dello spray pari a 30° . Il trattamento a parete dello spray è stato effettuato utilizzando il modello di *Bai-Gosman*. La modellizzazione della resistenza aerodinamica (drag), dello scambio termico e dell'evaporazione dello spray sono state effettuate, qualora presenti, con i modelli visti nel capitolo 3.

Per quanto riguarda la fase gassosa, nelle prove monocomponente è stato inizializzato un campo di moto con velocità d'ingresso imposta a 5 m/s, intensità di turbolenza pari al 5%, mentre nelle prove bicomponente non è stato inizializzato alcun campo di moto. La temperatura è stata scelta in base al problema da analizzare. Il modello di turbolenza utilizzato è l'*RNG k- ϵ* .

Le tabelle 6.1 e 6.2 riassumono le condizioni operative delle prove effettuate.

Nome della prova	Caso A	Caso B	Caso C
Pressione d'iniezione [bar]	9.11	9.00	8.98
Velocità iniziale del getto [m/s]	40.671	40.101	40.028
Temperatura d'iniezione [K]	350	300	293
Velocità d'ingresso dei gas [m/s]	5	5	5
Pressione d'uscita dei gas [bar]	1	1	1
Intensità di turbolenza [%]	5	5	5
Temperatura iniziale dei gas [K]	350	350	550
Temperatura iniziale di parete [K]	350	350	550

Tabella 6.1: Condizioni operative delle prove monocomponente

Nome della prova	Caso D	Caso E	Caso F	Caso G
Pressione d'iniezione [bar]	8.60	8.60	8.52	8.52
Velocità iniziale del getto [m/s]	38.093	38.093	37.701	37.701
Temperatura d'iniezione [K]	350	350	300	300
Pressione d'ingresso dei gas [bar]	1	1	1	1
Pressione d'uscita dei gas [bar]	1	1	1	1
Temperatura iniziale dei gas [K]	350	300	350	550
Temperatura iniziale di parete [K]	350	300	350	550

Tabella 6.2: Condizioni operative delle prove bicomponente

Le proprietà termofisiche della parete solida sono mostrate nella tabella 6.3 e sono comuni a tutte le prove effettuate considerando la conduzione nella parete.

Capacità termica della parete [J/m^3K]	3532500
Conduttività termica della parete [W/mK]	18
Spessore della parete [m]	0.002

Tabella 6.3: Caratteristiche della parete solida

6.2 Risultati delle prove

6.2.1 Caso A

Il caso A è una simulazione isoterma, senza evaporazione dello spray e del film e senza scambio termico dello spray. L'equazione della conduzione nella parete solida è disattivata e la parete è a temperatura imposta costante pari a 350 K . Il getto risulta alla stessa temperatura dei gas e della parete e quindi non si dovrebbe osservare alcuna variazione di temperatura nel film. Nelle figure 6.7 e 6.8 sono riportati i profili di spessore e temperatura del film per alcuni time-step.

Per quanto riguarda lo spessore del film si può osservare come i risultati siano coerenti con quanto ci si potrebbe aspettare dal problema in esame; l'asimmetria mostrata dal film a partire da 10 ms è imputabile alle interazioni fluidodinamiche tra i gas e il film liquido. Tale comportamento è presente in tutte le prove effettuate.

L'andamento della temperatura di film risulta invece meno realistico in quanto ci si aspetterebbe che il film si mantenga alla stessa temperatura dello spray e della parete. Tale comportamento è attribuibile probabilmente a errori di tipo numerico dovuti alle grandi fluttuazioni del termine sorgente S_H , il quale dipende dall'impatto delle gocce e quindi può passare, da un time-step al successivo, da valori prossimi a zero a valori molto grandi (si ricordi che l'entalpia è espressa in *Joule* e quindi assume valori superiori a 10^6). A dimostrazione di ciò riportiamo in figura 6.9 un confronto tra il caso A risolto con un time-step pari a 10^{-6} s e lo stesso caso risolto con un time-step pari a 10^{-8} s : si noti che, pur trattandosi dell'istante più critico (quello appena successivo al primo impatto) la seconda simulazione risulta notevolmente più accurata. Lo spessore risulta pressochè invariato in entrambe le simulazioni, mentre le oscillazioni di temperatura sono molto più contenute e accettabili. Tuttavia la scelta di un time-step così ridotto risulta proibitiva dal punto di vista dei tempi di calcolo.

Si vuole comunque precisare che questo caso non è indicativo di una condizione reale di funzionamento, ma rappresenta il problema più semplice dal punto di vista fisico per testare il comportamento dei modelli implementati.

6.2.2 Caso B

Nella seconda prova si è voluto verificare il comportamento del modello di film liquido in presenza di una differenza di temperatura contenuta tra lo spray e i gas; la temperatura massima (imposta dai gas) è stata scelta in modo da risultare inferiore alla temperatura d'ebollizione dell'acqua alla pressione operativa della prova (circa 373 K). In questo caso sono stati attivati sia l'evaporazione che lo scambio termico del film e dello spray. Inoltre è stata considerata la conduzione nella parete solida, rendendo quindi il sistema adiabatico verso l'esterno. Essendo lo spray a temperatura inferiore rispetto ai gas e alla parete ci si aspetta che il film si porti ad una temperatura intermedia tra quella del getto e quella della fase gassosa circostante. Dal punto di vista fluidodinamico non si attendono sostanziali differenze rispetto al caso precedente. I risultati per alcuni time-step sono riportati nelle figure 6.10, 6.11 e 6.12.

Si noti che la forma della zona interessata dal film risulta pressochè invariata rispetto al caso A, in particolare è presente la stessa asimmetria dovuta alle interazioni gas-film. L'andamento dello spessore del film è meno uniforme a causa dell'evaporazione più intensa in alcune zone rispetto ad altre. Lo spessore massimo è sempre localizzato nell'intorno del punto d'impatto.

L'andamento delle temperature risulta coerente con quanto ci si aspetterebbe dal punto di vista fisico. Il raffreddamento del film al di sotto della temperatura d'iniezione nella zona d'impatto è dovuto all'evaporazione che richiede energia per avvenire: dal momento che la parete è adiabatica, e i gas non riescono a fornire tutta l'energia necessaria (data la piccola differenza di temperatura) l'energia restante viene prelevata dall'energia interna del liquido, con conseguente riduzione di temperatura. Questo fenomeno si osserva anche nello spray come mostrato in figura 6.3.

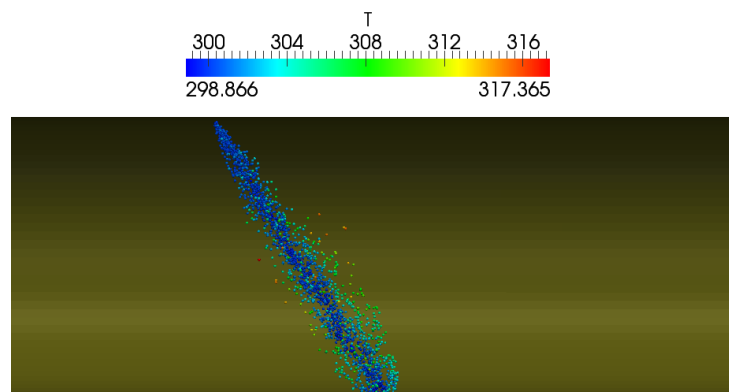


Figura 6.3: Profilo di temperatura dello spray, caso B, 2 ms

La temperatura della parete solida infine presenta un profilo in accordo con il profilo di temperatura osservato nel film, ossia dove si registrano le minime temperature del film si hanno anche le minime temperature della parete solida. Il minor raffreddamento della parete solida è imputabile alla ridotta durata della simulazione combinata alla elevata capacità termica del materiale costituente la parete solida.

È importante osservare che in questa configurazione non sono emersi i problemi di stabilità visti nel caso A; ciò è molto probabilmente dovuto allo scambio termico e all'evaporazione attivati, i quali tendono a mitigare le forti fluttuazioni del termine S_H risultando quindi il calcolo dell'equazione dell'energia più stabile.

6.2.3 Caso C

L'ultima prova monocomponente è stata pensata per riprodurre condizioni il più possibile vicine a quelle reali di funzionamento di un sistema d'iniezione di urea per applicazioni mobili. In particolare è stata imposta un'elevata differenza di temperatura tra il getto e i gas: la temperatura massima raggiungibile è molto superiore alla temperatura di ebollizione dell'acqua e quindi è logico aspettarsi che vi siano delle zone del film in cui si verifichi l'ebollizione.

I modelli di scambio termico, evaporazione e le impostazioni dello spray sono identiche al caso B. Anche in questa simulazione si è risolta l'equazione di conduzione nella parete solida. Al fine di verificare la stabilità del calcolo, questa simulazione è stata portata a tempi superiori rispetto alle altre e quindi, per motivi legati alla memoria del calcolatore, è stato necessario campionare con minor frequenza.

I risultati sono presentati nelle figure 6.13, 6.14 e 6.15. Anche in questo caso gli effetti delle interazioni fluidodinamiche gas-film portano ad una asimmetria della zona interessata dal film senza sostanziali variazioni rispetto agli altri casi. È interessante notare che tale asimmetria permane anche per tempi più lunghi, tuttavia attenuandosi progressivamente con l'estendersi della superficie occupata dal film.

Come atteso il film presenta una zona più interna a temperatura più bassa, corrispondente alla zona d'impatto dello spray, mentre il resto del film si trova ad una temperatura fissata pari alla temperatura di ebollizione. Vi sono alcune celle isolate in cui la temperatura è superiore a quella d'ebollizione: in tali celle lo spessore di film è inferiore al `minEvaporationThickness` e quindi la loro temperatura viene imposta pari alla temperatura di parete (calcolata con l'equazione della conduzione nella parete). La temperatura del film è ovunque superiore alla temperatura d'iniezione, in quanto il calore fornito dai gas è sufficiente a far avvenire l'evaporazione e scaldare il liquido.

La temperatura della parete mostra l'andamento atteso: a causa dell'elevata differenza di temperatura tra il liquido e la parete e dei lunghi tempi di simulazione si possono osservare un deciso raffreddamento della parete e il manifestarsi gli effetti conduttivi legati ai forti gradienti di temperatura.

Nella figura 6.4 è riportato il confronto tra la frazione massica di acqua nei gas nel caso B e nel caso C (nello stesso istante): si noti come l'ebollizione comporti un drastico incremento della quantità di acqua che passa dalla fase liquida alla fase gassosa.

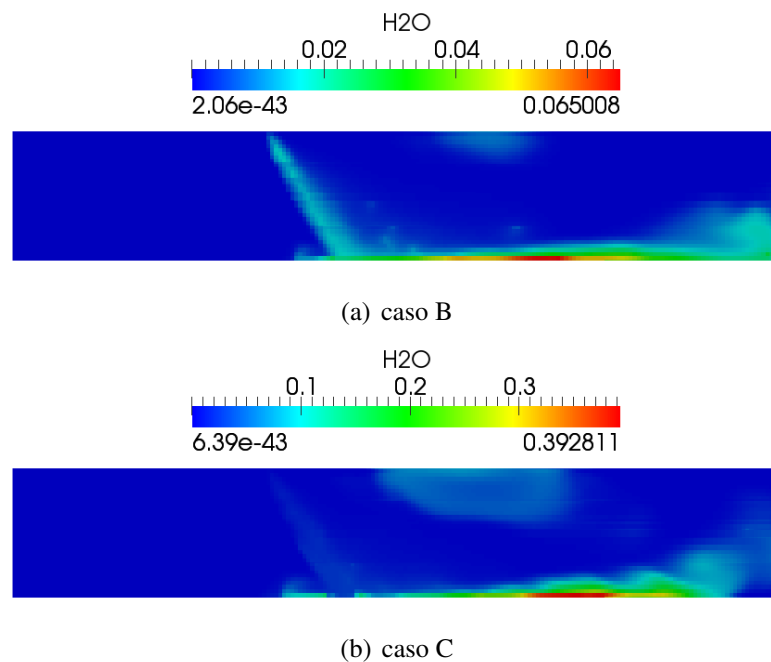


Figura 6.4: Confronto tra le frazioni massiche di acqua nei gas, casi B e C, 20 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)

6.2.4 Caso D

Il caso D è concettualmente simile al caso A, con la differenza che in questa simulazione si è utilizzato uno spray bicomponente. Nelle figure 6.16, 6.17 e 6.18 sono riportati i profili di spessore, temperatura e frazione massica di urea del film per alcuni time-step.

Lo spessore del film risulta molto più simmetrico rispetto ai casi con campo di moto inizializzato, a riprova del fatto che l'asimmetria è dovuta principalmente all'interazione con i gas. La temperatura di film mostra le stesse oscillazioni già viste nel caso A; anche in questo caso le fluttuazioni sono imputabili a un problema di stabilità numerica. La concentrazione di urea è coerente con l'impostazione

del problema, in quanto non essendoci evaporazione la frazione massica rimane inalterata passando dallo spray al film. Soltanto nelle zone di avanzamento del film (dove gli spessori sono estremamente ridotti) si riscontrano dei valori non coerenti con il problema anch'essi imputabili a errori di tipo numerico.

6.2.5 Caso E

Questa prova è stata effettuata allo scopo di verificare il corretto funzionamento del modello di film liquido qualora lo spray fosse a temperatura superiore a quella di parete. Al fine di evitare interferenze tra i vari fenomeni sono stati disattivati lo scambio termico e l'evaporazione dello spray e l'evaporazione del film; è stata inoltre trascurata la conduzione nella parete solida, imponendo perciò una temperatura di parete fissa. Le figure 6.19, 6.20, 6.21 e 6.22 mostrano i risultati ottenuti in questa simulazione.

Lo spessore di film non presenta comportamenti particolari o anomali ed è coerente con quanto atteso. La temperatura di film è perfettamente in linea con quanto ci si aspetterebbe dal problema, presentando dei valori compresi tra la temperatura d'iniezione e quella di parete (non essendo presente l'evaporazione non ci aspettiamo abbassamenti di temperatura). I due profili di concentrazione, come nel caso precedente, presentano il valore imposto nell'iniezione (salvo errori numerici isolati lungo il fronte di avanzamento); si noti che la conservazione della massa è rispettata in quanto le frazioni massiche sommano a 1.

6.2.6 Caso F

Questa simulazione considera tutti i fenomeni di scambio termico e di massa inerenti sia lo spray che il film. È considerata inoltre la conduzione nella parete solida. Le temperature sono state scelte per evitare fenomeni di ebollizione del film. I risultati sono visibili nelle figure 6.23, 6.24, 6.25 e 6.26.

Lo spessore di film e le concentrazioni massiche non richiedono particolari osservazioni, eccezion fatta per la frazione massica di urea che presenta un leggerissimo aumento causato dal maggior tasso di evaporazione dell'acqua (figura 6.5). La temperatura di film è congruente con la temperatura delle gocce impattanti e con la condizione di adiabaticità verso l'esterno (si ricorda che l'evaporazione causa una diminuzione della temperatura di film qualora l'apporto termico dei gas non fosse sufficiente). La temperatura di parete è anch'essa coerente con le impostazioni del problema, si noti che le variazioni di temperatura sono contenute a causa della bassa differenza di temperatura tra film e parete solida e dei ridotti tempi di osservazione.

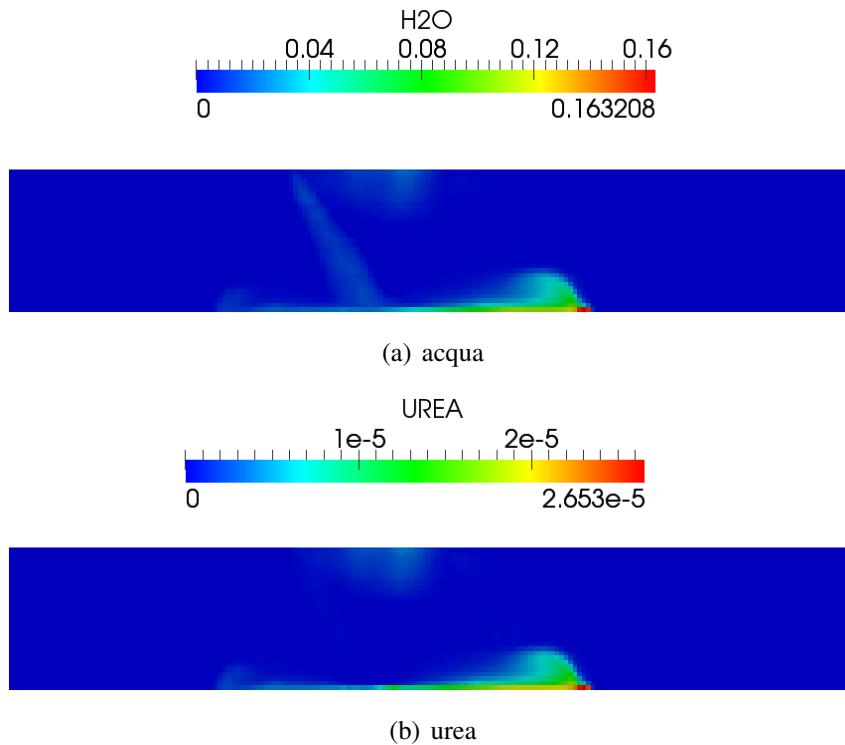


Figura 6.5: Confronto tra le frazioni massiche di acqua e urea nei gas, caso F, 20 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)

6.2.7 Caso G

L'ultima prova effettuata simula una configurazione molto simile a quella realmente utilizzata nei sistemi di iniezione di urea utilizzati nelle applicazioni mobili. Ci si aspetta che l'elevata temperatura di parete porti all'ebollizione della miscela iniettata, e in particolare che la temperatura del film si porti ad un valore pressochè uniforme e superiore a quello ottenuto nel caso C (in quanto la temperatura di ebollizione della miscela acqua-urea è superiore a quella della sola acqua e aumenta in funzione della concentrazione di urea presente). Le figure 6.27, 6.28 e 6.29 mostrano alcuni dei risultati ottenuti.

Come nel caso F si è osservato un aumento della concentrazione di urea presente nel film e come atteso tale incremento risulta superiore a causa della maggior quantità di acqua che passa dal film alla fase gassosa. La quantità di urea che migra dal liquido ai gas risulta anch'essa superiore in virtù delle più elevate temperature raggiunte. Si noti in figura 6.6 che la concentrazione di urea è quattro volte quella presente nel caso F dopo un minore intervallo di tempo.

Gli andamenti delle temperature di film e di parete rispecchiano quanto atteso, in particolare si può osservare che la temperatura di film, ad eccezione della

zona più interna interessata dagli impatti delle gocce, si porta ad una temperatura pressochè uniforme e costante, compresa fra 375 K e 377 K (ricordiamo che la temperatura di ebollizione a pressione ambiente con le frazioni massiche da noi imposte all'iniezione è circa 376 K); le variazioni sono dovute alla diversa concentrazione di urea nelle varie zone di liquido.

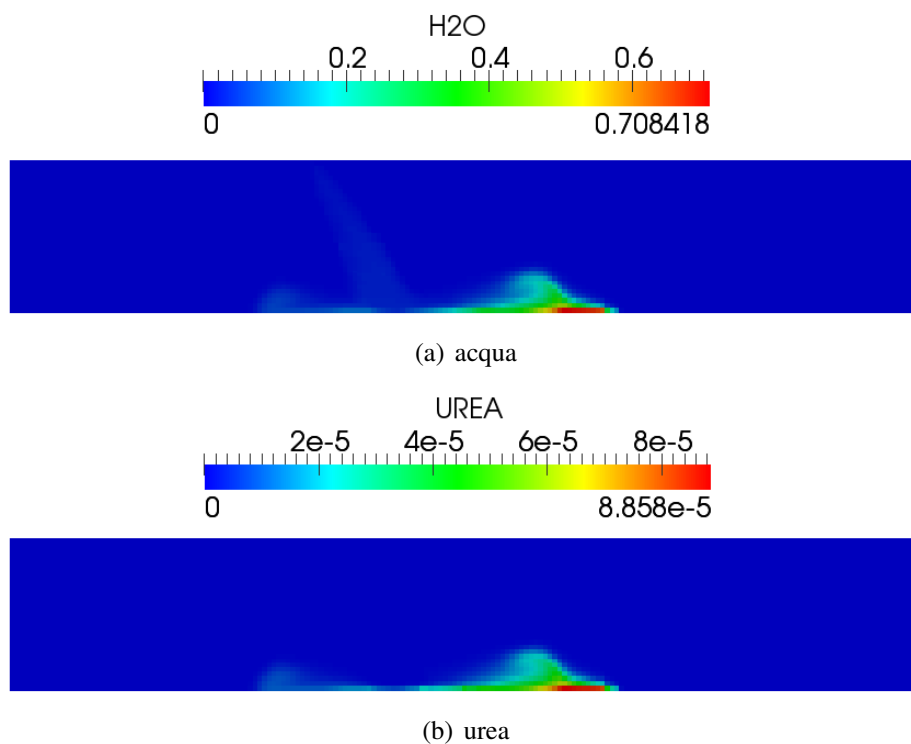
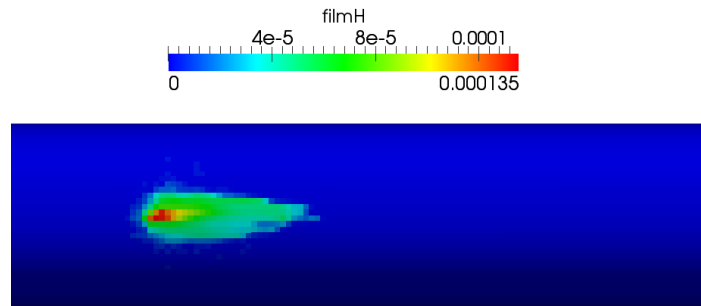
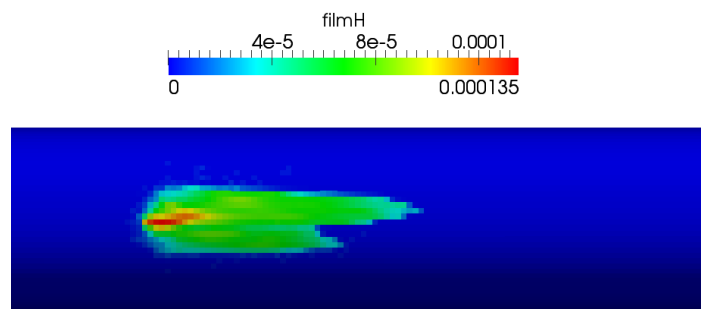


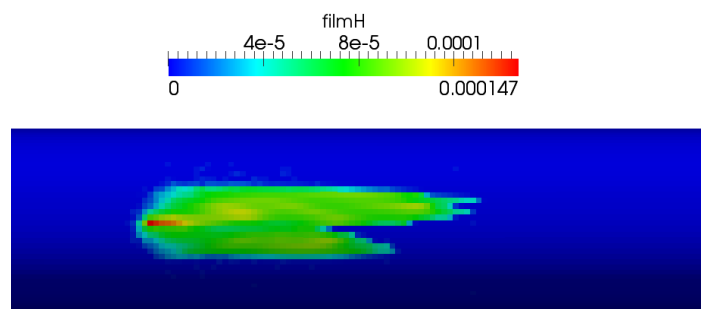
Figura 6.6: Confronto tra le frazioni massiche di acqua e urea nei gas, caso G, 10 ms (si noti la differente scala di visualizzazione)



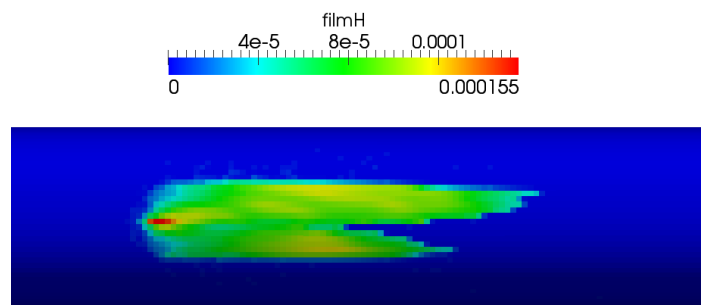
(a) 5 ms



(b) 10 ms

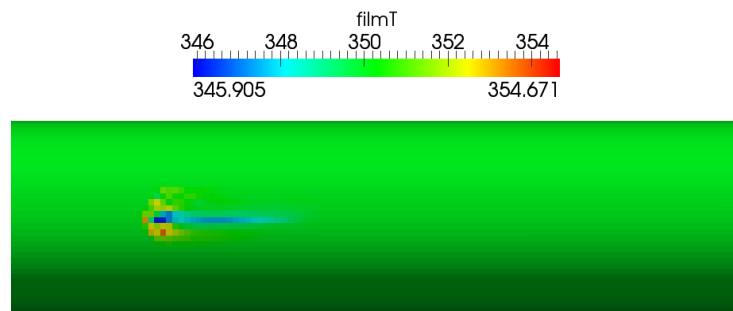


(c) 15 ms

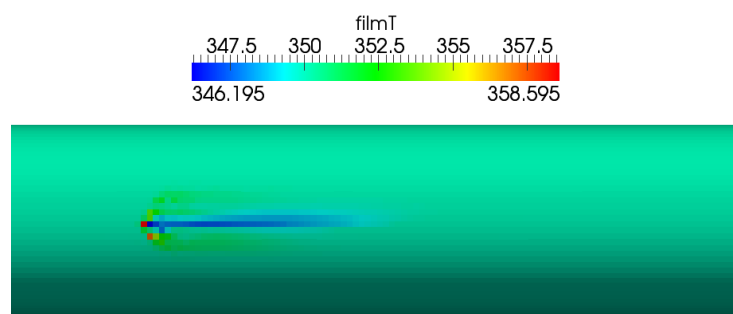


(d) 20 ms

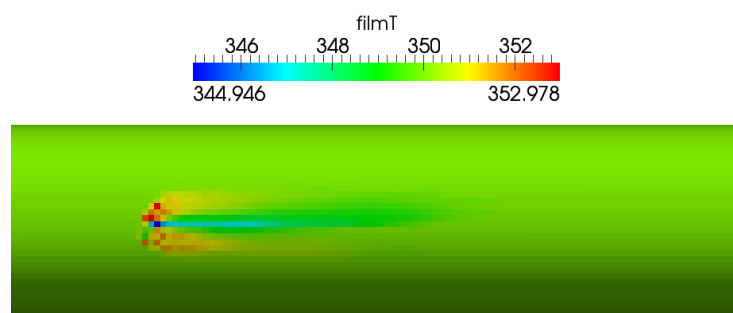
Figura 6.7: Spessore di film, caso A



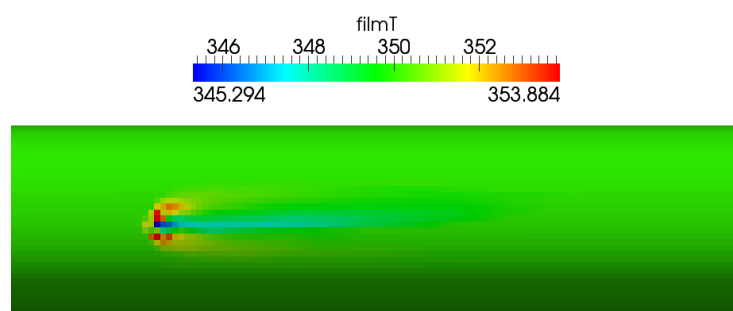
(a) 5 ms



(b) 10 ms

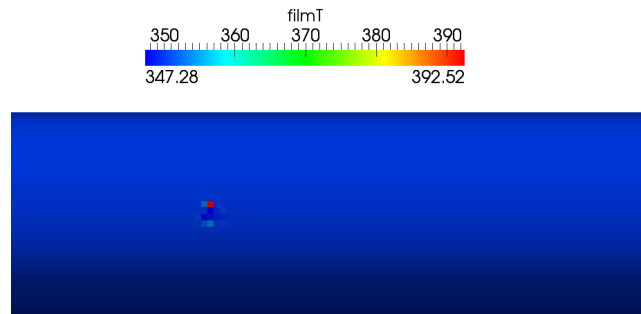


(c) 15 ms

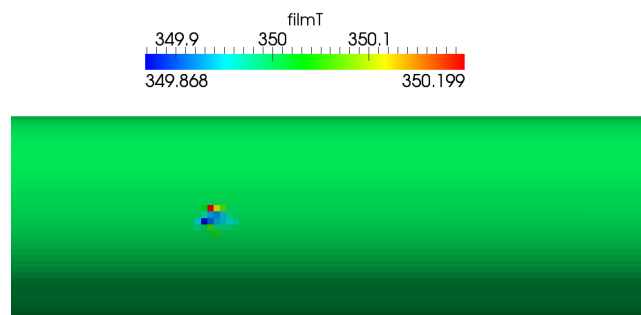


(d) 20 ms

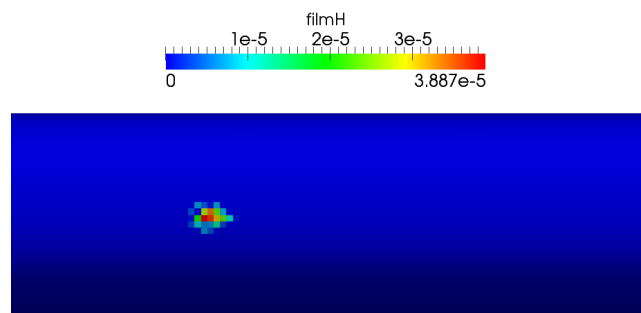
Figura 6.8: Temperatura di film, caso A



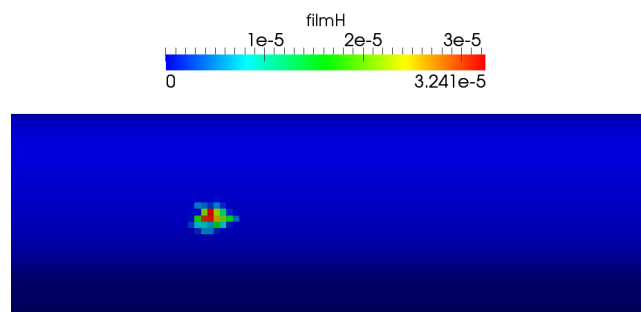
(a) Temperatura di film, time-step 10^{-6} s



(b) Temperatura di film, time-step 10^{-8} s

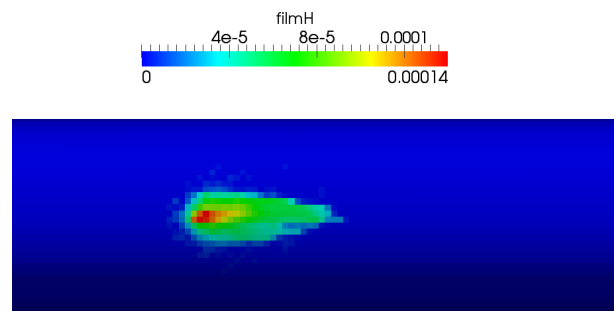


(c) Spessore di film, time-step 10^{-6} s

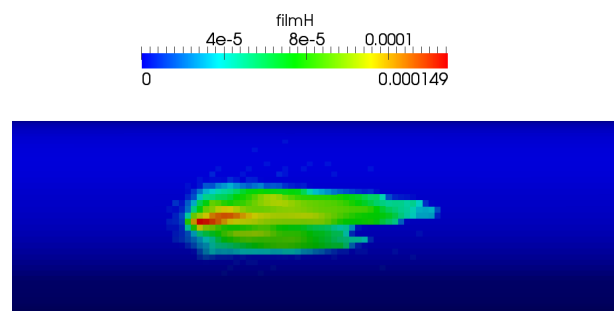


(d) Spessore di film, time-step 10^{-8} s

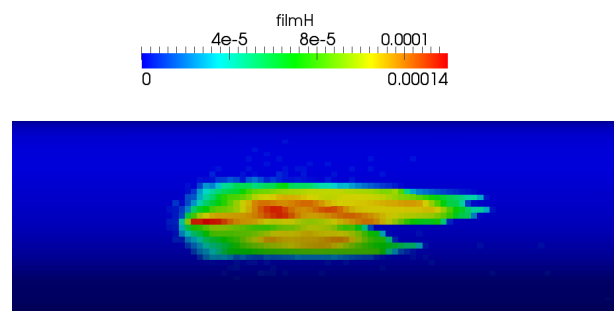
Figura 6.9: Confronto tra diversi time-step per il caso A, 2 ms



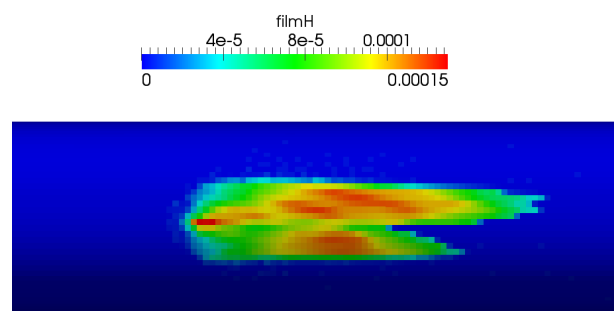
(a) 5 ms



(b) 10 ms

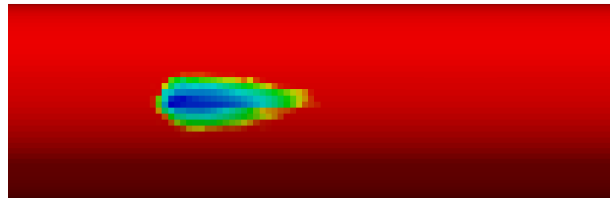
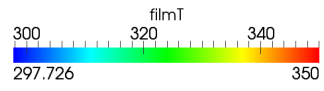


(c) 15 ms

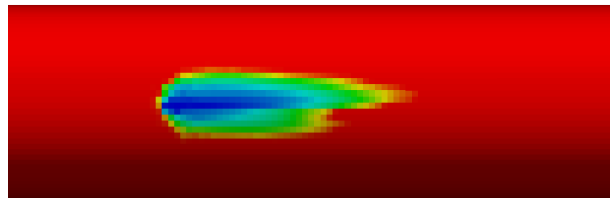
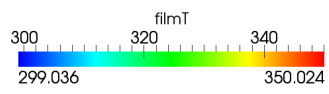


(d) 20 ms

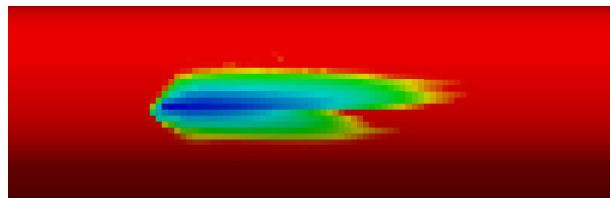
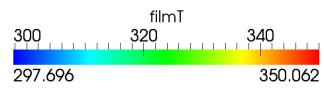
Figura 6.10: Spessore di film, caso B



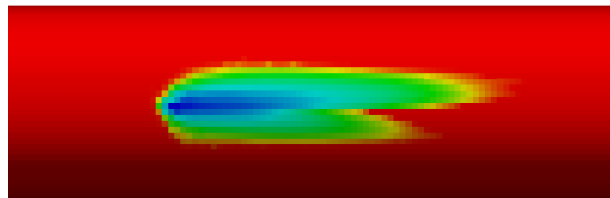
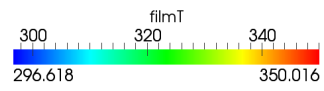
(a) 5 ms



(b) 10 ms

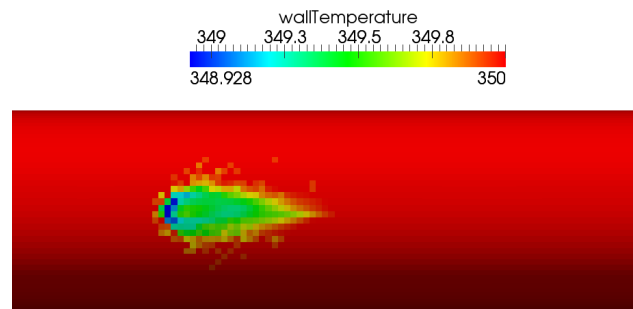


(c) 15 ms

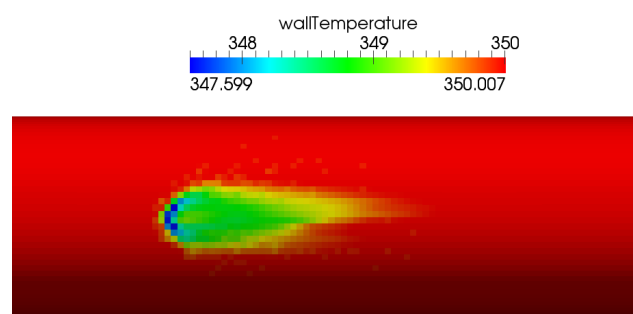


(d) 20 ms

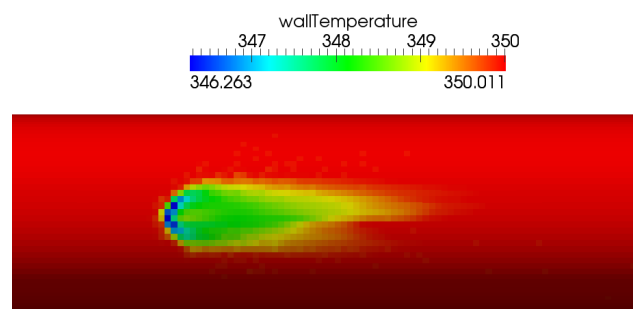
Figura 6.11: Temperatura di film, caso B



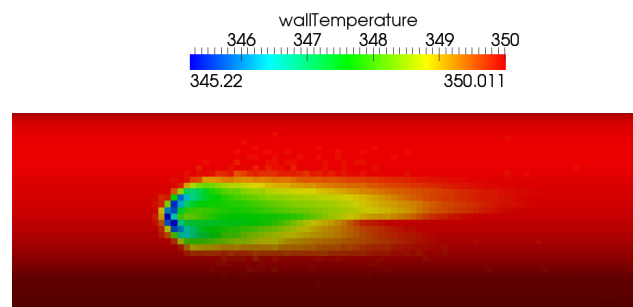
(a) 5 ms



(b) 10 ms

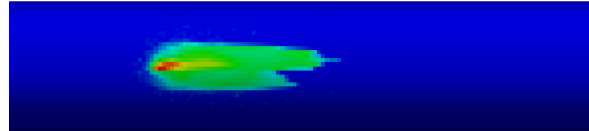
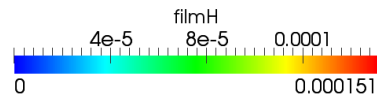


(c) 15 ms

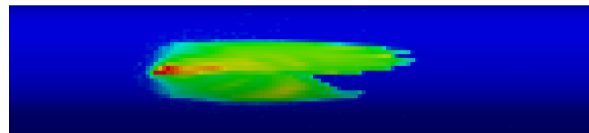
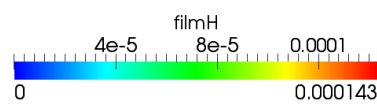


(d) 20 ms

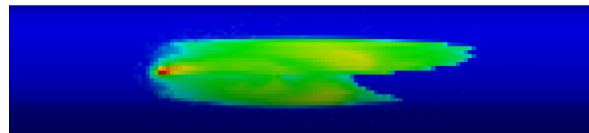
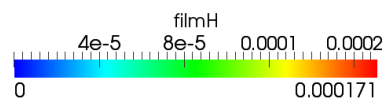
Figura 6.12: Temperatura di parete, caso B



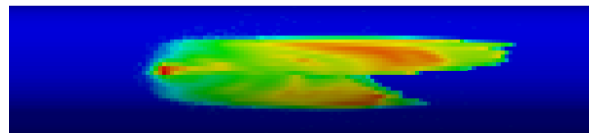
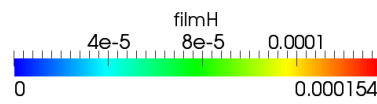
(a) 10 ms



(b) 20 ms

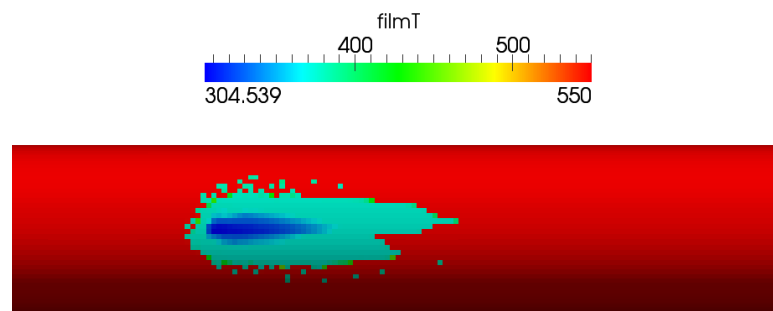


(c) 30 ms

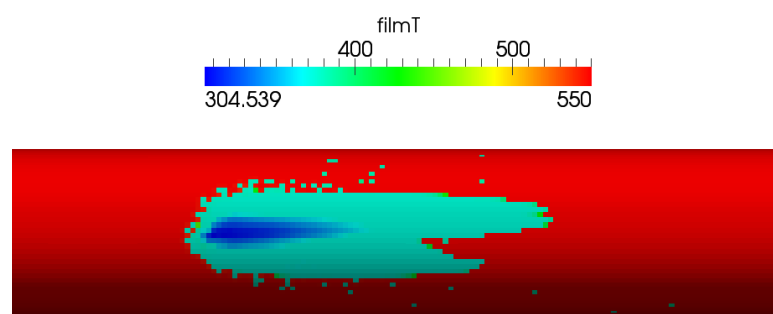


(d) 40 ms

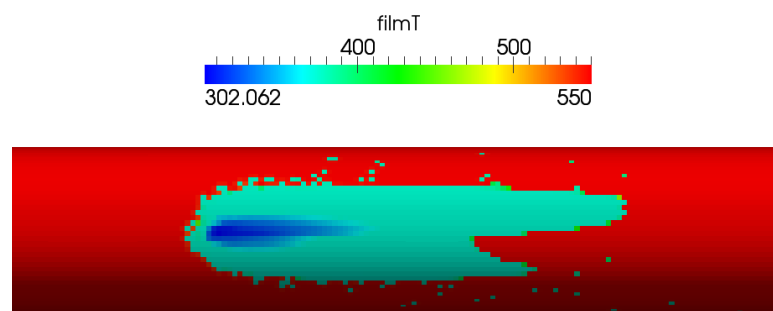
Figura 6.13: Spessore di film, caso C



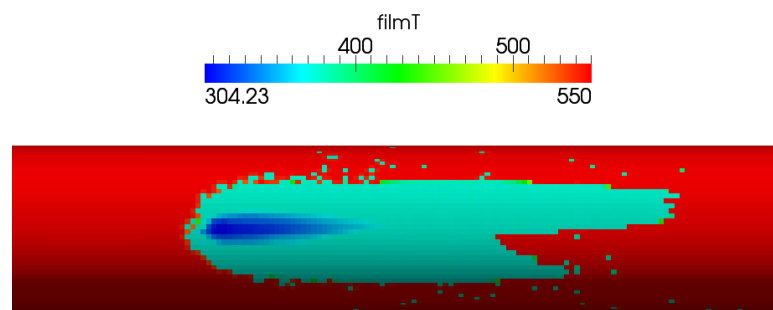
(a) 10 ms



(b) 20 ms

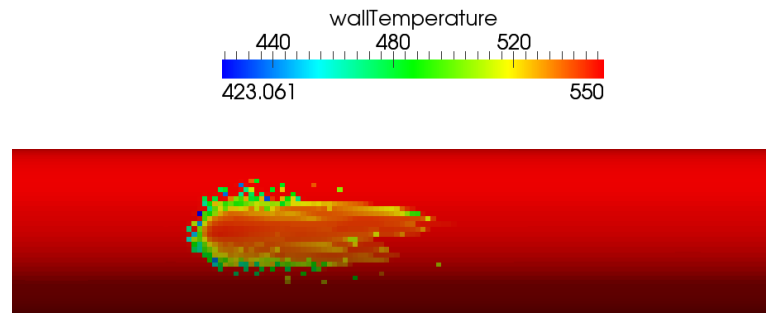


(c) 30 ms

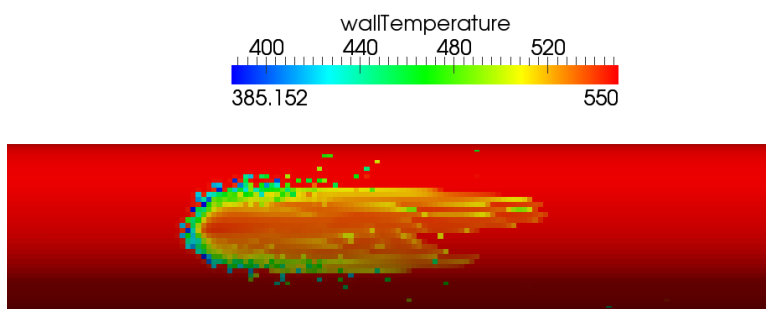


(d) 40 ms

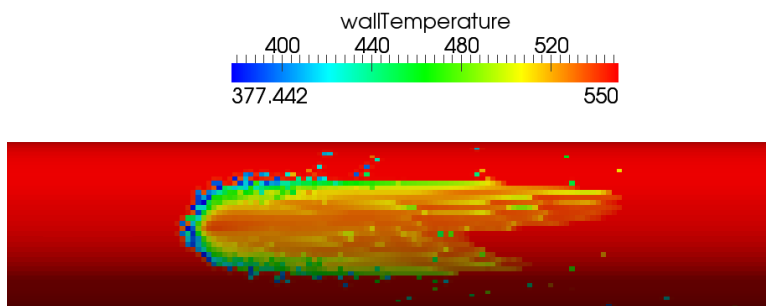
Figura 6.14: Temperatura di film, caso C



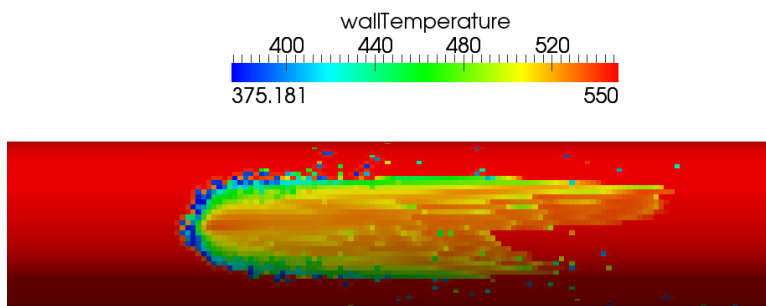
(a) 10 ms



(b) 20 ms

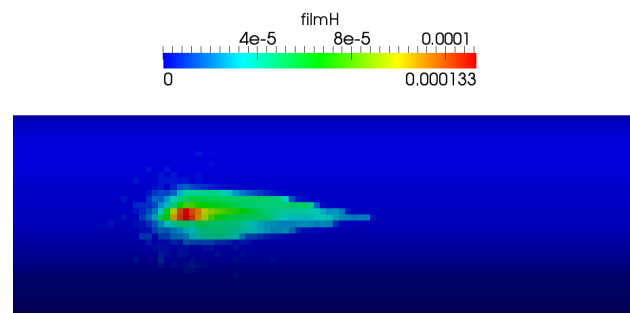


(c) 30 ms

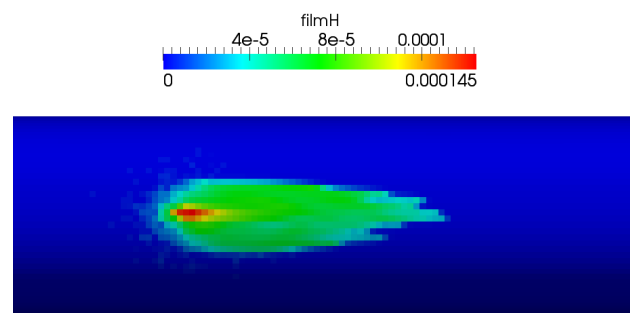


(d) 40 ms

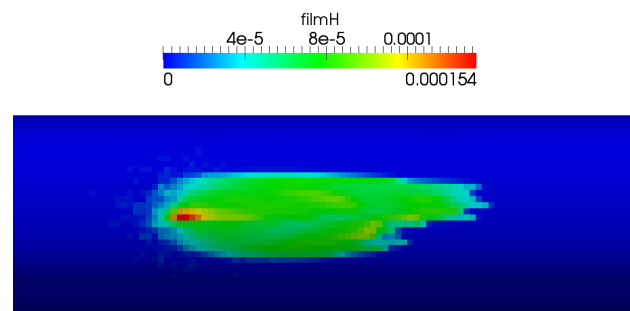
Figura 6.15: Temperatura di parete, caso C



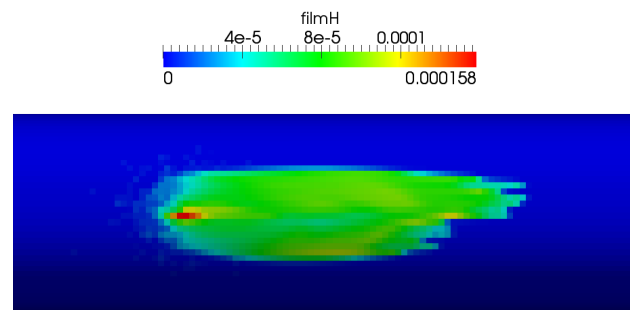
(a) 5 ms



(b) 10 ms

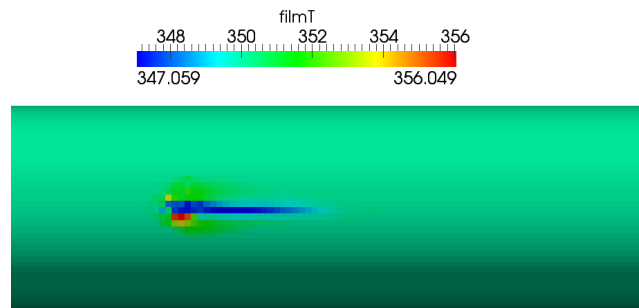


(c) 15 ms

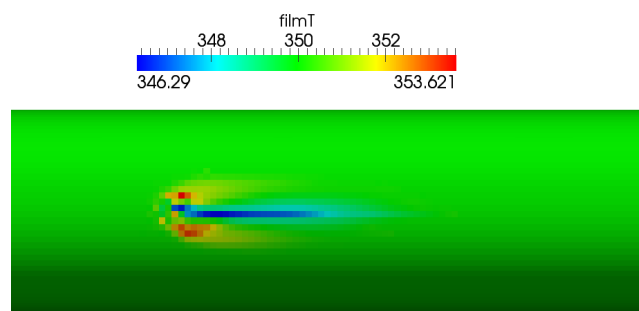


(d) 20 ms

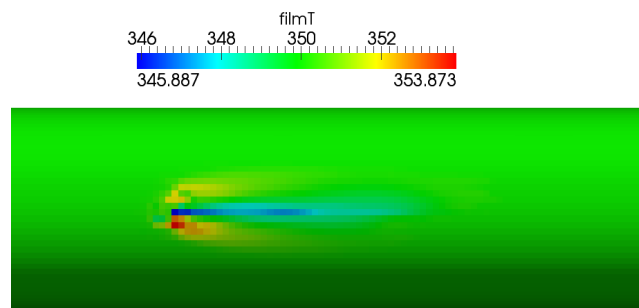
Figura 6.16: Spessore di film, caso D



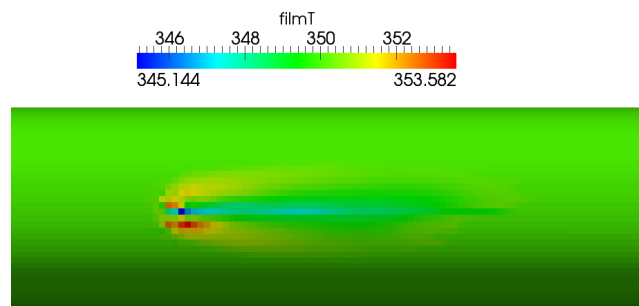
(a) 5 ms



(b) 10 ms

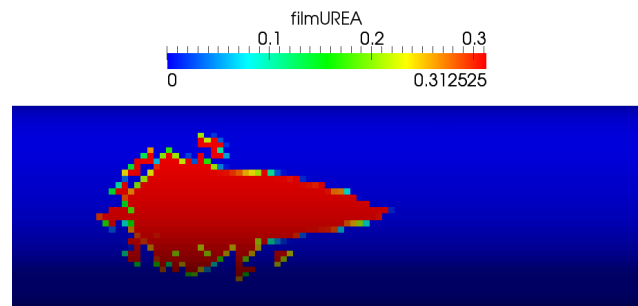


(c) 15 ms

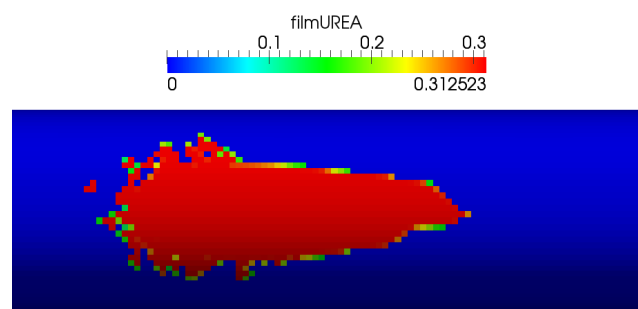


(d) 20 ms

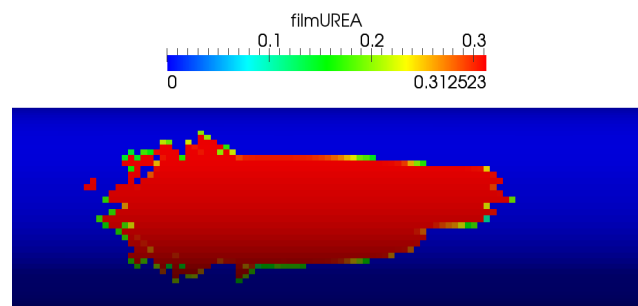
Figura 6.17: Temperatura di film, caso D



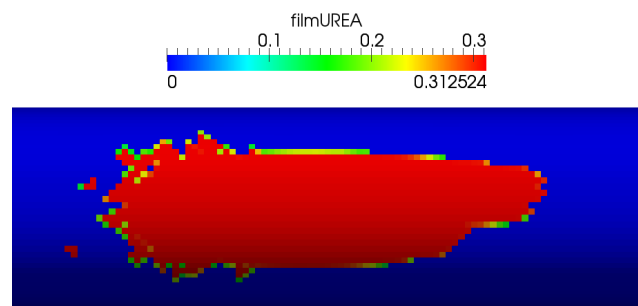
(a) 5 ms



(b) 10 ms

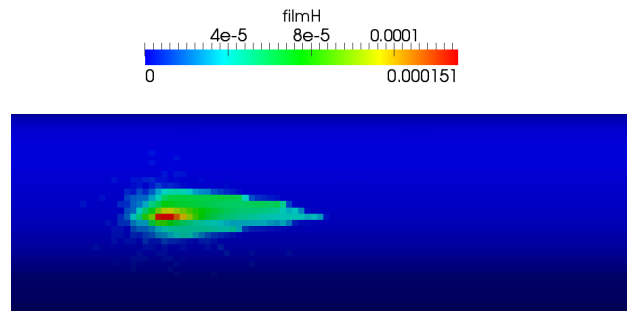


(c) 15 ms

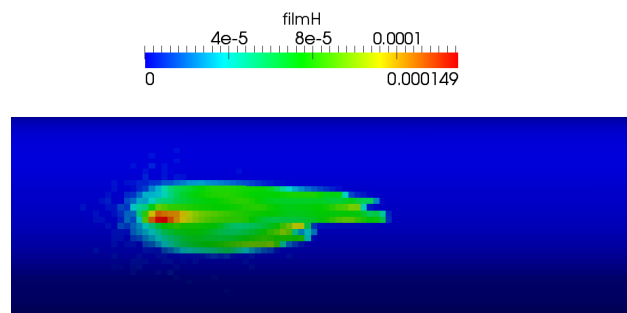


(d) 20 ms

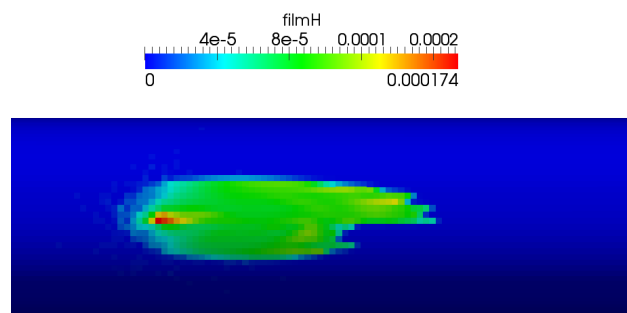
Figura 6.18: Frazione massica di urea del film, caso D



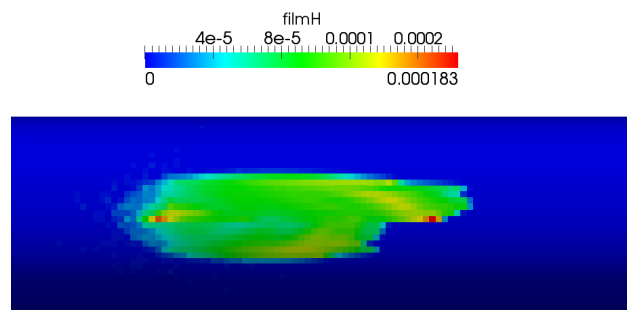
(a) 5 ms



(b) 10 ms

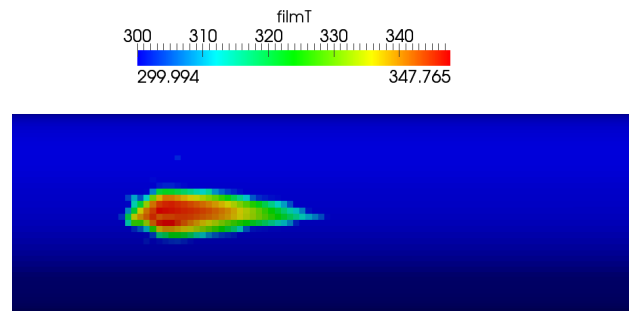


(c) 15 ms

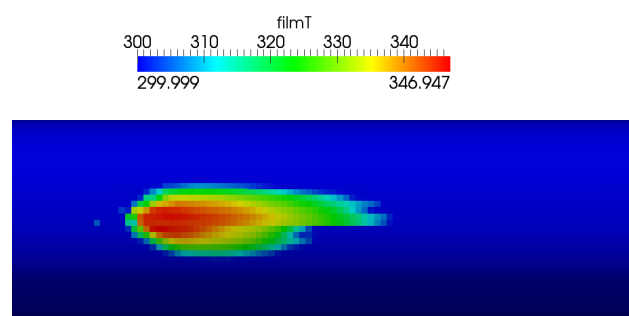


(d) 20 ms

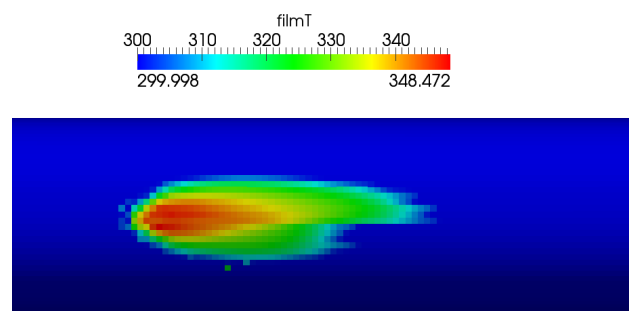
Figura 6.19: Spessore di film, caso E



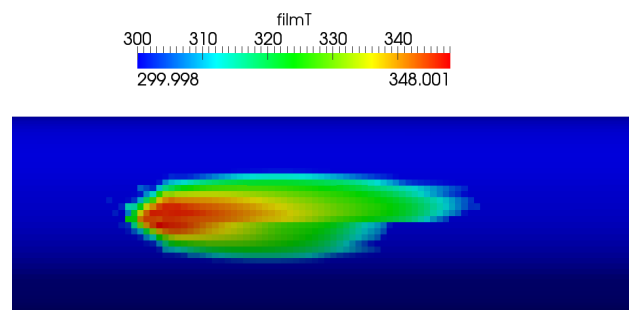
(a) 5 ms



(b) 10 ms

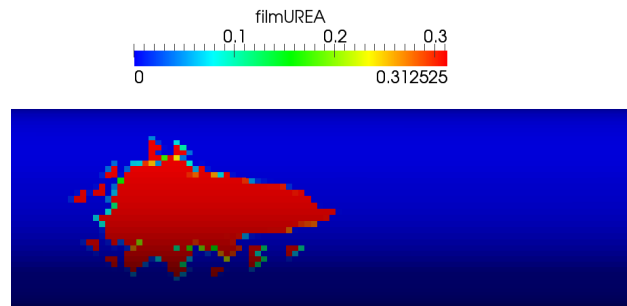


(c) 15 ms

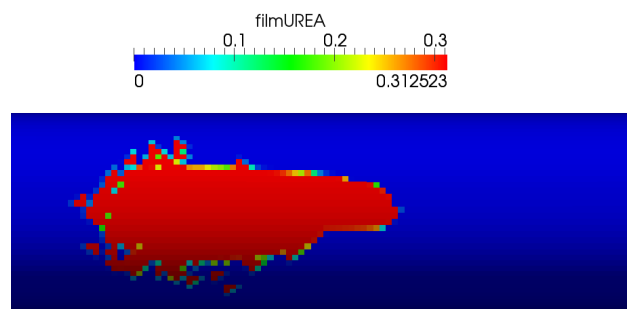


(d) 20 ms

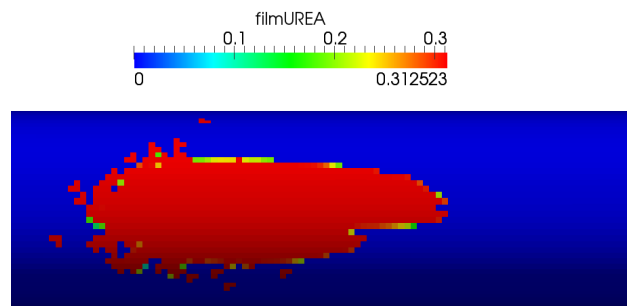
Figura 6.20: Temperatura di film, caso E



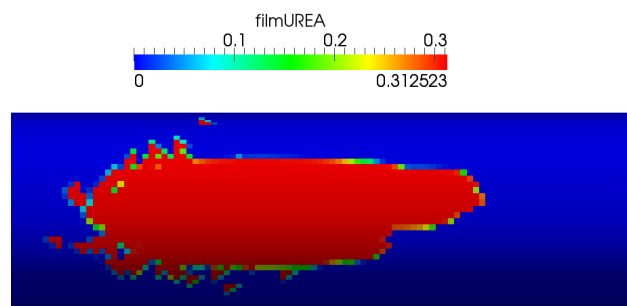
(a) 5 ms



(b) 10 ms

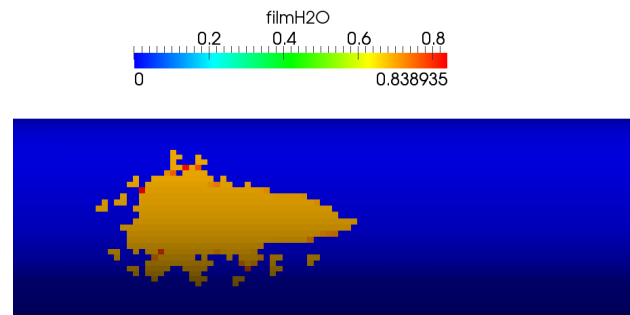


(c) 15 ms

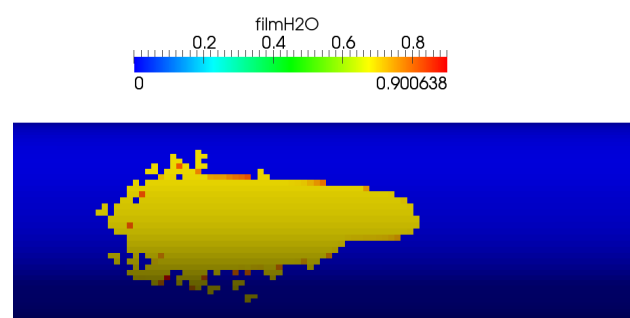


(d) 20 ms

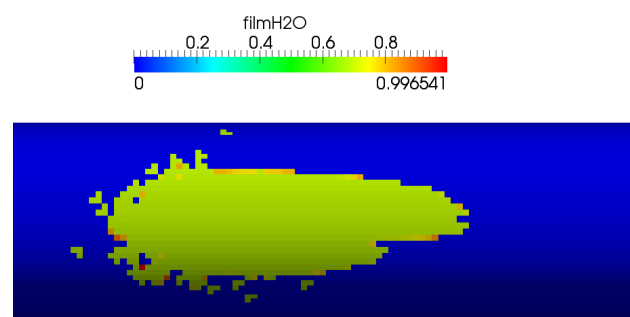
Figura 6.21: Frazione massica di urea del film, caso E



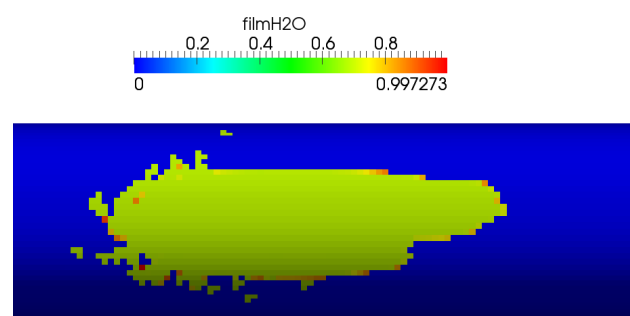
(a) 5 ms



(b) 10 ms

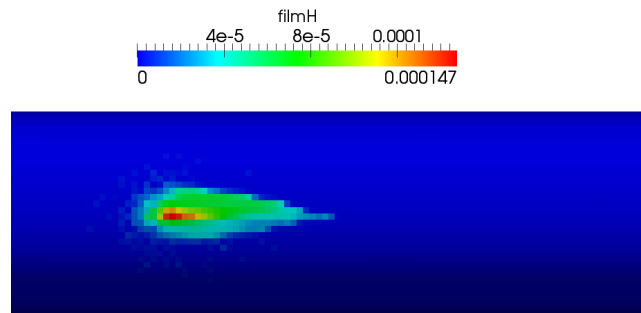


(c) 15 ms

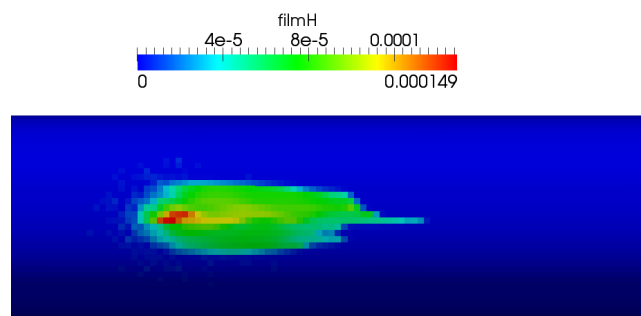


(d) 20 ms

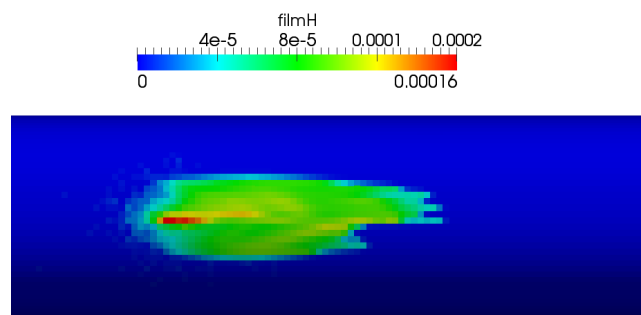
Figura 6.22: Frazione massica di acqua del film, caso E



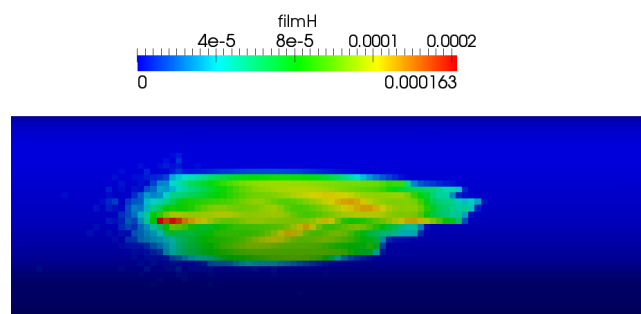
(a) 5 ms



(b) 10 ms

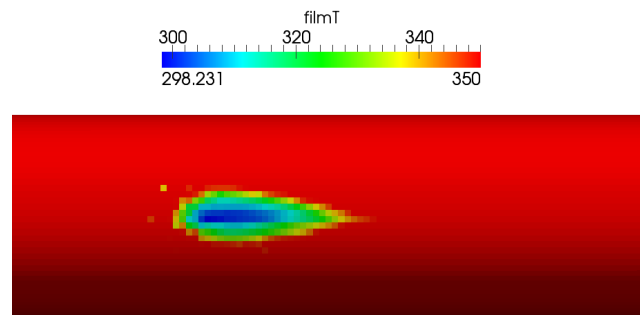


(c) 15 ms

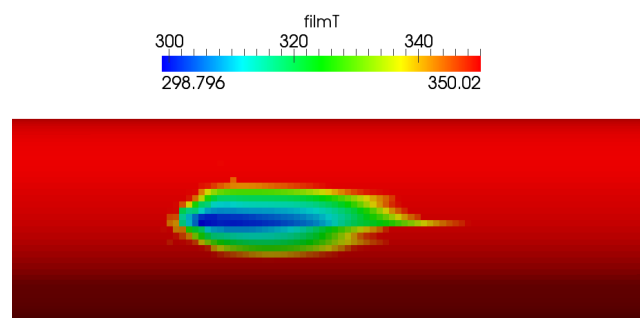


(d) 20 ms

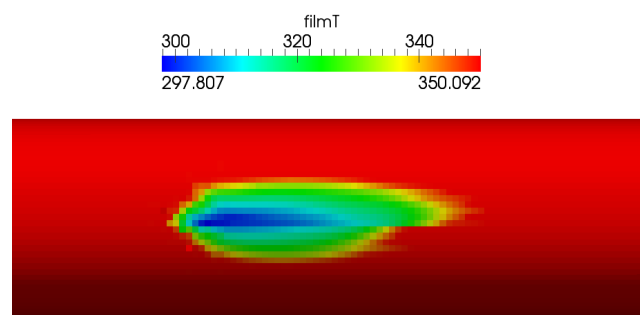
Figura 6.23: Spessore di film, caso F



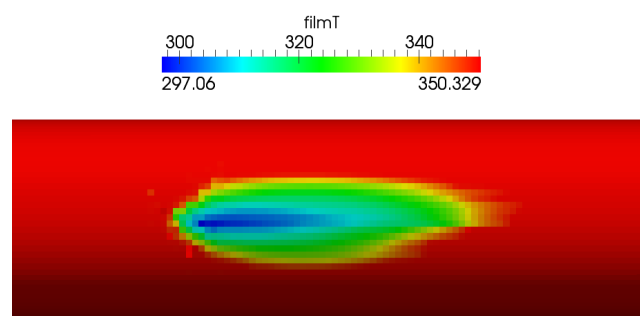
(a) 5 ms



(b) 10 ms

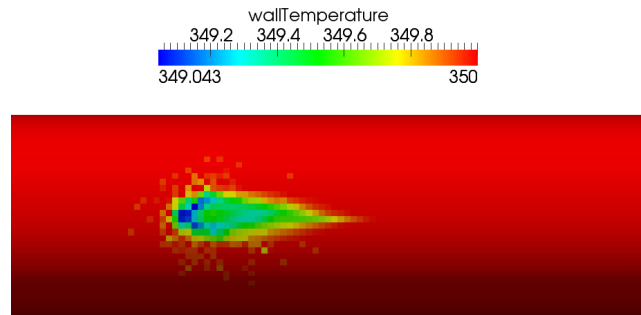


(c) 15 ms

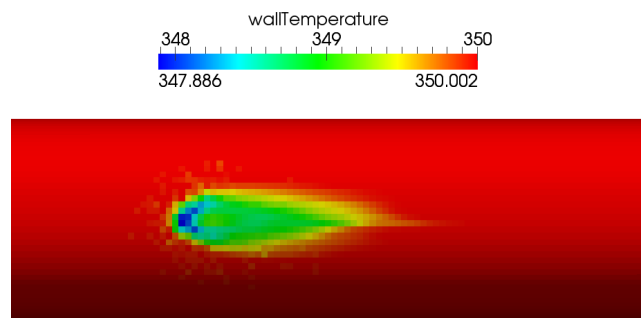


(d) 20 ms

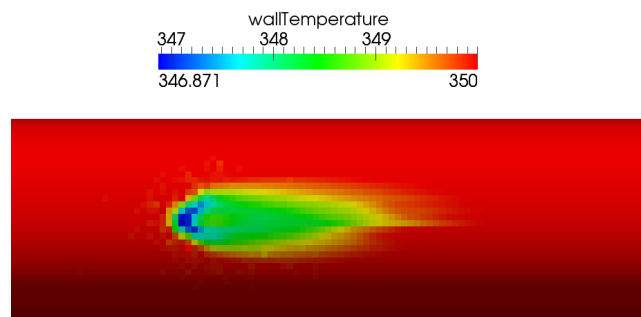
Figura 6.24: Temperatura di film, caso F



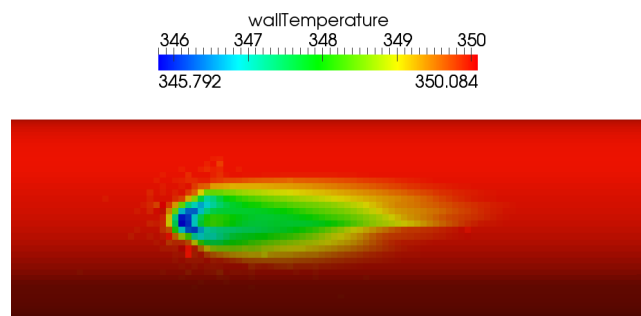
(a) 5 ms



(b) 10 ms

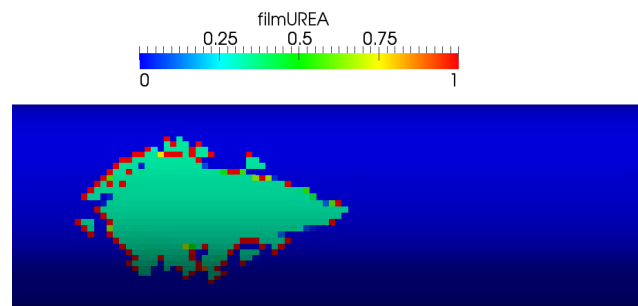


(c) 15 ms

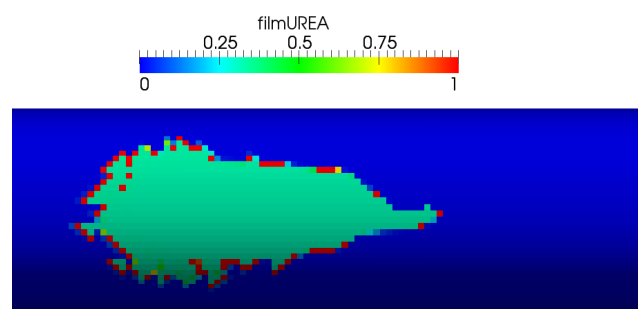


(d) 20 ms

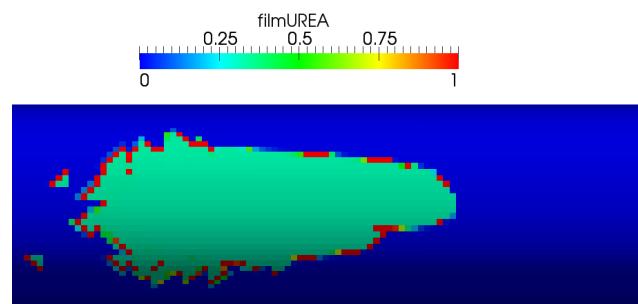
Figura 6.25: Temperatura di parete, caso F



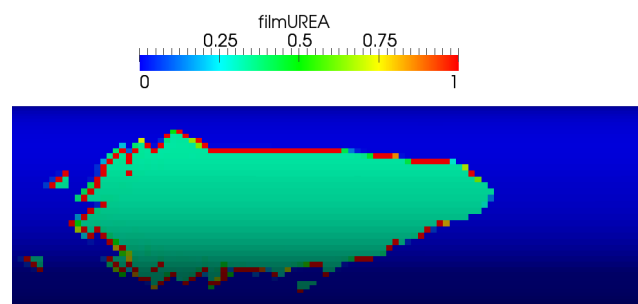
(a) 5 ms



(b) 10 ms

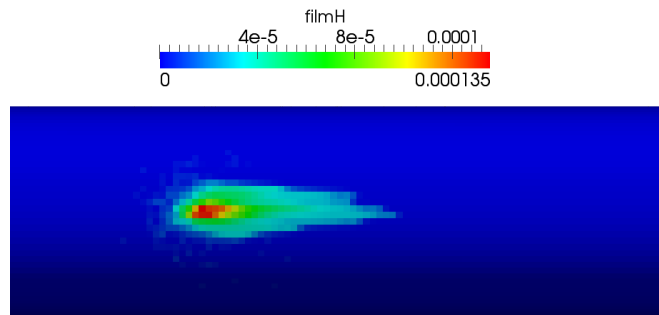


(c) 15 ms

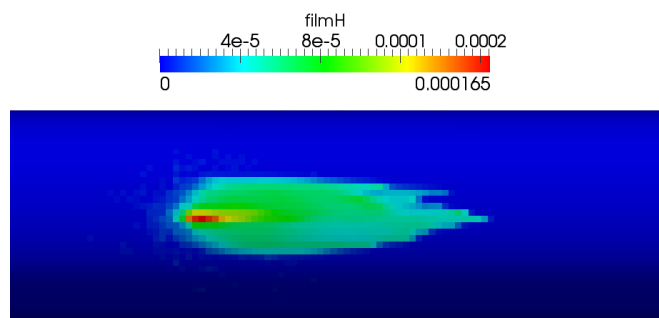


(d) 20 ms

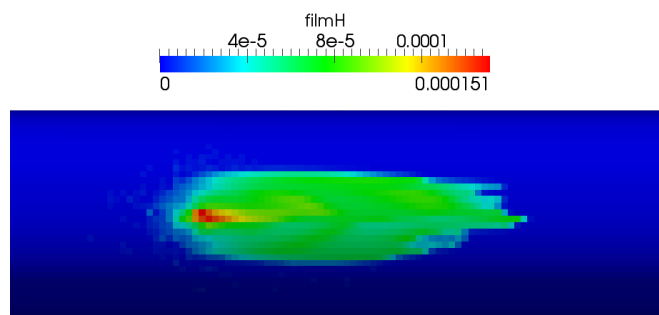
Figura 6.26: Frazione massica di urea del film, caso F



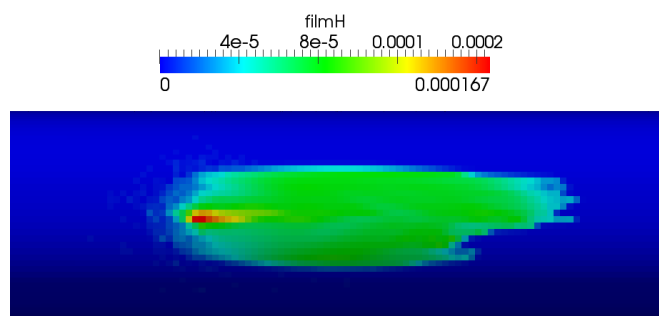
(a) 5 ms



(b) 10 ms

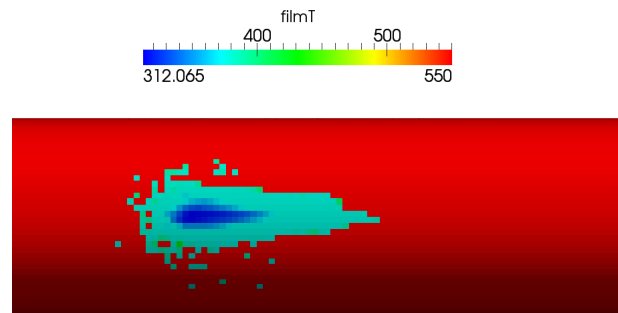


(c) 15 ms

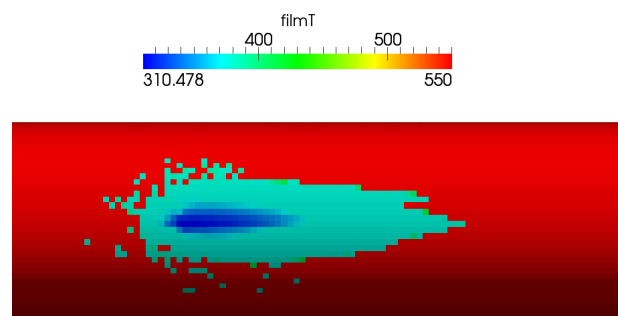


(d) 20 ms

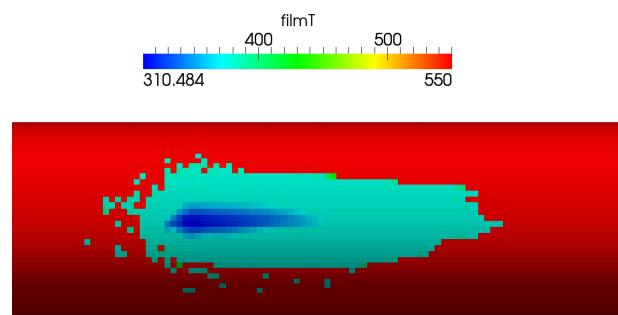
Figura 6.27: Spessore di film, caso G



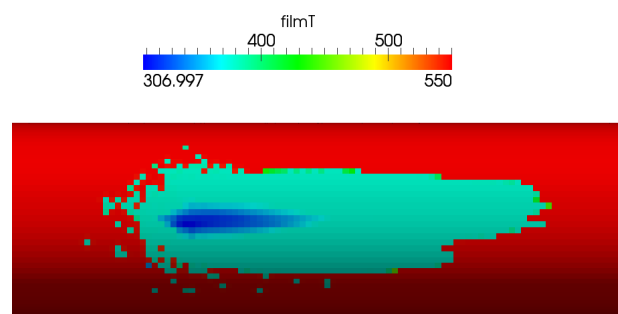
(a) 5 ms



(b) 10 ms

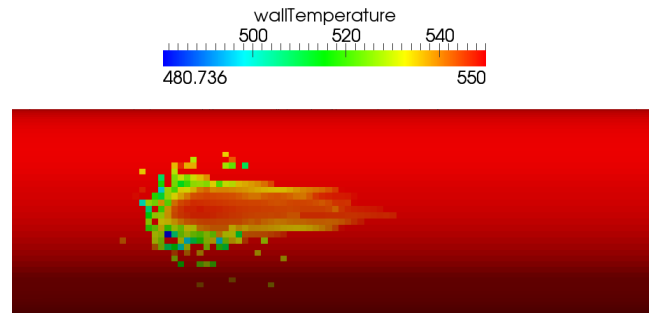


(c) 15 ms

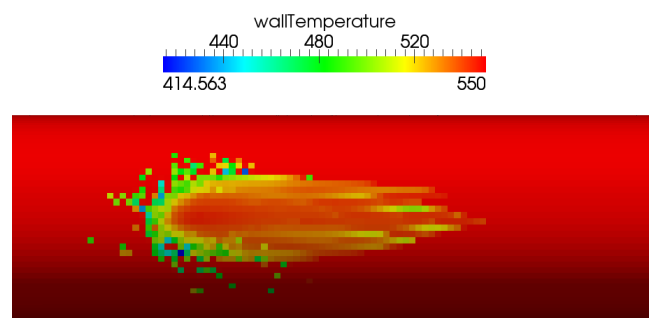


(d) 20 ms

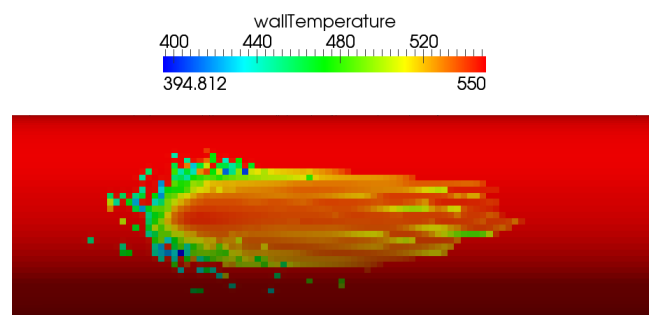
Figura 6.28: Temperatura di film, caso G



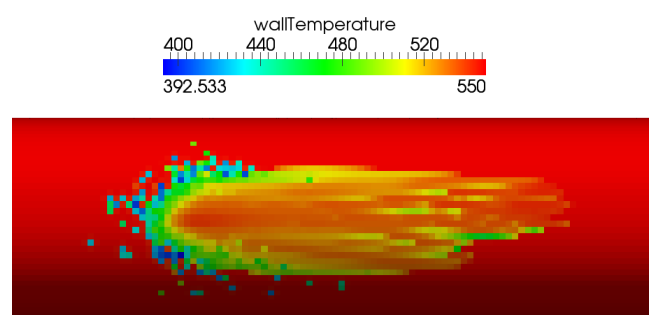
(a) 5 ms



(b) 10 ms



(c) 15 ms



(d) 20 ms

Figura 6.29: Temperatura di parete, caso G

Capitolo 7

Conclusioni e sviluppi futuri

L'approccio alle aree finite si è rivelato molto adeguato allo sviluppo e all'implementazione del modello di film liquido, garantendo dei risultati accettabili con costi computazionali molto contenuti. Questo approccio risulta intuitivo e di facile comprensione; esso inoltre risulta facile da ampliare per estendere l'analisi anche ad altri fenomeni, ad esempio si veda l'analisi della conduzione nello spessore della parete (difficilmente implementabile con altri approcci). Le equazioni risolte nel modello implementato (dette in forma "fortemente conservativa") permettono di considerare tutti i possibili contributi (nei limiti delle ipotesi di lavoro) garantendo allo stesso tempo una formulazione compatta e stabile numericamente. Unico inconveniente dell'approccio utilizzato è la continua necessità di mappare i campi volumetrici su campi di superficie e viceversa, portando a delle approssimazioni il cui peso è ancora da investigare.

Come si evince dai risultati mostrati nel capitolo 6 il modello implementato produce risultati che, per quanto non validati sperimentalmente, sono coerenti e realistici in tutte le condizioni simulate. Il modello mostra una maggior stabilità numerica quando vengono simulati tutti i fenomeni che normalmente intervengono nei problemi reali (evaporazione, scambio termico, ecc...); ciò è dovuto al fatto che lo scambio termico e l'evaporazione hanno l'effetto di compensare le oscillazioni dei termini sorgente legati all'impatto dello spray, in particolare per quanto riguarda l'equazione dell'energia, conferendo stabilità al modello di calcolo. In analogia con quanto accade per il metodo ai volumi finiti anche il metodo alle aree finite risulta più stabile ed accurato all'aumentare della risoluzione spaziale della griglia computazionale e al diminuire del passo di integrazione temporale.

Parlando di possibili sviluppi futuri è innanzitutto necessario validare il modello con dati sperimentali, non disponibili allo stato attuale, in modo da quantificare l'aderenza con la realtà.

Dal punto di vista dell'implementazione un possibile miglioramento riguarda il ciclo di calcolo delle temperature, attualmente molto semplice, in modo da con-

siderare una casistica più estesa. Nell'implementazione mostrata in questo lavoro vengono trascurati gli effetti delle prime gocce impattanti e l'apporto energetico delle gocce nelle zone in cui non viene risolta l'equazione dell'energia, perdendo queste informazioni. In futuro sarà opportuno ampliare il modello per investigare gli effetti di questi contributi sul comportamento del film liquido.

Infine per estendere la gamma dei problemi investigabili sarà necessario modificare l'equazione della conduzione nella parete solida e le relative condizioni al contorno per considerare eventuali flussi termici uscenti dal sistema o per tenere conto di uno spessore di parete variabile.

Nomenclatura

Lettere latine

A	Area d'impatto	m^2
A_w	Area della cella computazionale del metodo alle aree finite	m^2
c	Calore specifico	J/kgK
\vec{c}	Vettore posizione del centroide	m
c_p	Calore specifico a pressione costante	J/kgK
\bar{d}	Diametro medio delle gocce	m
d_v	Diametro medio volumetrico delle gocce	m
D	Diametro delle gocce	m
\underline{D}	Tensore delle deformazioni	$1/s$
\hat{E}	Energia totale specifica	J/kg
E_D	Energia persa per le dissipazioni nello splash	J
\hat{E}_K	Energia cinetica specifica	J/kg
$E_{S,K}$	Energia cinetica dovuta allo splash	J
E_σ	Energia superficiale delle gocce	J
f	Fattore correttivo dello scambio termico	—
\vec{f}	Forze di campo o volumetriche	N/kg
\vec{F}	Risultante delle forze agenti sulla goccia	N
\vec{g}	Accelerazione di gravità	m/s^2
h	Spessore del film	m
\hat{H}	Entalpia specifica	J/kg
\hat{H}_s	Entalpia sensibile specifica	J/kg
\hat{H}_v	Calore latente di vaporizzazione	J/kg
\underline{I}	Tensore identità	—
j_g	Flusso termico all'interfaccia gas-film	Wm/kg
j_w	Flusso termico a parete	Wm/kg
\vec{j}	Flusso diffusivo molecolare	kg/m^2s
k	Energia cinetica turbolenta	J/kg

l_i	Lunghezza dell' i -esimo lato della cella computazionale del metodo alle aree finite	m
l_{mix}	Lunghezza di miscelazione	m
L	Dimensione lineare caratteristica	m
MM	Massa molare	$kg/kmol$
m_d	Massa della goccia	kg
\dot{m}_d	Tasso di evaporazione della goccia	kg/s
\underline{n}	Versore normale	—
N_C	Numero di specie chimiche	—
N_S	Numero di gocce secondarie dello splash	—
p	Pressione	Pa
\mathcal{P}	Probabilità di collisione	—
\vec{q}	Flusso di energia	W/m^2
\vec{q}_d	Flusso entalpico diffusivo	W/m^2
\vec{q}_t	Flusso termico conduttivo	W/m^2
\dot{Q}	Potenza generata per unità di volume	W/m^3
\vec{Q}_S	Generico termine di sorgente attraverso il contorno del sistema	—
Q_V	Generico termine di sorgente nel volume del sistema	—
r	Raggio della goccia	m
r_m	Rapporto tra le masse nello splash	—
R	Costante universale dei gas	$J/kmolK$
R^*	Costante del gas	J/kgK
S	Superficie	m^2
S_H	Sorgente di energia delle gocce impattanti	Wm/kg
S_M	Sorgente di massa delle gocce impattanti	m/s
\vec{S}_U	Sorgente di quantità di moto delle gocce impattanti	m^2/s^2
S_V	Sorgente di massa dovuta all'evaporazione del film	m/s
t	Tempo	s
\underline{t}	Versore tangente	—
T	Temperatura	K
\vec{u}	Velocità	m/s
\hat{U}	Energia interna specifica	J/kg
U	Velocità caratteristica	m/s
\vec{U}	Velocità della goccia impattante	m/s

\vec{V}	Velocità di diffusione	m/s
V	Volume	m^3
\dot{W}^{Spray}	Sorgente di turbolenza dovuta allo spray	W/m^3
\vec{x}	Vettore posizione	m
X	Frazione molare	—
y	Distanza dalla parete, Deviazione dalla forma sferica della goccia	$m, -$
Y_f	Frazione massica nel film	—

Lettere greche

α	Diffusività termica	m^2/s^2
Γ	Coefficiente di diffusione massico	m^2/s^2
Γ_{mix}	Coefficiente di diffusione massico nella miscela	m^2/s^2
δ	Spessore della parete	m
Δ	Variazione	—
ϵ	Tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta	W/kg
θ	Frazione di vuoto locale	—
Θ	Angolo d'incidenza della goccia impattante	rad
κ	Costante di Von Kármán	—
λ	Secondo coefficiente di viscosità	$Pa\ s$
λ_t	Conduttività termica	W/mK
Λ	Lunghezza d'onda	m
μ	Viscosità dinamica	$Pa\ s$
ν	Viscosità cinematica	m^2/s^2
ξ	Sorgente di quantità di moto dovuta allo spray	N/m^3
ρ	Densità	kg/m^3
σ	Tensione superficiale	N/m
$\underline{\underline{\sigma}}$	Tensore degli sforzi	Pa
τ_b	Tempo caratteristico dell'ebollizione	s
τ_e	Tempo caratteristico dell'evaporazione	s
τ_h	Tempo caratteristico dello scambio termico	s
τ_u	Tempo caratteristico della quantità di moto	s
$\vec{\tau}_g$	Sforzi di taglio all'interfaccia gas-film	m^2/s^2
$\vec{\tau}_g$	Sforzi di taglio all'interfaccia gas-film	m^2/s^2
$\underline{\underline{\tau}}$	Parte viscosa del tensore degli sforzi	Pa
ϕ	Generica grandezza	—
ψ	Generica grandezza	—
Ψ	Funzione di dissipazione	W/m^3

ω	Frazione massica nel gas	—
$\dot{\Omega}$	Massa generata per unità di volume	kg/m^3s
Ω	Pulsazione caratteristica	rad/s

Gruppi adimensionali e sigle

B	Numero di Spalding
BC	Boundary Condition
C_D	Coefficiente di resistenza aerodinamica (drag)
La	Numero di Laplace
Le	Numero di Lewis
Nu	Numero di Nusselt
Oh	Numero di Ohnesorge
P_N	Problema numerico
Pr	Numero di Prandtl
Re	Numero di Reynolds
Sc	Numero di Schmidt
Sh	Numero di Sherwood
Ta	Numero di Taylor
We	Numero di Weber

Apici e pedici

d	Diffusivo, Goccia
f	Film
I	Goccia incidente (splash)
k	K-esima specie chimica
l	Liquido
mix	Miscela
n	Componente normale
S	Goccia secondaria (splash)
t	Termico, Turbolento
v	Vapore
w	Parete solida
τ	Componente tangenziale
'	Componente fluttuante secondo Reynolds, Goccia uscente (rebound)
"	Componente fluttuante secondo Favre
+	Grandezza adimensionale di strato limite
—	Componente mediata secondo Reynolds
~	Componente mediata secondo Favre

Bibliografia

- [1] G. Ferrari, *Motori a Combustione Interna*, Ed. Il Capitello, 2005
- [2] D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*, Ed. DCW Industries, Third Edition, 2006
- [3] S. B. Pope, *Turbulent Flows*, Ed. Cambridge University Press, 2000
- [4] G. Stiesch, *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*, Ed. Springer, 2003
- [5] J. H. Ferziger, M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Ed. Springer, Third Edition, 2001
- [6] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Ed. Longman Scientific & Technical, 1995
- [7] J. H. Lienhard IV, J. H. Lienhard V, *A Heat Transfer Textbook*, Ed. Phlogiston Press, Third Edition, 2008
- [8] F. P. Incropera, D. P. DeWitt, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, Ed. Wiley, Sixth Edition, 2006
- [9] G. Comini, G. Croce, E. Nobile, *Fondamenti di Termofluidodinamica Computazionale*, Ed. SGE, Seconda Edizione, 2004
- [10] N. Nordin, *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*
- [11] H. Foucart, C. Habchi, J. F. Le Coz, and T. Baritaud, *Development of a Three Dimensional Model of Wall Fuel Liquid Film for Internal Combustion Engines*, SAE Paper 980133, 1998
- [12] P. J. O'Rourke, A. A. Amsden, *A Particle Numerical Model for Wall Film Dynamics in Port-Injected Engines*, Los Alamos National Laboratory , 1996

- [13] P. J. O'Rourke, F. V. Bracco, *Modeling Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiments*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Vol. 9 , 1980
- [14] D. W. Stanton, A. M. Lippert, R. D. Reitz, and C. J. Rutland, *Influence of Spray-Wall Interaction and Fuel Films on Cold Starting in Direct Injection Diesel Engines*, SAE Paper 982584, 1998
- [15] C. Habchi, H. Foucart, and T. Baritaud, *Influence of the Wall Temperature on the Mixture Preparation in DI Gasoline Engines*, Oil & Gas Science and Technology, Vol.54 n. 2, 1999
- [16] F. Maroteaux, D. Llory, J. F. Le Coz, and C. Habchi, *Liquid Film Atomization on Wall Edges - Separation Criterion and Droplets Formation Model*, Journal of Fluids Engineering, Vol. 124, 2002
- [17] D. W. Stanton, C. J. Rutland, *Modeling Fuel Film Formation and Wall Interaction in Diesel Engines*, SAE Paper 960628, 1996
- [18] D. W. Stanton, C. J. Rutland, *Multi-Dimensional Modeling of Fuel Films in Direct Injection Diesel Engines*, ASME Internal Combustion Engine Division, 1997
- [19] D. W. Stanton, C. J. Rutland, *Multi-Dimensional Modeling of Heat and Mass Transfer of Fuel Films Resulting from Impinging Sprays*, SAE Paper 980132, 1998
- [20] T. Lucchini, G. D'Errico, F. Brusiani, G. M. Bianchi, Ž. Tuković, and H. Jasak, *Multi-Dimensional Modeling of the Air/Fuel Mixture Formation Process in a PFI Engine for Motorcycle Applications*, SAE Paper 2009-24-0015, 2009
- [21] C. X. Bai, H. Rusche, and A. D. Gosman, *Modelling of Gasoline Spray Impingement*, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Department of Mechanical Engineering
- [22] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, Ed. Wiley, Second Edition, 2002
- [23] A. Munnannur, C. M. Cremeens, and Z. Gerald Liu, *Development of Flow Uniformity Indices for Performance Evaluation of Aftertreatment Systems*, SAE Paper 2011-01-1239, 2011

-
- [24] F. Birkhold, U. Meingast, P. Wasserman, and O. Deutschmann, *Analysis of the Injection of Urea-Water-Solution for Automotive SCR DeNO_x-Systems: Modeling of Two-Phase Flow and Spray/Wall-Interaction*, SAE Paper 2006-01-0643, 2006
- [25] S. D. Yim, S. J. ean Kim, J. oon Hyun Baik, I. Nam, Y. S. Mok, J. ong-Hwan Lee, B. K. Cho, and S. H. Oh, *Decomposition of Urea into NH₃ for the SCR Process*, American Chemical Society, 2004
- [26] H. Ström, A. Lundström, and B. Andersson, *Choice of Urea-Spray Models in CFD Simulations of Urea-SCR Systems*, Chemical Engineering Journal, 2009
- [27] A. M. Bernhard, I. Czekaj, M. Elsener, A. Wokaun, and O. Kröcher, *Evaporation of Urea at Atmospheric Pressure*, The Journal of Physical Chemistry, 2011
- [28] V. Ebrahimian, A. Nicolle, and C. Habchi, *Detailed Modeling of the Evaporation and Thermal Decomposition of Urea-Water Solution in SCR Systems*, American Institute of Chemical Engineers Journal, Vol. 00 n. 0, 2011
- [29] E. F. Zanoelo, *A Lumped Model for Thermal Decomposition of Urea. Uncertainties Analysis and Selective Non-Catalytic Reduction of NO*, Chemical Engineering Science, 2008
- [30] R. van Helden, R. Verbeek, F. Willems, and R. van der Welle, *Optimization of Urea SCR DeNO_x Systems for HD Diesel Engines*, SAE Paper 2004-01-0154, 2004
- [31] OpenFOAM[®], *Programmer's Guide*, 2008