

POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria Industriale e dell'Informazione
Dipartimento di Energia

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica



Modellazione CFD di flussi reagenti in schiume a cella aperta: studio delle proprietà fluidodinamiche e di trasferimento di massa per applicazione nei sistemi di post-trattamento di M.C.I.

Relatore: Prof. Gianluca MONTENEGRO

Co-Relatore: Ing. Augusto DELLA TORRE

Tesi di Laurea di:

Salvatore INDELICATO Matr. 787096

Anno Accademico 2013-2014

Indice

Introduzione	1
1 Schiume a cella aperta: caratterizzazione e applicazioni	5
1.1 Applicazioni generali delle schiume	6
1.1.1 Le schiume metalliche come supporti di catalizzatori strutturali	8
1.2 Metodi di produzione	9
1.3 Metodi utilizzati per definire la struttura di un mezzo poroso .	12
1.4 Parametri utili per caratterizzare la micro-struttura	15
1.5 Modelli geometrici per descrivere le proprietà caratteristiche di una schiuma	18
1.5.1 Modello a cella cubica	19
1.5.2 Modello geometrico <i>Kelvin cell</i>	20
2 Equazioni Di Governo	21
2.1 Equazioni di conservazione per un generico mezzo continuo . .	21
2.1.1 Equazione di conservazione della massa	22
2.1.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche	23
2.1.3 Equazione di conservazione della quantità di moto	23
2.1.4 Equazione dell'energia	24
2.1.5 Semplificazione delle equazioni di conservazione	24
2.2 Leggi costitutive per un fluido Newtoniano	25
2.3 Equazioni di Navier-Stokes	27
2.4 Turbolenza	29
2.4.1 Caratterizzazione della turbolenza	29
2.4.2 Modellazione RANS della turbolenza	30
2.4.3 Modelli di turbolenza	31
3 Metodo dei volumi finiti	33
3.1 Metodo dei volumi finiti	34
3.1.1 Discretizzazione del dominio	35
3.1.2 Discretizzazione delle equazioni	36

4	Studio della fluidodinamica di una schiuma	43
4.1	Modellazione geometrica di una schiuma	44
4.1.1	Modello geometrico a cella cubica	44
4.1.2	Modello geometrico <i>Kelvin cell</i>	46
4.2	Tipologie di simulazioni effettuate	48
4.2.1	Stazionarietà	48
4.2.2	Comprimibilità	49
4.2.3	Porzione di schiuma considerata	50
4.3	Scelta tipologia di mesh	53
4.3.1	Caso test	54
4.3.2	Analisi dei risultati	58
4.4	Influenza del modello di turbolenza	60
4.5	Influenza dell'utilizzo del BL	62
4.6	Influenza del numero di celle elementari considerate	63
5	Verifica dei limiti di validità dell'ipotesi del continuo	65
5.1	Equazioni	68
5.1.1	Il ruolo degli accommodation coefficient	69
5.2	Simulazioni	70
6	Analisi delle perdite di carico	73
6.1	Prove sperimentali	73
6.2	Simulazioni dei test sperimentali	74
6.3	Parametri geometrici più importanti e correzione del modello geometrico	79
6.3.1	Modellazione delle perdite di carico per individuare i parametri geometrici più rilevanti	80
6.3.2	Correzione del modello geometrico	81
6.4	Applicazione della legge di Darcy-Forchheimer	83
6.5	Validazione della correzione proposta	85
6.6	Simulazione sugli altri campioni	87
7	Studio dell'influenza delle diverse forme della struct	89
7.1	Confronto dei campi di moto ottenuti	92
7.2	Perdite di carico	93
7.2.1	Analisi a parità di ingombro	93
7.2.2	Analisi a parità di superficie	94
7.2.3	Analisi a parità di porosità	95
7.3	Scambio termico	96
7.3.1	Analisi a parità di ingombro	96
7.3.2	Analisi a parità di superficie	97
7.3.3	Analisi a parità di porosità	98

7.4	Numero di Nusselt	99
8	Studio delle reazioni chimiche	101
8.1	Impostazione generale dei modelli utilizzati	101
8.2	Modello di trasferimento di massa	102
8.2.1	Modello di Chapman-Enskog	103
8.3	Modellazione della chimica	104
8.3.1	Velocità di reazione per il fluido	104
8.3.2	Velocità di reazione per il washcoat	106
8.4	Modello di scambio termico	108
8.5	Calcolo della velocità di conversione globale	109
9	Analisi della conversione delle specie chimiche	113
9.1	Validazione del modello: caso semplificato	114
9.1.1	Prove sperimentali	114
9.1.2	Simulazioni	115
9.2	Previsione della conversione delle specie chimiche sulle schiume	117
9.2.1	Prove sperimentali	117
9.2.2	Simulazioni	119
9.3	Coefficiente di trasporto di materia	126
9.3.1	Valutazione del coefficiente di scambio di materia . . .	126
9.3.2	Analisi adimensionale	128
9.4	Approccio "macro"	130
9.4.1	Verifica della consistenza dell'approccio "macro"	130
10	Applicazione della schiuma in un convertitore	133
10.1	Valutazione del livello di conversione	134
10.2	Valutazione delle perdite di carico	135
10.3	Condiderazione aggiuntive	137
	Conclusioni e sviluppi futuri	139
	Lista dei simboli	147

Elenco delle figure

1.1	Dispersione di una fase in un'altra	6
1.2	Esempio di schiuma a cella chiusa (sopra) e aperta (sotto) . . .	6
1.3	Esempi di applicazioni di schiume metalliche: a) convertitori catalitici; b) scambiatori di calore; c) bruciatori; d,e) applicazioni biomediche; f) isolatori termici; g) pannelli sandwich; h) automotive	6
1.4	Utilizzi delle schiume in funzione della struttura (celle aperte o chiuse)	8
1.5	Metodi di produzione delle schiume metalliche	10
1.6	Esempio di immagine di schiuma ottenuta con radiografia a raggi X	12
1.7	Microscopio ottico	12
1.8	Esempio di immagine ottenuta tramite microscopia ottica . . .	12
1.9	Microscopio elettronico	13
1.10	Esempio di immagine ottenuta tramite microscopia elettronica	13
1.11	X-ray computed tomography	13
1.12	Campioni reali di schiume	14
1.13	Strutture 3D riprodotte	14
1.14	Confronto tra poro e cella in un mezzo poroso	16
1.15	Porosimetro	17
1.16	Misurazione della dimensione di cella e del diametro del poro per una schiuma a basso PPI (a) ed alto PPI (b)	17
1.17	Parametri geometrici modello a cella cubica	19
1.18	Struttura completa riprodotta con un modello a cella cubica .	19
1.19	Parametri geometrici modello kelvin cell	20
1.20	Struttura completa riprodotta con un modello kelvin cell . . .	20
2.1	Differenti regimi di flusso	29
2.2	Esempio di macroscale L_d	30
3.1	Condizioni per la convergenza	34
3.2	Volume di controllo	35

3.3	Problematiche della discretizzazione	38
3.4	Modello upwind	39
3.5	Termine diffusivo in caso di non ortogonalità	40
4.1	Parametri geometrici modello a cella cubica	44
4.2	Parametri geometrici modello kelvin cell regolare	46
4.3	Influenza comprimibilità del fluido	49
4.4	Simulazione di tipo ciclico	52
4.5	Simulazione di flussaggio	52
4.6	Schematizzazione 2D delle mesh utilizzate per l'analisi	54
4.7	Modello geometrico della struttura considerata	54
4.8	Mesh esaedriche utilizzate	55
4.9	Mesh tetraedriche utilizzate	56
4.10	Mesh poliedriche utilizzate	57
4.11	Confronto dei risultati ottenuti per le varie mesh utilizzate	58
4.12	Influenza del modello di turbolenza	60
4.13	Profilo di velocità	61
4.14	Profilo di viscosità turbolenta	61
4.15	influenza della presenza di un BL	62
4.16	Influenza del numero di celle elementari considerato	63
5.1	Regimi del numero di Knudsen	66
5.2	Schematizzazione di un metodo del primo ordine	67
5.3	Impatto particelle	68
5.4	Effetto della condizione al bordo di Maxwell	71
6.1	Schema dell'impianto per i test sperimentali	73
6.2	Gradiente di pressione sul campione F in funzione della velocità in ingresso	75
6.3	flussaggio cubetto	76
6.4	gradiente di pressione flussaggio cubetto	76
6.5	Pressione che agisce sulla sulla struttura della schiuma	78
6.6	Campo di pressione utilizzando un modello a cella cubica	79
6.7	Campo di pressione utilizzando un modello Kelvin cell	79
6.8	Campo di velocità utilizzando un modello a cella cubica	79
6.9	Campo di velocità utilizzando un modello Kelvin cell	79
6.10	gradiente di pressione campione F corretto	82
6.11	Legge di Darcy-Forchheimer applicata al campione F	84
6.12	Strutture 3D riprodotte	85
6.13	Gradiente di pressione al variare della velocità in ingresso per i campioni B, C e D riprodotti utilizzando il modello <i>Kelvin cell</i> con la correzione proposta	88

7.1	Sezioni prese in considerazione	90
7.2	Campo di velocità con sezione circolare	91
7.3	Campo di velocità con sezione quadrata	91
7.4	Campo di velocità con sezione rombica	91
7.5	Campo di velocità con sezione triangolare	91
7.6	Perdita di carico a pari ingombro	93
7.7	Perdita di carico a pari superficie	94
7.8	Perdita di carico a pari porosità	95
7.9	Scambio termico a pari ingombro	96
7.10	Scambio termico a pari superficie	97
7.11	Scambio termico a pari porosità	98
7.12	Numero di Nusselt a pari superficie	99
8.1	Schema dei modelli necessari per studiare la canversione delle specie chimiche	101
8.2	Energia di attivazione	105
8.3	Significato fisico chimico dell'energia di attivazione	105
8.4	Adsorbimento dei reagenti sulla superficie di washcoat	106
8.5	Diffusione lungo la superficie e interazione	106
8.6	Desorbimento dei prodotti verso il fluido	106
8.7	Interfaccia solido-fluido	108
8.8	Sezione longitudinale del catalizzatore	109
8.9	Velocità di rimozione degli inquinanti in funzione della tem- peratura dei gas allo scarico	110
8.10	Schema per il calcolo della velocità di reazione secondo la teoria di Baruah	112
9.1	Struttura test	114
9.2	Conversioni al variare della portata	116
9.3	Conversioni al variare della %CO	116
9.4	Schema del microreattore utilizzato per i test sperimentali	117
9.5	Concentrazione di CO	119
9.6	Concentrazione di CO ₂	119
9.7	Concentrazione di O ₂	119
9.8	Confronto conversioni diversi modelli geometrici	120
9.9	Effetto della variazione della costante pre-esponenziale sulla stima della temperatura di <i>light-off</i>	121
9.10	Effetto variazione portata fluente	122
9.11	Effetto variazione concentrazione CO in ingresso	123
9.12	Effetto variazione pressione del sistema	124
9.13	Coefficiente di trasferimento di massa	127

9.14	Correlazione tra il numero di Sherwood (Sh) e il numero di Reynolds (Re)	129
9.15	Coefficiente di trasferimento di materia determinato con simulazioni macro	132
10.1	Conversione catalitico trivalente con comune struttura <i>honeycomb</i>	134
10.2	Conversione di CO ottenuta al variare della lunghezza del reattore considerando una velocità in ingresso pari a 10 m/s ed una concentrazione di CO in ingresso pari al 5%	135
10.3	Perdita di carico ottenuta al variare della percentuale di conversione delle specie chimiche considerando una velocità in ingresso pari a 10 m/s ed una concentrazione di CO in ingresso pari al 5%	136

Elenco delle tabelle

4.1	Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello a cella cubica	45
4.2	Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello kelvin cell	47
5.1	Thermal e tangenzial momentum accomodation coefficients per tipiche combinazioni di gas e superfici	70
5.2	Parametri geometrici e valutazione Kn per le mesh utilizzate .	71
6.1	Parametri caratteristici e geometrici corretti del campione F utilizzando il modello a cella cubica	82
6.2	Parametri caratteristici e geometrici corretti del campione F utilizzando il modello Kelvin cell	82
6.3	Parametri caratteristici misurati sperimentalmente per i campioni reali a disposizione	86
6.4	Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello <i>Kelvin cell</i>	86
6.5	Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni corretti per un modello a cella cubica	87
6.6	Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni corretti per un modello kelvin cell	87
9.1	Costanti adottate per il modello di Langmuir-Hinshelwood . .	115

Sommario

La riduzione delle emissioni di sostanze inquinanti è oggi una tematica di estrema importanza che coinvolge l'utilizzo di particolari sistemi di post-trattamento.

Il presente lavoro di tesi si inserisce in questo contesto e si propone di studiare il possibilità di utilizzare schiume metalliche come supporto per il deposito del substrato catalitico in sostituzione dei comuni *honeycomb*, con possibile applicazione in sistemi di post-trattamento di MCI.

In particolare, il codice CFD *open-source* ad elementi finiti OpenFOAM è stato utilizzato per valutare i due principali aspetti che determinano la bontà di un convertitore: perdite di carico e conversione delle specie chimiche. Questo richiede l'implementazione di una specifica libreria per la modellazione del trasferimento di massa e delle proprietà reattive della superficie di *washcoat*. Inoltre sono stati considerati due differenti modelli geometrici per la microstruttura della schiuma, chiamati strutture a cella cubica e *Kelvin cell*. Facendo ricorso a queste strutture idealizzate, si sono effettuate simulazioni CFD con lo scopo di analizzare le perdite di carico e la conversione delle specie chimiche ottenute per differenti campioni.

Infine, il confronto tra le performance delle schiume e degli *honeycomb* utilizzati come substrato catalitico, ha mostrato che le schiume permettono di raggiungere un più alto rapporto tra conversioni e perdite di carico lungo il catalizzatore.

Parole chiave: OpenFOAM, Schiume a cella aperta, Coefficiente di trasferimento di massa, Convertitore catalitico, Kelvin cell.

Nowdays reducing emissions of pollutants is an issue of extreme concern that involves the use of special exhaust after-treatment. In this context, the present work aims to investigate the possibility of using metal foam as a support for the coating of the catalytic substrate in order to replace the common honeycomb, with possible application in ICE after-treatment systems. In particular, the finite volume open-source CFD code OpenFOAM was applied to evaluate the two main aspects that determine the quality of a converter: pressure drops and conversion of chemical species. This required the implementation of a specific library for the modelling of the mass-transfer and reactive properties of the washcoat surface. Moreover two different geometric models of the foam micro-structure has been considered, namely cubic cell and Kelvin cell structures. Resorting to these idealized structures, CFD simulations were run in order to investigate the pressure drop and the specie conversion across different samples. Finally, the performances of foams and honeycomb as catalytic substrates were compared, showing that foams allows to achieve an higher ratio between conversion and pressure drop across the catalyst.

Keywords: OpenFOAM, Open cell foam, Mass transfer coefficient, Catalytic converter, Kelvin cell.

Introduzione

Negli ultimi decenni la fluidodinamica computazionale, meglio conosciuta con l'acronimo CFD, è diventata uno strumento efficace e affidabile per la progettazione e l'ottimizzazione di molti prodotti in diversi settori industriali. È infatti, sempre più spesso utilizzata per l'analisi di sistemi che coinvolgono moto di fluidi, scambio termico o reazioni chimiche.

L'approccio CFD comprende i seguenti passi fondamentali: analisi del problema, impostazione del modello concettuale, costruzione e risoluzione del modello matematico, analisi dei risultati e revisione del modello.

In particolare il descrivere un fenomeno fisico tramite la CFD rende necessario raggiungere un compromesso tra la precisione del modello matematico adottato e le risorse di calcolo necessarie per ottenere la soluzione numerica, a tal proposito i tempi di calcolo sono un punto fondamentale in un contesto industriale.

Sarà pertanto necessario introdurre approssimazioni al fine di ridurre la complessità del problema studiato, individuando i parametri fondamentali che devono essere accuratamente descritti e quelli che possono essere trascurati senza diminuire la precisione complessiva dell'analisi.

Infine per ottenere una soluzione numerica il problema deve essere necessariamente discretizzato, ovvero i domini del tempo e dello spazio sono suddivisi in un numero finito di elementi. Gli infiniti gradi di libertà del vero problema fisico sono perciò ridotti ad un numero finito.

In questo lavoro di tesi l'approccio CFD verrà utilizzato per valutare la bontà dell'utilizzo di schiume metalliche, in sostituzione delle comuni strutture a nido d'ape, come supporto per il substrato catalitico in sistemi di post-trattamento dei gas combusti dei motori a combustione interna.

Tra i maggiori responsabili della produzione di queste sostanze inquinanti vi è appunto il settore dei trasporti, il quale utilizza come fonte energetica principale i combustibili fossili. In questo settore per abbattere le emissioni prodotte dai motori Otto per autovettura si è affermato l'uso di convertitori trivalenti. Essi svolgono una triplice azione su gas di scarico derivanti da un'alimentazione prossima alla stechiometrica, essendo capaci di ridurre contemporaneamente gli NOx ad N₂ e di ossidare HC e CO a CO₂ ed H₂O.

Per rendere massima la loro efficienza, occorre avere una grande area esposta al flusso dei gas.

Le strutture utilizzate comunemente sono composte da un involucro metallico in cui è posto un elemento cilindrico monolitico (*honeycomb*) avente forma di nido d'ape. Tale struttura presenta il vantaggio di un'ampia superficie di contatto con i gas, limitate perdite fluidodinamiche ed una buona resistenza meccanica e termica.

I canali di passaggio per i gas sono rivestiti di uno strato poroso di allumina, impregnato di catalizzatori quali platino (Pt) o palladio (Pd) per creare siti attivi con elevata reattività per i processi di ossidazione di CO ed HC e rodio (Rh) per produrre un ambiente riducente atto ad eliminare gli NOx.

Il presente lavoro di tesi si inserisce in questo contesto ed è finalizzato alla valutazione della possibilità di impiegare schiume metalliche in sostituzione delle attuali strutture a nido d'ape. I parametri di merito che si considereranno sono il livello di conversione delle specie chimiche raggiunto e le perdite di carico che si ottengono, quest'ultime in particolare se troppo elevate potrebbero inficiare il funzionamento del motore.

A tal proposito l'impiego di schiume offre dei vantaggi in termini di alto grado di vuoto, che consente di ridurre le perdite di carico ed avere alti valori di superficie specifica, e di innesco di fenomeni di miscelamento che migliorano lo scambio termico e il trasporto di massa con conseguente innalzamento del livello di conversione raggiunto a parità di lunghezza rispetto alle strutture tradizionali.

In letteratura sono presenti numerosi studi volti a caratterizzare sia la geometria che lo scambio termico, materiale e di quantità di moto delle schiume. Tuttavia, lo studio di queste strutture è relativamente recente e in continua evoluzione, considerata l'influenza delle numerose variabili in gioco quali ad esempio materiali utilizzati, porosità e densità.

Il lavoro di tesi sarà così strutturato:

- Capitolo primo: presentazione delle principali caratteristiche delle schiume e loro possibili campi applicativi. Descrizione dei principali metodi di produzione e caratterizzazione sperimentale, la quale in alcuni casi si avvale di modelli geometrici per riprodurre la struttura
- Capitolo secondo: presentazione delle equazioni che governano il problema in esame
- Capitolo terzo: discretizzazione delle equazioni di governo attraverso utilizzando il metodo dei volumi finiti che rende le equazioni risolvibili secondo un approccio numerico

- Capitolo quarto: studio generale della fluidodinamica di una schiuma con particolare interesse all'influenza che hanno i modelli geometrici utilizzati, la tipologia di mesh adottare, le caratteristiche delle simulazioni effettuate e la turbolenza sui risultati delle simulazioni.
- Capitolo quinto: verifica dei limiti di validità dell'ipotesi del continuo, confrontando i risultati ottenuti in diversi regimi di numero di Knudsen secondo due diversi approcci.
- Capitolo sesto: validazione del codice CFD per quanto riguarda la stima delle perdite di carico, confrontando i risultati ottenuti dalle simulazioni con quelli forniti sperimentalmente. Valutazione del modello geometrico più adatto e correzione di questo per avere un minore scostamento dai dati sperimentali.
- Capitolo settimo: analisi dell'influenza che le diverse forme dei filamenti della schiuma hanno sulle grandezze termofluidodinamiche
- Capitolo ottavo: presentazione delle principali problematiche e dei relativi modelli adottati per riprodurre il fenomeno di conversione delle specie chimiche quando si ha la presenza di un substrato catalitico.
- Capitolo nono: validazione del codice CFD per quanto riguarda la stima del livello di conversione ottenibile e presentazione dell'approccio "macro" per lo studio macroscopico di lunghe porzioni di schiume
- Capitolo decimo: dimensionamento di un convertitore catalitico valutando il miglior compromesso fra livelli di conversione e perdite di carico nel caso si utilizzi una comune struttura a nido d'ape o una schiuma metallica come supporto per il rivestimento catalitico.

Capitolo 1

Schiume a cella aperta: caratterizzazione e applicazioni

Le schiume metalliche e ceramiche a cella aperta sono materiali reticolati ad elevata porosità, esse sono costituite da filamenti interconnessi la cui struttura può essere schematizzata come una sequenza di celle elementari ripetute nello spazio. Si tratta di una dispersione continua di una fase gassosa in una solida che si compenetrano (Fig. 1.1). In base alla continuità della fase gas possiamo individuare due grandi gruppi:

- **Schiume a cella aperta:** sono contraddistinti da una geometria complessa e da una geometria porosa di vuoti strettamente collegati.
- **Schiume a cella chiusa:** in questo caso le cavità, spesso sferiche, sono separate tra loro.

Le caratteristiche geometriche di una schiuma quali porosità e morfologia sono determinate dal processo di produzione mentre le caratteristiche fisiche, come la densità, la conducibilità termica e la resistenza meccanica sono definite dal tipo di materiale impiegato. Questa versatilità rende le strutture reticolari promettenti in impieghi di tipo strutturale ma anche in applicazioni funzionali.

I vantaggi delle schiume metalliche risiedono nella bassa densità e nell'alta resistenza della struttura. Il metallo non è soggetto alle limitazioni di resistenza meccanica e di shock termico alle quali deve sottostare invece un materiale ceramico o polimerico; la sua bassa inerzia termica permette un trasferimento del calore molto più veloce rispetto ai materiali ceramici e la grande varietà di metalli e leghe disponibili permette di adattare la struttura allo specifico compito.

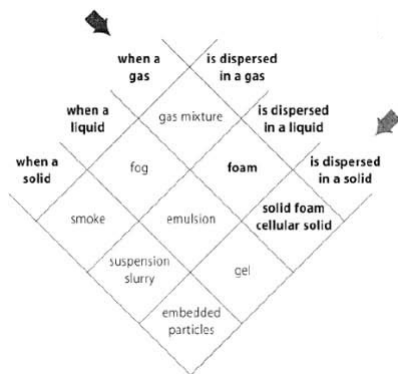


Figura 1.1: Dispersione di una fase in un'altra

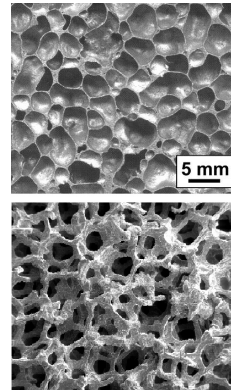


Figura 1.2: Esempio di schiuma a cella chiusa (sopra) e aperta (sotto)

1.1 Applicazioni generali delle schiume

Storicamente le schiume sono state proposte come elettrodi per batterie con elevata superficie specifica; tuttavia, la possibilità di ottenere un numero elevato di strutture distinte potendo scegliere il materiale adeguato ad ogni applicazione, ha reso promettenti tali strutture in diversi campi (Fig. 1.3). Sono riportati di seguito alcuni esempi di applicazioni di schiume metalliche in ambiti industriali, civili e medici. Le schiume a celle aperte altamente conduttive di rame o alluminio possono essere usate come scambiatori di calore. Il calore può essere rimosso o fornito al gas, o al liquido, semplicemente scaldando o raffreddando la schiuma stessa. Oltre a schiume di alluminio e rame, si trovano anche esempi di applicazione di schiume in FeCrAl. Nonostante questo materiale abbia una conducibilità termica circa 10 volte inferiore a quella dell'alluminio, all'atto pratico tale discrepanza di prestazioni si riduce, grazie ai fenomeni di turbolenza che incrementano le capacità di scambio [1]. Grazie alla loro elevata permeabilità, le schiume a celle aperte di FeCrAl

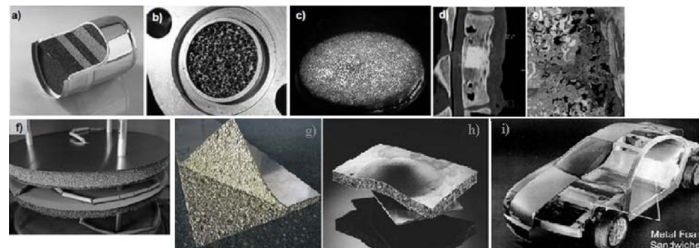


Figura 1.3: Esempi di applicazioni di schiume metalliche: a) convertitori catalitici; b) scambiatori di calore; c) bruciatori; d,e) applicazioni biomediche; f) isolatori termici; g) pannelli sandwich; h) automotive

possono essere utilizzate come bruciatori a mezzo poroso in alternativa ai bruciatori ceramici comunemente utilizzati; è così possibile raggiungere temperature di superficie inferiori e ridurre l'emissione di NOx. Possono essere anche utilizzate come ottimi isolatori di fiamma, in grado di arrestare la propagazione nei gas combustibili.

La possibilità di utilizzare le schiуме anche in ambito biomedico risale agli anni Settanta, quando si è capito che questi materiali permettono alle ossa e ai vasi ematici di essere incorporati e crescere nella struttura. Il titanio e le sue leghe Ti6Al4V sono sicuramente i materiali più utilizzati grazie alla loro straordinaria biocompatibilità associata ad un'elevata resistenza alla corrosione. Il primo test effettuato con un impianto permanente delle vertebre (Fig. 1.3d) dimostra come sia possibile la crescita di cellule ossee all'interno del materiale (Fig. 1.3e)

Esistono numerose altre applicazioni che coinvolgono le schiуме che vanno dal la filtrazione di particelle, liquidi o gas, all'isolamento termico ed acustico, all'assorbimento di urti e al rinforzo strutturale.

In relazione alla porosità, le schiуме sono in grado di attutire i suoni, le pulsazioni di pressione e le vibrazioni meccaniche. Spesso per l'isolamento acustico sono utilizzate le schiуме polimeriche ma ci sono diversi casi in cui anche le schiуме metalliche possono trovare applicazione, nonostante abbiano un fattore di smorzamento sonoro inferiore. Il principio di base è che un'onda sonora nel momento in cui incontra un materiale cellulare viene in parte riflessa e in parte entra nella struttura smorzandosi all'interno delle celle.

In ambito automobilistico, ad esempio, è importante sia proteggere i passeggeri dai rumori provenienti da fonti esterne, sia evitare che il rumore dei motori possa propagarsi liberamente nell'abitacolo ed inficiare il comfort dei passeggeri. Le schiуме metalliche sono adatte a questo compito perché sono elementi fonoassorbenti. In aggiunta hanno un'elevata resistenza e diventano elementi strutturali di protezione dell'abitacolo. Infatti, sono eccellenti assorbitori di energia poiché hanno un comportamento perfettamente plastico e subiscono grandi deformazioni quando sono sottoposti a tensione costante. Un ulteriore vantaggio nell'utilizzo in ambito automobilistico è il basso peso delle strutture. I cosiddetti pannelli sandwich (costituiti da un pannello di schiuma contenuto da due pelli di alluminio) sono molto utilizzati ad esempio per cofani e tetti (anche apribili), parti alle quali è richiesta una grande solidità per evitare deformazioni torsionali e vibrazioni (Fig. 1.3i). Oltre che nell'industria automobilistica, le schiуме metalliche trovano impiego anche quella aerospaziale, civile e navale.

Una volta definita l'applicazione, vi sono numerosi fattori da tenere in considerazione nella scelta della schiuma più adatta: la porosità richiesta,

la dimensioni dei pori, la superficie specifica desiderata, il tipo di materiale richiesto e il processo di produzione più adeguato.

Infine deve essere valutato l'aspetto economico della produzione di tali componenti che deve essere tale da rendere l'applicazione fruibile su larga scala.

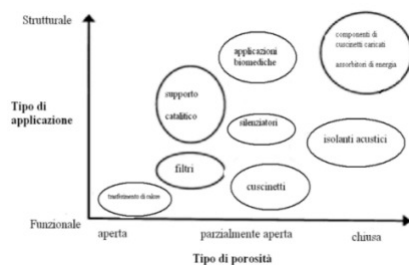


Figura 1.4: Utilizzi delle schiume in funzione della struttura (celle aperte o chiuse)

1.1.1 Le schiume metalliche come supporti di catalizzatori strutturali

La possibilità di utilizzare le schiume nei processi catalitici è stata proposta da Twigg e Richardson [2]. Le proprietà strutturali che le rendono spendibili come supporti nella catalisi eterogenea sono molteplici:

- L'elevato grado di vuoto ($70 \div 95\%$) permette una minor resistenza della struttura al flusso e quindi una riduzione delle perdite di carico rispetto al classico reattore a letto di particelle. Il grado di vuoto delle schiume è più del doppio di quello dei letti impaccati.
- L'elevata area geometrica per unità di volume (circa 103 m^{-1} per schiume da 15 PPI) garantisce un elevato fattore di efficienza e migliora lo scambio materiale e termico fra fluido e solido. È possibile progettare design di reattori più compatti e leggeri
- Le celle aperte permettono una dispersione radiale del flusso, favorendo la distribuzione omogenea dei reagenti lungo il letto, caratteristica che non presentano i monoliti a canali paralleli; inoltre, la struttura reticolare tortuosa garantisce un moto turbolento favorendo ulteriormente i fenomeni di trasporto. Lo scambio termico che realizzano permette così di ridurre l'entità dei punti caldi e l'eventuale disattivazione del catalizzatore quando si realizzano reazioni esotermiche

Molte delle applicazioni delle schiume riguardano processi con elevate velocità di flusso e bassi tempi di contatto o reazioni veloci gas - solido, che sono

controllate dal trasferimento di calore e materia gas-solido.

Nella catalisi ambientale, ad esempio, schiume attivate con Pt/Pd, possono essere utilizzate nei catalizzatori trivalenti per abbattere CO e idrocarburi e ridurre gli ossidi di azoto. Sono state anche utilizzate come catalizzatori di ossidazione per gas esausti provenienti da motori diesel di autobus e trucks, in cui ossidano CO e gli idrocarburi incombusti a CO₂ e acqua e gli NO a NO₂; sono state adottate nella combustione di propano e metano, nella produzione di idrogeno attraverso la reazione di water gas shift, nel reforming di biossido di carbonio, nell'ossidazione di ammoniaca per la produzione di acido nitrico, nell'ossidazione parziale di metanolo, nell'ossidazione parziale di idrocarburi a bassi tempi di contatto e nella sintesi di Fischer-Tropsch. Inoltre, sono state anche abbinate alla tecnologia SCR per la riduzione di ossidi di azoto con NH₃.

1.2 Metodi di produzione

Le schiume metalliche costituiscono una nuova tipologia di materiali per ciò che concerne le metodologie di produzione e di lavorazione, le prestazioni meccaniche e tecnologiche. Il termine è coniato nel 1940 per opera di Benjamin Sosnick, che brevetta un processo per ottenere leghe metalliche in forma di schiuma. Il metodo si rivelerà di scarso interesse ingegneristico ma aprirà la strada alla produzione di questa nuova classe di materiali. Da allora le metodologie produttive si sono moltiplicate ed affinate garantendo la produzione di una grande varietà di schiume in termini di materiale, densità, dimensione e forma delle bolle, dimensioni massime del pezzo, omogeneità. Molti metodi di produzione attualmente utilizzati richiamano le tecniche usate per schiumare liquidi polimerici o a base d'acqua; altre procedure, invece, sono progettate specificamente sfruttando le caratteristiche proprie dei metalli come la possibilità di essere sinterizzati e di essere depositati elettricamente.

I vari processi possono essere classificati in base allo stato in cui si trova il metallo al momento della lavorazione. Ciò definisce quattro famiglie di processi:

- Da metallo liquido
- Da metallo solido (sotto forma di polveri)
- Da vapori metallici
- Da ioni metallici

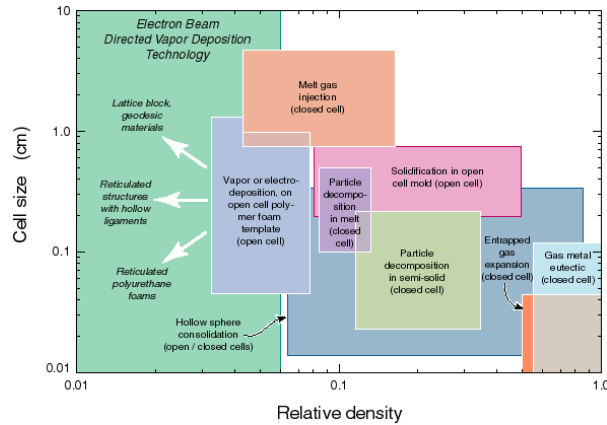


Figura 1.5: Metodi di produzione delle schiume metalliche

La scelta del metodo di produzione opportuno si basa sul tipo di metallo, sulla densità relativa e sulla dimensione di cella desiderata. In Fig. 1.5 sono riassunte le variazioni di dimensione di celle, il tipo di cella (aperta o chiusa), e la densità relativa che si possono ottenere con i metodi odierni. Tra questi però solo il metodo del consolidamento di sfere cave permette di scegliere in modo relativamente semplice tra celle aperte o chiuse.

Una prima metodologia si basa sulla schiumatura diretta del metallo liquido con bolle di gas che nascono in seno al liquido. Normalmente le bolle create nel fuso tenderebbero a raggiungere il pelo libero velocemente a causa della spinta idrostatica; per rallentare la loro risalita, si incrementa la viscosità del fuso con l'aggiunta di agenti addensanti quali elementi di lega o polveri ceramiche, che permettono anche di stabilizzare le bolle. Attualmente i due metodi di schiumatura diretta più utilizzati sono l'iniezione di gas, solitamente aria, all'interno di una vasca in cui si trova il metallo liquido; la schiumatura da agente soffiante in cui il gas utile alla creazione della schiuma è rilasciato da un agente schiumante ad esempio idruro di titanio, che è aggiunto al fuso e si decompone in determinate condizioni.

In alternativa è possibile utilizzare la solidificazione all'eutettico gas-solido, che sfrutta il fatto che molti metalli liquidi formano con l'idrogeno un sistema eutettico. Dopo aver fuso il metallo in atmosfera di idrogeno ad elevata pressione ($10 \div 50 \text{ atm}$), si raffredda fin sotto la temperatura di transizione così da permettere la reazione di segregazione.

La schiumatura da polveri compattate è un metodo che si basa su idee di vecchia data proposte dalla *United Aircraft Corporation*; viene spesso chiamato "metallurgia delle polveri" perché il materiale di partenza è realizzato con una miscela di polveri costituite da un metallo o da una sua lega da un agente schiumante. La miscela viene compattata attraverso una laminazione

o un'estrusione in modo tale da evitare la presenza di ogni porosità residua o altri difetti. Il prodotto semifinito che si ottiene è un materiale addensato che viene riscaldato fino alla temperatura di fusione della matrice. L'agente schiumante uniformemente distribuito, si decompone e rilascia il gas utile alla formazione dei pori nell'interno del liquido, ottenendo in questo modo una struttura altamente porosa. Il tempo e il grado di espansione del materiale dipendono dalla quantità di agente schiumante, dalla temperatura e dalla dimensione delle particelle del precursore e varia da pochi secondi ad alcuni minuti.

L'utilizzo di preformati e supporti sacrificali consente di avere una maggior flessibilità di modifica dei parametri caratteristici della schiuma, quali porosità e dimensione della cella. È indispensabile avere un supporto quando si intende utilizzare una tecnica di deposizione da vapori e da ioni metallici o di elettrodeposizione. Il metallo può essere depositato su preformati polimerici a celle aperte usate come calchi, anche attraverso la decomposizione chimica di un gas, come nel caso del nichel. Queste tecniche che si avvalgono di preformati sacrificali e possono essere efficacemente utilizzate anche con metalli fusi. Una volta concluso il processo di formazione è necessario rimuovere il "template" al fine di ottenere il prodotto desiderato.

Un metodo di produzione che si avvale di supporti sacrificali consiste nel colare il fuso attorno a granuli o sfere di materiale organico o inorganico o viceversa nell'introdurre questi materiali nel fuso. Le particelle che rimangono nella schiuma devono essere evacuate, utilizzando solventi adatti, acidi o trattamenti termici. Uno dei maggiori vantaggi dell'utilizzo di questa tecnica è lo stretto controllo possibile sulla dimensione dei pori della schiuma che dipende dalle dimensioni dei grani di riempitivo utilizzati, ma di contro la porosità massima realizzabile è dell' 80%.

In alternativa è possibile utilizzare uno stampo per la solidificazione del fuso. Schiume polimeriche reticolate a celle aperte possono essere usate come calchi per creare forme da fonderia nelle quali possano essere colati diversi metalli ad esempio alluminio, rame e magnesio. Il metodo presuppone l'esistenza di una schiuma polimerica a celle aperte, tipicamente di poliuretano, che abbia le dimensioni della cella e la densità relativa desiderate, e che costituisca il calco dello stampo. Esso viene ricoperto di materiale termoresistente e posto ad alta temperatura allo scopo di indurire il termoresistente stesso e rimuovere il calco di polimero. Questo stampo è riempito con una lega metallica e lasciato raffreddare. Dopo il raffreddamento e la solidificazione, lo stampo viene rimosso lasciando l'equivalente in metallo della schiuma polimerica utilizzata come immagine. Le maggiori difficoltà in questo processo si riscontrano nel riempimento con il fuso del materiale termoresistente e nella rimozione di tale materiale.

1.3 Metodi utilizzati per definire la struttura di un mezzo poroso

Vari sono i metodi utilizzati per definire la struttura di un mezzo poroso:

- **Radioscopia e radiografia a raggi X:**[3]

Immagini della microstruttura possono essere ottenute tramite semplici sistemi a raggi X. Il campione viene colpito da un fascio a raggi X e viene misurata l'attenuazione. Tale sistema permette l'ottenimento di un'immagine 2D, in cui è possibile individuare i pori più grandi mentre è più difficoltoso distinguere quelli più piccoli.

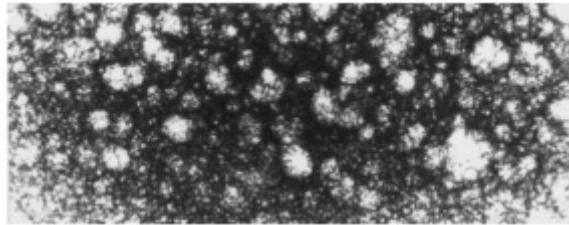


Figura 1.6: Esempio di immagine di schiuma ottenuta con radiografia a raggi X

- **Microscopia ottica:**[4]

Si può distinguere tra tre diverse tecniche di microscopia ottica: a luce diretta, a luce trasmessa o riflessa, a contrasto di fase. A seconda delle caratteristiche superficiali i materiali solidi si distinguono in opachi, assorbono la maggior parte della luce ricevuta, e trasparenti, trasmettono la maggior parte della luce incidente. In questo caso l'immagine della struttura è visualizzata tramite schermo e permette di stimare il numero di facce per cella e la dimensione degli elementi di cella.



Figura 1.7: Microscopio ottico

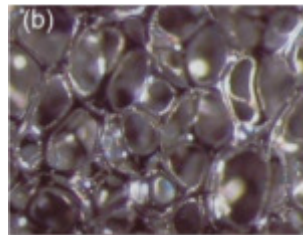


Figura 1.8: Esempio di immagine ottenuta tramite microscopia ottica

- **Microscopia elettronica:**[4]

La microscopia elettronica permette di superare i limiti di risoluzione della microscopia ottica, con livelli di risoluzione dell'ordine del nanometro. Si può distinguere tra due tipologie di microscopia elettronica: la microscopia elettronica a scansione (SEM) e quella a trasmissione (TEM), entrambe basate a differenza della microscopia ottica sull'utilizzo di un fascio di elettroni e non di luce. La prima è utilizzata per l'osservazione della superficie dei campioni, la seconda per osservare le strutture interne con ingrandimenti molto elevati.



Figura 1.9: Microscopio elettronico

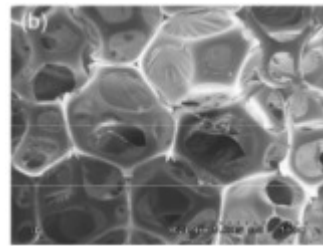


Figura 1.10: Esempio di immagine ottenuta tramite microscopia elettronica

- **X-ray computed tomography (CT):**[3][5]

Questo metodo a differenza dei precedenti permette di ottenere una rappresentazione tridimensionale della struttura. La ricostruzione tridimensionale consta di due passaggi principali:

- un fascio a raggi X colpisce il campione a diverse angolazioni e viene acquisito da un rivelatore.
- A partire dalle immagini 2D ottenute per diversi angoli viene ricostruita l'immagine 3D del campione, tramite opportuni software. Si ottiene quindi una geometria di superficie che può essere asportata come file .stl.

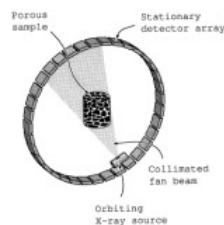


Figura 1.11: X-ray computed tomography

Di seguito sono riportate le strutture 3D di alcuni campioni di schiume realizzate in diversi materiali e aventi caratteristiche diverse ottenute tramite questa metodologia.

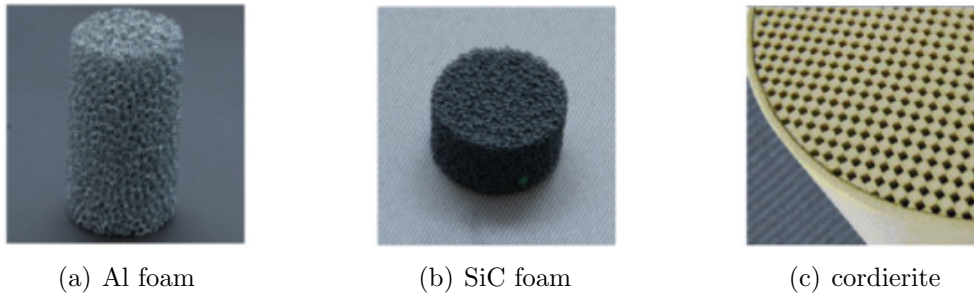


Figura 1.12: Campioni reali di schiume

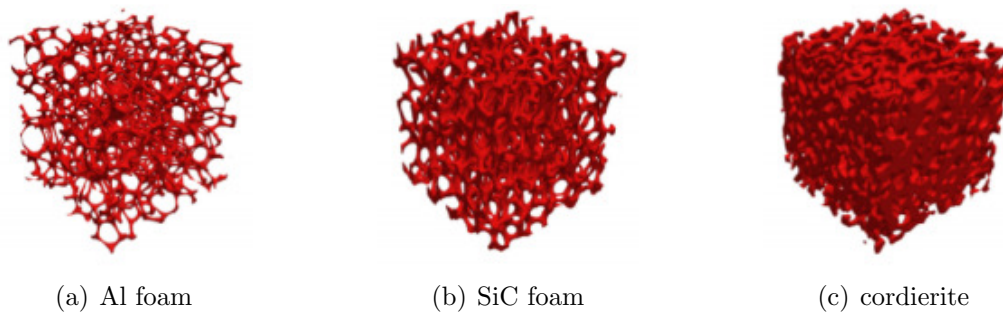


Figura 1.13: Strutture 3D riprodotte

Quindi a partire dal modello 3D ottenuto, tramite opportuni meshatori, sarà possibile realizzare la griglia di calcolo necessaria per intraprendere studi CFD del materiale.

1.4 Parametri utili per caratterizzare la micro-struttura

La micro-struttura dei campioni, che si andranno ad analizzare, può essere caratterizzata dai seguenti parametri [5][6]:

- **Porosità (ϵ):** Rappresenta il rapporto tra il volume di spazi vuoti (V_p) e il volume totale del mezzo poroso (V_b).

$$\epsilon = \frac{V_p}{V_b} \quad (1.1)$$

Tale rapporto risulta compreso tra zero e uno e può essere espresso in percentuale o in unità di porosità (P.U.). Questa appena definita è la porosità totale che considera tutti i pori idraulicamente interconnessi tra loro. Nelle applicazioni pratiche molto spesso si parla anche di porosità effettiva ϵ_e :

$$\epsilon_e = \frac{V_{pi}}{V_b} \quad (1.2)$$

dove V_{pi} è il volume dei pori interconnessi nel volume V_b .

La porosità infine può essere messa in relazione con un secondo parametro, l'indice di vuoto e , ovvero il rapporto tra il volume dei vuoti V_p e il volume della sola parte solida V_s , come segue:

$$e = \frac{V_p}{V_s} = \frac{V_p}{V_b - V_s} \quad (1.3)$$

$$\epsilon = \frac{e}{1 + e} \quad (1.4)$$

- **Superficie specifica (S_V):** È definita come il rapporto tra la superficie che descrive la fase solida e liquida e il volume totale V_b del mezzo poroso.
- **Tortuosità (χ):** la tortuosità è un parametro molto importante e viene definita come il rapporto tra la lunghezza dei capillari che attraversano il mezzo poroso e la proiezione degli stessi nella direzione del flusso. Questa può essere valutata per via matematica attraverso modelli e dipende da vari fattori: omogeneità, granulometria del mezzo poroso e livello di compattazione. Utilizzando il modello di DuPlessis [7]:

$$\chi = \frac{\epsilon d_p^2}{A_p} \quad (1.5)$$

- **dimensione di cella** (L_c): esprime la dimensione media di cella.
- **dimensione di poro** (d_p): è un parametro che specifica la dimensione media del poro in un mezzo poroso. Questa viene comunemente espressa in ppi (pore per inch) che definisce il numero di pori per pollice.
- **dimensione media della struttura** (d_s): esprime la dimensione media dei filamenti.

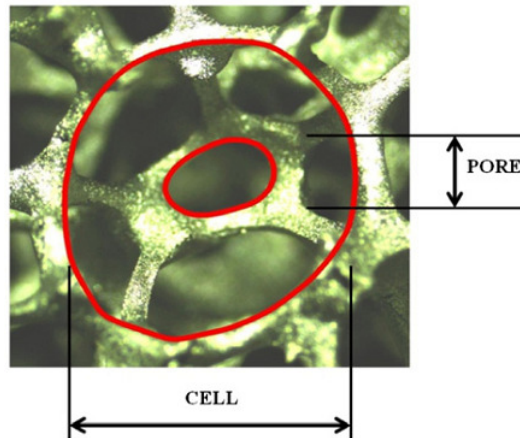


Figura 1.14: Confronto tra poro e cella in un mezzo poroso

La definizione di queste grandezze non risulta essere semplice ed immediata. Ad esempio la porosità viene valutata tramite uno strumento chiamato porosimetro. Questo risulta essere costituito essenzialmente da un recipiente con coperchio a tenuta collegato attraverso un piccolo foro ad un cilindro contenente un pistone. Inizialmente la pressione è p_0 e il volume V_0 , dopo l'azionamento del pistone (compressione isoterma) avremo una variazione di volume ΔV nota e una nuova pressione p_1 :

$$p_1 = \frac{p_0 V_0}{V_0 - \Delta V} \quad (1.6)$$

Tutto ciò deriva dal fatto che il sistema di misura si basa sulla legge di stato dei gas perfetti a temperatura costante, legge di Boyle $pV = \text{cost}$. Dalla misura di p_1 e p_0 tramite trasduttore, noto ΔV , è possibile definire V_0 . A questo punto noto il volume complessivo del recipiente si determina V_m , ovvero il volume occupato dalla struttura del materiale e perciò la porosità dello stesso:

$$\epsilon = \frac{V_{\text{aria}}}{V_{\text{campione}}} = 1 - \frac{V_m}{V_{\text{campione}}} \quad (1.7)$$

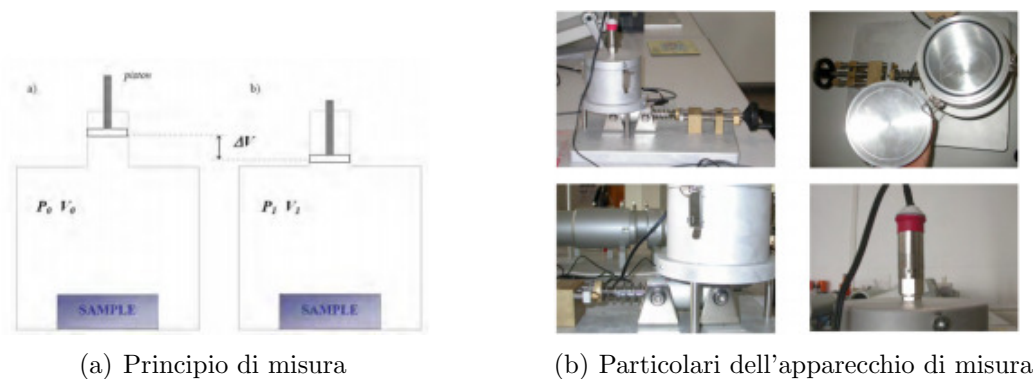
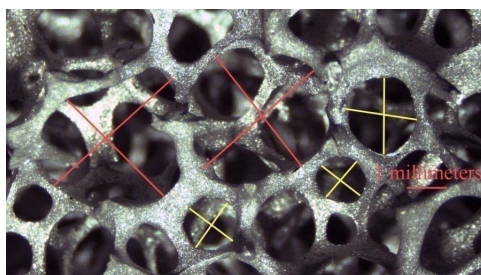
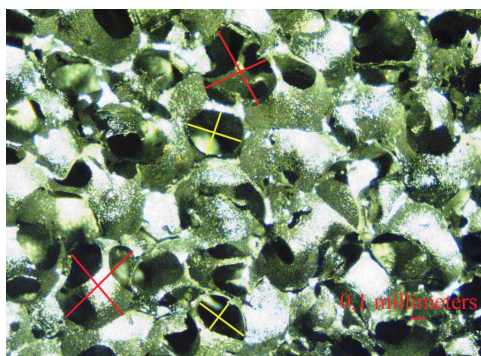


Figura 1.15: Porosimetro

Per quanto riguarda invece la misurazione della dimensione di cella e del diametro del poro questa può essere eseguita osservando i campioni al microscopio ed individuando la struttura.



(a) Schiuma a basso PPI



(b) Schiuma ad alto PPI

Figura 1.16: Misurazione della dimensione di cella e del diametro del poro per una schiuma a basso PPI (a) ed alto PPI (b)

Questi sono i due parametri che tipicamente vengono forniti per una schiuma perché di più facile misurazione.

1.5 Modelli geometrici per descrivere le proprietà caratteristiche di una schiuma

La struttura delle schiume è in generale descrivibile tramite la dimensione media della cella L_c , il diametro medio della struttura d_s e la porosità ϵ . Come descritto nella precedente sezione, una stima di L_c può essere ottenuta direttamente attraverso misurazioni ottiche, mentre la porosità può essere facilmente ricavata dal rapporto di densità $\epsilon = 1 - \frac{\rho_{foam}}{\rho_{struct}}$, dove ρ_{foam} è ottenuto misurando il volume globale e il peso della schiuma, mentre ρ_{struct} è la densità del materiale che costituisce la struttura della schiuma.

Per quanto riguarda invece il diametro medio della struttura d_s questo risulta più complicato da misurare sperimentalmente.

Adottando un modello per riprodurre la struttura reale, questi tre parametri sono correlati tra loro tramite relazioni geometriche, perciò solo due dei tre possono essere scelti indipendentemente.

Tipicamente si sceglie di adottare come parametri indipendenti L_c ed ϵ , lasciando come variabile dipendente d_s .

Per studiare le perdite di carico dovute al flussaggio all'interno di una schiuma ed ancor di più per studiare le reazioni chimiche che avvengono nel substrato delle schiume utilizzate come catalizzatori, la quantificazione della superficie disponibile è di cruciale importanza, ovvero risulta necessario conoscere la superficie specifica S_V . Questo parametro influenza pesantemente le performance delle schiume, ma purtroppo risulta di difficile misurazione. L'adozione di un modello consente di stimare, fissate le variabili indipendenti, la S_V della schiuma.

In letteratura sono stati storicamente proposti diversi modelli geometrici ideali per descrivere le schiume ceramiche e metalliche. Le considerazioni complete sulle proprietà dei materiali cellulari sono state elaborate da Gibson e Ashby [8] che hanno confrontato strutture impaccate costituite da diversi poliedri: prismi triangolari, rettangolari e esagonali, dodecaedri rombici e tetrakaidecaedri.

Sebbene le schiume siano anisotrope e geometricamente complesse, la struttura che secondo Gibson e Ashby meglio rappresenta la geometria è quella tetracaidecaedrica, ipotesi avallata dal buon accordo tra il numero medio di lati per faccia e il numero di facce per cella di tale geometria rispetto al materiale cellulare. Si illustreranno nel seguito i due modelli che la letteratura propone come il più semplice e il migliore per studiare le proprietà delle schiume, ovvero rispettivamente il modello a cella cubica e il modello *Kelvin cell*.

1.5.1 Modello a cella cubica

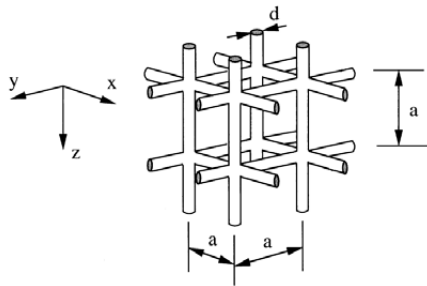


Figura 1.17: Parametri geometrici modello a cella cubica

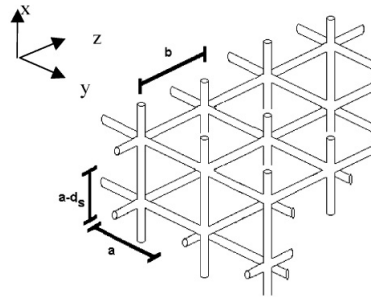


Figura 1.18: Struttura completa riprodotta con un modello a cella cubica

In letteratura il problema della modellazione delle schiуме viene spesso affrontato adottando un modello a cella cubica per riprodurre la struttura. Lu, Stone e Ashby [9] hanno proposto un modello a cella cubica nel quale la struttura della schiuma è rappresentata come piccoli cilindri, che riproducono i lati di una struttura cubica uniformemente distribuita come rappresentato in Fig. 1.17.

Il diametro medio della struttura e la superficie specifica calcolate secondo questo modello risultano essere sostanzialmente lontane da quelle misurate nella realtà con un sistema di micro-tomografia computerizzata o previste attraverso modelli e correlazioni più accurati, ma questo modello rappresenta sicuramente il primo e più semplice approccio al problema.

Parametri del modello

I parametri necessari per utilizzare questo modello sono:

- la dimensione di cella a
- il diametro della struct d_s

Nel caso di schiуме anisotrope, dove la dimensione del poro è differente se si considera una sezione tangenziale o una longitudinale, il modello può essere facilmente modificato considerando un prisma invece di un cubo, dove l'altezza b del prisma coinciderà con la dimensione del poro nella sezione longitudinale (figura 1.18).

Per quanto riguarda invece il diametro della struttura, questo è necessario ricavarlo utilizzando le relazioni geometriche che verranno successivamente ricavate nel caso di una schiuma isotropa.

1.5.2 Modello geometrico *Kelvin cell*

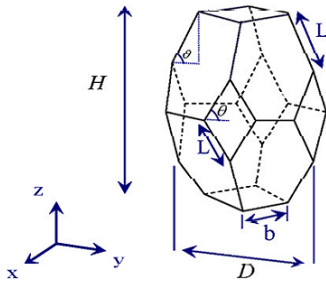


Figura 1.19: Parametri geometrici modello kelvin cell

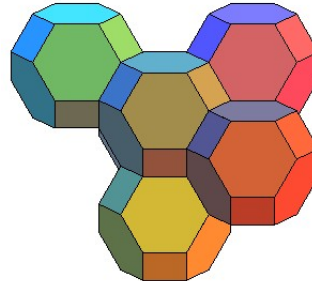


Figura 1.20: Struttura completa riprodotta con un modello kelvin cell

Per rappresentare la cella unitaria di una schiume, molti autori in letteratura [10] utilizzano un tetracaidecaedro, un poliedro di 14 facce, delle quali 6 sono quadrilateri e 8 sono esaedri, connessi da 36 lati e 24 vertici. Il tetracaidecaedro è comunemente conosciuto come *Kelvin cell* ed è stato identificato dagli studi di Gibson e Ashby [8] come il miglior possibile poliedro in grado di riprodurre il volume all'interno di una cella e minimizzare la superficie specifica. Questo modello risulta sicuramente più affidabile nella previsione della superficie specifica, rispetto al modello a cella cubica, anche se certamente più complesso.

Parametri del modello

Tutte le dimensioni e la forma di un tetracaidecaedro sono univocamente definite specificando almeno tre delle cinque grandezze geometriche della cella unitaria visibili in Fig. 1.19 [11]:

- altezza H
- larghezza D
- lato L
- lato b
- angolo θ
- diametro della struct d_s

In questa tesi si è deciso di utilizzare il modello di *Kelvin cell* regolare per rappresentare la struttura delle schiume, questa approssimazione comporterà come vedremo al Cap. 4 una serie di semplificazioni.

Capitolo 2

Equazioni Di Governo

Questo capitolo si propone di presentare tutte le equazioni che governano il problema in esame sia dal punto di vista della fluidodinamica che della chimica del processo di conversione.

Verranno dunque inizialmente esposte le equazioni di conservazione e successivamente si introdurranno le leggi costitutive che adatteranno dei modelli per esplicitare tutti i vari termini incogniti e rendere il problema chiuso dal punto di vista del calcolo numerico.

2.1 Equazioni di conservazione per un generico mezzo continuo

Il problema fisico oggetto di questa tesi può essere classificato nel campo di validità dell'ipotesi del continuo, cioè di sistemi fisici macroscopici nei quali la lunghezza caratteristica e la scala temporale coinvolte possono essere ritenute decisamente superiori rispetto a quelle della struttura molecolare della materia.

Sotto questa assunzione è possibile descrivere qualunque proprietà fisica macroscopica della materia come una funzione continua in coordinate macroscopiche (tempo, spazio).

Le equazioni che descrivono il comportamento di un continuo sono ricavate seguendo l'approccio euleriano, ossia tutte le variabili (U , T , P , ecc.) e le proprietà del fluido (ρ , μ , λ , ecc.) sono funzione 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 n , considerato positivo se uscente, le equazioni di conservazione sono riconducibili alla seguente formulazione generale:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \Phi dV + \oint_{S_M(t)} F(\Phi) \cdot ndS = \int_{V(t)} Q_V(\Phi) dV + \oint_{S_M(t)} \vec{Q}_S(\Phi) \cdot ndS \quad (2.1)$$

dove Φ è la generica grandezza che si conserva, Q_S e Q_V sono termini sorgente rispettivamente di volume e superficie, mentre F è il flusso netto entrante.

La formulazione appena scritta 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 si applicherà 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:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi) + \nabla \cdot (\vec{F} - \vec{Q}_s) = \vec{Q}_v \quad (2.2)$$

I contributi del flusso possono essere di due tipi:

- **convettivo:** descrive il trasporto passivo della variabile conservata da parte del flusso

$$\vec{F}_c = \Phi \vec{U} \quad (2.3)$$

- **diffusivo:** parte della proprietà intensiva che è trasportata dalla presenza del suo gradiente

$$\vec{F}_d = -k\rho \nabla \Phi \quad (2.4)$$

Considerando entrambi i contributi, possiamo scrivere la seguente equazione:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi + \nabla \cdot (\Phi \vec{U}) = \nabla \cdot (k\rho \nabla \Phi) + \vec{Q}_v + \nabla \cdot \vec{Q}_s \quad (2.5)$$

Sostituendo opportunamente Φ , Q_S e Q_V nell'equazione 2.4 è possibile ottenere le equazioni di conservazione necessarie per lo studio del sistema.

2.1.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di conservazione della massa, o di continuità, è ottenuta sostituendo $\Phi = \rho$ nell'equazione 2.4

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.6)$$

Nella seconda parte del lavoro si analizzeranno le reazioni che avvengono in una schiuma utilizzata come supporto per catalizzatori, si avrà dunque a che fare con un sistema multicomponente e reagente, perciò oltre alla conservazione della massa è necessario considerare anche la conservazione delle singole specie chimiche.

2.1.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche

L'equazione di conservazione per la k -esima specie può essere ottenuta sostituendo $\Phi = \rho Y_k$ nell'equazione 2.4

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \vec{U} Y_k) = -\nabla \cdot \vec{j}_k + \dot{\Omega}_k \quad (2.7)$$

Il termine $-\nabla \cdot \vec{j}_k$ rappresenta il flusso diffusivo ed è modellato utilizzando la legge di Fick, la quale verrà esposta successivamente. Il termine $\dot{\Omega}_k$ rende invece conto della generazione o distruzione della k -esima specie per effetto delle reazioni chimiche ed è modellato attraverso il calcolo della velocità di reazione.

Dovendo risolvere un'equazione del tipo della 2.7 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:

$$\sum_{k=1}^{N_C} \vec{j}_k = 0 \quad (2.8)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k = 0 \quad (2.9)$$

Sommando tra loro tutte le N_C equazioni di trasporto delle specie chimiche, rispettando le condizioni 2.8 e 2.9 e ricordando che $\sum_{k=1}^{N_C} Y_k = 1$, si ricava l'equazione di continuità

2.1.3 Equazione di conservazione della quantità di moto

L'equazione di conservazione della quantità di moto, o del momento, è ottenuta sostituendo $\Phi = \rho \vec{U}$ e ponendo $\vec{Q}_S = \bar{\sigma}$, $Q_V = \vec{f}$

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{U} \vec{U}) = \vec{f} + \nabla \bar{\sigma} \quad (2.10)$$

$\nabla \bar{\sigma}$ rappresenta l'effetto sulla quantità di moto del tensore degli sforzi (gradienti di pressione, velocità, ecc.), \vec{f} tiene invece conto delle forze di campo o volumetriche (forza di gravità, di Coriolis, elettromagnetiche, ecc.). Considerando come sola forza di volume la gravità allora \vec{f} coincide con il vettore accelerazione di gravità \vec{g}

2.1.4 Equazione dell'energia

L'equazione di conservazione dell'energia è ottenuta sostituendo ($\Phi = \rho E$) e ponendo $\vec{Q}_S = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{U})$, $Q_V = \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} Y_k \vec{f}_k (U + V_k)$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \vec{U}) = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{U}) + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} Y_k \vec{f}_k (\vec{U} + \vec{V}_k) \quad (2.11)$$

dove E rappresenta l'energia specifica totale calcolata come somma dell'energia interna u e di tutte le altre forme di energia coinvolte. In questo studio solo l'energia cinetica u_M sarà considerata, perciò:

$$E = u(p, T, Y_k) + \frac{1}{2} \vec{U}^2 \quad (2.12)$$

\dot{Q} rappresenta la potenza termica generata per unità di volume dalle sole reazioni termiche, in quanto il caso è adiabatico e dunque non vi è apporto di calore dall'esterno.

2.1.5 Semplificazione delle equazioni di conservazione

Le equazioni di conservazione appena introdotte possono essere in alcuni casi semplificate per modellare specifici problemi. In questa trattazione citeremo in particolare due casi particolari, ovvero il caso di fluido incomprimibile e di fluido non viscoso.

Fluido incomprimibile

Per fluidi incomprimibili e isotermeici il sistema di equazioni prima esposto si riduce come segue:

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \vec{U}) = g - \nabla \underline{p} + \nabla \cdot (\nu \nabla \cdot \vec{U}) \quad (2.14)$$

dove ν rappresenta la viscosità cinematica e \underline{p} la pressione cinematica. Questa semplificazione sarà adottata nel corso della trattazione e semplificherà notevolmente il problema in quanto permette di escludere l'equazione dell'energia passando così ad un sistema a due equazioni.

Fluido non viscoso

Questa semplificazione è comunemente adottata per specifici casi in cui gli effetti della viscosità sono trascurabili. In questo caso i termini delle equazioni

relativi alla viscosità sono considerati nulli e dunque il sistema si semplifica come segue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{U}) + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla p \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho E \vec{U}) = -\nabla \cdot (p \vec{U}) \quad (2.17)$$

Le equazioni così formulate prendono il nome di equazioni di Eulero.

2.2 Leggi costitutive per un fluido Newtoniano

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 $\vec{\sigma}$, 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).

Si considererà dunque un fluido newtoniano ed il seguente sistema di equazioni costitutive:

- **Equazione di stato:** permette di stabilire un legame tra una variabile di stato e le variabili del sistema, ad esempio:

$$\rho = \rho(p, T) \quad (2.18)$$

Nel caso in esame può essere sempre ritenuta valida l'ipotesi di gas ideale la quale fornisce una semplice espressione per l'equazione di stato:

$$\rho = \frac{p}{R^* T} \quad (2.19)$$

dove $R^* = \frac{R}{MM}$

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

- **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 :

$$\vec{q}_t = -\lambda_t \nabla T \quad (2.20)$$

dove la conducibilità termica è una funzione delle variabili di stato termodinamiche

$$\lambda_t = \lambda_t(p, T) \quad (2.21)$$

Il flusso entalpico diffusivo può essere invece essere espresso in funzione della velocità di diffusione ricavata mediante la legge di Fick (che sarà esposta in seguito) come:

$$\vec{q}_d = \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k Y_k \vec{V}_k \quad (2.22)$$

dove H_k e Y_k sono rispettivamente l'entalpia specifica e la frazione massica della k -esima specie ed N_C è il numero di specie chimiche presenti nel sistema.

- **Legge di Newton della viscosità:** permette di correlare il tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$ al tensore delle deformazioni \bar{D} , il quale è funzione del gradiente di velocità.

$$\bar{\sigma} = 2\mu\bar{D} - \left(p + \frac{2}{3}\nabla \cdot U\right)\bar{I} = \left(2\mu\bar{D} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot U\bar{I}\right) - p\bar{I} = \bar{\tau} - p\bar{I} \quad (2.23)$$

$$\bar{D} = \frac{1}{2}[\nabla U + (\nabla U)_T] \quad (2.24)$$

La precedente formulazione di $\bar{\sigma}$ è stata ricavata sotto l'ipotesi di Stokes, ovvero:

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.25)$$

Nell'espressione 2.23 $\bar{\tau}$ prende il nome di parte viscosa del tensore degli sforzi, mentre μ rappresenta la viscosità dinamica che è funzione delle grandezze termodinamiche di stato:

$$\mu = \mu(p, T) \quad (2.26)$$

- **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 modellare il flusso diffusivo di massa così definito:

$$\vec{j}_k = \rho Y_k \vec{V}_k \quad (2.27)$$

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

$$Y_k \vec{V}_k = - \mathcal{D}_{k,mix} \nabla Y_k \quad (2.28)$$

Sostituendo la 2.28 nella 2.27 si ottiene quindi l'espressione del flusso diffusivo:

$$\vec{j}_k = -\rho \mathcal{D}_{k,mix} \nabla Y_k \quad (2.29)$$

dove $\mathcal{D}_{k,mix}$ rappresenta il coefficiente di diffusione della k-esima specie nella miscela.

2.3 Equazioni di Navier-Stokes

L'unione delle equazioni di conservazione e delle leggi costitutive da luogo ad un sistema chiuso di equazioni differenziale alle derivate parziali di tipo quasi-lineare ed iperbolico descrittivo della miscela di fluidi Newtoniani oggetto del problema:

Conservazione della massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.30)$$

Conservazione delle specie chimiche:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \vec{U} Y_k) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_{k,mix} \nabla Y_k) + \dot{\Omega}_k \quad (2.31)$$

Conservazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{U}) + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = \rho \vec{g} - \nabla(p + \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{U}) + \nabla[\mu(\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)] \quad (2.32)$$

Conservazione dell'energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \vec{U}) &= \nabla \cdot (\bar{\sigma} \cdot \vec{U}) + \nabla \cdot \left(\lambda_t \nabla T - \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k Y_k \vec{V}_k \right) \\ &+ \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} Y_k \vec{f}_k (\vec{U} + \vec{V}_k) \end{aligned} \quad (2.33)$$

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

$$\hat{H} = \vec{U} + \frac{p}{\rho} \quad (2.34)$$

ed introducendola nell'equazione di conservazione dell'energia si ottiene la seguente formulazione:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{H}) + \nabla \cdot (\rho \hat{H} \vec{U}) &= \frac{Dp}{Dt} + \bar{\tau} : \nabla \vec{U} + \nabla \cdot \left(\lambda_t \nabla T - \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k Y_k \vec{V}_k \right) \\ &+ \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} Y_k \vec{f}_k (\vec{U} + \vec{V}_k) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Il termine $\psi = \bar{\tau} : \nabla \vec{U}$, 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:

$$\hat{H}_s = \hat{H} - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot Y_k \quad (2.36)$$

dove $\hat{H}_{f,k}^0$ rappresenta l'entalpia di formazione standard della k-esima specie. Ricordando la 2.31 è possibile scrivere la 2.33 in termini di entalpia sensibile specifica:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{H}_s) + \nabla \cdot (\rho \hat{H}_s \vec{U}) = \frac{Dp}{Dt} + \psi - \nabla \cdot \vec{q} + \dot{Q} + \dot{Q}^{ch} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} Y_k \vec{f}_k (\vec{U} + \vec{V}_k) \quad (2.37)$$

il termine \dot{Q}^{ch} rappresenta l'energia per unità di tempo liberata o richiesta dalle reazioni chimiche, ovvero:

$$\dot{Q}^{ch} = - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \dot{\Omega}_k \quad (2.38)$$

Si può osservare come 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.

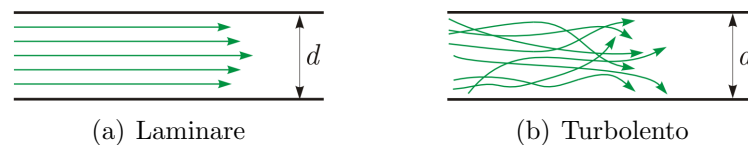


Figura 2.1: Differenti regimi di flusso

Il principale parametro che consente di discriminare tra i differenti regimi di moto è il numero di Reynolds Re , definito come:

$$Re = \frac{\rho U L}{\mu} \quad (2.39)$$

dove 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 Caratterizzazione 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).

All'interno dei moti turbolenti è comunque 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_d , 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 così 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.

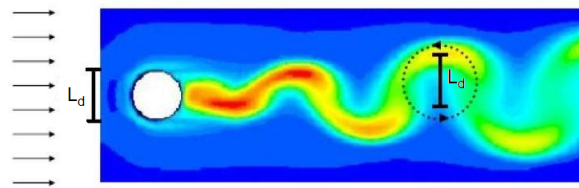


Figura 2.2: Esempio di macroscale L_d

2.4.2 Modellazione RANS 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 (approccio DNS) 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, in generale, la sola conoscenza delle grandezze medie può essere sufficiente alla soluzione del problema relativo ad un flusso turbolento.

L'idea di base della tecnica RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations) è quella di derivare equazioni per le sole grandezze medie (mediate nel tempo) a partire dalle equazioni di Navier-Stokes, al fine di potere ridurre l'enorme carico computazionale richiesto dalla DNS. Il moto medio, inoltre, può essere sia bidimensionale che stazionario, contrariamente alla DNS che richiede sempre equazioni 3D ed instazionarie (questo può essere particolarmente vantaggioso nella simulazione di determinate condizioni fluidodi-

namiche). Secondo tale approccio il valore istantaneo di ogni grandezza può essere scorporato 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.

L'equazioni per il moto medio che si ottengono sono esteticamente simili a quelle di Navier-Stokes fatta eccezione per la divergenza del tensore degli sforzi di Reynolds. Gli sforzi turbolenti di Reynolds sono del tutto fittizi rispetto alla realtà fisica e quantificano il trasferimento di energia cinetica dal moto medio alle strutture turbolente. La differenza fra le equazioni di Navier-Stokes e le RANS non è purtroppo solo estetica in quanto mentre le equazioni di Navier-Stokes costituiscono un problema differenziale chiuso, le RANS non lo sono affatto perché il tensore di Reynolds aggiunge altre 6 incognite al problema. La determinazione di tali termini incogniti prende il nome di chiusura o modellazione della turbolenza e viene realizzata introducendo delle relazioni aggiuntive dipendenti dal modello di chiusura scelto. I principali modelli di turbolenza utilizzati sono basati sulla stima della cosiddetta viscosità cinematica turbolenta e sono chiamati in generali modelli dissipativi, per via dell'intrinseca natura dissipativi della turbolenza.

2.4.3 Modelli di turbolenza

Esistono fondamentalmente due tipologie di modelli RANS di tipo dissipativo per la simulazione numerica di flussi turbolenti:

- **Modelli ad una equazione:** sono modelli che utilizzano una sola grandezza per determinare la viscosità turbolenta, storicamente si è scelta l'energia cinetica turbolenta k . L'aspetto critico di questi modelli è che legano la scala spaziale turbolenta alla geometria del caso in esame, risultando sicuramente molto semplici e leggeri dal punto di vista del costo computazionale, ma mancanti di applicabilità generale anche se non è difficile trovare degli ambiti dove questi modelli si comportano molto bene, specie se accuratamente calibrati caso per caso. Il modello più conosciuto appartenente a questa categoria è sicuramente quello di Spalart-Allmaras.
- **Modelli a due equazioni:** sono modelli che per definire la viscosità turbolenta utilizzano, oltre all'energia cinetica turbolenta, una seconda grandezza che permette di calcolare la scala di lunghezza turbolenta, rendendo così il modello di validità generale anche se al prezzo di un maggior costo computazionale. Il modello più conosciuto appartenente

a questa categoria è sicuramente il $k - \epsilon$ che probabilmente è il modello in assoluto più diffuso nell'ambito delle applicazioni ingegneristiche.

Un'altra classificazione possibile che si può fare dei modelli RANS di turbolenza è la seguente, basata sostanzialmente sull'utilizzo o meno di leggi di parete:

- **modelli LRN - Low Reynolds Number:** sono modelli sviluppati per descrivere correttamente il flusso a parete senza necessità di utilizzare un trattamento ad-hoc per questa zona, per poter fare ciò necessitano però di una griglia di calcolo molto fitta in prossimità della parete (boundary layer).
- **modelli HRN - High Reynolds Number:** sono modelli che consentono di diradare la griglia di calcolo, ma che non risolvono completamente il flusso a parete. Tali modelli nella regione di parete utilizzano perciò delle cosiddette wall function per descrivere il flusso con conseguente minor costo computazionale rispetto ai precedenti.

I modelli di turbolenza che testeremo in questa trattazione sono i seguenti:

- $k - \epsilon$: è un modello HRN a due equazioni che utilizza come secondo parametro per determinare la scala di lunghezza turbolenta il cosiddetto tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ϵ . Questo modello fornisce ottimi risultati sugli *shear flow* specie quando si ha $y^+ = 50 \div 500$ a parete, ma risulta poco efficace nelle zone di strato limite in quanto impone necessariamente una funzione di parete.
- $k - \omega$: è un modello LRN a due equazioni che utilizza come secondo parametro per determinare la scala di lunghezza turbolenta la velocità di dissipazione specifica ω . Questo modello fornisce buone prestazioni nelle zone di strato limite e in condizioni di gradiente avverso di pressione, mentre si dimostra carente nelle zone di free shear flow.
- $k - \omega SST$: è anch'esso un modello LRN e rappresenta un accoppiamento dei modello $k - \epsilon$ e $k - \omega$, in cui nella zona più interna dello strato limite è preponderante il modello $k - \omega$, dove questo risulta più efficace, mentre diventa preponderante il modello $k - \epsilon$ all'allontanarsi dalla parete solida e nelle zone di free shear.
- $k - \epsilon LienLeschzinerk$: è un modello LRN a due equazioni e rappresenta un'evoluzione del modello base $K - \epsilon$ la quale permette di poter utilizzare il modello $k - \epsilon$ senza l'adozione di wall function quando $y^+ < 1$.

Capitolo 3

Metodo dei volumi finiti

Le equazioni di Navier-Stokes presentate al capitolo precedente non sono risolvibili in forma chiusa, così come presentate, se non per problemi estremamente semplici e di scarsa utilità pratica. Quando si ha a che fare con problemi più complessi sarà quindi necessario passare a un approccio numerico per giungere a una soluzione ragionevole.

L'approccio più comunemente adottato è quello denominato come "Metodo dei volumi finiti", esso tramite una serie di discretizzazioni temporali e spaziali, risolve un problema approssimato di tipo algebrico. Di conseguenza la soluzione non sarà dipendente esclusivamente dal problema di partenza, ma anche dal tipo di discretizzazione fatta e dai metodi numerici risolutivi utilizzati. In particolare lo schema numerico dovrà soddisfare una serie di criteri.

Detta $D(U)$ l'equazione differenziale, $N(U)$ l'equazione discretizzata, \tilde{u} la soluzione esatta dell'equazione differenziale e \tilde{u}_i la soluzione esatta dell'equazione discretizzata si può definire il metodo numerico:

- **Stabile:** l'errore dovuto all'approssimazione algebrica rimane al di sotto di un certo limite ad ogni iterazione

$$\bar{\epsilon}_i^n = u_n^i - \tilde{u}_n^i \quad (3.1)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\bar{\epsilon}_i^n| < K \quad (3.2)$$

- **Consistente:** lo schema numerico deve tendere all'equazione differenziale al tendere a zero della discretizzazione nello spazio e nel tempo
- **Convergente:** la soluzione numerica è una corretta rappresentazione della realtà, ovvero la soluzione numerica deve tendere alla soluzione esatta del problema matematico al tendere a zero della discretizzazione spaziale e temporale

$$\tilde{\epsilon}_i^n = \tilde{u}_n^i - u_n^i \quad (3.3)$$

$$\lim_{\nabla T, \nabla x \rightarrow \infty} |\tilde{\epsilon}_i^n| = 0 \quad (3.4)$$

Si ricorda inoltre il *teorema di Lax*: per un problema ben posto con uno schema numerico consistente la stabilità è una condizione necessaria e sufficiente per la convergenza.

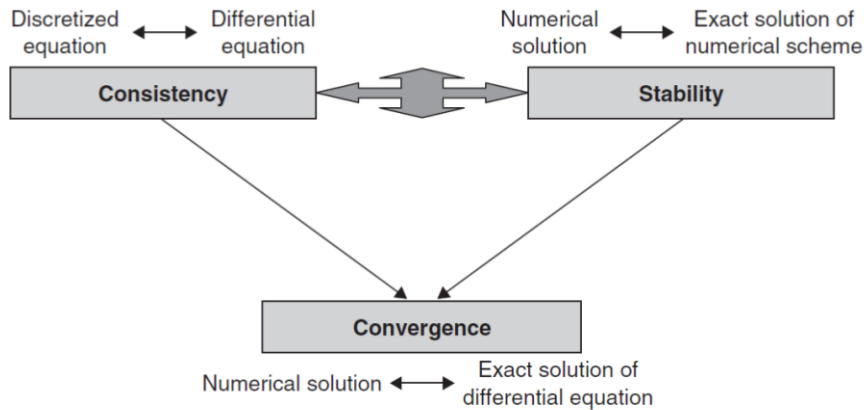


Figura 3.1: Condizioni per la convergenza

3.1 Metodo dei volumi finiti

Con il metodo dei volumi finiti si integrano le equazioni viste in precedenza in un volume di controllo tridimensionale di dimensioni finite per un certo intervallo temporale Δt . Ad esempio per la generica equazione di continuità si avrà:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V (\rho\phi) dV \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \nabla \cdot (\rho\phi\vec{U}) dV \right) dt \quad (3.5)$$

Ricordando il teorema di Gauss:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S \vec{n} \phi dS \quad (3.6)$$

dove dS è la superficie infinitesima rappresentata da un vettore normale uscente dal volume dV .

L'equazione può dunque essere riscritta come:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V (\rho\phi) dV \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_S \vec{n} \cdot (\rho\phi\vec{U}) dS \right) dt = 0 \quad (3.7)$$

Una volta ottenuta questa equazione sarà necessario discretizzarla.

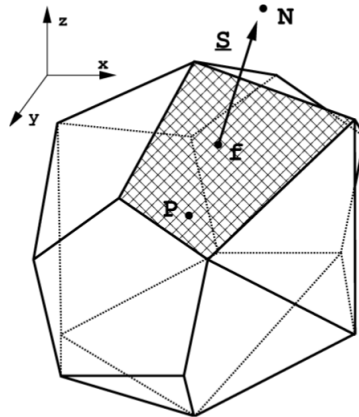


Figura 3.2: Volume di controllo

3.1.1 Discretizzazione del dominio

Nel metodo a volumi finiti si ha un dominio di calcolo scomposto in sotto-domini che danno origine a una griglia di calcolo detta *mesh*. Ogni volume di controllo è composto da un numero di facce piane arbitrario. Il centroide di ogni cella \vec{x}_p e quello di ogni faccia \vec{x}_f possono essere definiti rispettivamente come:

$$\int_V (\vec{x} - \vec{x}_p) dV = 0 \quad (3.8)$$

$$\int_S (\vec{x} - \vec{x}_f) dS = 0 \quad (3.9)$$

Per ogni cella i valori di ogni campo saranno valutati nel centroide P. Se si ipotizza che il valore di ogni grandezza di interesse ϕ vari linearmente all'interno di ogni cella, si può scrivere:

$$\phi = \phi_P + (\vec{x} - \vec{x}_P)(\nabla\phi)_P + o((\vec{x} - \vec{x}_P)^2) \quad (3.10)$$

e quindi quando si ha un integrale di volume questo può essere discretizzato nel dominio nel seguente modo:

$$\int_V \phi dV = \int_V \phi_P dV + \int_V (\vec{x} - \vec{x}_P) dV \nabla\phi + \int_V o(|\vec{x} - \vec{x}_P|^2) dV = \phi_P V_P + o(|\Delta x|)^2 \quad (3.11)$$

Si potrà quindi approssimare l'integrale di volume della grandezza con il valore della grandezza valutato nel centroide della cella di interesse moltiplicato per il volume della cella stessa, ottenendo un'accuratezza del secondo ordine in quanto il primo termine dell'errore di troncamento è di secondo grado. Si discretizza inoltre anche nel tempo, ripetendo il calcolo ogni Δt assegnato,

che può eventualmente essere modificato durante la simulazione, ad esempio per mantenere limitato il numero di Courant. Inoltre si ipotizza che il valore di una generica proprietà vari linearmente su ogni faccia interna (*Midpoint rule*)

$$\phi = \phi_f + (\vec{x} - \vec{x}_f)(\nabla\phi)_f + o((\vec{x} - \vec{x}_f)^2) \quad (3.12)$$

Quindi quando si ha un integrale di superficie questo può essere approssimato come:

$$\int_S \phi dS = \int_S \phi_f dV + \int_S (\vec{x} - \vec{x}_f) dV \nabla\phi + \int_S o(|\vec{x} - \vec{x}_f|^2) dS = \phi_f S + o(|\Delta x|^2) \quad (3.13)$$

ottenendo un'accuratezza del secondo ordine. è però necessario ricordare che in questo caso l'accuratezza non dipende soltanto dall'ordine del primo termine dell'errore di troncamento, ma anche da ϕ_f , che deve essere a sua volta ottenuto per interpolazione (almeno del secondo ordine). Si possono inoltre utilizzare altre approssimazioni, come ad esempio la *Simpson rule*.

3.1.2 Discretizzazione delle equazioni

Una volta discretizzate il dominio nel tempo e nello spazio, per ottenere un'espressione algebrica è necessario passare al campo discreto, sostituendo gli integrali con delle sommatorie. In particolare data la generica equazione di conservazione:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho\phi dV + \int_S \rho\phi\vec{U}\vec{n} dS = \int_S \Gamma\nabla\phi\vec{n} dS + \int_V S_\phi dV \quad (3.14)$$

che può anche essere scritta, utilizzando il teorema di Gauss, come:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho\phi dV + \int_V \nabla\rho\phi\vec{U} dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) dV + \int_V S_\phi dV \quad (3.15)$$

dove:

- $\frac{\partial}{\partial t} \rho\phi$ è la derivata nel tempo di ϕ
- $\nabla\rho\phi\vec{U}$ è il termine convettivo
- $\nabla\Gamma\nabla\phi\vec{n}$ è il termine diffusivo
- S_ϕ è il termine sorgente

A questo punto è possibile discretizzare ogni termine dell'equazione di conservazione.

Problematiche della discretizzazione

Prima di passare alla discretizzazione dei singoli termini dell'equazione di conservazione, è necessario innanzitutto trattare le problematiche dovute all'approssimazione del valore della grandezza sulla faccia Φ_f e del suo gradiente normale alla faccia $\nabla\phi_f$ che saranno in ogni caso richiesti.

Questi termini saranno valutati a partire dal valore della grandezza nelle celle vicine, e la loro accuratezza dipenderà dalla dimensione di cella e dalla qualità della mesh.

Tipicamente sono state definite delle proprietà che misurano la qualità della mesh, esse sono definite sulle facce della mesh e come tali non dipendono perciò dalla forma del volume di controllo utilizzato. Le principali proprietà e la loro definizione verranno ora riportate:

- **Non ortogonalità:** è stimata attraverso la misura dall'angolo α_N tra il vettore \vec{d} ed il vettore normale alla faccia \vec{S} (Fig. 3.3(a)), dove \vec{d} è definito come

$$\vec{d} = x_N - x_P \quad (3.16)$$

Questo angolo deve essere il più piccolo possibile e le ragioni di ciò verranno successivamente spiegate.

- **Skewness:** quando il vettore \vec{d} non interseca la faccia nel suo centro, la mesh è definita come skewed (Fig. 3.3(b)). Il grado di skewness è misurato come:

$$\Psi = \frac{|\vec{m}|}{|\vec{d}|} \quad (3.17)$$

dove il vettore \vec{m} è definito come

$$\vec{m} = x_f - x_{f_i} \quad (3.18)$$

in cui x_{f_i} denota il punto in cui il vettore \vec{d} interseca la faccia.

In generale l'effetto della skewness è quello di influenzare l'accuratezza dell'interpolazione dal centro cella alla faccia.

- **Uniformità:** quando \vec{d} interseca la faccia a metà strada tra il nodo P e il nodo N , allora la mesh si dice uniforme. Il grado di uniformità è definito come:

$$f_x = \frac{|x_{f_i} - x_N|}{|\vec{d}|} \quad (3.19)$$

che assume il valore di 0.5 per mesh uniformi. Questa proprietà influenza l'accuratezza del gradiente normale alla faccia.

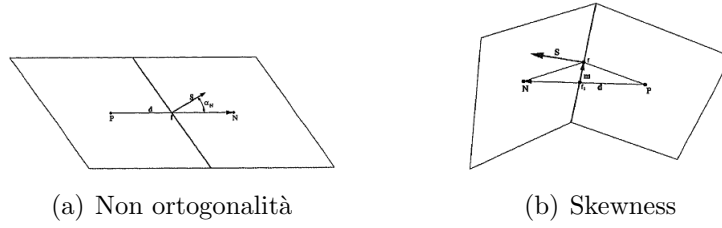


Figura 3.3: Problematriche della discretizzazione

Termine convettivo

Il termine convettivo può essere discretizzato nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \int_V \nabla(\rho\phi\vec{U})dV &= \int_S (\rho\phi\vec{U})\vec{n}dS = \sum_f \vec{S}(\rho\vec{U}\phi)_f = \\ &= \sum_f \vec{S}(\rho\vec{U})_f\phi_f = \sum_f (S\rho U_n)_f\phi_f = \sum_f F\phi_f \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dove ϕ_f , ovvero il valore della proprietà di interesse al centro della faccia può essere determinato in modi diversi, a seconda dei quali varierà l'ordine di accuratezza del modello:

- *upwind*: approssima ϕ_f con il valore del centroide della cella adiacente in funzione della direzione del flusso, ovvero

$$\begin{aligned} - \phi_f &= \phi_P \text{ se } \vec{U}\vec{n} > 0 \\ - \phi_f &= \phi_N \text{ se } \vec{U}\vec{n} < 0 \end{aligned}$$

questo tipo di discretizzazione è di primo ordine dato che il primo termine dell'errore di troncamento è proporzionale a un flusso diffusivo: $\epsilon_t = (x_f - x_p)(\frac{\partial\phi}{\partial x})_P$. Questo termine è una sorta di viscosità artificiale che garantisce l'assenza di oscillazioni numeriche il che risulta positivo per quanto riguarda la stabilità del metodo ma va a discapito dell'accuratezza della soluzione. Bisogna inoltre tenere conto che se la mesh è orientata obliquamente rispetto al flusso si avrà un termine diffusivo anche in direzione normale al flusso stesso.

- *interpolazione lineare* In questo caso si calcola il valore della proprietà di interesse sulla faccia andando a interpolare linearmente tra i valori dei centroidi di due celle adiacenti, ovvero:

$$\phi_f = \phi_N f_x + (1 - f_x)\phi_P \quad (3.21)$$

$$f_x = \frac{x_f - x_P}{x_N - x_P} \quad (3.22)$$

con questo tipo di approssimazione il primo termine dell'errore di troncamento risulta essere del secondo ordine e quindi il metodo risulterà più accurato (secondo ordine per mesh strutturate) a scapito della stabilità in quanto se il fenomeno è dominato da fenomeni di trasporto possono nascere delle oscillazioni spurie.

- vi sono poi altri metodi di ordine maggiore come il metodo *quick* dove si usa una parabola per approssimare il profilo tra i centroidi delle celle adiacenti oppure metodi di ordine superiore in cui vengono utilizzati dei polinomi.

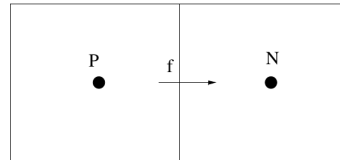


Figura 3.4: Modello upwind

Termine gradiente

Per quanto riguarda il termine gradiente si può discretizzare l'integrale nel seguente modo:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S \phi \vec{n} dS = \sum_f \vec{S}_f \phi_f \quad (3.23)$$

dove ϕ_f viene calcolato interpolando linearmente tra due celle adiacenti.

Termine diffusivo

Il termine diffusivo potrà essere scritto in forma discretizzata:

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) \vec{n} dS = \int_S \Gamma \nabla \phi \vec{n} dS = \sum_f \vec{S} (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)_f = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f (\vec{S} \nabla \phi)_f \quad (3.24)$$

dove il termine $\rho \Gamma_\phi$ viene interpolato sulla faccia mentre il termine $(\vec{S} \nabla \phi)_f$ dipende dal tipo di mesh considerata: $(\vec{S} \nabla \phi)_f = |\vec{S}| \frac{\phi_P - \phi_N}{|d|}$. Questo tipo di approssimazione permette di raggiungere un'accuratezza del secondo ordine su mesh ortogonali e uniformi. Se invece la mesh non risulta essere ortogonale l'accuratezza risulta penalizzata. Infatti in questo caso il gradiente si calcola

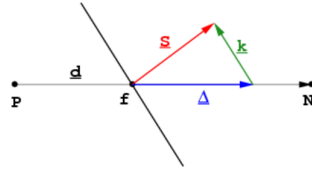


Figura 3.5: Termine diffusivo in caso di non ortogonalità

lungo la linea che connette i centri delle celle adiacenti, ma questa linea non risulta essere perpendicolare alla faccia di interesse, da qui il deriva il motivo di avere un angolo α_N che sia il più piccolo possibile. Sarà quindi necessario aggiungere una correzione \vec{k} per compensare la non ortogonalità della mesh, ovvero:

$$(\vec{S}\nabla\phi)_f = |\vec{S}|\frac{\phi_P - \phi_N}{|\vec{d}|} + \vec{k}(\nabla\phi)_f \quad (3.25)$$

Derivata temporale

Ipotizzando una variazione della proprietà di interesse lineare nel tempo e quindi del secondo ordine è possibile scrivere:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^t \quad (3.26)$$

A questo punto si possono sintetizzare i contributi all'equazione di conservazione come:

- derivata nel tempo in cui il valore di ϕ dipende dal valore al timestep precedente
- convezione: il valore di \vec{U} viene fornito, mentre ϕ_f dipende dai valori di ϕ_P (valore della grandezza nel centroide della cella con faccia f) e dai valore di ϕ_N (valore della grandezza nella cella *neighbour*)
- diffusione: il valore $\vec{S}(\nabla\phi)_f$ dipende dai valori di ϕ_P e ϕ_N

Di conseguenza per ogni punto si avrà un'equazione di questo tipo:

$$a_P\phi_P + \sum_N a_N\phi_N = R \quad (3.27)$$

Per quanto riguarda la derivata temporale si potrà fare un'approssimazione del primo o del secondo ordine:

- approssimazione del primo ordine:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\phi^n - \phi^0}{\Delta t} \quad (3.28)$$

e quindi l'integrale risulta essere:

$$\int_V \frac{\partial\phi}{\partial t} dV = \frac{\phi^n - \phi^0}{\Delta t} V_P \quad (3.29)$$

- approssimazione del secondo ordine:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^0 + \frac{1}{2}\phi^{00}}{\Delta t} \quad (3.30)$$

dove l'integrale diventa:

$$\int_V \frac{\partial\phi}{\partial t} dV = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^0 + \frac{1}{2}\phi^{00}}{\Delta t} V_P \quad (3.31)$$

In entrambi i casi, poiché $\frac{\partial\phi}{\partial t}$ dipende solo da quello di ϕ_P , si avrà solo un contributo diagonale e un contributo al termine sorgente. In particolare per l'approssimazione del primo ordine avremo: $a_P = \frac{V_P}{\Delta t}$ e $r_P = \frac{V_P\phi^0}{\Delta t}$. Per quanto riguarda la derivata seconda avremo:

- approssimazione del primo ordine:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{\phi^n - 2\phi^0 + \phi^{00}}{\Delta t^2} \quad (3.32)$$

con $\phi^n = \phi(t + \Delta t)$, $\phi^0 = \phi^0 = \phi(t)$, $\phi^{00} = \phi(t - \Delta t)$

- approssimazione del secondo ordine:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{2\phi^n - 5\phi^0 + 4\phi^{00} - \phi^{000}}{\Delta t^2} \quad (3.33)$$

Una volta discretizzati tutti i termini per ogni punto si ottiene un'equazione matriciale del tipo:

$$[A][\vec{\phi}] = [R] \quad (3.34)$$

con:

- $[A]$ → matrice sparsa
- ϕ → vettore dei termini associati a tutti i volumi di controllo

- $[R]$ vettore dei termini sorgente

A questo punto bisognerà decidere il criterio di avanzamento nel tempo. In particolare si potrà distinguere tra:

- metodo esplicito: il valore di ϕ_P^n dipende dai *vecchi* valori della cella vicina ϕ_N^0 :

$$\phi_P^n = \frac{R - \sum_N a_N \phi_N^0}{a_P} \quad (3.35)$$

Questo schema garantisce un'accuratezza del primo ordine ma risulta instabile per Δt troppo piccoli. Infatti, detto *Numero di Courant* il seguente valore:

$$Co = \frac{ud}{|d|^2 \Delta t} \quad (3.36)$$

il metodo risulterà instabile se $Co > 1$.

- metodo implicito: il valore di ϕ_P^n dipende dai *nuovi* valori della cella vicina ϕ_N^n :

$$\phi_P^n = \frac{R - \sum_N a_N \phi_N^n}{a_P} \quad (3.37)$$

In questo caso è sempre garantita l'accuratezza del primo e la stabilità della soluzione anche per $Co > 1$, il che permette di utilizzare timestep più grandi. Tuttavia in questo caso tutte le equazioni dovranno essere risolte simultaneamente dal momento che ogni valore nuovo di una cella dipenderà dai valori nuovi delle altre. Per farlo ogni termine sarà espresso in una matrice e il sistema risultante verrà risolto. Questo comporta la necessità di conservare in memoria i coefficienti della matrice, al contrario del metodo esplicito che risulta più rapido proprio per il fatto che non vi è necessità di memorizzare alcun valore.

Capitolo 4

Studio della fluidodinamica di una schiuma

Questo capitolo si propone di introdurre all'analisi delle perdite di carico dovute all'attraversamento di una schiuma, specificando le ipotesi e i modelli adottati nelle simulazioni fluidodinamiche.

In particolare si vuole capire l'impatto sui risultati ricavati dalle simulazioni dei seguenti aspetti:

- Tipologia di mesh utilizzata (esaedrica, tetraedrica, poliedrica)
- Modello di turbolenza utilizzato
- Presenza o meno di un boundary layer per riprodurre il profilo di velocità a parete
- Numero di celle elementari considerate

Lo scopo di tutte queste analisi è trovare il modo più corretto e dal costo computazionale più ridotto per studiare, attraverso l'analisi CFD, la fluidodinamica di una qualsiasi schiuma.

Prima di affrontare singolarmente questi aspetti è necessario innanzitutto modellare dal punto di vista geometrico il problema utilizzando i modelli geometrici presentati al Cap. 1.

Successivamente si farà inoltre una breve presentazione delle tipologie generali di simulazioni effettuate nel corso della trattazione specificando condizioni al bordo, porzione di schiuma considerata e campi di applicazione.

4.1 Modellazione geometrica di una schiuma

In letteratura sono riportati diversi modelli per riprodurre la configurazione della struttura delle schiume, i due principali che si prenderanno in considerazione in questa tesi sono:

- Modello geometrico a cella cubica
- Modello geometrico *Kelvin cell*

Di seguito verranno dunque riportate le relazioni che legano tra loro i principali parametri geometrici per i due modelli, utilizzando in entrambi i casi come parametri indipendenti L_c ed ϵ e lasciando come variabili dipendenti d_s ed S_V .

4.1.1 Modello geometrico a cella cubica

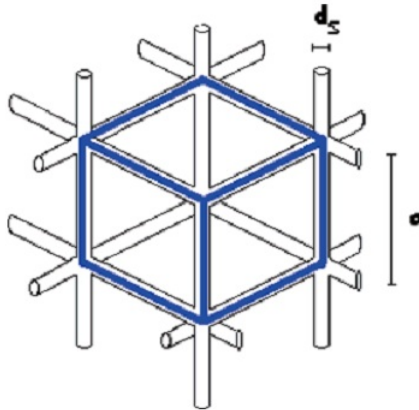


Figura 4.1: Parametri geometrici modello a cella cubica

Si è visto al Cap. 1 come i parametri necessari a definire univocamente il modello siano, nel caso più generale, le dimensioni a , b e il diametro dei filamenti d_s . La dimensione a è assunta pari alla dimensione media della cella L_c , parametro noto dalle misurazioni sperimentali, mentre per quanto riguarda invece il diametro dei filamenti, questo è necessario ricavarlo utilizzando le relazioni geometriche che verranno ora ricavate nel caso di una schiuma isotropa, in cui cioè si assume $a = b$.

Considerando il volume della cella cubica V_0 come:

$$V_0 = L_c^3 \tag{4.1}$$

il volume totale della struttura V_s può essere espresso come funzione della frazione vuota di schiuma:

$$V_s = (1 - \epsilon) \times V_0 = (1 - \epsilon) \times L_c^3 \quad (4.2)$$

In alternativa V_s può anche essere calcolato come il volume totale dei cilindri compresi nella cella unitaria, considerando che ogni filamento è condiviso tra quattro celle:

$$V_s = 3\pi \left(\frac{d_s^2}{4} \right) L_c \quad (4.3)$$

Uguagliando le espressioni 4.2 e 4.3 si ottiene la stima del diametro dei filamenti d_s in funzione di L_c e ϵ :

$$d_s = L_c \left[\frac{4}{3\pi}(1 - \epsilon) \right]^{1/2} \quad (4.4)$$

L'altro parametro di fondamentale importanza che si deve determinare è l'area specifica per unità di volume della cella, questa può essere scritta come:

$$S_V = \frac{4}{d_s}(1 - \epsilon) \quad (4.5)$$

Considerando l'equazione 4.4, S_V può essere espressa come funzione della porosità della schiuma ϵ e della dimensione di cella a

$$S_V = \frac{2}{L_c} [3\pi(1 - \epsilon)]^{1/2} \quad (4.6)$$

A questo punto partendo dai valori misurati di L_c ed ϵ ed utilizzando tali relazioni è possibile stimare tutti i restanti parametri geometrici fondamentali per descrivere la struttura di una schiuma. La stima dei parametri geometrici per quanto concerne i campioni testati in questo lavoro sono riportati nella tabella 4.1

Campione	$L_c[m]$	$\epsilon[\%]$	$d_s[m]$	$S_V[m^2/m^3]$
A	4.3×10^{-3}	94.5	0.66×10^{-3}	333
B	4.7×10^{-3}	92.7	0.82×10^{-3}	352
C	2.2×10^{-3}	93.8	0.37×10^{-3}	696
D	2.0×10^{-3}	93.7	0.33×10^{-3}	797
E	1.7×10^{-3}	93.2	0.28×10^{-3}	942
F	4.6×10^{-3}	91.1	0.80×10^{-3}	449

Tabella 4.1: Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello a cella cubica

4.1.2 Modello geometrico *Kelvin cell*

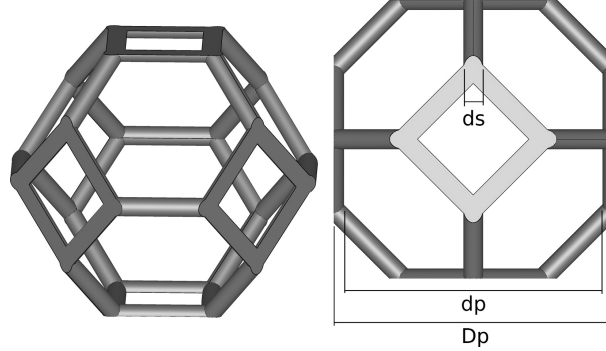


Figura 4.2: Parametri geometrici modello kelvin cell regolare

Si è visto al Cap. 1 come i parametri necessari a definire univocamente il modello siano, nel caso più generale, le dimensioni H , D , L , b , l'angolo Θ e il diametro dei filamenti d_s .

In questa tesi si è deciso di utilizzare il modello di *Kelvin cell* regolare per rappresentare la struttura delle schiume, questa approssimazione comporterà come vedremo una serie di semplificazioni. Tali parametri sono infatti legati tra loro da alcune relazioni geometriche [11]:

$$H = 4L \sin \theta \quad (4.7)$$

$$D = 2L \cos \theta + \sqrt{2}b \quad (4.8)$$

L'aspect ratio della cella $R = H/D$ assume dunque la seguente forma:

$$R = \frac{4L \sin \theta}{2L \cos \theta + \sqrt{2}b} \quad (4.9)$$

Utilizzando delle kelvin cell regolari, ovvero in cui $R = 1$, $L = b$ ed assumendo $\theta = 45^\circ$, le relazioni prima scritte si semplificano notevolmente, in particolare dalle Eq. 4.7 e 4.8 è possibile ricavare che:

$$H = D = 2L\sqrt{2} \quad (4.10)$$

Le grandezze da definire sono perciò solo due, ovvero H e d_s . Si assumerà H pari alla dimensione media della cella L_c , per quanto riguarda invece d_s è necessario passare, come nel caso di modello a cella cubica, attraverso correlazioni che legano tra loro ϵ , L_c ed appunto d_s .

Adottando un modello kelvin cell regolare la porosità, la dimensione di cella e il diametro della struttura sono legati tra loro dalla seguente relazione:

$$\epsilon = 1 - \frac{6\pi d_s^2 L_s}{L_c^3} = 1 - \frac{3\pi}{\sqrt{2}} \left(\frac{d_s}{L_c} \right)^2 \quad (4.11)$$

dove L_s è la lunghezza della struct data da $L_s = \frac{\sqrt{2}}{4} L_c$.

Recentemente è stata proposta [12] una modifica a questa correlazione:

$$\epsilon = 1 - \frac{3\pi}{\sqrt{2}} \left(\frac{d_s}{L_c}\right)^2 + 7.54 \left(\frac{d_s}{L_c}\right)^3 \quad (4.12)$$

Per stimare l'altro fondamentale parametro, ovvero la superficie specifica S_V , diversi sono stati gli approcci proposti: stimando la superficie del poliedro che riproduce la struttura, assumendo una similitudine con gli scambiatori di calore a fascio tubiero o usando tecniche di micro-tomografia computerizzata. Avendo adottato un kelvin cell regolare per approssimare la struttura della schiuma, è inoltre possibile derivare, basandosi su ragionamenti puramente geometrici e assumendo che ogni filamento sia condiviso dalle tre adiacenti Kelvin cell, un'espressione per la stima della superficie specifica:

$$S_V = \frac{24\pi d_s L_s}{L_c^3} = \sqrt{24\sqrt{2}\pi} \frac{\sqrt{1-\epsilon}}{L_c} = 10.33 \frac{\sqrt{1-\epsilon}}{L_c} \quad (4.13)$$

Anche per la stima di questo parametro è stata proposto [12] un miglioramento del modello, che porta alla seguente formulazione della correlazione:

$$S_V = 10.33 \frac{\sqrt{1-\epsilon}}{L_c} - 5.8 \frac{1-\epsilon}{L_c} \quad (4.14)$$

A questo punto partendo dai valori misurati di L_c ed ϵ ed utilizzando tali relazioni è possibile stimare tutti i restanti parametri geometrici fondamentali per descrivere la struttura di una schiuma. La stima dei parametri geometrici per quanto concerne i campioni testati in questo lavoro sono riportati nella tabella 4.2

Campione	$L_c[m]$	$\epsilon[\%]$	$d_s[m]$	$S_V[m^2/m^3]$
A	4.3×10^{-3}	94.5	0.41×10^{-3}	485.6
B	4.7×10^{-3}	92.7	0.54×10^{-3}	513.6
C	2.2×10^{-3}	93.8	0.24×10^{-3}	1054.8
D	2.0×10^{-3}	93.7	0.21×10^{-3}	1126.5
E	1.7×10^{-3}	93.2	0.18×10^{-3}	1333.9
F	4.6×10^{-3}	91.1	0.57×10^{-3}	555.2

Tabella 4.2: Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello kelvin cell

4.2 Tipologie di simulazioni effettuate

Nel corso della seguente trattazione verranno adottate diverse tipologie di simulazioni che differiscono tra loro per i seguenti aspetti:

- Stazionarietà / instazionarietà del fenomeno analizzato;
- Effetti di comprimibilità per il fluido considerato;
- Estensione della porzione di schiuma simulata.

Nel seguito questi aspetti verranno analizzati nel dettaglio spiegando le varie assunzioni fatte nel corso della trattazione.

4.2.1 Stazionarietà

Come descritto al Cap. 2 esistono in generale due regimi di moto: laminare e turbolento. In regime laminare il fenomeno in esame è stazionario, ovvero dopo un certo periodo di transitorio si raggiungeranno delle condizioni stabili in cui tutte le grandezze termodinamiche si manterranno costanti. Se si è in regime turbolento il fenomeno risulta invece instazionario cioè si avranno delle continue oscillazioni delle grandezze termodinamiche anche se dopo un certo periodo si raggiungeranno delle condizioni in cui i valori effettivi oscilleranno attorno ad un valore medio costante.

Per via delle velocità caratteristiche del problema in esame ci si troverà sempre ad operare in un regime turbolento.

In tale regime possono essere adottati due approcci: il primo, diretto e dal costo computazionale più elevato, consiste nell'andare a risolvere le scale più piccole della turbolenza, utilizzando dunque discretizzazione spaziale e temporale sufficientemente piccole. Tale approccio è quello che comunemente viene chiamato DNS e in tal caso il problema va necessariamente considerato instazionario ai fini della simulazione numerica.

Alternativamente è possibile considerare solo le scale più grandi della turbolenza risolvendo le equazioni RANS, presentate al Cap. 2, per chiudere il problema. In questo caso il problema può essere considerato stazionario ai fini della simulazione numerica.

L'approccio adottato per tutte le simulazioni eseguite in questo lavoro di tesi sarà il secondo, il quale permette di ottenere un elevato risparmio di costo computazionale fornendo comunque risultati che come verificato sono sufficientemente in accordo con quelli dell'analisi DNS.

4.2.2 Comprimibilità

Per quanto riguarda la possibilità di considerare il problema incomprimibile o meno la scelta dipende soprattutto dal tipo di fluido, dalle velocità in gioco e dalle grandezze a cui si è interessati.

Il fluido usato durante le simulazioni è aria, la quale si può assumere abbia un comportamento pressoché incomprimibile per numeri di Mach Ma inferiori a 0.3, mentre deve essere necessariamente considerata comprimibile per Ma maggiori di 0.3.

Nei casi analizzati durante lo studio delle perdite di carico, le velocità in gioco e le temperature sono tali da poter considerare il fluido incomprimibile in quanto Ma risulta minore di 0.3.

A conferma di quanto appena ipotizzato, in Fig. 4.3 si riportano i risultati, in termini di $\Delta p/L$ in funzione della velocità in ingresso, di due simulazioni sulla stessa mesh: nella prima si considera il caso comprimibile utilizzando un'ipotesi di gas perfetto per calcolare la densità del gas, nella seconda invece si considera il caso incomprimibile.

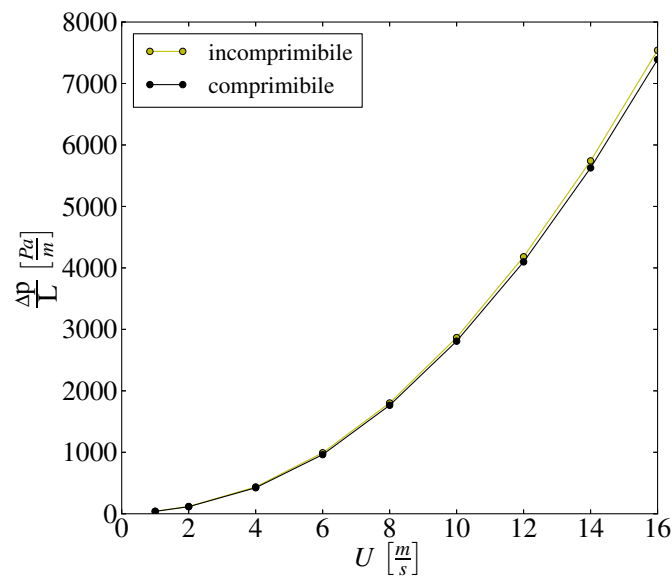


Figura 4.3: Influenza comprimibilità del fluido

4.2.3 Porzione di schiuma considerata

Nel caratterizzare la fluidodinamica di una schiuma è spesso necessario considerare campioni di lunghezza elevata i quali affrontati dal punto di vista di un'analisi microscopica danno sicuramente luogo ad un costo computazionale molto elevato. Risulta perciò spesso conveniente considerare limitate porzioni del campione sotto esame e da questo ottenere risultati di carattere generale, indipendenti perciò dalla sua lunghezza.

A tal proposito per riprodurre il comportamento dei vari campioni si sono considerate due diverse tipologie di approccio:

- simulazioni di tipo "ciclico"
- simulazioni di tipo "flussaggio"

Essi differiscono sulla base del numero di entità geometriche elementari considerate lungo la direzione del flusso, in quanto in tutti i casi il numero di entità elementari lungo le altre due direzioni è unitario. In particolare si analizzeranno ora le differenze riguardo le condizioni al bordo adottate nei diversi casi, specificando per ognuna i campi applicativi e la qualità dei risultati ottenuti. In generale una griglia utilizzata per riprodurre una schiuma è suddivisa in sette patch. Tali patch si riferiscono alle sezioni di ingresso ed uscita del fluido, alle delimitazioni del singolo canale riprodotto della schiuma ed infine alla superficie della schiuma contenuta nel canale analizzato. Per tutti e due le tipologie di simulazioni le condizioni al bordo adottate per le patch che riproducono le pareti del canale e per la matrice solida sono identiche ovvero rispettivamente di tipo ciclico, avendo considerato una singola cella nelle due direzioni trasversali al flusso, e tipo parete.

La condizione al bordo di tipo ciclico prevede che due patch vengano trattate come se fossero fisicamente connesse tra di loro ed è perciò usata quando il componente prevede delle geometrie che si ripetono.

Riguardo la condizione di tipo parete, questa è spesso conosciuta come condizione di *no-slip* ed è la scelta solitamente adottata quando si ha un flusso che lambisce una parete solida ed è valida l'ipotesi del continuo, la quale verrà discussa in dettaglio nel successivo capitolo. Tale condizione prevede di imporre nulla la componente normale della velocità, mentre la componente tangenziale è imposta pari alla velocità a cui si muove la parete.

Per quanto riguarda invece le condizioni al bordo che si impongono sulle patch di ingresso e uscita del flusso, queste varieranno a seconda della tipologia di simulazione considerata.

Simulazioni di tipo ciclico

Tali simulazioni prevedono che per tutte le grandezze termodinamiche di interesse le patch di ingresso ed uscita siano impostate come cicliche, ovvero su entrambe i valori delle grandezze saranno identiche.

Così procedendo però non si avrebbe alcun moto del fluido data l'assenza di un gradiente di pressione tra ingresso ed uscita, si inserisce dunque un termine sorgente nelle equazioni che impone una velocità al flusso e darà quindi luogo ad un corrispettivo gradiente di pressione fra ingresso ed uscita che altrimenti risulterebbe assente.

Tale set di condizione al bordo permette perciò di descrivere la periodicità delle condizioni fluidodinamiche in ingresso ed uscita della singola cella unitario facendo in modo di simulare correttamente il comportamento medio di una schiuma estraendo da questa un numero contenuto di celle (solitamente una) che riprodurranno le condizioni reali che si hanno nella zona centrale del reticolo.

Questa configurazione può essere usata solo nel caso di simulazioni incompressibili e in cui non siano considerate reazioni chimiche. Essa consente di ottenere risultati che siano significativi dal punto di vista degli andamenti delle grandezze fisiche al variare ad esempio delle varie geometrie, ma che probabilmente non sono corretti dal punto del valore assoluto delle grandezze in quanto viene considerato un comportamento medio. Si trascureranno ad esempio le perdite di concentrate che si avranno nella sezione di ingresso o i ricircoli che si hanno in uscita.

Come detto questa tipologia di simulazioni è utilizzabile solo nel caso incompressibile e in assenza di reazioni chimiche, per avere un corrispettivo in tali condizioni è possibile considerare la sua variante *mapped*. Tale condizione è basata sul calcolo del valore puntuale della grandezza $\phi_{inl}(\vec{x}, t)$ in ingresso sulla base dell'imposizione del valore medio della grandezza e della distribuzione della quantità all'uscita $\phi_{out}(\vec{x}, t)$.

Tali simulazioni prevedono le seguenti impostazioni:

- per la velocità, la temperatura e le specie chimiche si impone la condizione al bordo di tipo mapped in ingresso, mentre si avrà la condizione di gradiente nullo in uscita.
- per la pressione si impone la condizione di tipo mapped in uscita, mentre si avrà la condizione di gradiente nullo in ingresso.
- per la turbolenza si impongono i valori in ingresso, mentre in uscita si avrà la condizione di gradiente nullo.

Anche nel caso comprimibile e in presenza di reazioni chimiche è dunque possibile considerare un numero molto limitato di entità geometriche ele-

mentari che costituiscono la geometria modulare e che siano rappresentativi del comportamento medio, con gli stessi pregi e difetti delle precedenti.

Simulazioni di flussaggio

Tali simulazioni sono applicate al campione completo riprodotto in tutta la sua lunghezza e prevedono le seguenti impostazioni:

- per la velocità, la temperatura, la turbolenza e le specie chimiche si fissa il valore in ingresso, mentre si avrà la condizione di gradiente nullo in uscita.
- per la pressione si fissa il valore in uscita, mentre si avrà la condizione di gradiente nullo in ingresso.

Tale set di condizioni al bordo è applicabile in tutte le condizioni e risulta quello che riproduce più fedelmente le condizioni fluidodinamica in cui si viene a trovare il fluido durante l'attraversamento di una schiuma, infatti non viene rappresentato il comportamento medio ma quello effettivo considerando ad esempio effetti d'ingresso e d'uscita ecc. Simulazioni di questo servivano saranno utilizzate per riprodurre i test sperimentali eseguiti sui vari campioni dei quali si considererà tutta l'effettiva lunghezza o comunque porzioni molto rilevanti. L'analisi dell'influenza che ha sui risultati il numero di entità geometriche elementari considerato adottando tale configurazione sarà affrontata nel proseguo del capitolo.

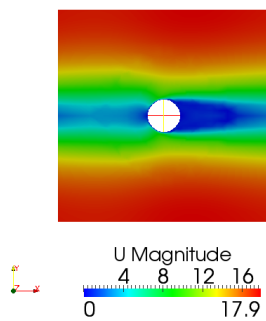


Figura 4.4: Simulazione di tipo ciclico

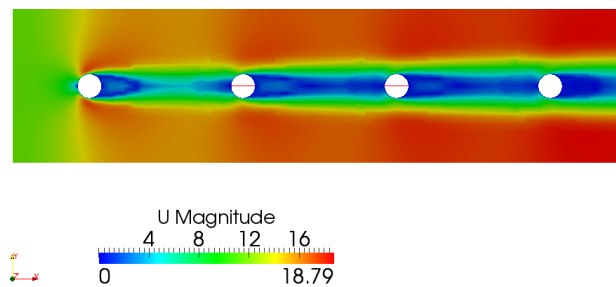


Figura 4.5: Simulazione di flussaggio

4.3 Scelta tipologia di mesh

L'obbiettivo in questa sezione è quello di determinare la tipologia di mesh più adatta per studiare il comportamento delle schiume.

Per semplificare le simulazioni e rendere più veloce la realizzazione delle varie tipologie di mesh proposte si sceglie di considerare ora solo il caso di modello a cella cubica, le considerazioni fatte saranno comunque di validità generale per entrambi i modelli geometrici di cella prima descritti. La caratteristica fondamentale su cui ci si concentrerà sarà quella della velocità di calcolo cioè la rapidità con cui ciascuna delle tipologie di mesh prese in considerazione riesce a dare un risultato coerente con le altre, infatti ciò che ci si attende è una grossa differenza tra le varie tipologie per mesh molto lasche, mentre un progressivo avvicinamento tra le varie soluzioni all'aumentare del raffinamento della mesh.

Per semplificare l'analisi, gli effetti di non ortogonalità, skewness e non uniformità non verranno considerati perché essi non fanno parte delle proprietà delle varie tipologie di mesh utilizzate, ma sono il risultato in generale di una mesh di bassa qualità.

Le tipologie di celle scelte per quest'analisi sono:

- **Cella esaedrica:** questa tipologia di mesh può essere generata direttamente in OpenFoam ed è caratterizzata da un miglior orientamento delle celle rispetto al flusso con conseguenti minori errori di discretizzazione.
- **Cella tetraedrica:** questa tipologia di mesh può essere generata grazie a Netgen, un software openSource in grado di realizzare mesh tetraedriche di un modello CAD, utilizzando un algoritmo *Delaunay*. La mesh verrà poi convertita in un formato leggibile da OpenFoam e dunque importata.
- **Cella poliedrica:** questa tipologia di mesh può essere ottenuta a partire dalle precedenti mesh tetraedriche attraverso la conversione nella relativa mesh duale, ovvero si uniscono tra loro diverse celle tetraedriche fino a formare celle poligonali.

Si eseguirà dunque dapprima un'analisi di sensitività su un caso test per ciascuna tipologia e successivamente si confronteranno i risultati ottenuti le varie tipologie analizzate per individuare quella che con un numero minore di celle riesce a dare un risultato coerente con le altre.

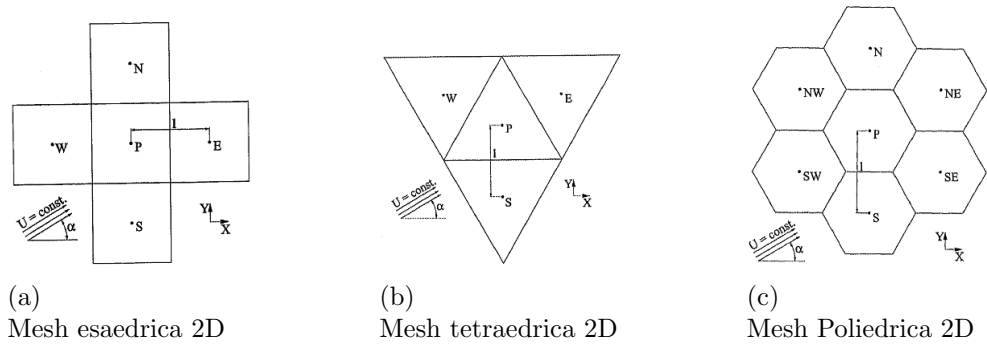


Figura 4.6: Schematizzazione 2D delle mesh utilizzate per l'analisi

4.3.1 Caso test

L'esempio numerico che si intende studiare come caso test riguarda la schiuma denominata precedentemente come campione A che viene schematizzata utilizzando il modello di cella cubica. La simulazione eseguita è stazionaria, incomprimibile e di tipo ciclico.

La realizzazione di ciascuna mesh prevede la creazione di un boundary layer per avere y^+ minore di 1 a parete in modo da riprodurre correttamente il profilo di velocità, a tal proposito risulta conveniente l'utilizzo di un modello $k - \Omega$ per quanto riguarda la turbolenza in particolare la sua versione SST . Riguardo il boundary layer, esso viene creato per tutte e tre le tipologie di mesh utilizzando l'utility integrata in OpenFoam *extrudeMesh* che è in grado di estrudere la superficie di una griglia esistente specificando lo spessore dell'estrusione, il numero di celle presenti e il fattore di crescita/decrecita; nel caso in esame rispettivamente 0.0005, 5, 0.9.

Per quanto riguarda il valore delle grandezze fluidodinamiche, si è imposto velocità media del flusso pari a 11.36 m/s e pressione in uscita pari a 10000 Pa

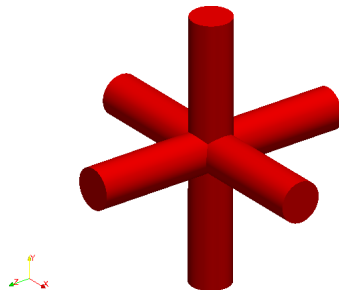
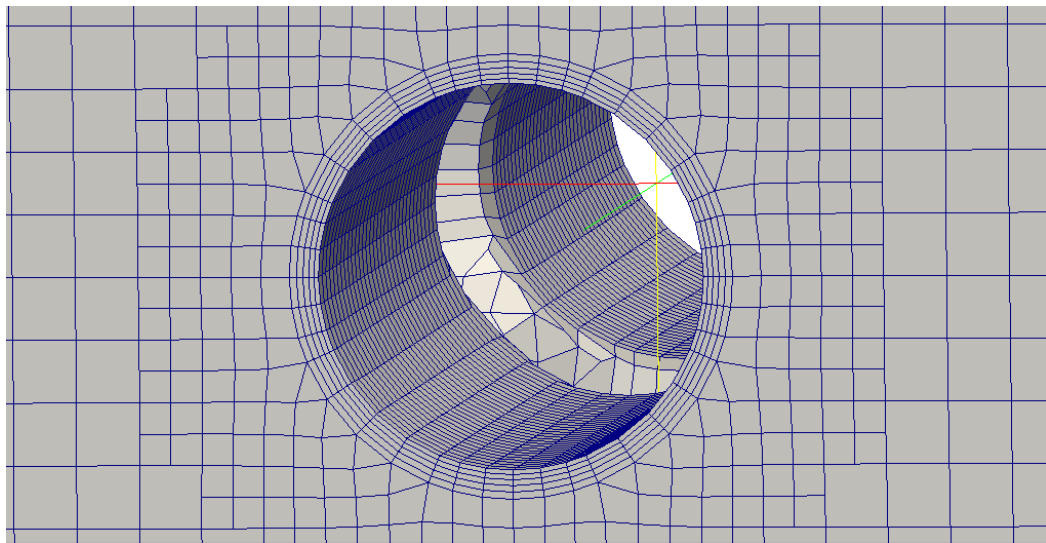
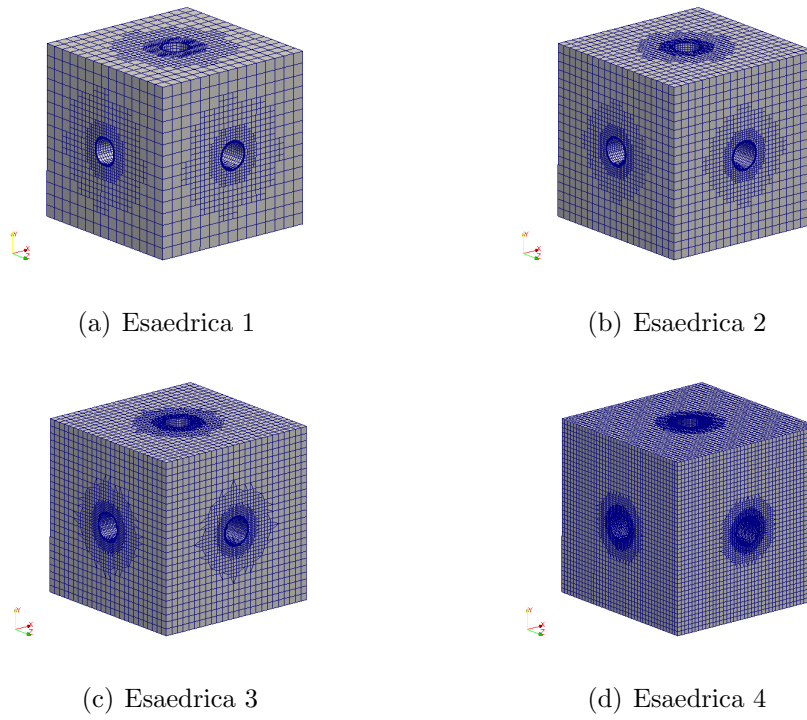
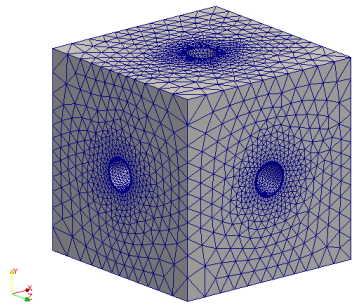


Figura 4.7: Modello geometrico della struttura considerata

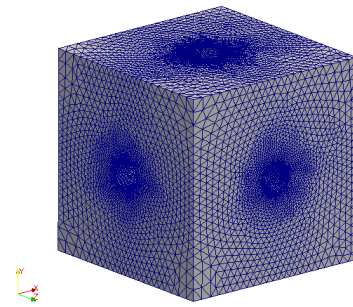


(e) Particolare esaedrica

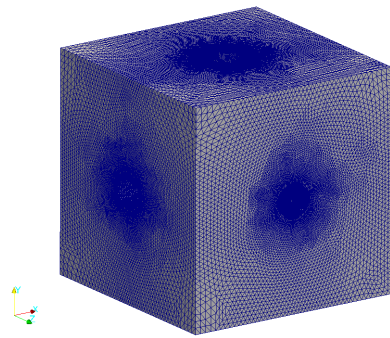
Figura 4.8: Mesh esaedriche utilizzate



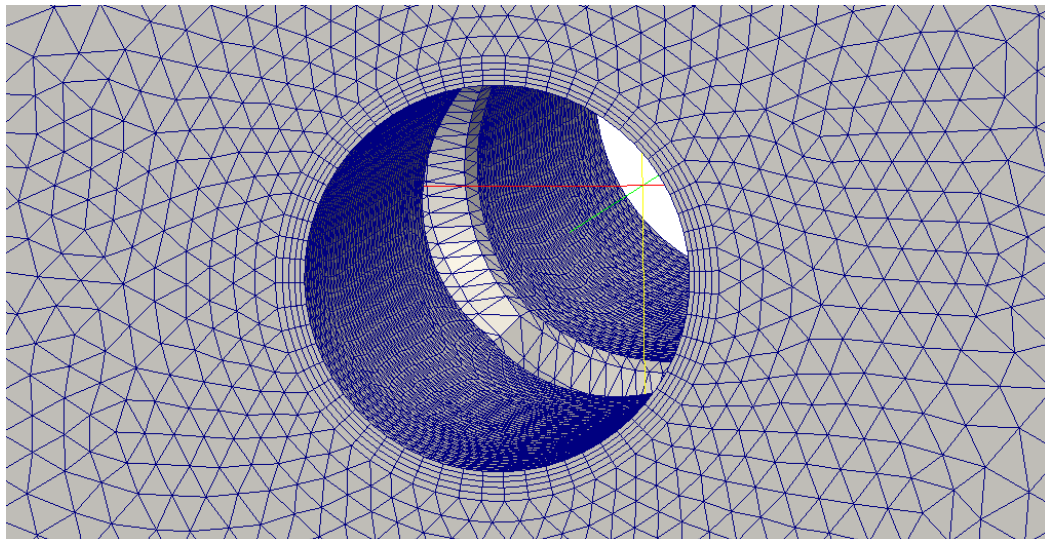
(a) Tetraedrica 1



(b) Tetraedrica 2

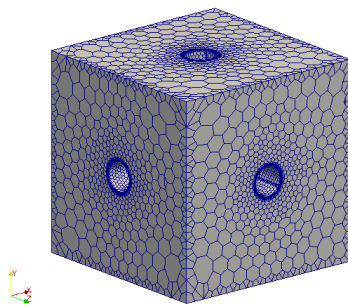


(c) Tetraedrica 3

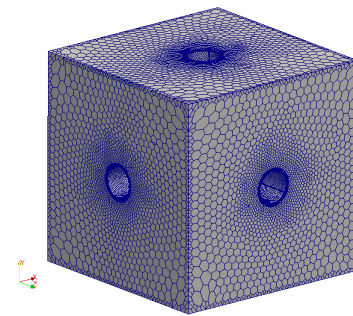


(d) Particolare tetraedrica

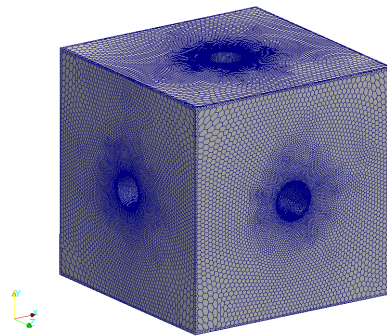
Figura 4.9: Mesh tetraedriche utilizzate



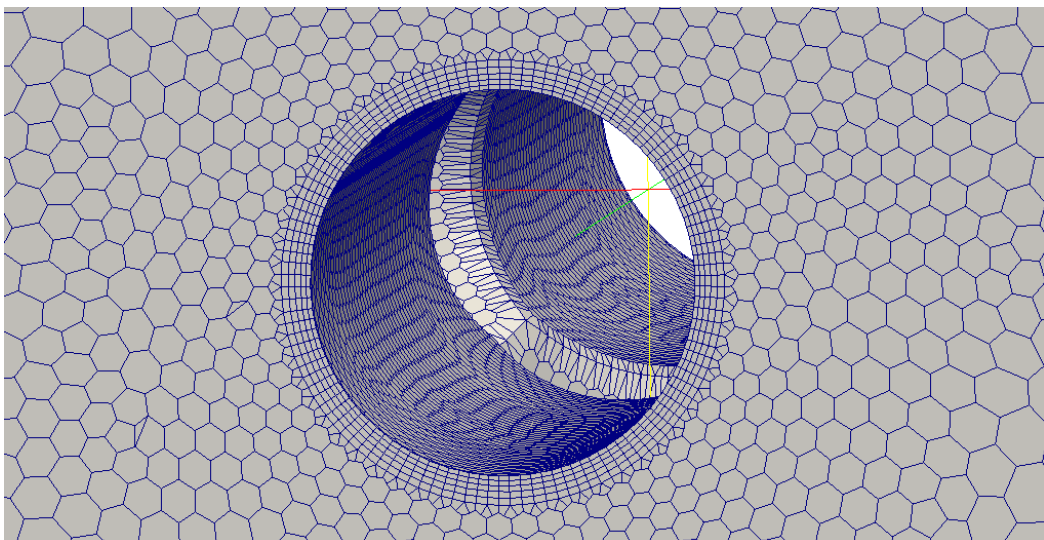
(a) Poliedrica 1



(b) Poliedrica 2



(c) Poliedrica 3



(d) Particolare poliedrica

Figura 4.10: Mesh poliedriche utilizzate

4.3.2 Analisi dei risultati

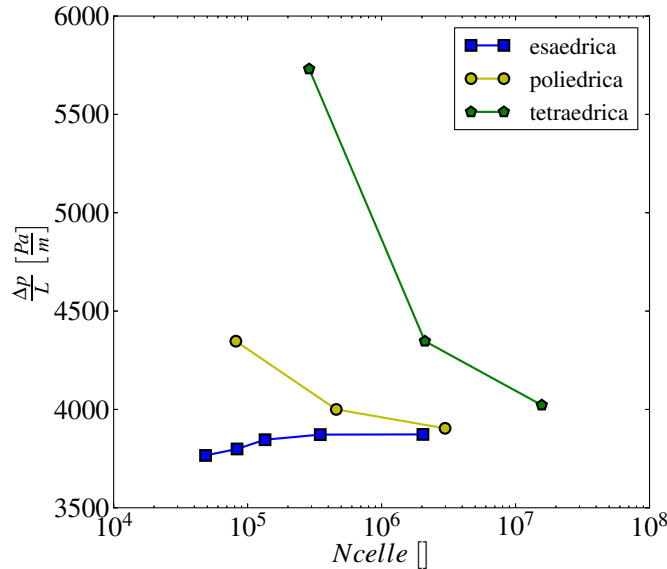


Figura 4.11: Confronto dei risultati ottenuti per le varie mesh utilizzate

Si sono analizzate in questa sezione le tipologie di celle di calcolo più comunemente diffuse:

- Le celle di calcolo tetraedriche sono sicuramente le più facili da generare, ma solitamente forniscono dei risultati non affidabili o per cui è richiesto un notevole numero di celle.
- Le celle di calcolo esaedrico sono probabilmente le migliori in termini di efficienza ed accuratezza, ma sono molto difficili da generare automaticamente.
- Le celle di calcolo di tipo poliedrico possono essere generate con la stessa facilità dei tetraedri, ma rispetto a queste garantiscono sicuramente una maggior accuratezza, anche se tipicamente minore rispetto alle celle esaedriche. Risultano molto affidabili nei casi in cui il flusso non abbia una direzione preferenziale.

Dal confronto dei risultati ottenuti per le tre tipologie di griglie (Fig. 4.11) si evince come tutte e tre le tipologie di mesh tendano a convergere verso un risultato comune. Si osserva subito, come previsto, che tra le tre sicuramente la mesh esaedrica è quella che arriva con un minor numero di celle alla convergenza del risultato, mentre la mesh tetraedrica pur considerando

un numero di celle molto elevato non fornisce ancora un risultato del tutto coerente con le altre due tipologie. Riguardo le mesh tetraedrica e poliedrica (che comunque si può dire sia giunta a convergenza) sarebbe necessario avere un'ulteriore analisi per un numero di celle ancora superiore, ma il successivo refinement della tetraedrica (e di conseguenza per la poliedrica da essa derivata) risulta impraticabile per via dell'elevato numero di celle che si avrebbe.

Il risultato ottenuto può essere spiegato considerando che un tetraedro, avendo solo quattro facce, è sicuramente meno adatto, rispetto a celle di calcolo esaedriche o poliedriche, alla corretta approssimazione dei flussi diffusivi. Questo perché nel caso di tetraedri, la cella non risulterà mai allineata al flusso dando luogo ad un termine diffusivo anche in direzione normale al flusso stesso.

Nel caso di celle esaedriche o poliedriche invece è possibile allineare le celle al flusso; ad esempio, lungo le pareti e là dove la direzione del flusso è data dalla geometria (condotti, canali, ecc.), considerando una cella prismatica le facce laterali dei prismi saranno allineate al flusso, mentre le basi dei prismi saranno ortogonali allo stesso, con una conseguente maggior accuratezza nell'approssimazione del termine diffusivo.

Sempre per lo stesso motivo le mesh poliedriche risultano generalmente le più accurate in caso di flussi senza una direzione privilegiata (ricircolanti). Anche in questo caso le celle tetraedriche sono le meno adatte, in quanto non hanno l'ortogonalità delle celle esaedriche e richiedono tipicamente un numero maggiore rispetto alle celle poliedriche.

Per il proseguo la scelta nel caso in esame ricadrà dunque sulle mesh esagonali in quanto queste, come mostrato dall'analisi di sensitività condotta, con un numero minore di celle (relativamente alla mesh poliedrica) riescono a fornire dei risultati che sono coerenti con quelli delle altre tipologie di mesh analizzate.

4.4 Influenza del modello di turbolenza

In tutte le simulazioni che si effettueranno sarà necessario adottare come spiegato un modello di turbolenza in quanto questo consente di ottenere la convergenza dei risultati che altrimenti utilizzando un caso puramente laminare non si riesce ad ottenere. Si vuole in questa sezione capire come il modello di turbolenza scelto influenza i risultati e in definitiva quale modello adottare per effettuare le varie simulazioni nel proseguo.

Per capire quale dei sopra citati modelli risulta più adatto a modellare il caso in esame, si effettueranno per ognuno delle simulazioni stazionarie ed incomprimibili al variare della velocità media di tipo ciclico su una singola cella riprodotta utilizzando un modello cubico. Nel caso dei modelli LRN si è optato per utilizzare una mesh provvista di boundary layer in modo da avere $y^+ < 1$ a parete, mentre nel caso dei modelli HRN la mesh deve avere necessariamente $y^+ > 30$ a parete perciò si è scelto di non utilizzare alcun boundary layer per non diminuire eccessivamente la dimensione di cella.

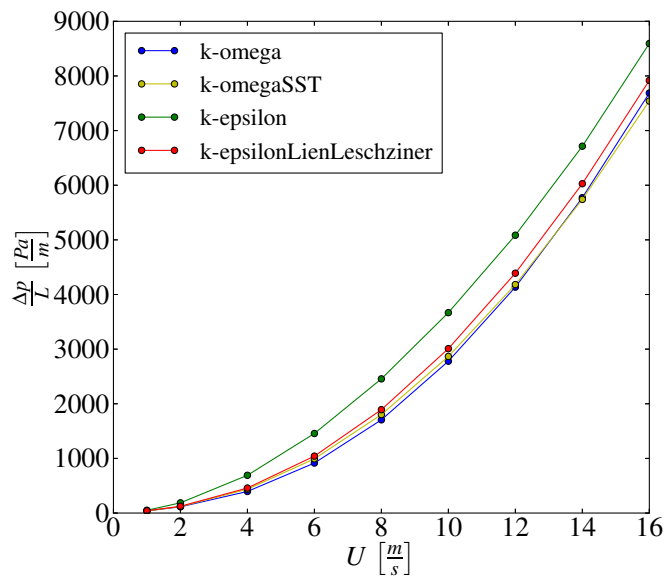


Figura 4.12: Influenza del modello di turbolenza

I risultati di tali simulazioni sono mostrati in figura 4.4, dove si può osservare come per quanto riguarda i tre modelli di turbolenza LRN i risultati sono pressoché identici, mentre riguardo quelli dell'unico modello HRN testato ($k - \epsilon$) i risultati si discostano in modo significativo.

Per capire meglio le differenze tra i diversi modelli di turbolenza utilizzati si riportano i profili di velocità (Fig. 4.13) e di viscosità turbolenta (Fig. 4.14) lungo la sezione del canale.

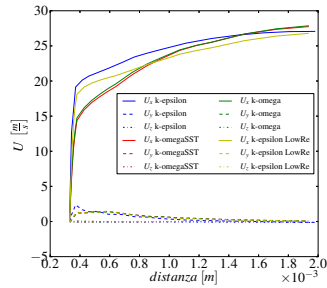


Figura 4.13: Profilo di velocità

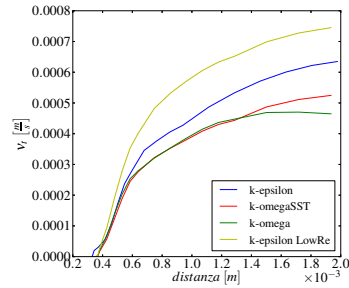


Figura 4.14: Profilo di viscosità turbolenta

Come detto inizialmente è necessario adottare un modello di turbolenza per avere la convergenza delle simulazioni, ma analizzando i risultati la scelta su quale modello di turbolenza adottare è indifferente. Ovvero in realtà il fatto di considerare o meno la turbolenza non ha un reale effetto sulla stima delle perdite di carico, infatti nel caso si considerino delle simulazioni instazionarie i risultati che si otterrebbero considerando o meno la turbolenza sarebbero identici in termini di valori medi di Δp misurati come differenza tra i valori medi di pressione all'ingresso e all'uscita.

Dai risultati si evince che, pur evidenziando tra loro una significativa differenza nello stimare la viscosità turbolenta, ai fini di stimare le perdite di carico e riprodurre il profilo di velocità tutti i modelli testati si sono mostrati coerenti a meno del modello $k-\epsilon$, il quale però risulta penalizzato dal fatto che date le dimensioni geometriche e le velocità in gioco del problema in questione risulta impossibile ottenere un y^+ a parete che sia compreso nel range ottimale di validità del modello.

In conclusione si opterà per l'utilizzo nel proseguo del modello $k-\omega SST$ in quanto questo fornisce risultati coerenti con gli altri modelli di turbolenza testati e come visto rappresenta la miglior soluzione dal punto di vista della risoluzione a parete.

4.5 Influenza dell'utilizzo del BL

E' stato appena visto come il modello di turbolenza usato non influenza il risultato, si vuole ora capire se è necessario o meno avere la presenza di un boundary layer, ovvero un infittimento localizzato della mesh nelle zone adiacenti alle pareti solide.

Avendo deciso di adottare il modello di turbolenza $k - \omega SST$ la questione è dunque se utilizzare o meno le wall function per descrivere il flusso a parete, infatti in presenza di BL si avrà $y^+ < 1$ dunque verrà risolto il flusso a parete, mentre in caso contrario $y^+ > 1$ dunque verranno applicate le leggi di parete. Per l'analisi scegliamo di adottare un modello geometrico a cella cubica.

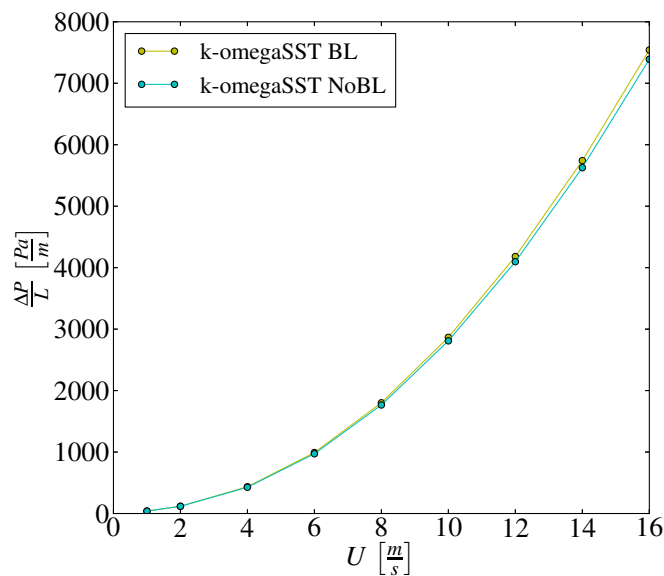


Figura 4.15: influenza della presenza di un BL

I risultati di Fig. 4.5 mostrano che la presenza o meno del BL risulta irrilevante ai fini della previsione delle perdite di carico, infatti le due curve con e senza BL risultano praticamente sovrapposte. Questo risultato semplificherà notevolmente la realizzazione delle mesh dei vari campioni e renderà più basso il costo computazionale delle simulazioni.

4.6 Influenza del numero di celle elementari considerate

In questa sezione si vuole analizzare in che modo il numero di celle elementari che si utilizzano influenza i risultati ricavati in termini di perdite di carico e scambio termico. Per questa analisi si utilizzeranno entrambi i modelli geometrici descritti in precedenza per evidenziare alcune differenze sostanziali che sussistono tra i due tipi di approcci.

Le simulazioni condotte in questa sezione saranno di tipo incomprimibile e riguarderanno non più una singola cella ma un reticolo di celle, in particolare si effettueranno simulazioni con matrici aventi dalle 4 alle 20 celle elementari. In figura 4.16 sono riportati i risultati in termini di $\Delta p/N_s$ per i due modelli geometrici testati.

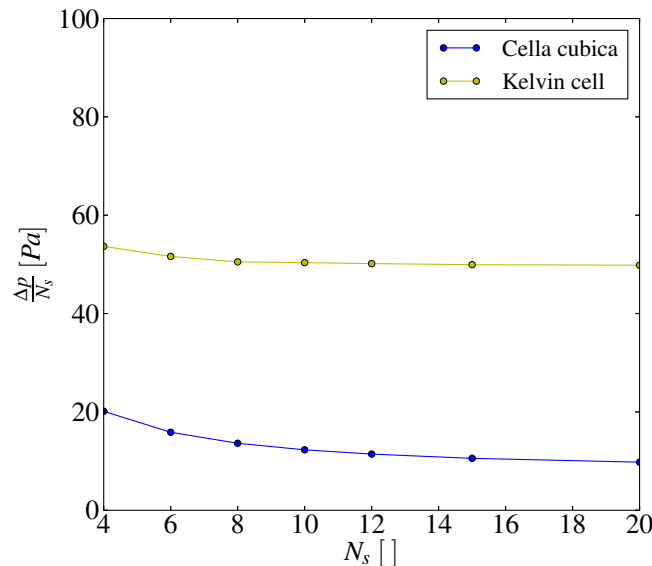


Figura 4.16: Influenza del numero di celle elementari considerato

Per entrambi i modelli geometrici si può vedere come il $\Delta p/N_s$ sia influenzato dal numero di celle elementari quando questo è basso, all'aumentare del numero di celle però il $\Delta p/N_s$ tende a mantenersi costante questo per il fatto che il flusso si è ormai stabilizzato e quando la lunghezza diventa sufficientemente elevata gli effetti di perdita in ingresso ed in uscita diventano meno rilevanti.

La differenza sostanziale che si può osservare tra il comportamento delle due tipologie di modelli geometrici analizzati riguarda appunto il numero di celle unitarie dopo il quale il flusso può essere considerato stabilizzato.

Nel caso di un modello a cella cubica si può osservare come tale numero risulti molto elevato (più di 20). Ciò è in disaccordo con le simulazioni condotte su geometrie reali [5], in quanto in tal caso risulta essere necessario un numero di celle elementari nettamente inferiore (già dopo 4).

Utilizzando invece un modello geometrico *Kelvin cell* l'andamento è molto simile, anche se traslato verso l'alto, ma si può notare come tale numero sia molto più limitato (dopo circa 6), in linea con il caso reale.

Per le spiegazioni riguardo tali fenomeni si rimanda al Cap. 6 nel quale verrà discusso quale dei due modelli riproduce meglio la i test sperimentali.

Capitolo 5

Verifica dei limiti di validità dell'ipotesi del continuo

In fisica, un corpo materiale può essere studiato come un corpo discreto, in quanto costituito da particelle elementari distinte le une dalle altre, oppure come un corpo continuo, in quanto il numero elevatissimo, la coesione e l'interdipendenza tra queste particelle fanno sparire qualsiasi granularità, almeno a livello macroscopico.

In genere, come visto al Cap. 2, il flussaggio attraverso microcanali è modellato utilizzando l'ipotesi del continuo, tale approccio applicato al caso macroscopico permette di risolvere le proprietà (variabili dipendenti) in funzione delle coordinate spaziali (variabili indipendenti).

Quando la lunghezza di scala del sistema fisico decresce, la validità dell'approccio continuo con la condizione al bordo di non slittamento può però venire meno.

Un parametro che può essere valutato per determinare se l'approccio continuo è valido o meno per descrivere il problema in esame è il numero di Knudsen Kn . Esso è un parametro adimensionale definito come il rapporto del cammino libero medio delle molecole e la lunghezza di scala macroscopica rappresentativa del sistema fisico.

$$Kn = \frac{\lambda}{\Lambda}$$

dove $\lambda = 16\mu/5\rho\sqrt{2\pi RT}$, utilizzando i risultati di Chapman-Enskog per il coefficiente di viscosità dinamica μ in una sfera solida di gas a temperatura T , e $\Lambda = \rho/\partial\rho/\partial x$, dove ρ è la densità del fluido.

Il numero di Knudsen può anche essere interpretato basandosi sul rapporto tra il numero di Mach $Ma = U/\sqrt{\gamma RT}$ ed il numero di Reynolds $Re = \rho UD/\mu$ come:

$$Kn = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2RT}} \frac{\mu}{\rho D}$$

dove γ è il rapporto tra i calori specifici, U è la velocità del fluido, R è la costante specifica dei gas e D è la dimensione caratteristica del sistema.

Il numero di Knudsen locale misura in definitiva il grado di rarefazione del gas durante il flussaggio attraverso stretti canali, proprio come quelli che si hanno in una schiuma.

Per le normali schiume utilizzate è tale parametro risulta essere sufficientemente piccolo da poter considerare valida l'ipotesi del continuo. Quando però la scala diventa ancora più piccola questo parametro cresce e perciò l'effetto della rarefazione del gas diventa molto pronunciato. In questi casi il comportamento del fluido vicino alla superficie solida è dominato dagli effetti dell'interazione gas-superficie ed eventualmente l'ipotesi del continuo può venir meno.

Ciò che si ci si propone in questo capitolo è di verificare la validità dell'ipotesi continua per le schiume in esame, analizzando per quali scale risulta eventualmente necessario considerare un altro tipo di approccio.

Un approccio alternativo a quello continuo è quello del modello molecolare, il quale discretizza il fluido come un insieme di particelle singole. In questo modello la posizione, e lo stato di ogni particella sono calcolati in modo deterministico o probabilistico ad ogni time step.

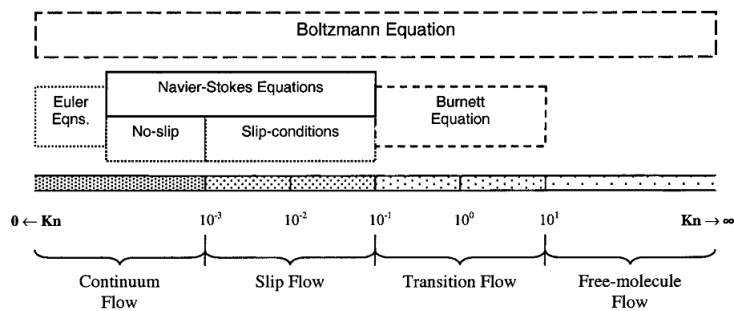


Figura 5.1: Regimi del numero di Knudsen

In Fig. 5.1 sono descritti differenti regimi in dipendenza dal numero di Knudsen e la rispettiva modalità ottimale di trattamento.

Il regime di flusso per $Kn < 0.001$ è conosciuto come regime di *continuum flow*, dove cioè risulta valido l'ipotesi del continuo continuo, ovvero le equazioni di Navier-Stokes con la condizione al bordo di non slittamento governano il flusso.

Nel regime di *slip flow* ($0.001 < Kn < 0.1$) la normale condizione al bordo di no-slip risulta inadeguata a modellizzare il comportamento fluidodinamico, infatti un substrato dell'ordine di un cammino libero medio delle molecole, noto come strato di Knudsen, inizia a diventare dominante all'interfaccia fluido-parete. In generale il flusso, nel Knudsen layer non può

essere analizzato con le classiche equazioni di Navier-Stokes e richiede perciò soluzioni speciali delle equazioni di Boltzmann, mentre fuori dal Knudsen layer le equazioni di Navier-Stokes rimangono ancora valide. Per $Kn < 0.1$ però il Knudsen layer copre meno del 10% dell'altezza del canale, perciò questo substrato può essere trascurato estrapolando perciò la soluzione calcolata fuori dal Knudsen layer fino a parete.

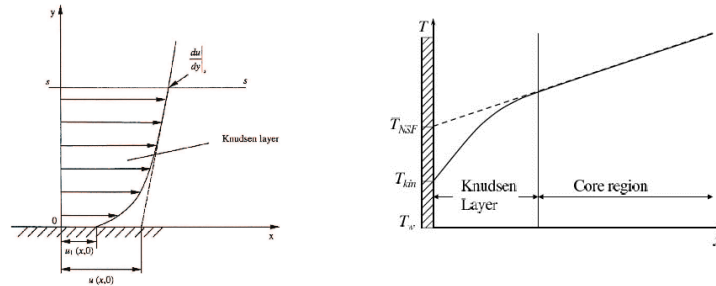


Figura 5.2: Schematizzazione di un metodo del primo ordine

Ciò dà luogo ad una velocità di slittamento a parete, da qui il nome di regime di slip flow. In questo regime il flusso è governato dalle usuali equazioni di Navier-Stokes e, come si può osservare in figura 5.2, l'effetto della rarefazione è modellato attraverso la presenza a parete di una velocità di scorrimento ed un salto di temperatura (Modelli del primo ordine). Risulta perciò necessario utilizzare una nuova condizione al bordo denominata di *slip*, in quanto si considera la possibilità di avere una differenza di velocità tra particelle di fluido adiacenti alla parete e parete stessa.

Nel regime di *transition flow* ($Kn \geq 0.1$) le leggi costitutive che definiscono il tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$ e il vettore flusso termico \vec{q} non sono più valide, è richiesto dunque una correzione di ordine superiore per le leggi costitutive, cosa possibile con le equazioni di Burnett o Woods. È anche possibile utilizzare l'equazione di Boltzmann direttamente, la quale risulta sempre valida a livello macroscopico.

Infine dei casi molto particolari sono i regimi in cui $Kn \rightarrow 0$ ed in cui $Kn \rightarrow \infty$. Per $Kn \rightarrow 0$ si è ancora nel regime di continuum flow, è però possibile fare un'ulteriore semplificazione, infatti in tal caso il tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$ e il vettore flusso termico \vec{q} risultano trascurabili con la conseguente possibilità di applicare la semplificazione di flusso inviscido che dà luogo alle cosiddette equazioni di Eulero, come visto al Cap. 2.

Per quanto riguarda invece il caso in cui $Kn \rightarrow \infty$ questo regime è caratterizzato da molecole completamente libere in cui non sussiste cioè alcuna forza di attrazione fra di esse in quanto l'effetto della rarefazione è preponderante.

5.1 Equazioni

Nella seguente trattazione si prenderanno in considerazione solo i modelli di primo ordine trascurando quelli di ordine superiore, si studieranno perciò solo casi con $Kn < 0.1$. Tali modelli sono applicabili nel cosiddetto regime di slip flow ($0.001 < Kn < 0.1$) e come visto richiedono la presenza a parete di una velocità di scorrimento ed un salto di temperatura tra parete e fluido adiacente alla parete.

Per quanto riguarda la velocità di scorrimento la condizione al bordo utilizzata più frequentemente in questi casi è quella di Maxwell, la quale per un gas ideale è descritta dalla seguente espressione:

$$U_{gas} - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_V}{\sigma_V} \lambda \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_w + \frac{3}{4} \frac{\mu}{\rho T_{gas}} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_w \quad (5.1)$$

La corrispondente relazione che modella il salto termico tra parete e fluido è stata derivata da Von Smoluchowski, ed assume la seguente espressione:

$$T_{gas} - T_{wall} = \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \left[\frac{2\gamma}{\gamma + 1} \right] \frac{\lambda}{P_r} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_w \quad (5.2)$$

Nelle equazioni 5.1 e 5.2 U_{gas} e T_{gas} sono velocità e temperatura del gas adiacente alla parete, mentre U_{wall} e T_{wall} sono velocità e temperatura della parete, P_r rappresenta il numero adimensionale di Prandtl ed infine w denota la condizione a parete.

Il secondo termine dell'equazione 5.1 è conosciuto come *thermal creep* e genera una velocità di slip in direzione opposta all'incremento di temperatura. Le condizioni di slip-wall appena presentate (5.1 e 5.2) fanno uso dei cosiddetti *tangential-momentum accommodation coefficient* σ_V e *thermal accommodation coefficient* σ_T a parete, questi coefficienti indicano la frazione delle molecole riflesse diffusivamente dalla parete

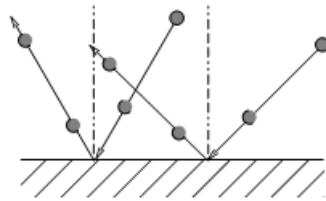


Figura 5.3: Impatto particelle

5.1.1 Il ruolo degli accommodation coefficient

Per modellizzare il trasferimento di momento ed energia tra le molecole di gas e la superficie è necessario conoscere in che modo interagiscono le molecole di gas e la superficie quando vengono a contatto (figura 5.1). Un'analisi dettagliata di questo risulta molto complicata e richiederebbe la conoscenza completa della diffusione delle molecole. Da un punto di vista macroscopico è sufficiente però conoscere dei parametri medi in modo da descrivere qualitativamente l'interazione fluido-parete.

Il *tangential momentum accommodation coefficient* (σ_V) può essere definito nel seguente modo:

$$\sigma_V = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_w} \quad (5.3)$$

dove τ_i e τ_r sono rispettivamente il momento tangenziale delle molecole in ingresso e riflesse, mentre τ_w è il momento tangenziale della superficie ($\tau_w = 0$ per superficie stazionarie).

- Il caso di $\sigma_V = 0$ è chiamato *specular reflection*: in questo caso la velocità tangenziale delle molecole riflesse dalla superficie rimane invariata, ma la loro velocità normale è inversa a causa del momento normale trasferito alla parete. In questi casi non c'è trasferimento di momento tangenziale tra fluido e parete con il risultato di assenza di perdite viscose, ovvero la cosiddetta ipotesi di fluido inviscido.
- il caso di $\sigma_V = 1$ è chiamato *diffuse reflection*: in questo caso le molecole sono riflesse dalla superficie con una velocità tangenziale media nulla in quanto si ha scambio di momento tangenziale del gas con la parete.

Il *thermal accommodation coefficient* (σ_T) può essere definito nel seguente modo:

$$\sigma_T = \frac{dE_i - dE_r}{dE_i - dE_w} \quad (5.4)$$

dove dE_i e dE_r sono rispettivamente il flusso di energia delle molecole in ingresso e riflesse, mentre dE_w è il flusso di energia nel caso tutte le molecole in ingresso venissero respinte con un flusso di energia corrispondente alla temperatura in superficie T_w . Il caso di completo scambio di energia tra molecole e parete corrisponde a $\sigma_T = 1$.

I coefficienti σ_V e σ_T dipendono in generale dalla finitura superficiale, dal fluido utilizzato e dalla pressione locale. Alcuni valori tipici per le combinazioni più comuni di fluido e superficie sono riportati in tabella 5.1.

<i>Gas</i>	<i>Surface</i>	σ_V	σ_T
Aria	Al	$0.87 \div 0.97$	$0.87 \div 0.97$
He	Al		0.073
Aria	Acciaio	$0.87 \div 0.93$	$0.87 \div 0.96$
H2	Acciaio		$0.31 \div 0.55$
Aria	Bronzo	$0.88 \div 0.95$	

Tabella 5.1: Thermal e tangenzial momentum accomodation coefficients per tipiche combinazioni di gas e superfici

5.2 Simulazioni

Nelle normali simulazioni eseguite in questa trattazione si è adottato l'ipotesi del continuo, in quanto come affermato al Cap. 2, la lunghezza caratteristica e la scala temporale coinvolte nelle varie analisi sono considerabili decisamente superiori rispetto a quelle della struttura molecolare della materia. Si è perciò imposto per le pareti solide della schiuma una condizione al bordo di no-slip, in cui la componente normale della velocità si annulla mentre quella tangenziale viene assunta pari alla velocità che ha la parete solida. Ci si propone in questa sezione di verificare ai fini della valutazione delle perdite di carico tale ipotesi, scalando perciò la geometria per capire come varia il Δp al variare del Kn e quando nasce l'esigenza di adottare il nuovo tipo di approccio. Per fare ciò è necessario innanzitutto implementare in OpenFOAM le condizioni al contorno presentate nella sezione precedente e scalare la geometria di partenza. Il campione che si è scelto di prendere in considerazione è quello denominato come *A*, il quale viene riprodotto utilizzando un modello a cella cubica. Le simulazioni che si effettueranno saranno di flussaggio considerando un reticolo composto da 5 celle e saranno di tipo incompressibile. La velocità in ingresso è di 11 m/s . I parametri geometrici e la valutazione del Kn per i casi testati sono riportati in tabella 5.2.

I risultati ottenuti sono mostrati in figura 5.4, si può osservare come finché $Kn < 0.001$ non si ha alcuna differenza nell'utilizzare l'una o l'altra condizione al bordo. Passando però a $Kn > 0.001$ si vede come i risultati si scostino sempre più all'aumentare di Kn , in particolare si otterrebbe una sovrastima delle perdite di carico adottando una condizione di non slittamento.

<i>Mesh</i>	<i>Fattore scala</i>	L_c [m]	d_s [m]	Kn []
Base	1	4.3×10^{-3}	0.66×10^{-3}	7.52×10^{-5}
Ridotta 1	0.1	4.3×10^{-4}	0.66×10^{-4}	7.52×10^{-4}
Ridotta 2	0.01	4.3×10^{-5}	0.66×10^{-5}	7.52×10^{-3}
Ridotta 3	0.005	2.15×10^{-5}	0.33×10^{-5}	1.50×10^{-2}
Ridotta 4	0.001	4.3×10^{-6}	0.66×10^{-6}	7.52×10^{-2}

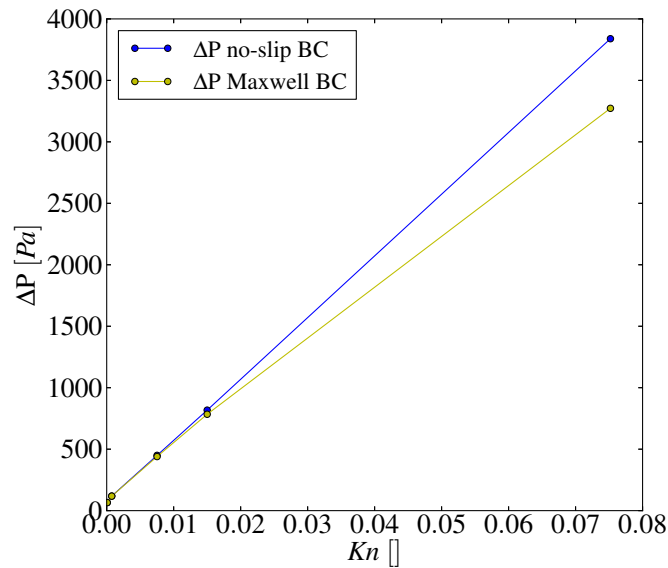
Tabella 5.2: Parametri geometrici e valutazione Kn per le mesh utilizzate

Figura 5.4: Effetto della condizione al bordo di Maxwell

La schiuma di partenza, come riportato in tabella 5.2, si trova pienamente in un regime di *continuum flow*, ciò giustifica la scelta di adottare all'inizio della trattazione l'approccio continuo.

È dunque corretto utilizzare le equazioni di Navier-Stokes con una condizione di non slittamento sulle pareti per descrivere il problema in questione. Inoltre si fa notare come questa ipotesi possa essere ritenuta valida anche nel caso dell'analisi di schiume ad elevata densità di poro: infatti la transizione al regime di *slip flow* avviene in corrispondenza di una densità di poro di 500-1000 ppi, ben più alta della massima densità di poro delle schiume di interesse industriale (10-100 ppi).

Capitolo 6

Analisi delle perdite di carico

Lo scopo di questo capitolo è quello di trovare un modello valido per caratterizzare, attraverso un'analisi CFD, le perdite di carico che si hanno durante l'attraversamento di una schiuma. Si farà dunque riferimento a dati sperimentali disponibili in letteratura e si analizzerà il modello geometrico più adeguato per riprodurre il comportamento di una schiuma dal punto di vista puramente fluidodinamico, ovvero senza considerare la presenza di un substrato attivo che dia luogo a reazioni chimiche. Si analizzeranno poi quali sono i parametri caratteristici principali di una schiuma che influenzano le perdite di carico e si cercherà in questo modo di correggere eventualmente il modello geometrico di base per avvicinarsi il più possibile a riprodurre dati sperimentali.

6.1 Prove sperimentali

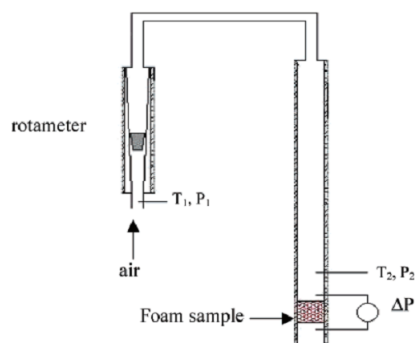


Figura 6.1: Schema dell'impianto per i test sperimentali

Le prove sperimentali disponibili in letteratura [13] per la misura delle perdite di carico sono state eseguite nell'apparecchiatura sopra schematiz-

zata (Fig. 6.1). Le schiume metalliche usate per questi test consistono in cilindri con un diametro di 75 mm e spessore di $50 \div 75\text{ mm}$ dei campioni indicati come B , C , D ed F .

Essi sono posti all'interno di un condotto e le perdite di carico generate dal flusso di aria che li attraversa sono state misurate con un manometro differenziale. La portata volumetrica di aria è stata misurata con un flussimetro ad area variabile, mentre la portata massica è stata calcolata per la temperatura T_1 e pressione p_1 . La temperatura T_2 e la pressione p_2 sono state usate per calcolare la velocità dell'aria all'ingresso dei campioni, tale velocità nei test effettuati varia in un range di $1 \div 16\text{ m/s}$. Le misurazioni sperimentali fornite sono espresse come gradiente di pressione, ovvero $\Delta p/L$ in funzione della velocità misurata all'ingresso del campione in esame.

6.2 Simulazioni dei test sperimentali

Per simulare il comportamento di una schiuma ci si è proposti di analizzare due diversi modelli geometrici per riprodurre il reticolo di una schiuma reale: il primo, modello a cella cubica, si visto come sia molto semplice e facilmente riproducibile conoscendo i parametri geometrici della schiuma reale che si vuole riprodurre, ma probabilmente non riproduce al meglio la struttura. Il secondo, modello *Kelvin cell*, si è visto come sia molto più difficilmente configurabile ma consente di riprodurre molto più fedelmente le caratteristiche geometriche di una schiuma reale, in particolare la superficie specifica che come vedremo è un parametro molto significativo e di notevole importanza sia nel caso dello studio delle perdite di carico che ancor di più nel caso dello studio delle reazioni chimiche.

Per determinare quale modello riproduca al meglio i risultati sperimentali ottenuti con le prove presentate nella sezione precedente e quanto sia eventualmente lo scostamento, si effettueranno delle simulazioni di flussaggio al variare della velocità in ingresso.

Il campione scelto per queste prove è quello denominato con la lettera F in quanto per questo è disponibile anche la geometria della struttura ottenuta tramite tomografia della schiuma reale.

In questo modo è stato possibile validare dapprima il codice CFD utilizzando la geometria reale e successivamente utilizzare i modelli per avere una previsione dei risultati a prescindere dall'aver o meno a disposizione la geometria reale della schiuma.

La lunghezza L scelta per riprodurre il reticolo del campione F è di circa 28 mm , in quanto questa è lo spessore che risulta utilizzando 6 celle elementari. Ciò risulta in disaccordo con gli spessori utilizzati durante i test sperimentali dove tali valori erano decisamente superiori, nel caso di modello

Kelvin cell questo però non risulta affatto influente sui risultati in quanto come visto al Cap. 4 dopo circa 6 celle è possibile considerare il flusso praticamente stabilizzato e dunque esprimendo i risultati in termini di $\Delta p/L$ ed utilizzando un reticolo di appunto almeno 6 celle tale assunzione non incide in alcun modo sull'analisi.

Diversa è invece la situazione per quanto riguarda il modello a cella cubica, infatti utilizzando tale modello si è visto dalle simulazioni effettuate come si renda necessario l'utilizzo di una notevole quantità di celle unitarie. E' necessario perciò tenere conto che il valore stimato sarà sovrastimato rispetto a quello che si otterrebbe utilizzando uno spessore pari a quello dei campioni reali.

I risultati delle simulazioni sul campione F ottenuti utilizzando diversi modelli geometrici ed utilizzando la geometria reale sono mostrati in figura 6.2.

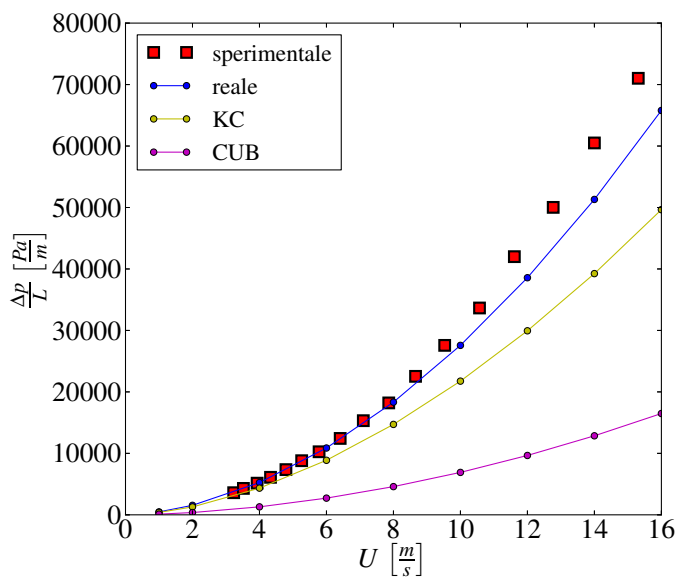


Figura 6.2: Gradiente di pressione sul campione F in funzione della velocità in ingresso

Riguardo le simulazioni sul campione reale si può evidenziare come i risultati fornite da queste seguano molto da vicino i dati sperimentali, anche si si possono osservare una leggera sottostima dei valori.

Tale differenza può essere imputata alla diversa direzione di flussaggio del campione, ovvero avendo utilizzato per le queste prove un sample anisotropo le perdite di carico varieranno a seconda della direzione di flussaggio considerata.

Per verificare ciò si è deciso di estrarre una porzione della geometria in questione e su questa eseguire tre diversi flussaggi lungo le tre direzioni del cubetto come mostrato in Fig. 6.3.

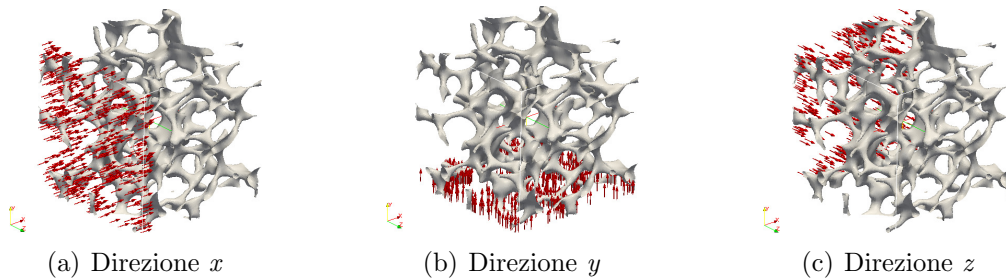


Figura 6.3: flussaggio cubetto

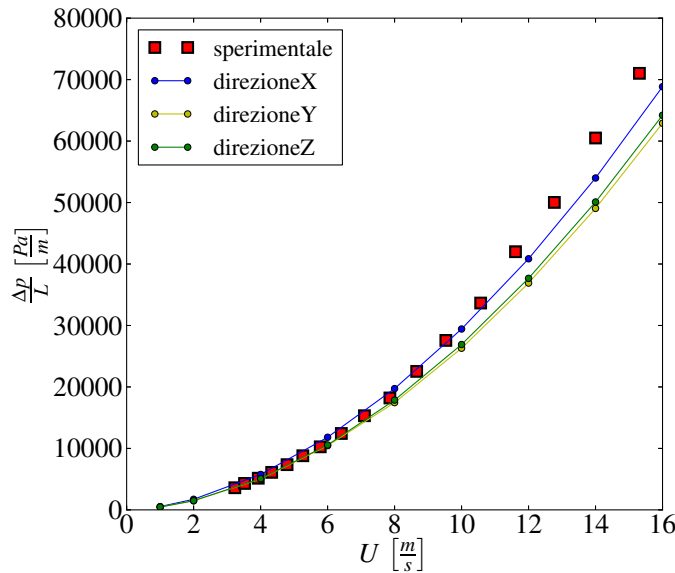


Figura 6.4: gradiente di pressione flussaggio cubetto

I risultati dell'analisi (Fig. 6.4) mostrano come sia evidente che la direzione del campione utilizzata per la simulazione (z) non coincida con quella utilizzata dalle prove sperimentali in quanto nella direzione utilizzata le perdite di carico risultano inferiori rispetto a quelle misurate in direzione x . Le perdite in direzione y risultano invece pressoché identiche a quelle misurate in direzione z in quanto la struttura si presenta pressoché identiche nelle due direzioni. Grazie ai risultati ottenuti e a queste considerazioni si può perciò affermare che le simulazioni CFD sulla geometria reale del campione F sono rappresentative del reale comportamento fluidodinamico.

Per quanto riguarda le simulazioni sulla struttura modellata si può osservare come i risultati forniti dal modello *Kelvin cell* siano molto più vicini ai dati sperimentali di quanto lo siano quelli del modello a cella cubica.

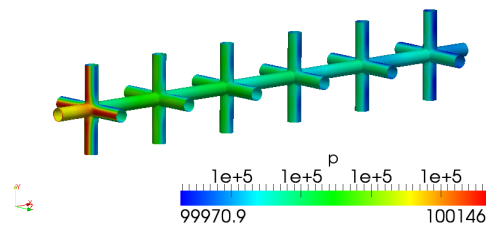
Le motivazioni di questa notevole differenza sono da ricercarsi in primis nella diversa stima che i due modelli fanno della superficie specifica, ovvero, a parità di volume, della superficie bagnata dal fluido. Misurando infatti sulla geometria reale la S_V , grazie ad un'utility implementata in OpenFoam, si ottiene un valore di $760 \text{ m}^2/\text{m}^3$; come riportato precedentemente nelle tabelle 4.1 e 4.2, la S_V stimata con i modelli a cella cubica e *Kelvin cell* risultava essere rispettivamente di $449 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e $555.2 \text{ m}^2/\text{m}^3$. Si ha dunque in entrambi i casi una sottostima della superficie specifica, con il modello a cella cubica che risulta il più penalizzato tra i due. Questa differenza influisce in particolare sulle perdite di tipo viscoso che subisce il fluido durante l'attraversamento, per cui entrambi i modelli danno un valore sottostimato delle perdite a causa della minor superficie a contatto con il fluido. In particolare il modello a cella cubica risulta, come da previsioni, il più distante dai dati sperimentali, mentre il modello *Kelvin cell*, riproducendo meglio il parametro S_V della schiuma, risulta decisamente più rappresentativo.

Una seconda motivazione è di tipo fluidodinamico, infatti la geometria di un modello a cella cubica risulta troppo regolare perciò le varie celle elementari che compongono la struttura complessiva vedono un flusso completamente disturbato da quella precedente. Nella geometria reale invece è come se ogni cella si trovasse in sostanza nelle stesse condizioni della prima perché, essendo la geometria irregolare, il flusso che impattata sui filamenti di una cella viene deviato ma la successiva cella, che si presenta non allineata con quella precedente, vede impattare sui propri filamenti un flusso simile a quello delle precedenti, causando così maggiori perdite.

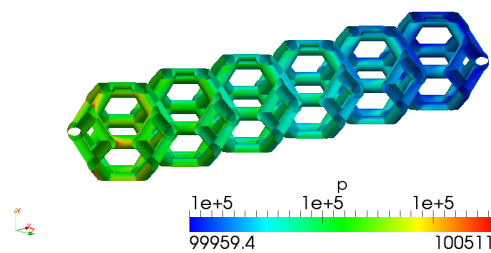
Questa situazione può essere osservata in figura 6.5 dove si riportano le pressioni che agiscono sulla struttura della schiuma nei tre diversi casi.

Come si può osservare nel modello cubico (Fig. 6.5(a)) i filamenti della prima cella elementare risultano essere fortemente sollecitati, mentre quelli delle altre sono in contatto con un flusso disturbato caratterizzato da ricircoli e dunque non causano ulteriori perdite di carico.

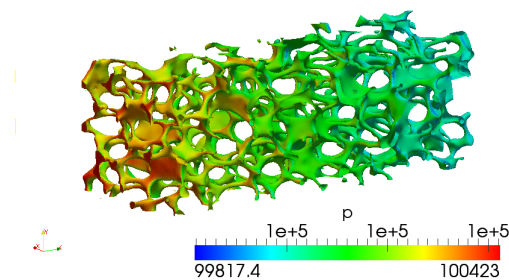
Utilizzando invece un modello *Kelvin cell* (Fig. 6.5(b)) si ha una situazione molto simile a quella reale (Fig. 6.5(c)), in cui tutti filamenti delle varie celle elementari vedono una sollecitazione pressoché uguale a parte quelli della prima in cui si hanno delle leggere sovrappressioni dovute agli effetti delle perdite concentrate in ingresso.



(a) Modello a cella cubica



(b) Modello kelvin cell



(c) Geometria reale

Figura 6.5: Pressione che agisce sulla sulla struttura della schiuma

Nel seguito sono riportate le immagini dei campi delle principali grandezze ottenuti dalle simulazioni. Si può in particolare osservare come ad esempio il campo di velocità sia molto disuniforme nel caso di utilizzo di un modello a cella cubica, infatti la maggior parte della portata passa nelle zone prive di struttura solida (Fig. 6.8) e perciò questo causa una pesante sottostima delle perdite di carico. Il modello *Kelvin cell* risulta invece molto più vicino alle condizioni reali in quanto il flusso risulta sin da subito più uniforme, e di conseguenza il valore stimato delle perdite di carico risulta essere notevolmente più prossimo a quello sperimentale.

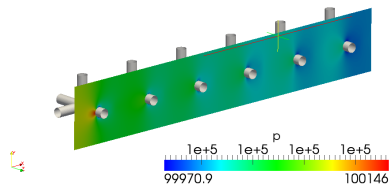


Figura 6.6: Campo di pressione utilizzando un modello a cella cubica

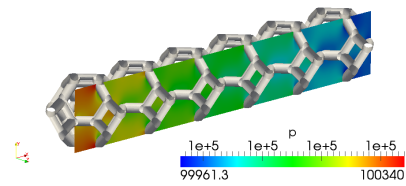


Figura 6.7: Campo di pressione utilizzando un modello Kelvin cell

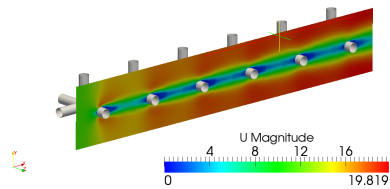


Figura 6.8: Campo di velocità utilizzando un modello a cella cubica

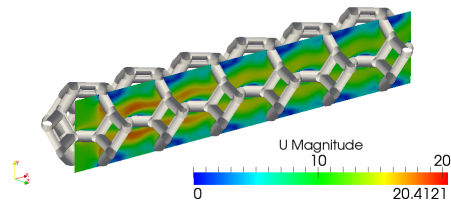


Figura 6.9: Campo di velocità utilizzando un modello Kelvin cell

Il modello geometrico *Kelvin cell* risulta in conclusione preferibile perché molto più rappresentativo della reale struttura di una schiuma riuscendo così a riprodurre più fedelmente il reale comportamento fluidodinamico. Il modello geometrico a cella cubica nonostante queste limitazioni risulta comunque utile perché come visto riproduce adeguatamente l'andamento, anche se sottostima il valore, e dunque può essere usato per analisi preliminari su varie tipologie di schiume aventi differenti caratteristiche.

6.3 Parametri geometrici più importanti e correzione del modello geometrico

Scegliendo di adottare un modello geometrico *Kelvin cell* per riprodurre la struttura di una schiuma si vuole ora capire quali tra i parametri caratteristici elencati al Cap. 1 influisce maggiormente sulle perdite di carico. Per effettuare questa analisi si cercherà dunque di trovare un modello che descriva le perdite di carico ottenute durante l'attraversamento di una schiuma riprodotta utilizzando celle elementari di tipo *Kelvin cell*, il quale, come visto nella sezione precedente, è il modello geometrico che fornisce i migliori risultati.

6.3.1 Modellazione delle perdite di carico per individuare i parametri geometrici più rilevanti

Analizzando i modelli proposti in letteratura [14] è possibile capire come i parametri fondamentali che influenzano le perdite di carico in una schiuma siano la superficie specifica e la porosità.

Il punto di partenza è l'assunzione che in una singola cella elementare il gradiente di pressione è dato dalla cosiddetta "drag force" F_D totale divisa per il volume del fluido V_0 . Considerando che $V_0 = \epsilon L_c^3$:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{F_D}{\epsilon L_c^3} \quad (6.1)$$

A questo punto è possibile definire un coefficiente di drag C_D come:

$$F_D = C_D \frac{\rho U_p^2}{2} A_w \quad (6.2)$$

dove ρ è la densità del fluido, U_p è la velocità media del fluido all'interno del poro e A_w è la superficie bagnata.

Un'espressione per la velocità media nel poro può essere derivata da una semplice considerazione sulla conservazione della portata: assumendo un flusso incomprimibile, la portata all'interno di una struttura kelvin cell è data da $U_p A_p$, dove A_p è l'area trasversale della cella attraversata da fluido. La portata volumetrica all'ingresso della cella può essere al contempo espressa come $U L_c^2$, perciò si può dire che:

$$U_p = \epsilon \frac{U L_c^2}{A_p} \quad (6.3)$$

Si introdurrà ora il concetto di tortuosità (χ) come il rapporto tra l'effettivo percorso della linea di flusso e le lunghezza longitudinale. Per un mezzo poroso la tortuosità è stata definita da DuPlessis et al. [7] e può essere espressa come:

$$\chi = \frac{\epsilon L_c^2}{A_p} \quad (6.4)$$

Usando la tortuosità, U_p è data da:

$$U_p = U \frac{\chi}{\epsilon} \quad (6.5)$$

Infine combinando le equazioni precedenti e ricordando che $S_V = \frac{A_w}{L_c^3}$ si ottiene che:

$$\frac{dp}{dx} = S_V \frac{\rho U^2 \chi^2}{2 \epsilon^3} C_D \quad (6.6)$$

Attraverso questa semplice analisi è possibile capire quali siano le grandezze geometriche che influenzano maggiormente la fluidodinamica del problema. Si può osservare come esista una proporzionalità diretta tra perdite di carico e superficie specifica, mentre ci sia una proporzionalità inversa con la porosità.

6.3.2 Correzione del modello geometrico

Per ottenere un modello corretto che stimi con maggior accuratezza le perdite di carico è necessario perciò che i parametri caratteristici di una schiuma esattamente riprodotti con il modello geometrico siano la porosità e la superficie specifica e non più porosità e dimensione di cella. Si propone dunque di correggere i parametri geometrici di entrambi i modelli considerando come variabili indipendenti appunto la porosità e la superficie specifica, mentre adottare come variabili dipendenti la dimensione di cella e il diametro della struct.

Per fare ciò è necessario conoscere in primis il valore misurato sperimentalmente della superficie specifica e successivamente invertire le relazioni geometriche proposte al Cap. 4 che legano tra loro queste quattro grandezze.

Riguardo la conoscenza del valore reale della superficie specifica, questo è stata possibile ottenerla direttamente dalla geometria della schiuma reale attraverso un utility implementata in *OpenFOAM* che fornisce appunto la misura di tutti i parametri caratteristici, è necessario però avere a disposizione tali modelli geometrici ottenuti tramite tomografia.

Per quanto concerne invece l'inversione delle relazioni proposte al Cap. 4 queste diventeranno delle equazioni di secondo grado (avente due coppie di soluzioni) nel caso del modello a cella cubica, mentre si avrà un'equazione di terzo grado (avente tre coppie di soluzioni) nel caso di modello a cella cubica. In ogni caso una sola delle combinazioni di valori di L_c e d_s ottenute sarà fisicamente realizzabile e dunque saranno assunti come parametri geometrici del modello. I nuovi parametri geometrici e i parametri caratteristici stimati da entrambi i modelli geometrici per il campione F sono riportati nelle tabelle 6.1 e 6.2.

Dai dati è possibile osservare che sia nel caso di modello a cella cubica che nel caso di modello *Kelvin cell* per avere un modello che riproduca fedelmente la porosità e la superficie specifica della schiuma reale è necessario assumere una dimensione di cella inferiore a quella misurata sperimentalmente.

Utilizzando i parametri geometrici calcolati per realizzare le nuove griglie di calcolo e ripetendo nuovamente le simulazioni eseguite nella sezione precedente sulle nuove mesh, si ottengono i risultati mostrati in figura 6.10.

Campione	ϵ [%]	S_V [m^2/m^3]	L_c [m]	d_s [m]
F	91.1	760.6	2.41×10^{-3}	0.468×10^{-3}

Tabella 6.1: Parametri caratteristici e geometrici corretti del campione F utilizzando il modello a cella cubica

Campione	ϵ [%]	S_V [m^2/m^3]	L_c [m]	d_s [m]
F	91.1	760.6	3.37×10^{-3}	0.421×10^{-3}

Tabella 6.2: Parametri caratteristici e geometrici corretti del campione F utilizzando il modello Kelvin cell

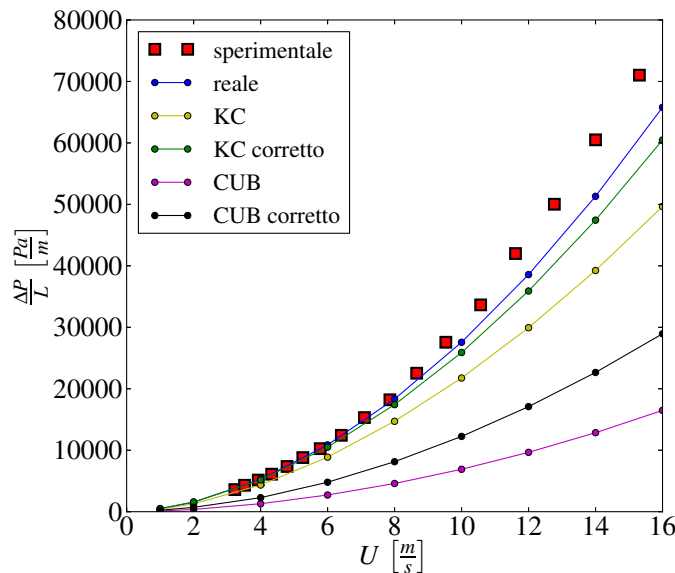


Figura 6.10: gradiente di pressione campione F corretto

I risultati mostrano in entrambi i casi, ma specie per il modello *Kelvin cell*, un notevole avvicinamento ai risultati della simulazione sulla geometria reale e di conseguenza ai dati ricavati dai test sperimentali. Questo approccio risulta sicuramente migliorare l'affidabilità nello stimare le perdite di carico, ma è legato alla conoscenza della superficie specifica reale della schiuma, cosa che in questo caso è stata ricavata per misurazione diretta sulla geometria ottenuta tramite tomografia del campione reale, ma che in generale è di difficile misurazione diretta.

6.4 Applicazione della legge di Darcy-Forchheimer

In letteratura spesso le schiume e i materiali porosi in generale vengono studiate utilizzando un approccio basato sull'equazione di Darcy-Forchheimer.

La legge di Darcy descrive il moto di un fluido in un mezzo poroso saturo nel caso in cui non esistano interazioni chimico-fisiche fra fase solida e fase fluida ed il moto sia laminare ($Re \ll 1$):

$$-\nabla p = \mu dU \quad (6.7)$$

dove μ è la viscosità del fluido, U la velocità e d la costante di darcy.

Il fluido però come nel nostro caso non è in regime laminare e quindi la legge di Darcy non è sufficiente.

Per far fronte a questo uno scienziato austriaco Philip Forchheimer intraprese degli studi su flussi attraverso mezzi porosi, in regime turbolento ($Re > 1$). Egli osservò che all'aumentare della velocità del flusso questo iniziava ad essere dominato da effetti inerziali. Al fine di tenere conto di tutto ciò inserì nell'equazione di Darcy un termine inerziale (detto "non-Darcy").

L'equazione di Darcy-Forchheimer viene perciò così definita:

$$-\nabla p = \left(\mu dU + \frac{1}{2} f \rho U^2 \right) \quad (6.8)$$

dove f è il coefficiente di Forchheimer e ρ la densità del fluido.

In forma vettoriale la relazione assume la seguente espressione:

$$-\nabla p = \left(\mu dU + \frac{1}{2} f \rho |U| \right) U \quad (6.9)$$

Fissata una certa velocità, l'equazione di Darcy-Forchheimer stimerà perciò una perdita di carico che sarà maggiore di quella prevista dalla legge di Darcy, o viceversa fissato un certo gradiente di pressione la velocità che il fluido raggiunge sarà più bassa.

Per ricavare i parametri d ed f dell'equazione di Darcy-Forchheimer è necessario avere a disposizione i valori di Δp al variare della velocità in ingresso U . A questo punto riportando in un grafico il valore di $\Delta p/(LU)$ in funzione di U si otterrà una retta la cui intercetta (A) e pendenza (B), questi ultimi consentono di ottenere i coefficienti d ed f nel seguente modo:

$$d = \frac{A}{\mu} \quad (6.10)$$

$$f = \frac{2B}{\rho} \quad (6.11)$$

Ciò che si vuole valutare è la possibilità di utilizzare effettivamente tale legge e che risultati fornisce nel caso delle schiume, verificando inoltre come varia la stima dei coefficienti al variare del modello geometrico utilizzato per riprodurre la reale struttura. In figura 6.4 è riportato l'andamento di $\Delta p/(LU)$ in funzione della velocità in ingresso U per il campione F riprodotto utilizzando i diversi modelli ed applicando le relative correzioni viste nella sezione precedente.

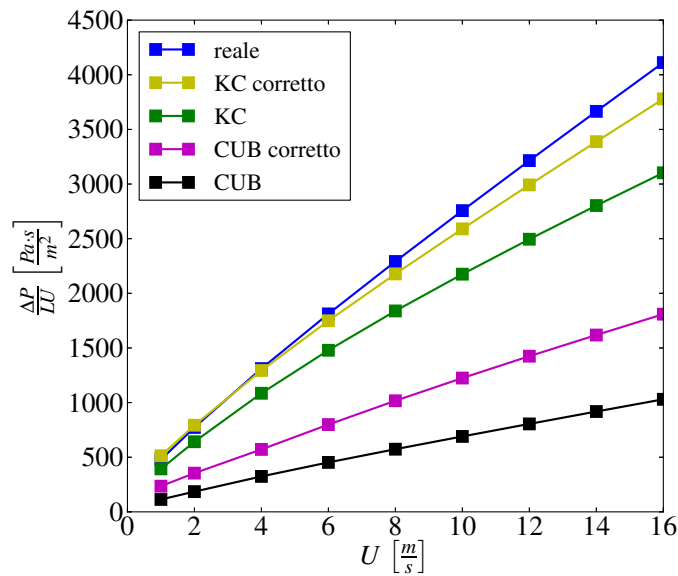


Figura 6.11: Legge di Darcy-Forchheimer applicata al campione F

Come si può osservare, per tutte le velocità testate si è sempre in un regime di Darcy-Forchheimer in quanto le rette risultano avere sempre una determinata pendenza. Ciò significa che si ha sempre un effetto dovuto all'inerzia in cui però il parametro f stimato risulta diverso in funzione della velocità in ingresso considerata. Esiste infatti una velocità in cui le varie curve cambiano la loro pendenza, a destra di tale velocità si è in un regime di flusso puramente turbolento in cui gli effetti inerziali sono molto rilevanti, mentre a sinistra il flusso è ancora turbolento ma gli effetti inerziali sono meno preponderanti rispetto a quelli viscosi.

Per quanto riguarda il coefficiente di Darcy d questo risulta essere sostanzialmente funzione della superficie a contatto con il fluido e perciò della S_V . Si vede infatti come il valore delle intercette delle varie rette tenda sempre più a quello della geometria reale al migliorare dell'accuratezza con cui il modello geometrico stima appunto la superficie specifica, specie quando si utilizza un modello *Kelvin cell* a cui è stata applicata la correzione proposta.

In conclusione la correzione proposta consente una stima accurata del coefficiente di Darcy (d), legato alle perdite viscose, mentre fornisce una previsione comunque più accurata del coefficiente di Forchheimer (f), legato agli effetti inerziali, che però risulta ancora leggermente sottostimato rispetto alla realtà.

L'equazione di Darcy-Forchheimer risulta quindi adatta a modellare dal punto di vista macroscopico il problema e verrà utilizzata nel proseguo nell'ambito dell'approccio definito "macro" che verrà presentato nel proseguo al Cap. 9.

6.5 Validazione della correzione proposta

Ci si propone ora di generalizzare l'approccio presentato nella Sez. 6.3.2 per correggere i modelli geometrici, trovando cioè un modo generale per stimare qualitativamente la superficie specifica di una schiuma reale a partire dai parametri caratteristici di più facile misurazione, ovvero L_c e ϵ .

Per fare ciò è possibile utilizzare le correlazioni proposte da diversi autori (ad esempio [15]), oppure in maniera più semplice trovando sperimentalmente un valore percentuale di quanto è necessario correggere in media la superficie specifica stimata attraverso l'adozione del modello Kelvin cell descritto al Cap. 4, partendo dalla conoscenza delle misure sperimentali di L_c ed ϵ .

In questa trattazione si adotterà il secondo approccio, in quanto esistono svariate correlazioni che tra loro sono in netto disaccordo e dunque si è scelto di trovare un valore sperimentale che sia significativo perlomeno da un punto di vista qualitativo.

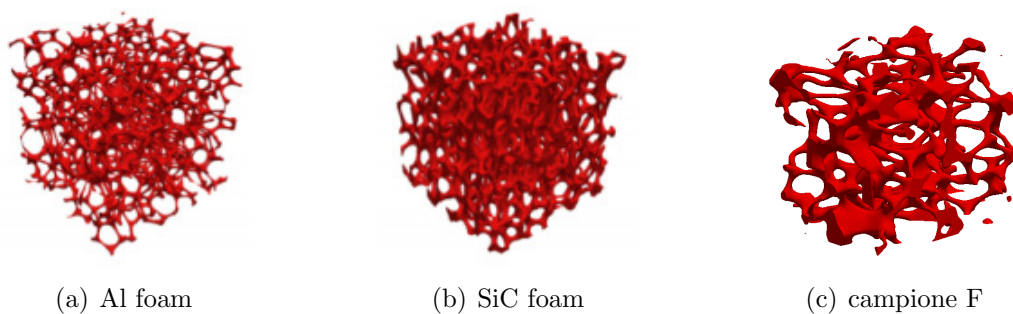


Figura 6.12: Strutture 3D riprodotte

Quello che si farà è dunque confrontare i valori della superficie specifica misurata sperimentalmente con quelli stimati utilizzando il modello *Kelvin cell* presentato al Cap. 4 per tre campioni di schiuma di cui è a disposizione anche la struttura reale e attraverso questa analisi trovare un

valore correttivo medio per il valore stimato.

I campioni disponibili per l'analisi sono costituiti da tre diverse geometrie ottenute tramite tomografia dei relativi campioni di schiuma reali di cui si conosce dimensione media di cella e porosità.

Il primo passo sarà dunque quello di creare le mesh di ciascuna geometria e successivamente come, fatto per il caso del campione F , trovare i parametri caratteristici di interesse mancanti attraverso la misurazione diretta con l'utility implementata in OpenFoam. I parametri caratteristici rilevati per ciascuna schiuma esaminata sono riportati in tabella 6.3.

	Al foam	Si-C foam	Campione F
ϵ [%]	96.0	87.0	91.1
S_V [m^2/m^3]	664.6	4053.3	760.6
L_c [m]	3.8×10^{-3}	1.0×10^{-3}	4.6×10^{-3}

Tabella 6.3: Parametri caratteristici misurati sperimentalmente per i campioni reali a disposizione

Se si ragionasse, come solitamente fatto, riproducendo con il modello *Kelvin cell* l'esatto L_c e l'esatta ϵ ed adottando le relazioni del Cap. 4 si stimerebbero i valori di S_V e d_s riportati in tabella 6.4.

Campione	L_c [m]	ϵ [%]	d_s [m]	S_V [m^2/m^3]	S_V/S_{Vcalc}
Al foam	3.8×10^{-3}	96.0	0.34×10^{-3}	435.1	≈ 1.37
Si-C foam	1.0×10^{-3}	87.0	0.15×10^{-3}	2962	≈ 1.37
Campione F	4.6×10^{-3}	91.1	0.57×10^{-3}	555.2	≈ 1.37

Tabella 6.4: Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni stimati utilizzando un modello *Kelvin cell*

Come si può notare, rapportando i valori di S_V misurati sulla geometria reale a quelli stimati si è trovato un valore medio di 1.37 ovvero il modello *Kelvin cell* riprodotto a partire dai valori misurati sperimentalmente di L_C e ϵ stima una S_V che è in media del 37% inferiore a quella reale.

Utilizzando il valore e la modalità appena presenti possiamo ottenere i parametri geometrici e caratteristici corretti per ciascun campione adottando in questa trattazione utilizzando un qualsiasi modello per riprodurre la geometria. Tali valori per i due modelli geometrici presi in esame sono riportati nelle tabelle 6.5 e 6.6.

Campione	ϵ [%]	S_V [m^2/m^3]	L_c [m]	d_s [m]
A	94.5	665.3	2.16×10^{-3}	0.331×10^{-3}
B	92.7	703.6	2.36×10^{-3}	0.415×10^{-3}
C	93.8	1445.1	1.06×10^{-3}	0.172×10^{-3}
D	93.7	1543.3	1.00×10^{-3}	0.163×10^{-3}
E	93.2	1827.4	0.88×10^{-3}	0.149×10^{-3}
F	91.1	760.6	2.41×10^{-3}	0.468×10^{-3}

Tabella 6.5: Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni corretti per un modello a cella cubica

Campione	ϵ [%]	S_V [m^2/m^3]	L_c [m]	d_s [m]
A	94.5	665.3	3.16×10^{-3}	0.304×10^{-3}
B	92.7	703.6	3.36×10^{-3}	0.377×10^{-3}
C	93.8	1445.1	1.53×10^{-3}	0.157×10^{-3}
D	93.7	1543.3	1.44×10^{-3}	0.149×10^{-3}
E	93.2	1827.4	1.26×10^{-3}	0.136×10^{-3}
F	91.1	760.6	3.37×10^{-3}	0.421×10^{-3}

Tabella 6.6: Parametri geometrici e caratteristici dei vari campioni corretti per un modello kelvin cell

6.6 Simulazione sugli altri campioni

Per ottenere una validazione effettiva dell'approccio corretto presentato nella precedente sezione di questo capitolo si effettueranno le simulazioni sui restanti campioni a disposizione di cui si hanno a disposizione i risultati dei test sperimentali utilizzando appunto la correzione descritta in precedenza. Verranno dunque create le nuove mesh utilizzando i dati geometrici di riportati in tabella 6.6 e si effettueranno delle simulazioni di flusso in cui si determinerà il valore di $\Delta p/L$ al variare della velocità in ingresso, allo stesso modo di quanto fatto sul campione *F*.

I risultati di tali simulazioni eseguite sono mostrati in Fig. 6.13.

Il grafico ottenuto mostra come i risultati delle simulazioni seguano da vicino i risultati ottenuti dai test sperimentali per tutti e tre i campioni. Ciò permette di validare ulteriormente il modello e la correzione geometrica proposta.

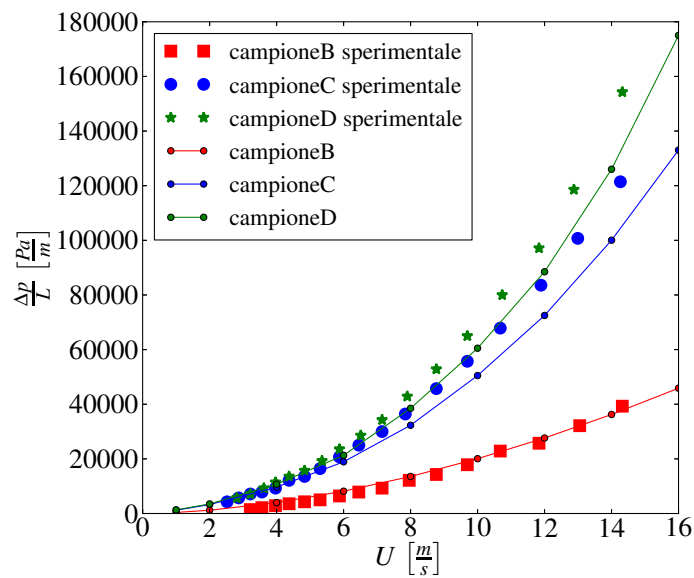


Figura 6.13: Gradiente di pressione al variare della velocità in ingresso per i campioni B, C e D riprodotti utilizzando il modello *Kelvin cell* con la correzione proposta

Capitolo 7

Studio dell'influenza delle diverse forme della struct

Questo capitolo si propone di analizzare l'influenza che hanno sulla termo-fluidodinamica le diverse forme della sezione trasversale dei filamenti che compongono la struttura di una schiuma. Come visto al Cap. 4, la struttura di una schiuma viene modellata solitamente utilizzando filamenti a sezione circolare, questa in genere è la geometria più diffusa all'interno di un reticolo. Talvolta però le schiume possono presentare filamenti di sezione triangolare o quadrata e ciò può avere effetti sulle caratteristiche termo-fluidodinamiche. Per approcciare il problema si sono effettuate delle simulazioni per analizzare come le perdite di carico Δp , lo scambio termico ΔT e il numero di Nusselt Nu sono influenzati dalla tipologia di sezione considerata al variare della velocità in ingresso.

Quando si utilizza un modello geometrico per riprodurre la struttura di una schiuma, la variazione della forma delle sezioni dei filamenti comporta necessariamente la variazione delle proprietà caratteristiche stimate, dunque il confronto tra schiume aventi filamenti di sezioni diverse verrà fatto volta per volta a parità di una delle proprietà caratteristiche, in modo da riprodurre sempre schiume tra loro paragonabili. Le principali proprietà caratteristiche che si considereranno sono:

- dimensione caratteristica del filamento (ingombro)
- superficie bagnata
- porosità (volume)

Considerare sezioni triangolari o quadrate anziché circolari porta inoltre il problema di come orientare la struttura rispetto al flusso. Si cercherà perciò di individuare delle disposizioni che riproducano i principali casi riscontrabili in una schiuma reale.

Per tali ragioni le tipologie sezioni che si confronteranno con quella circolare possono essere riassunte, in funzione della forma e della disposizione rispetto al flusso, secondo tale classificazione:

- sezione quadrata
- sezione rombica
- sezione triangolare

le quali verranno poi volta per volta analizzate a parità di una delle tre proprietà caratteristiche prima citate.

Una rappresentazione di tutte le varie sezioni analizzate è visibile in Fig. 7.1

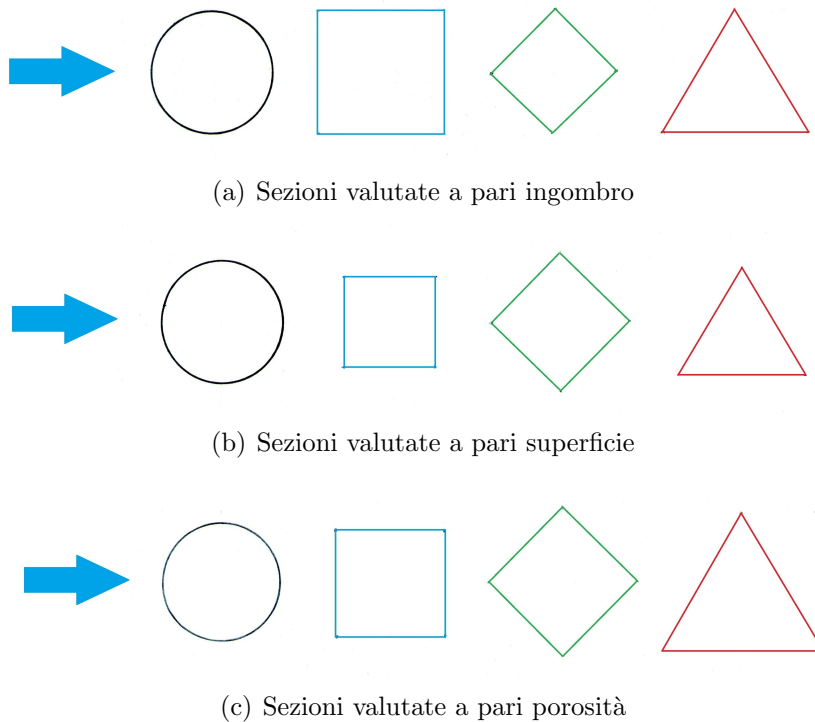


Figura 7.1: Sezioni prese in considerazione

Le simulazioni di flussaggio saranno condotte sul campione di schiuma A riprodotto per semplicità utilizzando un modello geometrico a cella cubica di 6 celle elementari. I risultati saranno validi da un punto di vista qualitativo, mentre per una valutazione dal punto di vista quantitativo sarebbe necessario adottare modelli geometrici più complessi. Il caso sarà infine considerato comprimibile in quanto si è interessati anche a valutare lo scambio termico subito dal fluido durante l'attraversamento.

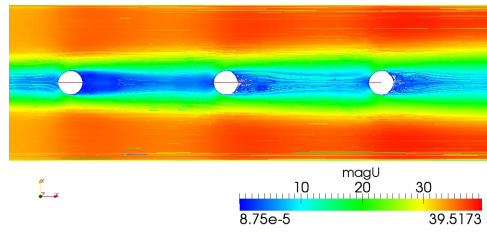


Figura 7.2: Campo di velocità con sezione circolare

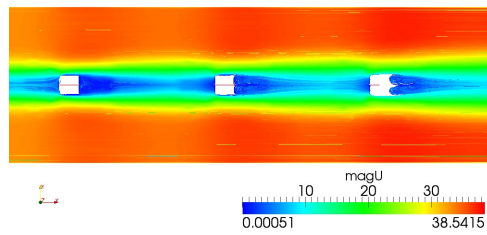


Figura 7.3: Campo di velocità con sezione quadrata

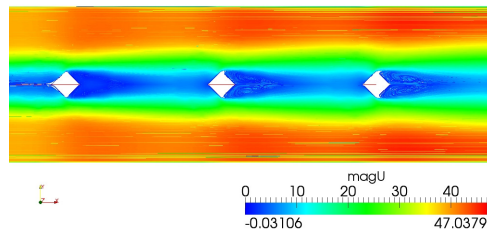


Figura 7.4: Campo di velocità con sezione rombica

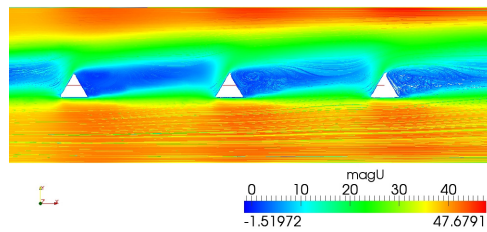


Figura 7.5: Campo di velocità con sezione triangolare

7.1 Confronto dei campi di moto ottenuti

Dall'osservazione dei campi di moto riportati per le varie tipologie di sezione si osserva come in generale il campo di moto osservato nel caso di una sezione triangolare (Fig. 7.5) sia molto disturbato e presenti ampie zone di ricircolo. Ciò è dovuto alla deflessione che subisce il flusso quando incontra una struttura di questo genere che non è simmetrica rispetto alla direzione del flusso. Infatti si può osservare che il flusso viene deviato preferenzialmente in una sola direzione, perciò circa metà della cella (porzione superiore) vede un flusso deviato caratterizzato dalla presenza di scie, mentre l'altra metà (porzione inferiore) vede un flusso che sostanzialmente non viene deflesso. Tale tipologia in linea di massima sarebbe quella che, se si potesse ragionare a parità di tutte le proprietà caratteristiche, darebbe luogo alle maggiori perdite di carico e al maggiore scambio termico in quanto a parità di superficie bagnata si avrebbe una zona di non ristagno superiore.

A differenza della triangolare, le altre tipologie di sezioni sono simmetriche rispetto alla direzione del flusso e dunque daranno luogo a un campo di moto simmetrico con zone di ricircolo limitate alla zona tra due successivi filamenti della struttura.

Per quanto riguarda la differenza tra quadrata e rombica queste sono sostanzialmente la stessa sezione che viene però disposta in maniera diversa per considerare diverse situazioni in cui può trovarsi il flusso che impatta sulla struttura. In generale si può dire che la rombica dà luogo ad un campo di moto maggiormente disturbato dalla presenza della struttura solida in quanto per la sua morfologia è in grado di deviare consistentemente il flusso dalla sua direzione preferenziale. Ciò si traduce in linea di massima in maggiori perdite di carico e maggiore scambio termico rispetto alla sezione quadrata.

Infine la sezione circolare se si potesse ragionare a parità di tutti i parametri caratteristici della schiuma, sarebbe quella che darebbe luogo alle minori perdite di carico e minor scambio termico perché, come si può osservare in Fig. 7.2, è quella che genera la minore zona in cui sono presenti scie.

Come spiegato precedentemente però non è possibile ragionare a parità di tutte le proprietà caratteristiche utilizzando un modello geometrico per riprodurre la struttura e considerando la stessa lunghezza del campione. Perciò sarà necessario volta per volta ragionare a parità di una singola proprietà caratteristica per l'effettiva influenza delle sezione considerate sulle grandezze di interesse.

7.2 Perdite di carico

7.2.1 Analisi a parità di ingombro

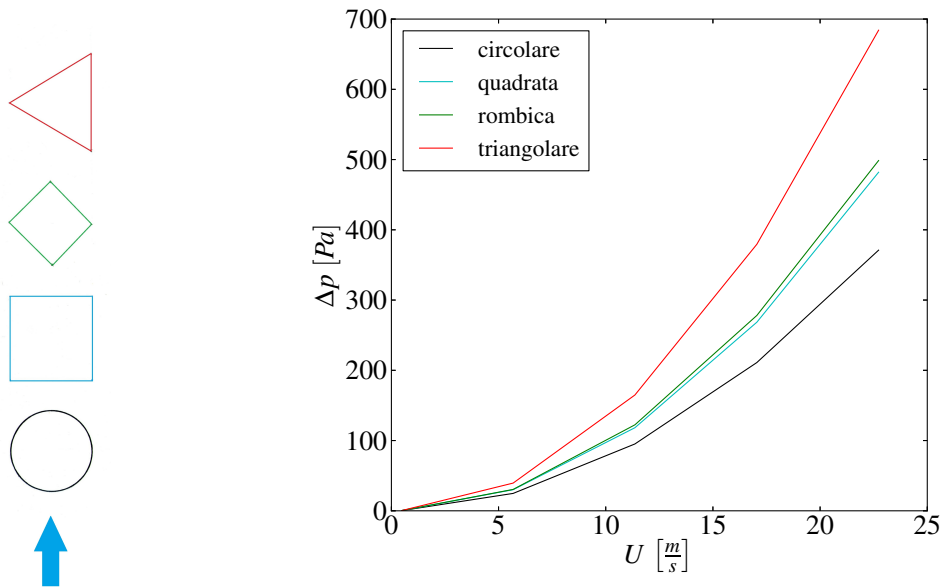


Figura 7.6: Perdita di carico a pari ingombro

Ragionando a pari dimensione caratteristica le sezioni circolare e triangolare sono quelle che danno luogo rispettivamente alle minori e maggiori perdite di carico.

Il comportamento osservato per quanto riguarda le sezioni quadrata e rombica in termini di perdite di carico è intermedio tra le due precedenti, con la rombica che risulta solo leggermente superiore nonostante presenti una porosità e una superficie bagnata inferiori alla quadrata.

7.2.2 Analisi a parità di superficie

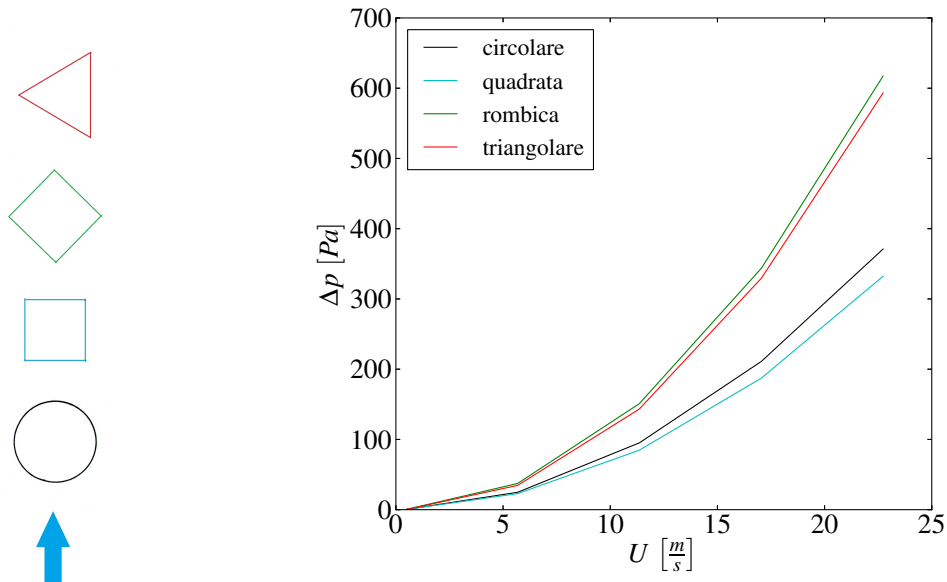


Figura 7.7: Perdita di carico a pari superficie

Ragionando a pari superficie bagnata le sezioni rombica e triangolare sono quelle che danno luogo alle maggiori perdite di carico. Il motivo per cui la sezione triangolare dia perdite leggermente inferiori è da ricercarsi nel fatto che essa, in tal caso, è caratterizzata da una porosità della schiuma superiore a quella della sezione rombica.

Le sezioni circolare e quadrata sono invece quelle che danno le minori perdite, con la circolare che risulta leggermente superiore sempre per la stessa motivazione data in precedenza.

7.2.3 Analisi a parità di porosità

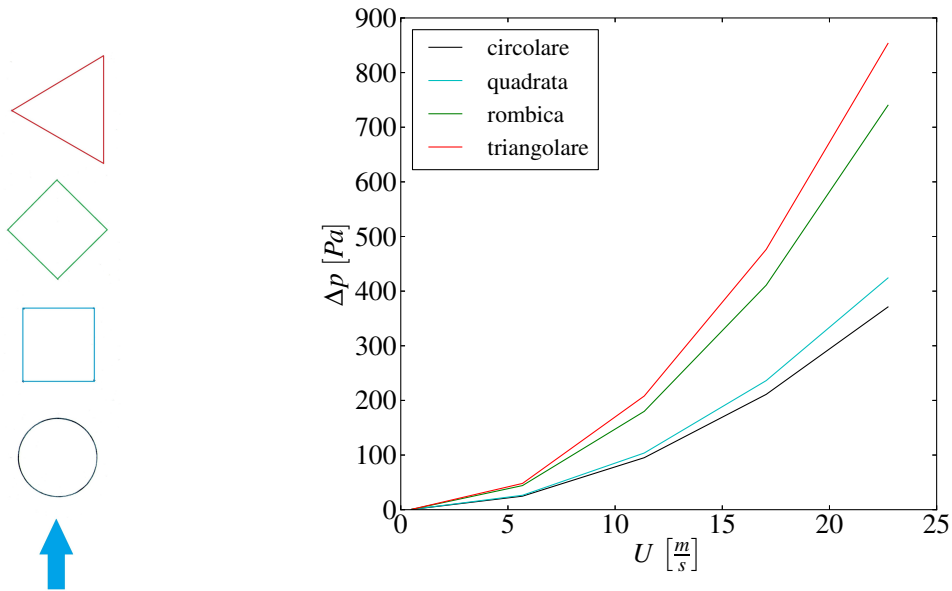


Figura 7.8: Perdita di carico a pari porosità

Ragionando a pari porosità le sezioni circolare e triangolare sono quelle che danno luogo rispettivamente alle minori e maggiori perdite di carico. Il comportamento osservato per quanto riguarda le sezioni quadrata e rombica in termini di perdite di carico è intermedio tra le due precedenti, con la rombica che però risulta decisamente superiore nonostante presenti la stessa superficie.

7.3 Scambio termico

7.3.1 Analisi a parità di ingombro

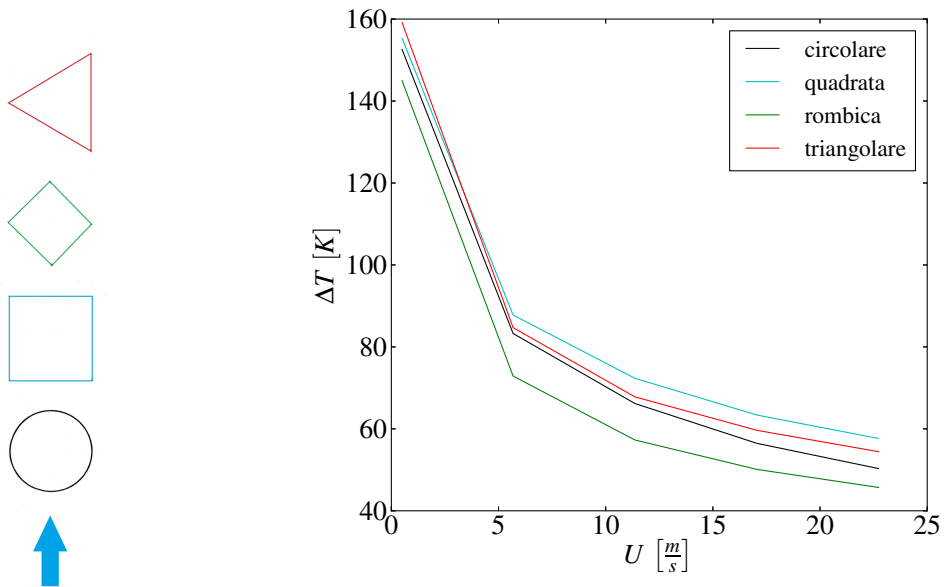


Figura 7.9: Scambio termico a pari ingombro

Ragionando a pari ingombro le sezioni rombica e quadrata sono quelle che danno luogo rispettivamente al minore e maggiore scambio termico. Ciò è spiegabile col fatto che esse presentano rispettivamente la minore e maggiore superficie di scambio.

Il comportamento osservato per quanto riguarda le sezioni triangolare e circolare in termini di scambio termico è intermedio tra le precedenti, con la triangolare che risulta leggermente superiore sempre per via della maggiore superficie bagnata.

7.3.2 Analisi a parità di superficie

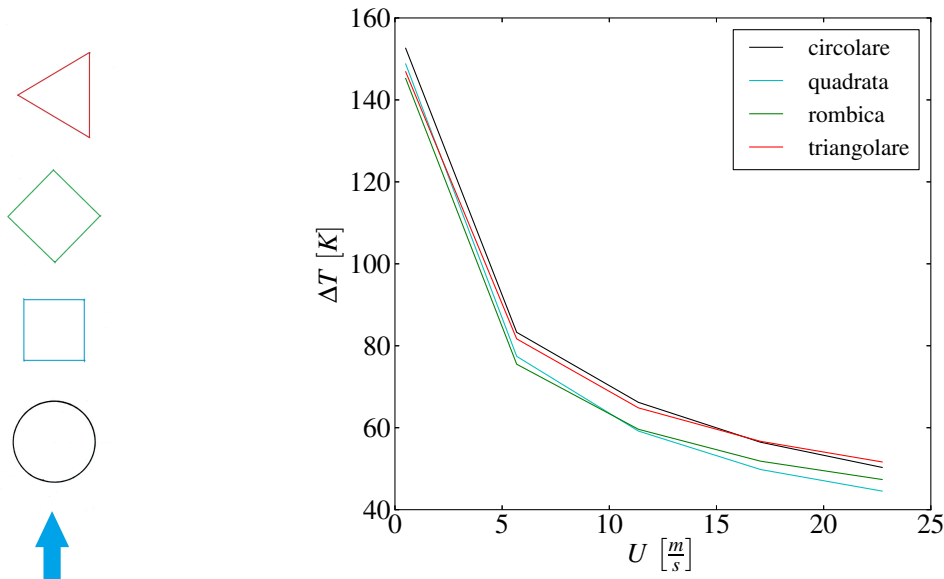


Figura 7.10: Scambio termico a pari superficie

Ragionando a pari superficie bagnata le sezioni circolare e triangolare sono quelle che danno luogo al maggiore scambio termico, mentre le sezioni quadrata e rombica sono quelle che danno luogo al minore scambio termico. Ciò è in generale spiegabile osservando la quantità di superficie a contatto con un flusso in condizioni di ristagno che dunque non scambia calore in maniera ottimale. Infatti per le sezioni circolare e triangolare solo $1/3$ circa del flusso adiacente alla parete della schiuma è in condizioni di ristagno, la restante parte si trova a contatto con un flusso non ristagnato che quindi scambia calore in maniera adeguata. Per le sezioni quadrata e rombica invece la porzione di superficie che è adiacente ad un flusso in condizioni di ristagno è decisamente superiore.

Tale spiegazione è confermata dal fatto che le curve tendono ad intersecarsi, ad esempio per velocità inferiori a circa 16 m/s la circolare risulta avere uno scambio leggermente favorito rispetto alla sezione triangolare, mentre per velocità superiori è la triangolare che risulta favorita. All'aumentare della velocità infatti la porzione di superficie a contatto con flusso in condizioni di ristagno tende a crescere per quanto riguarda la circolare, mentre resta all'incirca costante per quanto riguarda la triangolare; questo dà luogo al cambiamento di tendenza che si osserva. Un comportamento analogo si ha fra le sezioni quadrata e rombica.

7.3.3 Analisi a parità di porosità

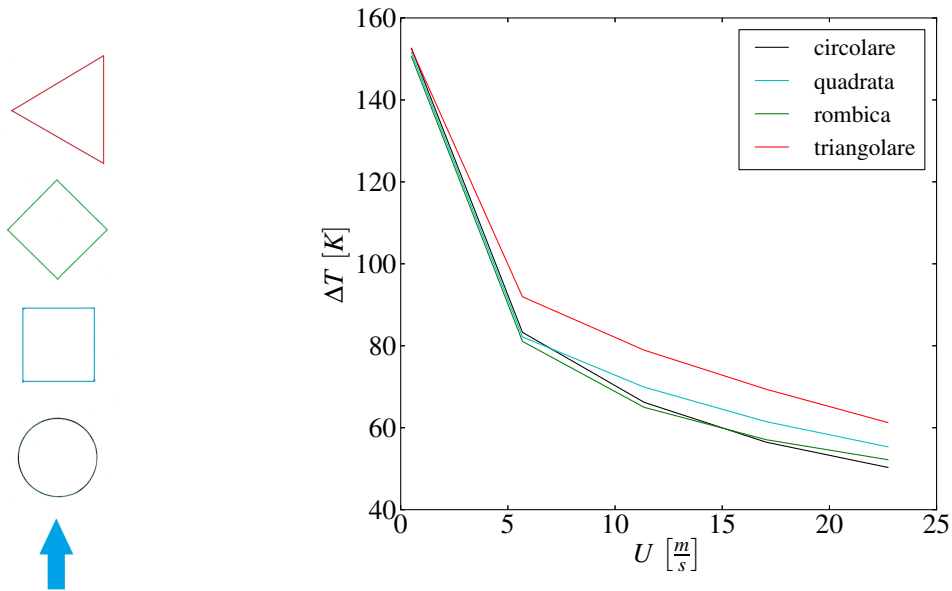


Figura 7.11: Scambio termico a pari porosità

Ragionando a pari porosità la sezione triangolare è quella che dà luogo al maggiore scambio termico. Ciò è spiegabile col fatto che essa presenta in assoluto la maggiore superficie di scambio.

Le sezioni rombica, circolare e quadrata sono nell'ordine quelle che danno uno scambio termico minore. Anche qui la spiegazione è semplicemente legata all'estensione della superficie di scambio nei vari casi.

Anche qui l'intersecarsi delle curve è spiegabile, come nel caso precedente, con la variazione della porzione di superficie a contatto con un flusso in condizioni di ristagno che si ha al variare del regime di moto.

7.4 Numero di Nusselt

Il numero di Nusselt Nu è un gruppo adimensionale che esprime il rapporto tra il flusso di calore scambiato per convezione e il flusso di calore scambiato per conduzione. Esso è definito come

$$Nu = \frac{hD}{k} \quad (7.1)$$

dove h rappresenta la trasmittanza termica convettiva, D è la dimensione caratteristica che dipende dal caso preso in esame ed infine k è la conducibilità termica. Per quanto riguarda la determinazione di h , essa è stata ottenuta nel seguente modo:

$$h = \frac{\dot{Q}_{scamb}}{S \Delta T_{LM}} \quad (7.2)$$

dove \dot{Q}_{scamb} rappresenta la potenza termica scambiata a parete (ricavabile tramite un'apposita utility presente in OpenFOAM *wallHeatFlux*), ΔT_{LM} rappresenta la differenza di temperatura media logaritmica ed S la superficie bagnata.

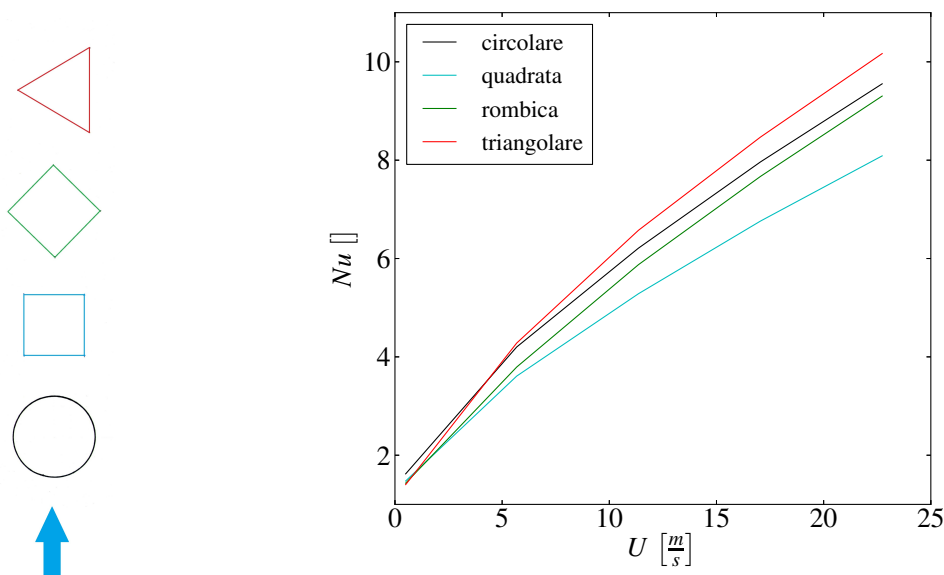


Figura 7.12: Numero di Nusselt a pari superficie

Ragionando a parità di superficie si può notare come la sezione triangolare sia quella che scambia maggiormente calore per convezione, mentre la quadrata è quella che scambia il maggiormente calore per conduzione. La rombica e la circolare hanno un comportamento intermedio.

Capitolo 8

Studio delle reazioni chimiche

Questo capitolo si propone di descrivere i modelli utilizzati e le ipotesi fatte per riprodurre, attraverso l'analisi CFD, le conversioni delle specie chimiche che si hanno in presenza di un substrati catalitici. In particolare l'applicazione su cui si focalizzerà l'attenzione è quella dei convertitori catalitici trivalenti utilizzati sui motori a combustione interna.

8.1 Impostazione generale dei modelli utilizzati

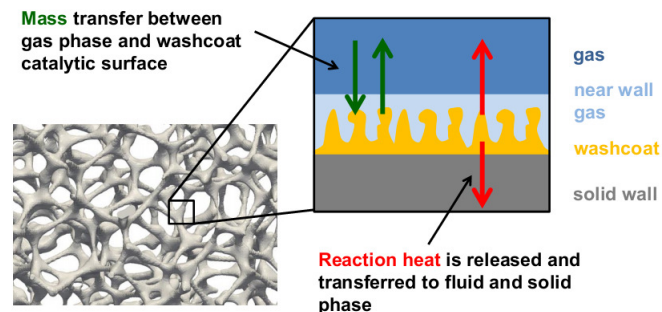


Figura 8.1: Schema dei modelli necessari per studiare la conversione delle specie chimiche

Per modellare il processo di conversione delle specie chimiche per mezzo di una superficie catalizzata (*washcoat*) è necessario implementare diversi modelli:

- Un modello di trasferimento di massa tra fluido e superficie del substrato catalitico per riprodurre l'adsorbimento che si ha nel washcoat;
- Un modello che riproduca la chimica del processo, ovvero la velocità con cui avviene la conversione dei reagenti in prodotti e la quantificazione del calore che deve essere rilasciato o sottratto a seguito dell'avvenuta reazione chimica;

- Un modello di scambio termico che riproduca lo scambio termico che deve avvenire tra fase solida e fluido una volta che le reazioni generano o richiedono calore poiché avvengono.

Dal punto di vista delle equazioni questi modelli forniscono i termini sorgenti presenti nelle equazioni di Navier-Stokes scritte al Cap. 2, ovvero nell'ordine \dot{j}_i , $\dot{\Omega}_i$ e \dot{Q}^{ch} .

Nel seguito verranno analizzati in dettaglio i vari modelli, descrivendo volta volta i sotto-modelli specifici adottati.

8.2 Modello di trasferimento di massa

La modellazione del trasferimento di massa si basa sostanzialmente sulla determinazione della costante di diffusione da inserire nella legge di Fick (vedi Cap. 2) per ciascuna specie chimica considerata. Lo scopo è quello di calcolare il flusso di specie chimiche che si ha tra fluido e washcoat sulla base del gradiente di concentrazione.

Sperimentalmente [5] si è osservato che il valore del coefficiente di diffusione delle singole specie chimiche nella miscela è tra loro molto simile ed inoltre risulta pari alla viscosità cinematica della miscela. In altre parole, il numero di Schmidt, definito come $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$, risulta molto vicino all'unità. Tale gruppo adimensionale esprime il rapporto tra diffusività cinematica e la diffusività di materia, dunque è lecito assumere in definitiva il coefficiente di diffusione delle singole specie chimiche pari alla viscosità cinematica della miscela.

Per il calcolo della viscosità, e quindi del coefficiente di diffusione, si deve far però riferimento alla corretta temperatura, infatti considerando una viscosità costante, con conseguente coefficiente di diffusione costante, si sottostimerebbe il flusso di massa tra fluido per temperature più alte, mentre lo si sovrastimerebbe nel caso di temperature inferiori.

Per la valutazione della viscosità al variare della temperatura si farà riferimento alla legge di Sutherland, la quale può essere espressa nel seguente modo:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (8.1)$$

dove $S = 110[K]$.

La legge di Sutherland permette di calcolare la viscosità dinamica μ dell'aria in funzione della temperatura T , purché ne sia noto almeno un valore sperimentale, indicato con μ_0 , relativo ad una determinata temperatura T_0 . Tali valori possono essere ad esempio quelli della condizione standard, ovvero $\mu = 1.78 \cdot 10^{-5}[Pas]$ e $T_0 = 288.15[K]$.

La viscosità cinematica potrà di conseguenza essere definita come $\nu = \mu/\rho$.

8.2.1 Modello di Chapman-Enskog

Un modello più dettagliato e complesso per stimare il coefficiente di diffusione delle singole specie della miscela è quello di Chapman-Enskog.

Il coefficiente di diffusione \mathcal{D}_i per la componente i -esima di una miscela di N_C componenti è dato dalla seguente espressione [16]:

$$\mathcal{D}_i = \frac{1 - c_i}{\sum_{j=2}^{N_C} \left(\frac{c_j}{\mathcal{D}_{i,j}} \right)} \quad (8.2)$$

dove $\mathcal{D}_{i,j}$ sono i cosiddetti coefficienti di diffusione binari delle specie e rappresentano la diffusione della i -esima specie in una miscela composta dalle i -esima e j -esima specie. Essi sono calcolati utilizzando l'equazione di Chapman-Enskog [16]:

$$\mathcal{D}_{i,j} = 1.85 \cdot 10^{-3} \frac{T^{1.5} \left(\frac{1}{MM_i} + \frac{1}{MM_j} \right)^{0.5}}{p \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \right)^2 \Omega_D} \quad (8.3)$$

L'espressione dei coefficienti di diffusione binari del gas rivela una dipendenza della diffusività dalla temperatura del gas con esponente 1.5, a sottolineare la significativa influenza che ha sulla velocità di reazione quando si è ad alte temperature. La diffusività dipende inoltre dalla massa molare (MM) e dal cosiddetto integrale di collisione (Ω_D), valutato sulla base dei potenziali di Lennard-Jones (ϵ_0), e dal diametro di collisione (σ).

Per esprimere l'integrale di collisione in letteratura esistono diversi valori tabulati che però sono validi solo in certi range di temperatura, perciò si è deciso di adottare la seguente correlazione durante il calcolo, come suggerito dalla letteratura [16]:

$$\Omega_D = \left(\frac{1.06036}{\frac{kT^{0.15610}}{\epsilon_0}} \right) + \left(\frac{0.19300}{e^{0.47635 \frac{kT}{\epsilon_0}}} \right) + \left(\frac{1.03587}{e^{1.52996 \frac{kT}{\epsilon_0}}} \right) + \left(\frac{1.76474}{e^{3.89411 \frac{kT}{\epsilon_0}}} \right) \quad (8.4)$$

8.3 Modellazione della chimica

La modellazione della chimica del processo riguarda la cinetica delle reazioni ed in particolare la sua fase di attivazione, la quale essendoci presenza di sostanze catalizzanti avverrà a temperature decisamente inferiori a quelle che si avrebbero nel caso non catalizzato.

Nel presente studio sono stati adottati due diversi modelli per il calcolo della velocità delle reazioni chimiche $\dot{\Omega}_i$, a seconda della zona che si sta considerando:

- Per il fluido, dove non si ha la presenza di sostanze catalitiche, si è utilizzato il modello di Arrhenius in cui la velocità di reazione è determinata in base:
 - al tipo di reazione e alla natura chimica dei reagenti
 - alla temperatura
 - ad un fattore energetico detto Energia di attivazione
- Per il washcoat, dove si ha la presenza di sostanze catalitiche, si è utilizzato invece un modello tipo Arrhenius ma più dettagliato (Langumir-Hinshelwood), che considera la possibilità di avere competizione tra le diverse reazioni di conversione.

8.3.1 Velocità di reazione per il fluido

La velocità di reazione $\dot{\Omega}_i$ dell'*i*-esima specie chimica nella zona fluida può essere calcolata secondo la relazione di Arrhenius nel seguente modo:

$$\dot{\Omega}_i = A e^{\frac{-E_{att}}{RT}} \quad (8.5)$$

dove A è una costante che dipende dalla natura dei reagenti, E_{att} è l'energia di attivazione della reazione, R è la costante universale dei gas e T è la temperatura assoluta.

La relazione mostra come la velocità di conversione, oltre a dipendere naturalmente dal tipo di reazione e dalla natura chimica dei reagenti dipende dalla temperatura e da un fattore energetico detto Energia di attivazione.

Il significato fisico della relazione di Arrhenius può essere spiegato facendo riferimento alla teoria delle collisioni o teoria degli urti. Secondo tale teoria affinché le molecole dei reagenti possano produrre una reazione chimica esse devono urtarsi con un'energia cinetica sufficientemente elevata.

L'urto deve cioè essere abbastanza violento da rompere i legami che devono essere spezzati affinché avvenga la reazione.

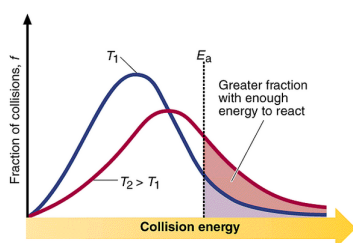


Figura 8.2: Energia di attivazione

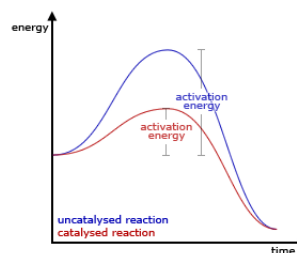


Figura 8.3: Significato fisico chimico dell'energia di attivazione

L'energia di attivazione può essere quindi definita come la minima energia che deve possedere una particella affinché il suo urto sia efficace e produca una trasformazione chimica.

Dall'osservazione di Fig. 8.2 si può facilmente comprendere come all'aumentare della temperatura aumenta anche la frazione di molecole che possiedono energia superiore all'energia di attivazione.

Il valore dell'energia di attivazione di una reazione compare anche quando si rappresenta la variazione dell'energia potenziale di una reazione rispetto al tempo. In questo caso si può immaginare che l'energia cinetica dei reagenti si trasformi in parte nell'energia potenziale del complesso attivato.

Secondo tale modello i reagenti, anche nelle reazioni esotermiche come quella rappresentata Fig. 8.3, devono comunque superare una barriera energetica (che coincide con l'energia di attivazione) per potersi trasformare nei prodotti di reazione. Il modello prevede che durante la reazione si formi un composto instabile, detto complesso attivato o stato di transizione, il cui contenuto energetico risulta più elevato e che condiziona la velocità della reazione stessa.

Per quanto riguarda il fattore A o fattore pre-esponenziale, esso risulta essere relativamente costante al variare della temperatura e assume un valore caratteristico per ogni reazione. La teoria degli urti esprime il fattore pre-esponenziale come prodotto di due fattori:

- un fattore di probabilità che dipende essenzialmente dalla geometria delle molecole e misura la probabilità che i reagenti, aventi una certa struttura geometrica, si scontrino con un opportuno orientamento.
- un fattore di frequenza che misura la frequenza degli urti (la probabilità che l'urto avvenga) e dipende dalle dimensioni delle particelle, dalla loro massa e dalla loro temperatura.

Le variazioni di temperatura incidono comunque in modo trascurabile sul fattore pre-esponenziale rispetto a quanto non accada per il fattore energetico o fattore esponenziale, perciò si può ritenere trascurabile.

8.3.2 Velocità di reazione per il washcoat

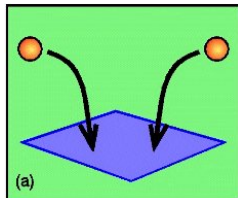


Figura 8.4: Adsorbimento dei reagenti sulla superficie di washcoat

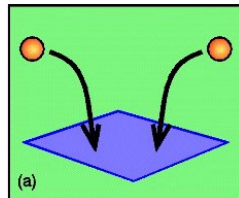


Figura 8.5: Diffusione lungo la superficie e interazione

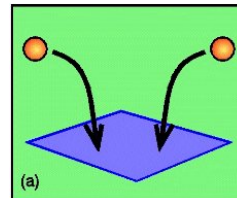


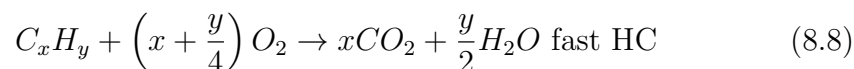
Figura 8.6: Desorbimento dei prodotti verso il fluido

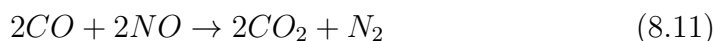
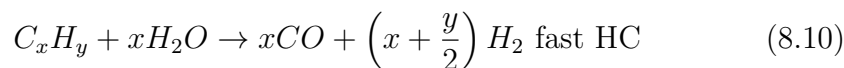
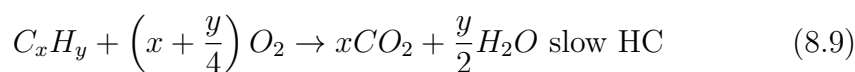
Per calcolare la velocità di reazione $\dot{\Omega}_i$ dell'*i*-esima specie chimica sulla superficie di washcoat si è scelto di utilizzare un modello che segue sempre una legge tipo Arrhenius, adattata questa volta però ad una superficie solida. Il modello in questione è quello di Langmuir-Hinshelwood il quale tiene conto, attraverso un fattore di inibizione, dell'impatto che ha sulla cinetica l'adsorbimento dei reagenti e il desorbimento dei prodotti sui siti attivi per ogni reazione considerata.

Una schematizzazione del processo riprodotto secondo tale modello è rappresentata sopra, esso può essere riassunto in tre fasi:

- Le molecole dei reagenti vengono adsorbite sulla superficie dell'adsorbente, in questo caso rappresentato dal washcoat (Fig. 8.4).
- Sulla superficie si ha un accumulo delle molecole di reagenti che diffondono sulla superficie e se le condizioni sono adeguate reagiscono dando luogo ai prodotti di reazione (Fig. 8.5).
- I prodotti che si sono formati nella precedente fase vengono ora desorbiti dalla superficie dell'adsorbente verso il fluido (Fig. 8.6).

Koltsakis et al. [17] ha applicato il modello di Langmuir-Hinshelwood al caso di un convertitore catalitico per uso automobilistico, considerando le principali reazioni che avvengono sulla superficie catalizzata:





Adottando dunque il modello di Langmuir-Hinshelwood per esprimere la velocità delle reazioni considerate, si ottengono le seguenti relazioni:

$$\dot{\Omega}_1 = \frac{A_1 e^{-\frac{E_1}{RT}} c_{CO} c_{O_2}}{G_1} \quad (8.12)$$

$$\dot{\Omega}_2 = \frac{A_2 e^{-\frac{E_2}{RT}} c_{H_2} c_{O_2}}{G_1} \quad (8.13)$$

$$\dot{\Omega}_3 = \frac{A_3 e^{-\frac{E_3}{RT}} c_{C_xH_y} c_{O_2}}{G_1} \quad (8.14)$$

$$\dot{\Omega}_4 = \frac{A_4 e^{-\frac{E_4}{RT}} c_{C_xH_y} c_{O_2}}{G_1} \quad (8.15)$$

$$\dot{\Omega}_5 = \frac{A_4 e^{-\frac{E_4}{RT}} c_{C_xH_y} c_{H_2O}}{G_1} Eq_5 \quad (8.16)$$

$$\dot{\Omega}_6 = A_6 e^{-\frac{E_6}{RT}} c_{CO}^m c_{NO}^{0.5} \quad (8.17)$$

dove:

$$G_1 = T_w (1 + K_1 c_{CO} + K_2 c_{C_3H_6})^2 (1 + K_3 c_{CO}^2 c_{C_3H_6}^2) (1 + K_4 c_{NO}^{0.7}) \quad (8.18)$$

$$Eq_5 = 1 - \frac{c_{s,CO}^x c_{s,H_2}^{x+0.5y}}{c_{C_xH_y} c_{H_2O}^x K_P(T)} \quad (8.19)$$

$$m = -0.19 (1 - 6.26 e^{-m_1 c_{s,CO}}) \quad (8.20)$$

Per quanto concerne la valutazione delle costanti di adsorbimento, queste dipendono dai metalli nobili utilizzati come catalizzatori. In particolare Koltsakis ha stimato:

$$K_1 = 65.5 e^{\frac{961}{T}} \quad (8.21)$$

$$K_2 = 2.08 \cdot 10^{-3} e^{\frac{361}{T}} \quad (8.22)$$

$$K_3 = 3.98 e^{\frac{11.611}{T}} \quad (8.23)$$

$$K_4 = 4.79 \cdot 10^5 e^{\frac{-3733}{T}} \quad (8.24)$$

8.4 Modello di scambio termico

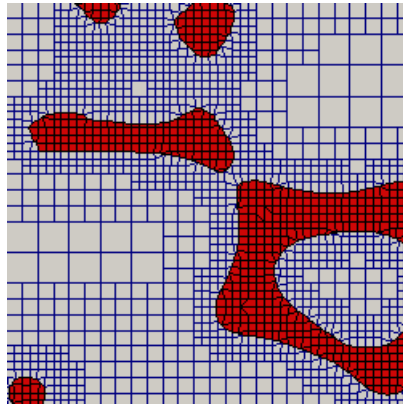


Figura 8.7: Interfaccia solido-fluido

Durante la stesura delle equazioni di Navier-Stokes al Cap. 2 si è visto come sia presente un termine sorgente \dot{Q}^{ch} che considera il calore prodotto o richiesto durante le reazioni termiche, a seconda che queste siano esotermiche o endotermiche.

La presenza di questo termine implica la necessità di avere un modello di scambio termico fra fase solida e fase fluida.

La modellazione di tale processo consiste nel suddividere tale calore richiesto o sviluppato all'interfaccia fluido-parete appunto tra matrice solida e fluido. In generale esistono due approcci al problema:

- single-region: in cui la temperatura della matrice solida viene imposta come condizione al contorno
- multi-region: in cui la temperatura viene calcolata sulla base della soluzione del bilancio di energia per la matrice.

In ogni caso il modello utilizzato per il trasferimento di energia termica è quello della legge di Fourier, presentata al Cap. 2.

8.5 Calcolo della velocità di conversione globale

La modellazione del processo di conversione delle specie chimiche è basata sul calcolo della velocità di conversione globale delle specie chimiche r . Questa è espressa in $mol/(m^2 s)$ e rappresenta la velocità con cui le sostanze reagenti vengono convertite in prodotti. Tipicamente questa quantità è fornita in rapporto al m^2 di superficie attiva, quest'ultima risulta notevolmente superiore a quella nominale delle pareti interne del convertitore in quanto sulle superfici è depositato uno strato poroso di allumina in cui sono trattenute le sostanze catalizzanti.

Per stimare tale superficie attiva normalmente è fornito l'ammontare della quantità di washcoat depositato sulle pareti solide in termini di massa per unità di volume totale del catalizzatore. A questo punto conoscendo i m^2 di superficie per grammo di sostanza è possibile determinare la superficie fisicamente disponibile all'interfaccia fluido-parete, come:

$$S_{phys} = \alpha \gamma V_{cat} \quad (8.25)$$

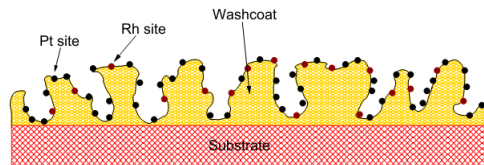


Figura 8.8: Sezione longitudinale del catalizzatore

I metalli preziosi utilizzati come sostanze catalizzanti, sono depositate su questa superficie, come mostrato in figura 8.8. La superficie disponibile per le reazioni (superficie attiva) è perciò rappresentata dai cosiddetti siti attivi, che rappresentano in termini massici (Θ_w) circa lo 0.1% del washcoat. Tale superficie è perciò minore di quella fisicamente disponibile (S_{phys}) e il rapporto tra le due può essere calcolato sulla base del loading e della dimensione delle particelle di sostanze catalitiche utilizzate. Ad esempio, per i siti di platino il rapporto in questione può essere stimato come segue:

$$\Phi_{Pt} = \frac{A_{Pt}}{S_{phys}} \quad (8.26)$$

Dove A_{Pt} dipende dal numero di siti attivi, il quale può essere calcolato a partire dalla conoscenza della frazione massica di Pt e Rh e del loro peso molecolare

$$A_{Pt} = \frac{\gamma V_{cat} \Theta_w \Phi_{Pt}}{MM_{Pt}} \quad (8.27)$$

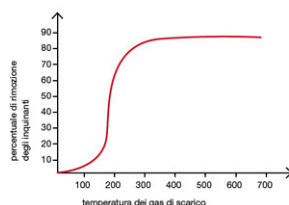


Figura 8.9: Velocità di rimozione degli inquinanti in funzione della temperatura dei gas allo scarico

In Fig. 8.9 è rappresentato un tipico andamento della velocità con cui i reagenti vengono trasformati in prodotti, come si può osservare essa dipende tipicamente dalla temperatura a cui avviene la reazione. In particolare si ha un drastico cambiamento di tendenza a seconda che la temperatura sia maggiore o minore di una cosiddetta *temperatura di light-off* T_L , definita convenzionalmente come la temperatura dei gas di scarico alla quale il convertitore raggiunge un'efficienza del 50%.

Tale temperatura è un parametro molto importante da stimare in quanto segna un cambiamento del processo dominante che guida la cinetica globale delle reazioni. Per modellare dunque il processo di conversione e trovare un'espressione che permetta di calcolare la velocità di conversione della singola specie, è necessario considerare che:

- Se $T < T_L$ il processo di conversione è governato puramente dalla cinetica delle reazioni in gioco, infatti il raggiungimento dell'energia minima di attivazione rappresenta il collo di bottiglia. In questi casi la % di conversione assume un andamento di tipo esponenziale con la temperatura.
- Se $T > T_L$ il processo di conversione è governato dalla diffusione delle specie chimiche attraverso la fase solida che questa volta rappresenta il collo di bottiglia, mentre la cinetica è pienamente attiva per via delle alte temperature. In questo caso la % di conversione assume un andamento di tipo lineare con la temperatura.

Per simulare tale curva di conversione è necessario perciò implementare, come descritto in precedenza nel capitolo, un modello (modello per la chimica) che fornisca il valore della velocità cinetica della reazione (Ω_i) ed un secondo modello che calcoli il flusso diffusivo (\dot{j}_i) tra fase fluida e fase solida sulla base della legge di Fick in cui però è necessario determinare accuratamente il coefficiente di diffusione (modello di trasferimento di massa).

Riguardo la determinazione del flusso diffusivo tra fase solida e fase fluida è necessario fare però alcune considerazioni.

Conoscendo il coefficiente di diffusione delle singole specie nella miscela considerata, calcolato attraverso il modello di trasferimento di massa, è possibile attraverso la legge di Fick trovare il valore della velocità di diffusione \dot{j}_i tra fluido e parete solida come:

$$\dot{j}_i = \rho \mathcal{D}_{i,mix} (Y_{f,i} - Y_{s,i}) \quad (8.28)$$

dove $Y_{f,i}$ e $Y_{s,i}$ sono le concentrazioni della i -esima specie rispettivamente nella prima cella fluida adiacente la parete e nel substrato.

A questo punto per ricavare quanto vale la concentrazione nel substrato è sufficiente risolvere il seguente bilancio:

$$\frac{\partial}{\partial t} Y_{s,i} + \dot{\Omega}_i + \dot{j}_i = 0 \quad (8.29)$$

dove il primo termine dell'equazione è chiamato termine di accumulo.

L'approccio così diretto è identificato come *Single-step* e considera la presenza di accumulo di massa ed energia sul washcoat.

In sostanza esso consta di tre passaggi:

- I reagenti vengono adsorbiti dal washcoat attraverso un processo di diffusione governato dalle diverse concentrazioni presenti tra fluido e substrato;
- Si ha la reazione chimica che dà luogo ai prodotti;
- I prodotti vengono desorbiti dal washcoat attraverso un processo di diffusione governato dalle diverse concentrazioni presenti tra fluido e substrato.

Tale metodologia è possibile solo per simulazioni instazionarie in quanto necessita di conoscere con precisione l'intervallo temporale per descrivere il termine di accumulo.

Per poter eseguire delle simulazioni stazionarie è possibile assumere, basandosi sulla teoria di Baruah [16], che non ci sia accumulo di massa all'interno del washcoat. Questo vuol dire che il termine di accumulo dell'Eq. 8.29 è trascurabile e dunque tutte le componenti chimiche che diffondono nei pori del substrato si suppone reagiscano nei siti attivi del catalizzatore.

Fatta questa assunzione è possibile affermare che quando la cinetica globale della reazione diventa governata dal processo di trasferimento di massa, tutti i reagenti che diffondono nel washcoat reagiscono, come detto, nei siti attivi e conseguentemente la loro concentrazione nella fase solida può essere

considerata nulla. Questo vuol dire che il gradiente di concentrazione tra fase fluida e fase solida di tutti i reagenti può essere approssimato alla loro concentrazione in fase fluida.

Per avere ciò è necessario inoltre ipotizzare che i prodotti che si formano nel washcoat vengano rapidamente desorbiti.

In conclusione la velocità di reazione globale r , adottando tale teoria semplificata, sarà assunta pari al valore minimo tra la velocità di conversione calcolata secondo l'approccio cinetico $\dot{\Omega}_i$, che limita la velocità di conversione sulla base del raggiungimento di un'energia minima di attivazione, e quella calcolata secondo l'approccio diffusivo \dot{j}_i , che limita la velocità di conversione sulla base della diffusione dei reagenti dalla fase fluida alla fase solida.

$$r_i = \min(\dot{\Omega}_i, \dot{j}_i) \tag{8.30}$$

Tale procedura è schematizzata in Fig. 8.10, dove è possibile assumere che:

$$\text{se } T < T_{lim} \implies r_i = \dot{\Omega}_i$$

$$\text{se } T > T_{lim} \implies r_i = \dot{j}_i$$

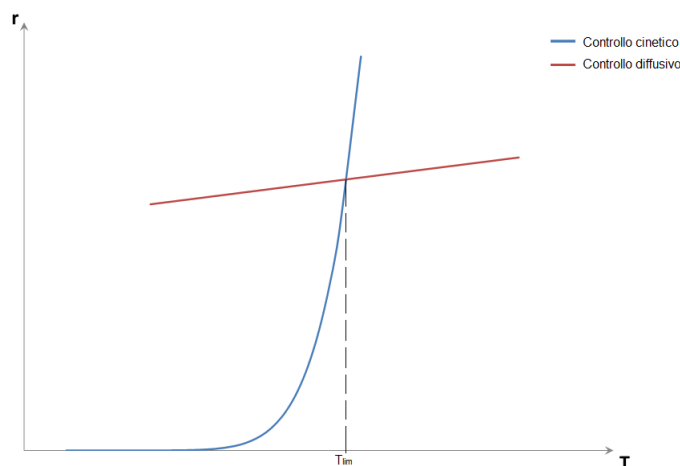


Figura 8.10: Schema per il calcolo della velocità di reazione secondo la teoria di Baruah

Capitolo 9

Analisi della conversione delle specie chimiche

In questo capitolo ci si propone di trovare un modello geometrico valido per riprodurre attraverso l'analisi CFD la conversione delle specie chimiche che si ha durante l'attraversamento di una schiuma utilizzata come supporto per catalizzatori.

Ai fini di verificare la bontà dell'utilizzo di una schiuma rispetto all'utilizzo di un comune monolito a nido d'ape è sufficiente considerare una sola delle reazioni principali che si hanno in un catalizzatore trivalente, dall'analisi di questa sarà poi possibile trarre indicazioni generali sul processo. Per quanto riguarda le analisi svolte si è scelto di considerare la sola reazione del monossido di carbonio CO.

Si farà dunque riferimento a dati sperimentali disponibili in letteratura e si analizzerà, in analogia a quanto fatto per le perdite di carico, il modello geometrico più adeguato per la stima della conversione degli inquinanti che si ha nel caso sia presente un substrato attivo catalizzato che dà luogo a reazioni chimiche.

Si proverà infine ad utilizzare un approccio "macro" al problema, nel senso che non si considererà l'effettiva geometria interna della struttura, ma si considererà solo il suo ingombro imponendo una determinata porosità attraverso la legge di Darcy-Forchheimer. Utilizzando poi alcune correlazioni presenti in letteratura o i risultati di conversione ottenuti nel caso di simulazioni su porzioni limitate della stessa schiuma si proverà a riprodurre quanto ottenuto utilizzando l'approccio di simulazione alla micro-scala.

Prima di tutto ciò è necessario però avere una validazione dei modelli implementati e descritti nel dettaglio nel Cap 8. Questo sarà ottenuto su un semplice caso test descritto in letteratura, in quanto per esso, a differenza delle schiume, sono disponibili dei risultati sperimentali lungo tutta la curva di conversione.

9.1 Validazione del modello: caso semplificato

La validazione dell'implementazione descritta al Cap. 8, verrà effettuata su un caso molto semplice disponibile in letteratura [18] di cui è a disposizione l'intera curva sperimentale di conversione ed in particolare si ha una stima accurata della temperatura di light-off.

9.1.1 Prove sperimentali

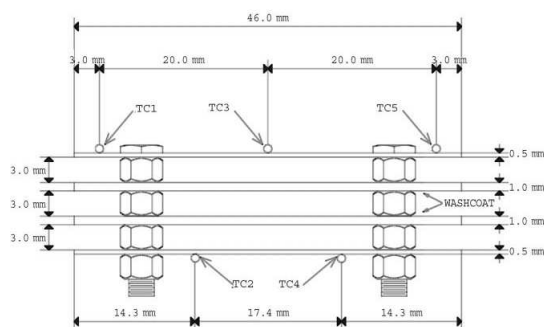


Figura 9.1: Struttura test

Le prove sperimentali sono state eseguite nel reattore schematizzato in Fig. 9.1, esso consiste in quattro lastre (*larghezza* = 46 [mm], *lunghezza* = 200 [mm]) assemblate ad intervalli di 3 mm l'una dall'altra in modo da formare tre canali rettangolari paralleli (Fig. 9.1). Le piastre sono realizzate in alluminio ed hanno in generale uno spessore di 1 mm. Lo spessore delle due lastre esterne è uguale a metà dello spessore di quelle centrali, dal momento che sono state ricoperte con il catalizzatore solo da un lato.

Il tutto è inserito nel reattore realizzato in acciaio inossidabile (46×26 [mm] di sezione trasversale interna) e posto all'interno di un forno con ricircolo d'aria monitorato per mezzo di un controllo di tipo proporzionale-integrale-derivativo.

La distribuzione di temperature lungo le pareti superiori e inferiori del reattore è stata inoltre misurata da due termocoppie scorrevoli. Infine la caduta di pressione dovuta all'attraversamento del reattore è risultata trascurabile in tutte le prove.

Riguardo il substrato, le immagini al SEM hanno stimato uno spessore di washcoat pari a $70 \mu\text{m}$, mentre l'analisi morfologica ha determinato un volume del poro pari a $0.48 \text{ cm}^3/\text{g}$, con una superficie specifica di washcoat di $110 \text{ m}^2/\text{g}$.

9.1.2 Simulazioni

La realizzazione della geometria prevede la realizzazione di uno solo dei tre canali del reattore in quanto si può pensare che essi abbiano tutti lo stesso comportamento. Il caso inoltre per sua natura può essere considerato 2D, ovvero si può trascurare ciò che avviene lungo la larghezza del canale visto che le pareti laterali non sono ricoperte di catalizzatori e dunque su di esse non avviene alcuna reazione chimica, ed inoltre il loro l'effetto sulla distribuzione di velocità media al centro del canale può ritenersi trascurabile per via delle consistenti dimensioni in questa direzione.

Per quanto riguarda la stima dei coefficienti da utilizzare per il modello di Langumir-Hinshelwood adottato sul washcoat, si farà riferimento ai coefficienti proposti da Koltsakis et al. [17] in cui però la costante pre-esponenziale A è lasciata come parametro variabile per descrivere l'influenza che hanno le diverse tipologie di washcoat utilizzato. Nel caso in questione tale costante è determinata interpolando secondo un modello di Langumir-Hinshelwood i valori di velocità di conversione sotto controllo cinetico dati dal modello di Groppi et al. [19] (per il quale sono disponibili delle stime sperimentali delle costanti per il caso sperimentale considerato). I valori delle costanti utilizzate sono stati riportati in Tab. 9.1.

Per quanto riguarda invece le costanti del modello di Arrhenius utilizzato per le reazioni in fase gassosa, esse sono state direttamente assunte pari a quanto proposto in letteratura [20].

Le simulazioni effettuate, analogamente a quanto eseguito nei test sperimentali, hanno l'obiettivo di stimare la conversione ottenuta al variare della temperatura fissando la concentrazione del CO in ingresso e variando la portata fluente, oppure, in maniera duale, fissando la portata e variando la concentrazione di CO in ingresso. I risultati di queste due serie di prove sono riportati rispettivamente in Fig. 9.2 e Fig. 9.1.2 in termini di percentuale di conversione η osservata in funzione della temperatura in ingresso, dove η è stata calcolata come concentrazione media fra ingresso e uscita.

$$\eta = \left(1 - \frac{Y_{CO}^{out}}{Y_{CO}^{in}}\right) \cdot 100 \quad (9.1)$$

E_1 [J/mol]	95000
A_1 [molK/(m ³ s)]	5.0×10^9

Tabella 9.1: Costanti adottate per il modello di Langmuir-Hinshelwood

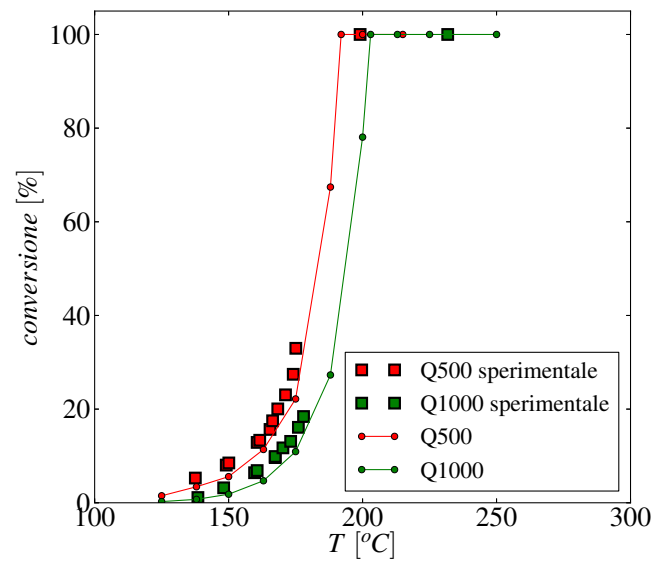


Figura 9.2: Conversioni al variare della portata

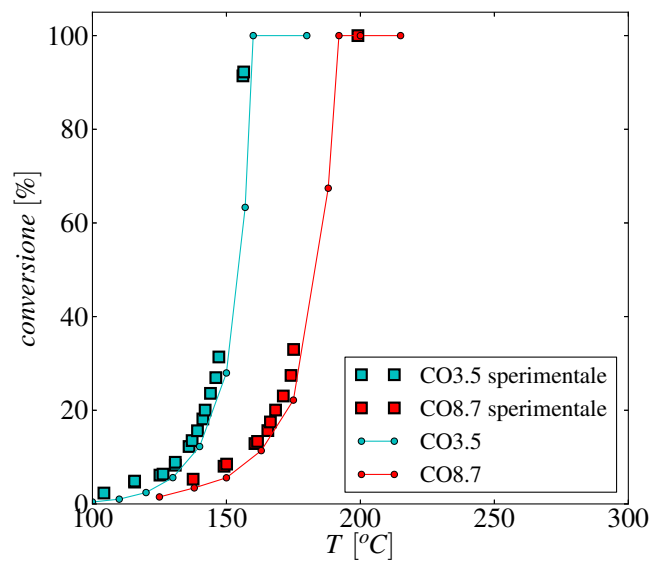


Figura 9.3: Conversioni al variare della %CO

I risultati mostrano come in ogni condizione il modello implementato stima correttamente la conversione del CO che si ottiene sperimentalmente. È possibile dunque affermare che il modello implementato secondo quanto

spiegato in dettaglio nel Cap. 8 è corretto e dunque può essere usato per stimare i valori delle conversioni che si hanno a seguito di flussaggi in geometrie più complesse come possono essere le schiume.

Per quanto riguarda l'influenza che hanno i possibili gradi di libertà del problema (portata fluente, concentrazioni di CO in ingresso, pressione del sistema) questi verranno discussi nel proseguo del capitolo a proposito delle schiume.

9.2 Previsione della conversione delle specie chimiche sulle schiume

Dopo aver validato i modelli necessari per il calcolo è possibile procedere con le simulazioni sui campioni di schiuma.

Anche qui si confronteranno i risultati delle simulazioni con quelli sperimentali disponibili in letteratura [13], considerando però che quest'ultimi sono limitati alle zone di puro controllo cinetico e di puro controllo diffusivo, non si hanno perciò a disposizione risultati sperimentali nella zona di *light-off*.

9.2.1 Prove sperimentali

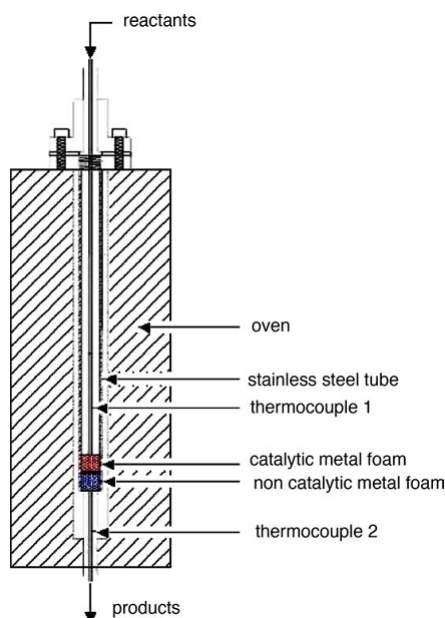


Figura 9.4: Schema del microreattore utilizzato per i test sperimentali

Le schiume metalliche usate per questi test consistono in cilindri aventi diametro pari a 9 mm e altezze comprese tra 6 mm e 25 mm tagliati a partire dalla schiuma metallica per elettroerosione, in maniera da ottenere un taglio preciso senza andare a danneggiare la struttura e che assicuri un perfetto serraggio con la parete interna del reattore.

Dopo il deposito del substrato attivo, i provini delle schiume sono inseriti nel microreattore schematicamente rappresentato in Fig. 9.4, il quale ha un diametro interno di 9 mm . L'aria e il CO sono forniti al reattore attraverso linee indipendenti, successivamente vengono mescolati e presiscaldati ad una certa temperatura prima di entrare nel reattore.

Le schiume sono state caricate nel reattore a coppie: su quella superiore è stato depositato il substrato attivo mentre su quella inferiore no. Quest'ultima è stata posizionata in fondo al reattore in modo da assicurare una distribuzione equa attraverso la schiuma catalitica.

La temperatura della schiuma catalitica è stata misurata con una termocoppia posizionata a contatto con la sezione trasversale in ingresso della schiuma (segnata come termocoppia 1 in Fig. 9.4). Un'altra termocoppia è stata posizionata sulla sezione di uscita della schiuma senza substrato (segnata come termocoppia 2 in Fig. 9.4) in modo da misurare la temperatura del flusso di gas uscente.

I test di attività sono stati svolti per un range di portate di alimentazione tra $3000 \div 10000\text{ cm}^3/\text{min}$ (*STP*) sui differenti campioni di schiume catalitiche a disposizione .

La concentrazione di CO in ingresso è stata inoltre variata tra l'1% e il 5% (*v/v*) in aria (*STP*). Durante ciascuna prova, la temperatura in ingresso è stata aumentata gradualmente e, per ogni livello di temperatura, è stata determinata la conversione di CO tramite un'analisi di cromatografia del gas a seguito del raggiungimento di una condizione di stazionarietà.

In generale conversioni complete (100%) di CO sono state osservate a portate molto basse ($1000\text{ cm}^3/\text{min}$ *STP*).

In alcuni test diagnostici dedicati, un terzo campione di schiuma è stato caricato nel reattore sopra la schiuma catalizzata in modo che agisse come distributore di flusso. Questa configurazione presenta però lo svantaggio di impedire la misurazione della temperatura in ingresso della schiuma. I test eseguiti con o senza schiuma addizionale non hanno evidenziato alcuna differenza nel valore di conversione di CO raggiunto nelle medesime condizioni, quindi in definitiva si può concludere che i risultati dei test di attività catalitica non sono stati influenzati da problemi di mal distribuzione.

9.2.2 Simulazioni

Le simulazioni sulle schiume sono state eseguite inizialmente solo sul campione E per valutare la bontà dell'approccio; esso è stato riprodotto adottando entrambi i modelli base proposti al Cap. 4, ovvero il modello geometrico a cella cubica e modello *Kelvin cell*. Con l'utilizzo inoltre della correzione proposta al Cap. 6 si proverà ad avere un minor scostamento dai dati misurati durante le prove sperimentali.

Si sono perciò diverse simulazioni al variare della temperatura del fluido in ingresso, con lo scopo di esaminare l'effetto dei seguenti parametri sui risultati forniti:

- Modello geometrico
- Coefficienti del modello
- Portata fluente
- Composizione della miscela in ingresso
- Pressione del sistema

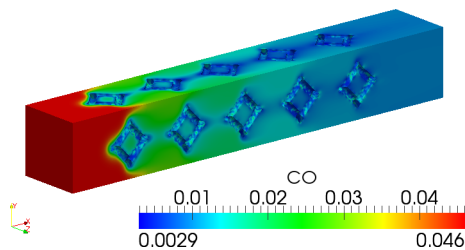


Figura 9.5: Concentrazione di CO

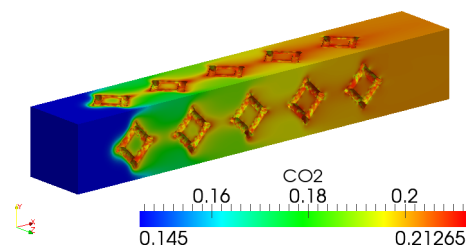


Figura 9.6: Concentrazione di CO_2

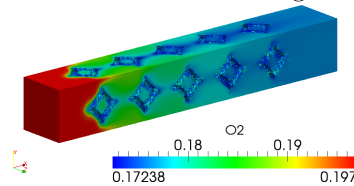


Figura 9.7: Concentrazione di O_2

Effetto dei diversi modelli geometrici utilizzati

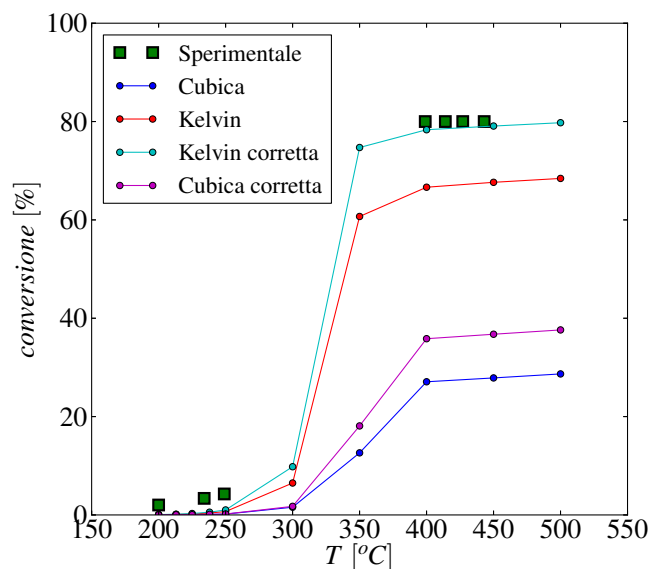


Figura 9.8: Confronto conversioni diversi modelli geometrici

I risultati ottenuti mostrano che entrambi i modelli di base utilizzati riproducono in generale il comportamento atteso, infatti come si può notare in tutte le curve è presente una zona a bassa temperatura in cui la conversione è praticamente nulla; all'aumentare della temperatura del sistema, il catalizzatore diventa attivo e fra i 300 e i 400 °C si individua la zona di *light-off*. La conversione rimane infine all'incirca costante anche per ulteriori aumenti di temperatura raggiungendo un plateau. Questo comportamento asintotico è associato, come spiegato al Cap. 8, al raggiungimento delle condizioni di completo controllo diffusivo in cui si ha solo una leggera variazioni con la temperatura dovute all'aumento del coefficiente di diffusione con la temperatura.

Riguardo le differenze tra i vari modelli geometrici, i risultati mostrano, che come avvenuto per le perdite di carico, il modello *Kelvin cell* fornisce i risultati migliori anche per quanto riguarda la conversione delle specie chimiche. Inoltre adottando la correzione proposta al Cap. 6 si riesce a diminuire ulteriormente lo scostamento dai dati sperimentali per entrambi i modelli. Ciò è spiegabile considerando che la correzione proposta fa in modo di riprodurre correttamente dal punto di vista quantitativo la superficie all'interfaccia fluido-parete, dunque adottando i corretti parametri del *washcoat* si ha una superficie attiva pari a quella della schiuma reale. Questo unito

alla più corretta riproduzione della fluidodinamica, come affermato nel Cap. 6, fa in modo che la previsione della conversione del CO in CO_2 sia efficace almeno per le temperature in cui si hanno dei dati sperimentali di sicuro affidamento, ovvero per le temperature in cui si ha un controllo diffusivo della velocità di conversione.

Per temperature inferiori invece i dati sperimentali sono assenti o poco affidabili, per i motivi spiegati precedentemente, quindi non è possibile fare alcuna considerazione anche se come affermato per il caso test i risultati forniti dalle simulazioni sono comunque di sicuro affidamento.

Effetto della variazione delle costanti del modello

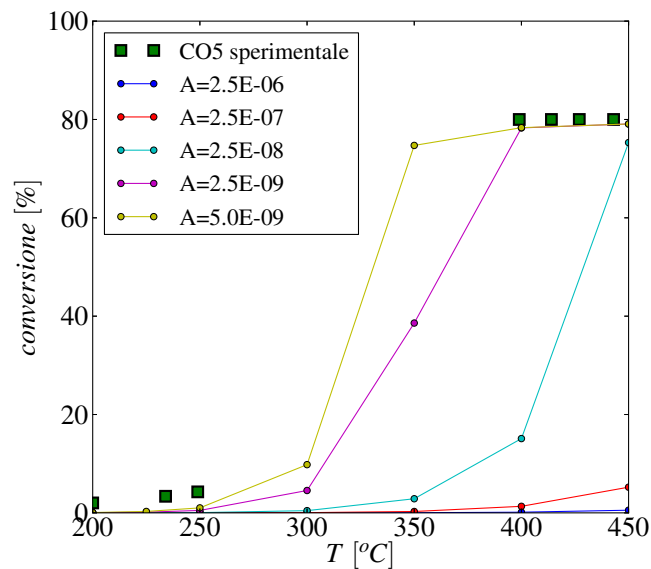


Figura 9.9: Effetto della variazione della costante pre-esponenziale sulla stima della temperatura di *light-off*

Riguardo i coefficienti usati per settare la modellazione della chimica per il washcoat si sono adottati gli stessi utilizzati per il caso semplificato considerato inizialmente (Tab. 9.1), ovvero assumendo per l'energia di attivazione il valore stimato da Koltzakis et al. [17], mentre per quanto riguarda la costante pre-esponenziale si assume il valore trovato attraverso l'interpolazione con il modello di Langmuir-Hinshelwood del modello proposto da Groppi et al. [19].

Si sono perciò in questa sezione effettuate, a puro scopo valutativo, diverse simulazioni al variare del coefficiente pre-esponenziale A_1 del modello di

Langumir-Hinshelwood. I risultati sono mostrati in figura 9.9, dove si può notare come una variazione anche limitata di questo parametro influenzi pesantemente lo sviluppo della cinetica della reazione.

In particolare si può dire che all'aumentare del parametro si ottiene via via una temperatura di *light-off* minore come spiegato anche in occasione della presentazione del modello di Arrhenius utilizzato per il fluido e da cui appunto il modello di Langumir-Hinshelwood viene derivato.

Effetto della variazione di portata fluente

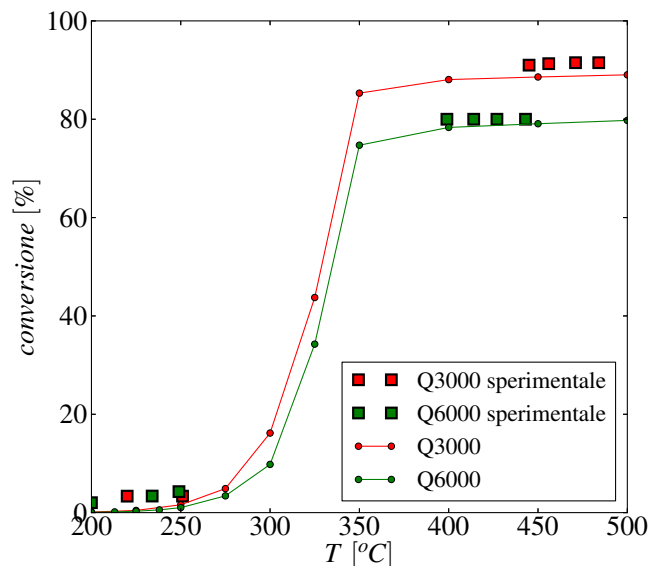


Figura 9.10: Effetto variazione portata fluente

All'aumentare della portata si osserva (Fig. 9.2.2) una diminuzione del livello di conversione raggiunto che passa da circa il 90% per $Q = 3000$ [cm^3/min] all' 80% per $Q = 6000$ [cm^3/min].

Inoltre si rileva un leggero aumento della temperatura di *light-off* con il crescere della portata che comunque rimane compresa tra $300 \div 350$ $^{\circ}C$.

Effetto della variazione della concentrazione di CO in ingresso

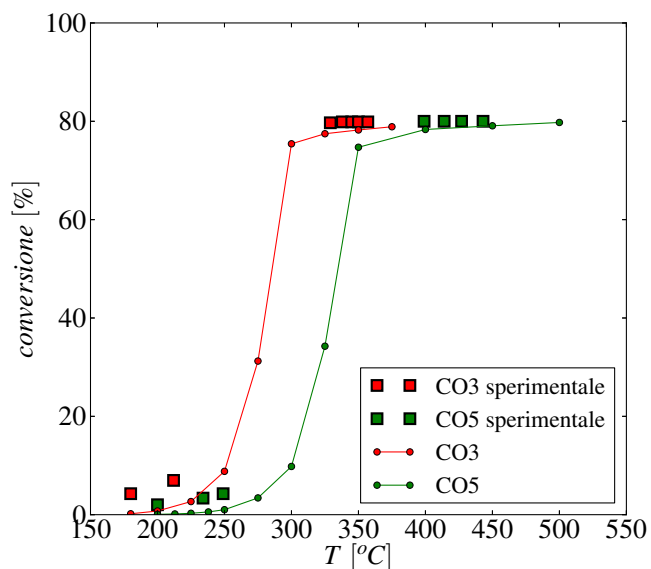


Figura 9.11: Effetto variazione concentrazione CO in ingresso

Un altro aspetto interessante è l'effetto della concentrazione di CO in ingresso sulle curve di conversione. Fissata la portata fluente pari a $6000 \text{ cm}^3/\text{min}$, si sono effettuate diverse prove al variare della temperatura per due differenti concentrazioni di CO in ingresso, in particolare 3% e 5% (v/v).

I risultati riportati in figura 9.2.2 e mostrano come per entrambe le prove si raggiunge lo stesso livello di conversione pari all'80% circa.

Si ha però una notevole variazione della temperatura di *light-off* che passa dai $250 \div 300 \text{ }^\circ\text{C}$, nel caso si ha una concentrazione di CO in ingresso pari al 3%, ai $300 \div 350 \text{ }^\circ\text{C}$, nel caso di concentrazione di CO pari al 5%.

Effetto della pressione del sistema

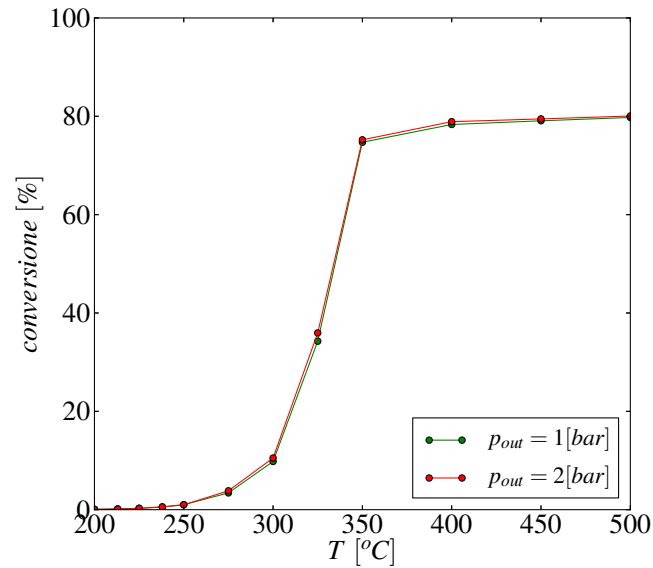


Figura 9.12: Effetto variazione pressione del sistema

La pressione del sistema è un possibile grado di libertà a disposizione. E' possibile dunque, a puro scopo valutativo, effettuare una simulazione in cui si fissa la pressione in uscita pari a 2 *bar* anziché l'usuale pressione atmosferica. I risultati riportati in Fig. 9.2.2 mostrano che le due curve ottenute a pressioni diverse sono sostanzialmente sovrapposte, infatti la temperatura di *light-off* stimata è pressoché identica così come la conversione asintotica raggiunta in controllo diffusivo.

Considerazioni finali sulle prove di attività catalitica

In conclusione Sulle prove di attività catalitica è possibile fare le seguenti considerazioni:

- In ogni prova si raggiunge ad alta temperatura ($T > 250^{\circ}\text{C}$) un plateau di conversione che diviene circa indipendente dalla temperatura;
- All'aumentare della concentrazione di CO si verifica un aumento della temperatura di *light-off*;
- La conversione asintotica è indipendente dalla concentrazione di CO alimentata;
- La temperatura di *light-off* e la concentrazione asintotica raggiunta sono indipendenti dalla pressione del sistema.

La presenza di un livello asintotico di conversione permette di confermare il raggiungimento delle condizioni di controllo diffusivo sulla velocità di conversione dei reagenti quando si è a temperature sufficientemente alte.

A tal proposito, la reazione di ossidazione di monossido di carbonio su metalli preziosi si può dire mostri una cinetica intrinseca di ordine negativo rispetto al reagente: a parità di temperatura la velocità della reazione diminuisce al crescere della concentrazione del reagente. Ciò si traduce in un aumento della temperatura di accensione al crescere della concentrazione di CO.

Tuttavia si raggiunge la stessa conversione asintotica, si può dire dunque che la reazione di ossidazione assume una cinetica apparente di pseudo primo ordine rispetto al reagente.

Quando si è in controllo diffusivo, l'ordine di reazione osservato, infatti, è unitario e la costante cinetica osservata è pari al coefficiente di trasporto di materia.

9.3 Coefficiente di trasporto di materia

L'utilizzo delle schiume in un qualsiasi processo catalitico, sia di catalisi ambientale che chimico, rende indispensabile comprendere l'influenza della morfologia delle schiume sul trasporto di materia. Dopo aver analizzato la geometria delle schiume in termini di lunghezze caratteristiche e di porosità, è possibile, attraverso le prove di attività catalitica eseguite esclusivamente in controllo diffusivo, valutare l'influenza della geometria del supporto sullo scambio di materia.

L'obiettivo finale sarà quello di adottare una correlazione adimensionale generale che sia in grado di predire il coefficiente di trasporto di materia in supporti catalitici strutturati tipo schiume.

Tale correlazione potrà essere successivamente applicata per stimare i coefficienti di scambio materiale, necessari quando si analizzano i problemi di trasporto su scala macroscopica.

9.3.1 Valutazione del coefficiente di scambio di materia

Per descrivere il sistema reagente su scala macroscopica è possibile utilizzare un approccio a parametri concentrati. Il bilancio materiale in condizioni stazionarie sul monossido di carbonio può essere espresso ipotizzando che il comportamento del sistema sia tipo "plug flow" isoterma, descritto con un modello matematico monodimensionale, e che la reazione di ossidazione sia irreversibile.

Scrivendo il bilancio molare su un volume infinitesimo dV ed esprimendo la portata molare in funzione della concentrazione e della portata volumetrica si ottiene:

$$\frac{d\dot{n}_{CO}}{dV} = Q \frac{dC_{CO}}{dV} = -r = -k_c C_{CO} = -k_m S_V C_{CO} \quad (9.2)$$

Poiché si sono raggiunte le condizioni di controllo diffusivo, l'ordine di reazione osservato è unitario e perciò la costante cinetica è pari al coefficiente di trasporto materiale.

La velocità di reazione è espressa in generale come $r = k_c C_{CO}$. Integrando sul volume del reattore e fra la concentrazione in ingresso e in uscita di CO si ottiene:

$$\ln \left(\frac{C_{CO}^{out}}{C_{CO}^{in}} \right) = -\frac{k_m S_V}{Q} V_0 \quad (9.3)$$

Utilizzando la conversione η definita secondo la 9.1, si ottiene l'espressione del coefficiente di scambio di materia k_m :

$$k_m = -\frac{\ln(1 - \eta)}{\frac{S_V V_0}{Q}} \quad (9.4)$$

in cui S_V è la superficie specifica in m^2/m^3 valutata secondo il modello geometrico a cella cubica (per omogeneità con quanto fatto nei test sperimentali), V_0 è il volume del reattore espresso in m^3 e Q è la portata volumetrica in m^3/s valutata nelle condizioni effettive di temperatura e pressione.

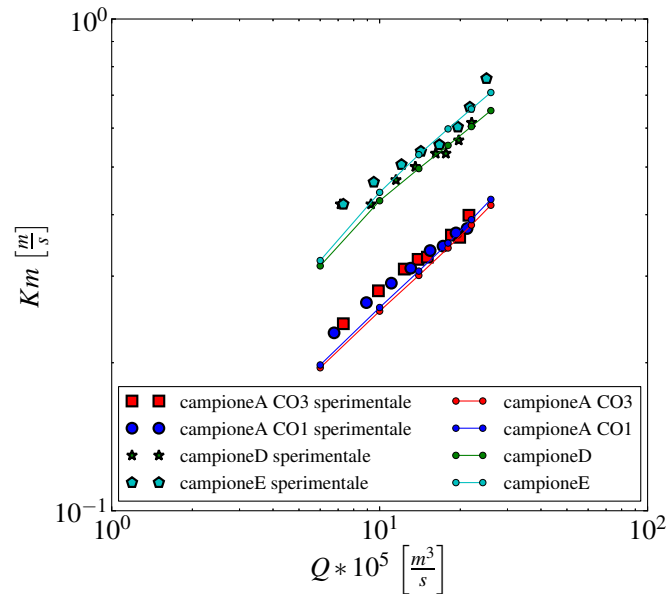


Figura 9.13: Coefficiente di trasferimento di massa

I risultati dell'analisi sono mostrati in Fig. 9.13 dove si riporta il coefficiente di scambio di materia in funzione della portata volumetrica valutata nelle condizioni effettive di temperatura e pressione.

La temperatura a cui sono state eseguite le prove è di $500\text{ }^\circ\text{C}$ in modo tale da essere sicuramente in un regime di controllo diffusivo delle velocità di conversione.

Le simulazioni sono state inoltre eseguite anche sui restanti campioni di cui si era in possesso dei dati misurati sperimentalmente e ciò ha confermato ulteriormente la bontà dell'implementazione.

In generale, osservando i dati ottenuti, è possibile dire che il coefficiente di scambio di materia:

- Aumenta al crescere della portata volumetrica effettiva per entrambi i campioni;
- Aumenta all'aumentare della superficie specifica del campione considerato;
- Non varia al variare della concentrazione di CO in ingresso.

9.3.2 Analisi adimensionale

Le proprietà di trasferimento di materia per il sistema in esame dipendono sostanzialmente:

- Dalle proprietà del fluido: densità, viscosità o diffusività;
- Dalla velocità superficiale;
- Dalle caratteristiche geometriche della struttura: porosità e una lunghezza caratteristica.

Quindi il coefficiente di scambio Km può essere espresso come:

$$Km = f(L, \epsilon, \nu, \rho, \mathcal{D}_{k,mix}, \eta) \quad (9.5)$$

Un'analisi dimensionale in questo caso può essere utile in quanto permette di sostituire le variabili indipendenti del problema con grandezze equivalenti espresse in forma adimensionale, che possono essere utilizzate per descrivere una qualsiasi relazione fisica o sperimentale legata al fenomeno fisico in esame. Attraverso tale analisi è possibile ridurre il numero delle grandezze necessarie per descrivere un determinato fenomeno fisico.

Sulla base del teorema di Buckingham, la relazione fra le grandezze può essere espressa da un'equazione contenente un numero p di gruppi adimensionali, costituiti con le r grandezze in gioco. I numeri adimensionali necessari sono dunque pari a $p = r - m$, essendo m il numero di grandezze fondamentali necessarie a esprimere le r grandezze. Il metodo dell'analisi dimensionale consente perciò di ridurre notevolmente il numero di prove richieste per lo studio del fenomeno in esame.

Tra le variabili individuate nell'Eq. 9.5 esiste dunque una relazione che descrive il fenomeno di trasporto e che può essere espressa in modo equivalente usando tre gruppi adimensionali tra loro indipendenti. Tipicamente i gruppi adimensionali adottati per quest'analisi sono i numeri di Sherwood Sh , Reynolds Re e Schmidt Sc .

In particolare il numero di Sherwood rappresenta il rapporto fra il flusso di materia che si realizza ad un'interfaccia e il flusso puramente diffusivo:

$$Sh = \frac{KmL}{\mathcal{D}_{k,mix}} \quad (9.6)$$

Esso serve a descrivere il trasporto di materia e può essere espresso in funzione del numero di Reynolds e di Schmidt utilizzando espressioni di questo genere:

$$Sh = 1.1Re^b Sc^{1/3} \quad (9.7)$$

In quanto alla dipendenza del numero di Sherwood dalle proprietà del fluido essa è ben rappresentata dalla relazione $Sh \simeq Sc^{1/3}$ [21]. I numeri di Reynolds e Schmidt possono essere valutati nel seguente modo:

$$Re = \frac{\rho U d_s}{\mu} \quad (9.8)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho \mathcal{D}_{k,mix}} \quad (9.9)$$

Essi descrivono rispettivamente le proprietà fluidodinamiche del sistema e le proprietà del fluido in esame.

Per considerare anche la dipendenza del numero di Sherwood dalle proprietà fluidodinamiche è possibile utilizzare in definitiva la correlazione proposta da Giani et al. [13], la quale è così formulata:

$$Sh = 0.91 Re_{max}^{0.43} Sc^{1/3} \quad (9.10)$$

Dove $Re_{max} = \frac{U d_s}{\nu}$. Essa, come mostrato in Fig. 9.14, approssima correttamente i risultati delle simulazioni per il calcolo del coefficiente di trasferimento di materia descritte in precedenza ed è valida per Re_{max} compresi tra 15 e 200. Questa relazione permetterà nel proseguo del capitolo di affrontare il problema della conversione delle specie chimiche da un punto di vista macroscopico.

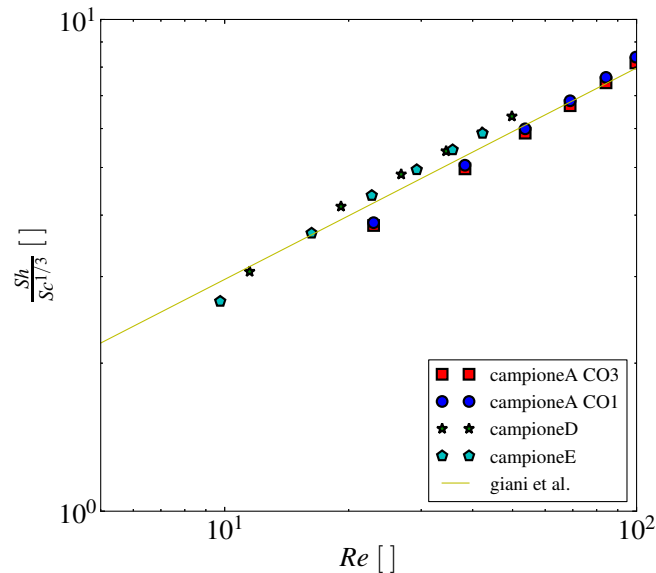


Figura 9.14: Correlazione tra il numero di Sherwood (Sh) e il numero di Reynolds (Re)

9.4 Approccio "macro"

Finora si è affrontato il problema della caratterizzazione della fluidodinamica e della conversione delle specie chimiche da un punto di vista puramente microscopico considerando limitate porzioni di schiuma per riprodurre il comportamento medio.

Per simulare però il comportamento microscopico di una schiuma utilizzata come substrato in un convertitore catalitico è però necessario considerare non più delle piccole porzioni, ma quantità ben più elevate per poter riprodurre correttamente il comportamento in ogni zona e non più quello medio.

Questo risulta impossibile da attuare in quanto avrebbe un costo computazionale non sostenibile.

Per risolvere il problema e caratterizzare almeno dal punto quantitativo tali casi è possibile adottare un approccio cosiddetto "macro", cioè che non considera più la microstruttura della schiuma, ma che sulla base dei dati ricavati per simulazioni "micro" su piccole porzioni della stessa schiuma riesce a riprodurre quantitativamente i risultati osservati sperimentalmente.

9.4.1 Verifica della consistenza dell'approccio "macro"

Per validare tale approccio si è deciso di riprodurre i risultati della sezione precedente riguardanti il coefficiente di trasferimento di materia Km utilizzando appunto un approccio "macro".

In generale è possibile definire una velocità media specifica al volume del campione considerato con cui si converte il CO:

$$W_{fuel} = \dot{m} \frac{Y_{CO}^{in} - Y_{CO}^{out}}{V_{campione}} \quad (9.11)$$

Essa in generale dipende dalla temperatura, dalla velocità in ingresso (Re) e dalla concentrazione di CO in ingresso.

Se si è in regime di controllo diffusivo però è possibile dire che la temperatura influenza in maniera trascurabile il problema, o meglio per ciò che si vuole fare, ovvero replicare i risultati riguardanti la stima del coefficiente di trasferimento di materia, è possibile ragionare a temperatura costante. Questo permette di eliminare una delle variabili e avere in definitiva:

$$W_{fuel} = f(Re, Y_{CO}^{in}) \quad (9.12)$$

Per stimare tale parametro al variare di Re e Y_{co} è possibile ricorrere alla correlazione (Eq. 9.10) riportata nella sezione precedente, essa permette la stima del coefficiente di trasporto di materia a partire dalla conoscenza del

numero di Re e del numero di Schmidt calcolabili a partire da grandezze note come la velocità in ingresso e la temperatura media del flusso.

Invertendo poi la relazione 9.4 è possibile ricavare il valore della percentuale di conversione η che si otterrà all'uscita del campione.

Dalla definizione di quest'ultima (Eq. 9.1) è possibile infine, a partire dalla conoscenza della concentrazione di CO in ingresso Y_{CO}^{in} , stimare la velocità di conversione media specifica W_{fuel} .

In definitiva si riporta l'espressione completa di W_{fuel} ottenuta secondo quanto esposto nei precedenti passaggi:

$$W_{fuel} = \dot{m} \frac{Y_{CO}^{in} - Y_{CO}^{out}}{V_{campione}} = \dot{m} \frac{Y_{CO}^{in} \eta}{V_{campione}} = \dot{m} \frac{Y_{CO}^{in} \left(1 - e^{(-Km \frac{S_V V_0}{Q})} \right)}{V_{campione}} \quad (9.13)$$

dove, ricordando che $Sh = \frac{K m d_s}{\mathcal{D}_{CO, mix}}$, Km può essere ricavata utilizzando la correlazione di Giani et Al.[13](Eq. 9.10), come:

$$Km = \frac{1.1 Re^{0.43} Sc^{1/3} \mathcal{D}_{CO, mix}}{d_s} \quad (9.14)$$

A partire da queste relazioni è possibile dunque puntualmente determinare al variare del numero di Reynolds (che influenza la portata Q) e della concentrazione di CO in ingresso la relativa velocità di conversione media specifica W_{fuel} da applicare cella per cella in modo da riprodurre dal punto di vista macroscopico il fenomeno che in realtà avviene su scala microscopica. Questa metodologia appena presentata è valida solo se si abbiano delle temperature tali per cui il fenomeno della conversione delle specie chimiche sia governato dal processo di diffusione. Per temperature inferiori dove il fenomeno è in genere governato dal processo di reazione, tale metodologia perde la sua validità, in quanto la correlazione proposta perde essa stessa di validità.

In quest'ultimo caso è possibile ancora adottare un approccio "macro", ma è necessario determinare i valori di W_{fuel} a partire da simulazioni su scala microscopica di porzioni limitate del campione considerato (2 celle elementari) per alcune combinazioni di numero di Reynolds e di concentrazione di CO in ingresso. Da queste prove è possibile determinare la concentrazione di CO in uscita e ricavare perciò direttamente tramite la relazione 9.11, in cui il $V_{campione}$ è quello del campione delle prove microscopiche, i valori di W_{fuel} al variare di Re ed Y_{CO}^{in} che verranno poi interpolati per avere una stima puntuale.

Naturalmente è necessario riprodurre correttamente anche le perdite di carico che si hanno durante l'attraversamento del campione di schiuma. A tal

proposito è possibile utilizzare l'equazione di Darcy-Forchheimer presentata al Cap. 6, adottando i corretti coefficienti d ed f stimabili, come visto, attraverso la conoscenza di un adeguato numero di valori di $\Delta p/L$ al variare della velocità in ingresso.

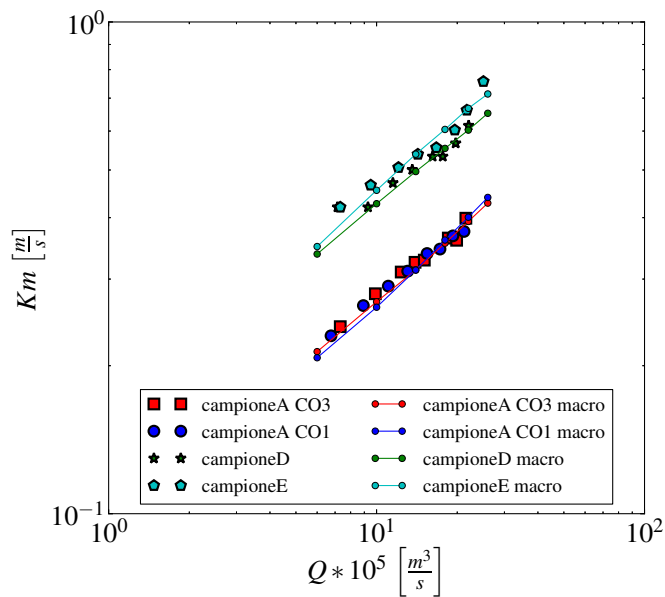


Figura 9.15: Coefficiente di trasferimento di materia determinato con simulazioni macro

I risultati ottenuti per quanto riguarda la riproduzione "macro" delle simulazioni "micro" per il calcolo del coefficiente di trasferimento di materia effettuato in precedenza sono mostrati in Fig. 9.15, da essi è possibile notare la consistenza dell'approccio "macro" appena descritto.

Capitolo 10

Applicazione della schiuma in un convertitore

Questo capitolo si propone di effettuare un confronto quantitativo per quanto riguarda la bontà dell'utilizzo effettivo di una schiuma metallica come supporto per il substrato catalitico in sostituzione dei tradizionali monoliti a nido d'ape in sistemi di after-treatment per MCI.

Dopo aver validato il modello implementato, confrontando, sia dal punto di vista delle perdite di carico che delle conversioni delle specie chimiche, i risultati ottenuti dalle simulazioni con i dati sperimentali a disposizione è possibile ora valutare diverse tipologie di supporti per reattori catalitici.

In particolare ciò che si vuole investigare è se l'effettivo utilizzo di schiume metalliche può essere più efficiente rispetto ai comuni monoliti a nido d'ape utilizzati nei sistemi per l'abbattimento delle emissioni nocive.

In queste applicazioni si hanno livelli molto alti di conversione delle specie inquinanti che sono tipicamente raggiunti in condizioni di controllo diffusivo. Il raggiungimento di tali livelli di conversione deve coincidere però con basse perdite di carico subite dal fluido durante l'attraversamento del convertitore in modo da non penalizzare eccessivamente il funzionamento del motore. Se infatti si hanno grosse perdite di carico nel sistema di post-trattamento ciò implica che senz'altro nel condotto di scarico del motore si avranno pressioni più elevate e ciò limita l'espansione dei gas combusti che dovranno essere espulsi a pressioni maggiori con conseguente perdita di lavoro utile.

Dovrà essere dunque valutato il trade-off tra conversione-perdite di carico che si ha nelle diverse strutture di supporto in esame.

Oltre a questi aspetti che rappresentano le caratteristiche funzionali, si vuole analizzare come varia la quantità di metalli nobili da inserire nel convertitore ai fini di ottenere alti livelli di conversione anche a temperature basse. Se l'adozione di una nuova struttura dovesse infatti risultare effettivamente favorevole ai fini della conversione delle specie inquinanti la quantità richiesta

di questi elementi per ottenere lo stesso livello di conversione sarà inferiore con un conseguente risparmio economico dato che essi rappresentano il costo più rilevante nella realizzazione di un convertitore.

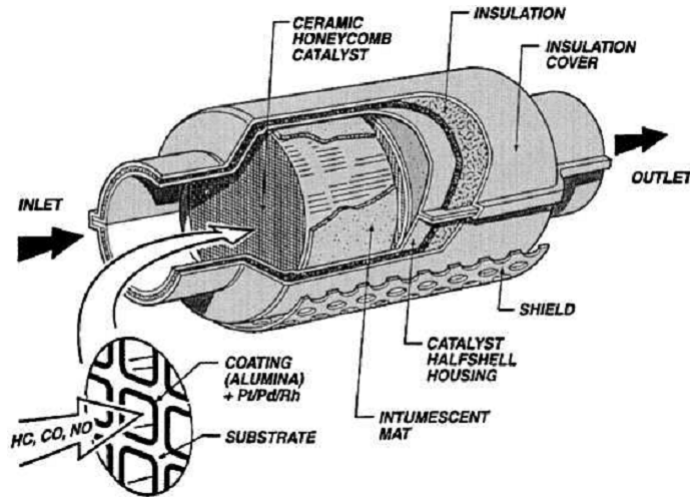


Figura 10.1: Conversione catalitico trivalente con comune struttura *honeycomb*

10.1 Valutazione del livello di conversione

Ciò che si vuole investigare in questa sezione riguarda la lunghezza necessaria, al variare della tipologia di struttura, per raggiungere uno stesso livello di conversione fissato.

Tale analisi è stata condotta confrontando la schiuma denominata come campione *E* con una tipica struttura honeycomb utilizzata per sistemi di post-trattamento in MCI la quale è caratterizzata da una porosità ϵ pari a 0.7 e una densità di celle pari a 400 *cp*.

Per quanto riguarda il settaggio delle simulazioni, esse sono state condotte considerando una velocità di ingresso pari a 10 *m/s* e una concentrazione di CO in ingresso del 5% (*v/v*). Si sono perciò valutate le conversioni al variare della lunghezza del reattore normalizzata per l'occasione rispetto alla velocità in ingresso. I risultati di tali simulazioni effettuate sono riportati in figura Fig. 10.2.

Dai risultati ottenuti si può osservare come la lunghezza del reattore necessaria per raggiungere un pari livello di conversione è nettamente inferiore nel caso si utilizzi una schiuma come supporto per il substrato catalitico anziché una comune struttura honeycomb.

Questo risultato è molto interessante in quanto spesso in varie applicazioni

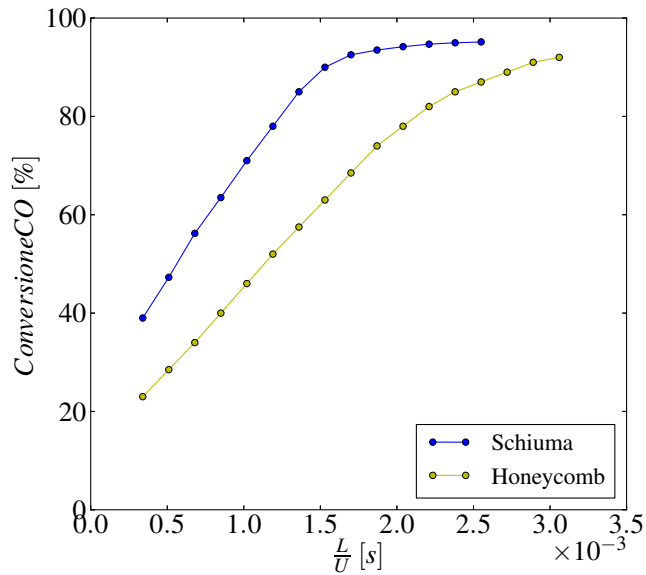


Figura 10.2: Conversione di CO ottenuta al variare della lunghezza del reattore considerando una velocità in ingresso pari a 10 m/s ed una concentrazione di CO in ingresso pari al 5%

è richiesto un basso peso e dimensioni compatte. A proposito di quest'ultimo aspetto, un reattore più compatto è caratterizzato da una minore inerzia termica, ciò influenza positivamente la risposta ai transitori che si hanno ad esempio durante le fasi di accensione e variazione di regime, tipiche di applicazioni nei MCI

10.2 Valutazione delle perdite di carico

Per valutare la bontà dell'adozione di una schiuma rispetto ad una struttura *honeycomb* è necessario, oltre alla conversione delle specie chimiche, considerare le perdite di carico che subisce il fluido durante l'attraversamento del reattore.

Tipicamente a parità di lunghezza una struttura a nido d'ape dà luogo a minori perdite di carico. Ragionando però a pari livello di conversione raggiunta le cose cambiano sostanzialmente in quanto una struttura *honeycomb* richiede, come visto nella sezione precedente, una lunghezza decisamente superiore. Per valutare tale aspetto si riportano in Fig. 10.3 i risultati delle simulazioni prima descritte, in termini di Δp valutato in funzione della conversione di CO avvenuta tra ingresso e uscita.

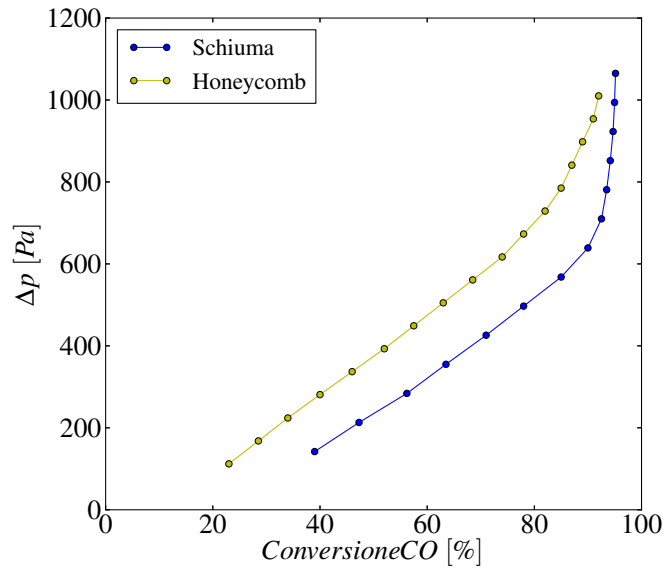


Figura 10.3: Perdita di carico ottenuta al variare della percentuale di conversione delle specie chimiche considerando una velocità in ingresso pari a 10 m/s ed una concentrazione di CO in ingresso pari al 5%

Tali risultati mostrano che in effetti a parità di lunghezza una struttura *honeycomb* dà luogo a minori perdite di carico rispetto ad una schiuma, ma raggiunge un livello inferiore di conversione. Per ottenere lo stesso livello è necessario avere un condotto decisamente più lungo nel caso della struttura a nido d'ape che per tal motivo risulta darà luogo a perdite di carico nettamente superiori. Quanto ora esposto è vero finché non si desidera raggiungere conversioni prossime al 100%, in tal caso si avrebbero in entrambi i casi lunghezze molto elevate e considerato il fatto che le perdite di carico in una struttura honeycomb a nido d'ape aumentano in maniera meno rapida con la lunghezza rispetto a quanto avviene in una schiuma, ad un certo punto si avrebbe un'intersezione delle due curve di Fig. 10.3, come si può già intuire dalla pendenza nel tratto finale delle due curve o quantomeno il raggiungimento di un valore limite comune. A questo punto aumentando ulteriormente la lunghezza per raggiungere livelli di conversione più elevati si perderebbe il vantaggio delle minori perdite di carico date dall'utilizzo della schiuma.

Tale aspetto è strettamente legato all'appiattimento delle curve di conversione al variare della lunghezza che si osserva in Fig. 10.2. Esso è spiegabile considerando che il fenomeno in questione si trova in un range sotto controllo diffusivo, in cui cioè la velocità di conversione delle specie chimiche è lim-

itata dal fenomeno di trasferimento di massa tra fluido e substrato attivo, il quale dipende in sostanza dal gradiente di concentrazione e dalla superficie disponibile. A questo punto entra in gioco un aspetto di cui non si è finora tenuto conto, cioè la superficie specifica delle due strutture utilizzate. Questo parametro risulta molto diverso nei due casi analizzati, in particolare la struttura honeycomb presenta una superficie specifica che è circa doppia rispetto a quella della schiuma.

Quando si hanno alte concentrazioni da abbattere la schiuma risulta decisamente più efficiente in quanto, pur avendo una superficie specifica inferiore, la sua morfologia random consente ai vari filetti fluidi di trasferire massa alla parete sotto un gradiente sempre elevato di concentrazione, mentre una geometria regolare come quella degli honeycomb risulta penalizzata sotto questo punto di vista. Ciò spiega perché inizialmente la schiuma per lunghezze limitate dà luogo a livelli di conversione più elevati di quelli della struttura *honeycomb*.

All'aumentare della lunghezza però la concentrazione di reagenti nel fluido diminuisce e perciò il gradiente di concentrazione tra fluido e parete in entrambi i casi si riduce drasticamente causando un più lento innalzamento del livello di conversione all'aumentare della lunghezza del reattore. In queste condizioni ciò che pesa maggiormente sul livello di conversione raggiungibile è la quantità di superficie disponibile che come prima evidenziato nelle strutture *honeycomb*, a parità di lunghezza, è decisamente superiore. In queste condizioni l'utilizzo di una schiuma diventa perciò penalizzante.

10.3 Condiderazione aggiuntive

Come detto, già a parità di lunghezza la schiuma ha una superficie specifica che risulta inferiore, questo aspetto fa sì che già ragionando a parità di lunghezza e loading del reattore si avrebbe una quantità di metalli nobili che risulta sostanzialmente ridotta nel caso si utilizzi la schiuma. Se poi si considera che per raggiungere un determinato livello di conversione nel caso della schiuma la lunghezza richiesta è decisamente inferiore, il vantaggio appena discusso diventa ancor più rilevante, con conseguente risparmio dal punto di vista economico.

Per quanto sinora osservato è possibile affermare che l'adozione di una schiuma in sostituzione dei comuni monoliti a nido d'ape risulta sicuramente vantaggioso sia dal punto di vista funzionale (minori perdite di carico a pari livello di conversione raggiunto) che economico (minore quantità di metalli nobili richiesta).

Quanto appena dichiarato è in generale sicuramente vero, finché non sono richiesti livelli di conversione prossimi al 100%. In tal caso, come descritto

nella sezione precedente, ad un certo punto si avrebbe che le perdite di carico derivanti dall'utilizzo di una struttura honeycomb a nido d'ape risultano inferiori a quelle derivanti dall'utilizzo di una schiuma.

Da questa osservazione è possibile pensare in questi casi all'utilizzo di una struttura ibrida composta da un primo tratto di schiuma, in modo da raggiungere rapidamente, con una lunghezza relativamente limitata, un livello di conversione elevato (ad esempio nel caso in esame 95% circa), ma non ancora pari a quello desiderato. Dopodichè proseguire con un secondo tratto di struttura honeycomb in cui la maggiore superficie specifica permette di elevare il livello di conversione all'aumentare della lunghezza senza però penalizzare eccessivamente le perdite di carico quando le concentrazioni delle specie inquinanti in gioco sono molto limitate.

Conclusioni e sviluppi futuri

Questo lavoro intende valutare, attraverso un'analisi CFD, la possibilità di utilizzare una schiuma metallica come supporto per il substrato catalitico in un convertitore trivalente, considerando in particolare l'applicazione in sistemi di post-trattamento di MCI. In tale settore è comunemente utilizzato un monolite a nido d'ape il quale presenta ampie superfici di scambio e dà luogo a contenute perdite di carico.

Per valutare la bontà dell'utilizzo di una schiuma rispetto ad una comune struttura a nido d'ape è necessario considerare sia l'efficienza di conversione raggiunta che le perdite di carico ottenute, in quanto queste potrebbero penalizzare il funzionamento del motore.

Prima di passare alla valutazione dei singoli aspetti è stato fondamentale innanzitutto riprodurre la struttura dei campioni di schiume analizzati. A questo scopo sono stati adottati due diversi modelli geometrici: a cella cubica e kelvin cell. Il primo modello è molto semplificato e riproduce solo in modo qualitativo i parametri caratteristici di una schiuma, il secondo modello invece è più complesso e riproduce in modo migliore i parametri caratteristici di interesse, in particolare la superficie specifica.

Il primo passo nello studio della fluidodinamica di una schiuma è stato quello di valutare il modo ottimale per studiare con l'analisi CFD una schiuma. Gli aspetti che si sono presi in considerazione sono: tipologie di simulazioni considerate (stazionarie/instazionarie, comprimibili/incomprimibili, porzione di schiuma considerata), tipologia di mesh adottata (esaedrica, poliedrica o tetraedrica), modello di turbolenza, adozione di una mesh con boundary layer e numero di celle elementari considerato.

Dopo aver valutato le influenze di tali aspetti sui risultati ottenuti e aver verificato la validità dell'ipotesi di continuità (implementando le condizioni al contorno secondo Maxwell e verificando che non ci siano differenze nei valori delle perdite di carico stimate per le schiume normalmente utilizzate nelle applicazioni industriali), si è passato a caratterizzare la fluidodinamica di alcuni campioni di schiuma. È stata dunque verificata la bontà di ciascun modello geometrico nello stimare la caduta di pressione a seguito del flusso del campione in esame confrontando i risultati ottenuti dalle simulazioni

con quelli osservati sperimentalmente. A tal proposito il modello kelvin cell risulta il più affidabile nella stima, anche se il modello a cella cubica riesce comunque a fornire indicazioni almeno qualitative del comportamento fluidodinamico. Entrambi i modelli base utilizzati hanno mostrato un'eccessivo scostamento dai dati sperimentali, si è perciò proposta una correzione qualitativa dei parametri necessari a descrivere ciascun modello sulla base della conoscenza dei parametri caratteristici che hanno più influenza sulla fluidodinamica, ovvero porosità e superficie specifica.

Prima di passare alla validazione del processo di conversione delle specie chimiche si è condotta un'ulteriore analisi sull'influenza che ha la forma dei filamenti sulle perdite di carico e sullo scambio termico confrontando diverse geometrie (quadrata, rombica e triangolare) con quella normalmente usata, cioè la sezione circolare.

Per studiare il processo di conversione delle specie chimiche è stata fondamentale l'implementazione di vari modelli per riprodurre lo scambio di massa, la chimica e lo scambio termico che si hanno in presenza di una superficie catalizzata e che in definitiva consentono di stimare la velocità con cui i reagenti si convertono in prodotti.

Per validare tale implementazione si sono utilizzati i dati sperimentali relativi ad un semplice reattore catalitico disponibili in letteratura. Si è successivamente passati alla caratterizzazione del processo di conversione sulle schiume cercando di riprodurre, utilizzando sia i modelli geometrici di base che quelli corretti, i risultati sperimentali che però erano disponibili solo nella zona di controllo diffusivo.

A questo punto si è passati all'implementazione di un approccio di tipo macroscopico per lo studio combinato di perdite di carico (modellate attraverso la legge di Darcy-Forchheimer) e conversioni (stimate attraverso correlazioni o in alternativa simulazioni su porzioni molto ridotte della schiuma), e si è verificata la sua consistenza calcolando il valore del coefficiente di trasferimento di massa e confrontandolo con quello stimato da analoghe simulazioni alla micro-scala.

Dopo aver caratterizzato in dettaglio perdite di carico e conversioni ed aver validato i relativi modelli di calcolo è stato possibile infine fare il confronto fra schiuma e honeycomb a nido d'ape utilizzati come supporto per substrati catalitici in un convertitore trivalente. Considerando le tipiche dimensioni geometriche di queste tipologie di supporti, si è valutata la lunghezza del convertitore necessaria per ottenere un determinato livello di conversione. In questo confronto la schiuma si è rivelata nettamente migliore in quanto necessita di una lunghezza decisamente inferiore con la conseguenza di richiedere, a parità di loading, minori quantità di metalli nobili. Riguardo le perdite di carico, anche qui la schiuma si rivela migliore per i normali livelli di con-

versione fino a circa 90 ÷ 95%, mentre, per livelli di conversione prossimi al 100%, la struttura honeycomb a parità di livello di conversione raggiunto dà luogo a minori perdite di carico.

Questa osservazione consente di ipotizzare un uso combinato di entrambe le strutture nel caso si vogliano raggiungere altissime efficienze di conversione, in un dispositivo che monti in serie un substrato costituito da una schiuma a celle aperte e un monolite a nido d'ape. Infatti, la schiuma iniziale permetterebbe di ottenere la conversione di una percentuale consistente degli inquinanti quando la loro concentrazione è elevata con una perdita di carico limitata, mentre la successiva struttura a nido d'ape consentirebbe di elevare ulteriormente il livello di conversione fino al rispetto del limite imposto alla concentrazione di inquinanti all'uscita del dispositivo.

Bibliografia

- [1] D.P. Haack. L'enciclopedia degli idrocarburi.
- [2] M.V. Twigg and J.T. Richardson. Theory and applications of ceramic foam catalysts. Chemical Engineering Research and Design, 80(2):183 – 189, 2002.
- [3] John Banhart. Manufacture, characterisation and application of cellular metals and metal foams. Progress in Materials Science, 46(6):559 – 632, 2001.
- [4] Minh Tan Hoang. Multi-scale and multi-physics modeling and simulation of acoustic behavior of poroelastic media-application to low density foam. Tesi di dottorato, Universite Paris-Est.
- [5] Augusto Della Torre. Multi-scale CFD modeling of intake and exhaust system for internal combustion engines. Tesi di dottorato, Politecnico di Milano.
- [6] Gian Carlo Tabaroni. Studio del moto dei fluidi in mezzi porosi. Tesi di dottorato, Universita degli Studi di bologna.
- [7] Prieur Du Plessis, Agnes Montillet, Jacques Comiti, and Jack Legrand. Pressure drop prediction for flow through high porosity metallic foams. Chemical Engineering Science, 49(21):3545 – 3553, 1994.
- [8] L.J. Gibson and M.F. Ashby. Cellular Solids, Structure and Properties. Pergamon Press, Oxford, 1988.
- [9] T.J. Lu, H.A. Stone, and M.f. Ashby. Heat transfer in open-cell metal foam. Acta Metall., 10(46):3619–3635, 1998.
- [10] J.G. Fourie and J.P. Du Plessis. Pressure drop modelling in cellular metallic foams. Chemical Engineering Science, 57(14):2781 – 2789, 2002.

- [11] Roy M. Sullivan, Louis J. Ghosn, and Bradley A. Lerch. A general tetrakaidecahedron model for open-celled foams. International Journal of Solids and Structures, 45(6):1754–1765, 2008.
- [12] Francesco Lucci, Augusto Della Torre, Jan von Rickenbach, Gianluca Montenegro, Dimos Poulikakos, and Panayotis Dimopoulos Eggenchwiler. Performance of randomized kelvin cell structures as catalytic substrates: Mass-transfer based analysis. Chemical Engineering Science, (0):-, 2014.
- [13] Leonardo Giani, Gianpiero Groppi, and Enrico Tronconi. Mass-transfer characterization of metallic foams as supports for structured catalysts. Industrial and Engineering Chemistry Research, 44(14):4993–5002, 2005.
- [14] Jouane Ahmed, Cuong Pham-Huu, and David Edouard. A predictive model based on tortuosity for pressure drop estimation in slim and fat foams. Chemical Engineering Science, 66(20):4771 – 4779, 2011.
- [15] Amer Inayat, Hannsjörg Freund, Thomas Zeiser, and Wilhelm Schwieger. Determining the specific surface area of ceramic foams: The tetrakaidecahedra model revisited. Chemical Engineering Science, 66(6):1179 – 1188, 2011.
- [16] P. C. Baruah. Numerical Solution of non-steady flows with variable specific heats and chemical reactions. MacGraw-Hill, Oxford, 1986.
- [17] G.C. Koltsakis, P.A. Konstantinidis, and A.M. Stamatelos. Development and application range of mathematical models for 3-way catalytic converters. Applied Catalysis Environmental, 12(2 - 3):161 – 191, 1997.
- [18] E. Tronconi and G. Groppi. A study on the thermal behavior of structured plate-type catalysts with metallic supports for gas/solid exothermic reactions. Chemical Engineering Science, 55(24):6021 – 6036, 2000.
- [19] G. Groppi, W. Ibashi, E. Tronconi, and P. Forzatti. Structured reactors for kinetic measurements under severe conditions in catalytic combustion over palladium supported systems. Catalysis Today, 69(1-4):399 – 408, 2001. Structured Catalysts and Reactors.
- [20] Guilhem Guilhem Lacaze. Arrhenius kinetic parameters for a reversed equilibrium reaction. CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique), 2006.

- [21] Eni. in proceedings asme int. mechanical engineering congress expo 2001. ASME, 2001.

Lista dei simboli

Lettere latine

\dot{Q}	Potenza termica generata per unità di volume [W]
p	Pressione [Pa]
R	Costante universale dei gas [J/kgK]
T	Temperatura [K]
MM	Massa molare [$kg/kmol$]
$\overline{\overline{D}}$	Tensore delle deformazioni [–]
Q_s	Generico termine di sorgente attraverso il contorno del sistema
Q_v	Generico termine di sorgente nel volume del sistema
t	Tempo [s]
\vec{U}	Velocità [m/s]
\vec{f}	Forze di campo volumetriche [N/kg]
E	Energia totale [J/kg]
\vec{q}	Flusso termico [W/m]
e	Energia interna [J/kg]
\vec{g}	Accelerazione gravitazionale [m/s^2]
V	Volume [m^3]
\vec{V}	Velocità di diffusione [m/s]
S	Superficie [m^2]
\hat{n}	Versore normale [–]
e	Indice di vuoto [–]
L_c	Dimensione di cella [m]
d_p	Dimensione di poro [m]
d_s	Dimensione della struttura [m]
S_V	Superficie specifica [$1/m$]
\vec{j}	Flusso diffusivo molecolare [$kg/(m^2 s)$]
Y	Frazione massica [–]
c	Frazione molare [–]
A	Costante pre-esponenziale [$molK/(m^2s)$]
E_{att}	Energia di attivazione [J/mol]
N_s	Numero di celle elementari [–]
N_c	Numero di specie nella miscela [–]
W_{fuel}	Velocità di conversione specifica [$kg/(m^3 s)$]

Lettere latine

k	Energia cinetica turbolenta [J/kg]
h	Entalpia [J/kg]
l_d	Lunghezza caratteristica della scala di Kolmogorov [m]
U_d	Velocità caratteristica della scala di Kolmogorov [m/s]
λ_t	Conducibilità turbolenta [W/mK]
\mathcal{D}	Coefficiente di diffusione [m^2/s]
Km	Coefficiente di trasferimento di massa [m/s]

Lettere Greche

Φ	generica grandezza [-]
$\bar{\bar{\sigma}}$	tensore degli sforzi [N/m^2]
$\bar{\tau}$	Parte viscosa del tensore degli sforzi [Pa]
μ	Viscosità dinamica [$Pa\cdot s$]
Ξ	Viscosità cinematica [m^2/s]
μ_T	Viscosità turbolenta [$Pa\cdot s$]
ϵ	Porosità [-]
λ_t	Coefficiente di conducibilità termica [W/mK]
λ	Secondo coefficiente di viscosità [$Pa\cdot s$]
ρ	Densità del fluido [kg/m^3]
Δ	Variazione [-]
σ	Diametro della particella di gas [nm]
Ω_D	Integrale di collisione [-]
γ	Rapporto tra i calori specifici [-]
$\dot{\Omega}$	Massa generata per unità di volume [$kg/(m^3s)$]
σ_V	Tangential momentum accommodation coefficient [-]
σ_T	Thermal accommodation coefficient [-]

Pedici

<i>in</i>	Grandezza in ingresso
<i>out</i>	Grandezza in uscita
<i>c</i>	Contributo convettivo
<i>d</i>	Contributo diffusivo
<i>s</i>	Termine di superficie
<i>v</i>	Termine di volume
<i>i</i>	Componente del vettore in direzione x
<i>j</i>	Componente del vettore in direzione y
<i>p</i>	Grandezza nel centro della cella
<i>f</i>	Grandezza sul centro faccia della cella
<i>N</i>	Centro della cella neighbour

Gruppi adimensionali e sigle

<i>MCI</i>	Motore a combustione interna
<i>BL</i>	Boundary layer
<i>Cu</i>	Numero di Courant
<i>CFD</i>	Computation fluid dynamics
<i>Re</i>	Numero di Reynolds
<i>Sc</i>	Numero di Schmidt
<i>Sh</i>	Numero di Sherwood
<i>Kn</i>	Numero di Knudsen
<i>Nu</i>	Numero di Nusselt