POLITECNICO DI TORINO

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Aerospaziale

Tesi di Laurea Magistrale

Applicazione del metodo DSMC a flussi di interesse propulsivo



#### Relatore

Prof. Michele Ferlauto

Candidato

Melania Russo

Anno Accademico 2021-2022

Alla mia famiglia

Ai miei Amici

# ABSTRACT

L'obiettivo del presente lavoro è lo studio del metodo *Direct Simulation Monte Carlo* (DSMC) e della sua applicazione a flussi di interesse nella propulsione aerospaziale. Il DSMC è un approccio di tipo fisico-probabilistico, basato sull'equazione di Boltzmann ed utilizzato in particolare per lo studio di problemi fisici che coinvolgono flussi rarefatti. Il solutore utilizzato per i *test case* proposti è il *dsmcFoam* della suite *open-source* OpenFOAM. Alcuni dei casi presi in esame coinvolgono flussi all'interno di ugelli o micro-ugelli e problematiche di rientro in atmosfera.

# INDICE

LISTA DELLE FIGURE	6
LISTA DELLE TABELLE	9

Capitolo I: Introduzione	.11
Struttura della tesi	.13
1.1. La teoria cinetica dei gas e l'equazione di Boltzmann	.14
1.2.La distribuzione di Boltzmann	.18
1.3. Il modello molecolare	.21
1.4. La necessità di una descrizione molecolare	.22
1.5. Le proprietà di trasporto di Chapman-Enskog	.30

Capitolo II: Il metodo Monte Carlo	32
2.1. Modellazione fenomenologica	35
<b>2.2.</b> La meccanica delle collisioni binarie	37
2.3. Modelli molecolari per il DSMC e modelli di collisioni elastiche	.42
2.4. Modelli per l'energia interna	.44
<b>2.4.1.</b> Rotational energy exchange	46
<b>2.4.2.</b> Vibrational energy exchange	.49
<b>2.4.3.</b> Il modello di Larsen-Borgnakke	50
<b>2.5.</b> Interazioni gas-superficie	52

Capitolo III: Il metodo numerico dsmcFoam	54
<b>3.1.</b> OpenFOAM: Introduzione al software	55
<b>3.2.</b> Sviluppo del codice dsmcFoam	56
<b>3.3.</b> Algoritmo base	59

<b>3.4.</b> Descrizione del solver dsmcFoam63
<b>3.5.</b> Sensibilità del codice
<b>3.6.</b> Selezione delle coppie di collisione in dsmcFoam: No Time Counter72
<b>3.7.</b> Buondary Conditions in dsmcFoam
<b>3.8.</b> Sampling
<b>3.9.</b> Convergenza ed errori nella simulazione
3.10. Confronto particle methods: DSMC-PIC
Capitolo IV: Simulazioni numeriche di configurazioni di base
<b>4.1.</b> Colpo d'ariete
<b>4.2.</b> Flusso ipersonico sul cuneo
<b>4.3.</b> Flusso ipersonico attorno al cilindro103
Capitolo V: Rientro della capsula CEV in atmosfera
<b>5.1.</b> Capsula di rientro109
5.2. Capsula Orion CEV110
<b>5.3.</b> Capsula di rientro immersa in un flusso di Argon112
5.4. Rientro della capsula CEV in atmosfera terrestre114
5.5. Rientro della capsula CEV in atmosfera marziana123
Capitolo VI: Espansione del flusso nell'ugello divergente
Conclusioni141
Bibliografia142
Ringraziamenti

## LISTA DELLE FIGURE

Numero Pagina
1. Distribuzione di velocità di Maxwell-Boltzmann
2. Distribuzione della velocità in funzione della temperatura
3. I limiti di Kn sui modelli matematici
4. Regimi di gas in funzione della densità e lunghezza caratteristica
5. Diversi regimi molecolari in funzione del Mach e Re
6. Diversi scenari per alti Kn
7. La transizione dai modelli di analogia meccanica a quelli fenomenologici $35$
8. Collisione elastica tra due molecole
9. Struttura della directory di dsmcFoam
10. Capacità del dsmcFoam
11. Algoritmo base del metodo DSMC60
12. Diagramma UML semplificato per le particelle in OpenFOAM
13. Diagramma UML semplificato per i cloud in OpenFOAM
14. Diagramma UML semplificato per BinaryCollisionModels in OF
15. Simulazione DSMC del gas Argon in a cube di dimensione laterale L,
con pareti speculari sui contorni
16. Schema delle collisioni binarie
17. Modello di interazione gas-superficie
18. Andamento lungo il condotto della (a) velocità media (b) pressione (c)
densità (d) number density (e) temperatura - colpo d'ariete93-95
19. Confronto tra soluzione teorica e dsmcFoam (t=0.018s) - colpo d'ariete97
20. Campo di pressione - Flusso supersonico sul cuneo
21. Andamento della pressione lungo x ad y=0.1 m per $\Delta t$ = (a) 2e-6 s
(b) 5e-7 s (c) 8e-7 s - Flusso supersonico sul cuneo100

22. Andamento del number density lungo x ad y=0.1 m nel caso
(a) Kn=0.17 e (b) Kn=1 - Flusso supersonico sul cuneo102
23. Campo di pressione a (a) Kn=0.17 e (b) Kn=1
- flusso supersonico sul cuneo103
24. Dominio computazionale - flusso ipersonico attorno al cilindro104
25. Mesh computazionale (a) con zoom (b)
- flusso ipersonico attorno al cilindro104
26. Confronto caso continuo e rarefatto: (a) temperatura (b) velocità
(c) Mach – flusso ipersonico attorno al cilindro106-107
27. Campo di densità nel caso rarefatto (a) e continuo (b)
– flusso ipersonico attorno al cilindro108
28. Progetto Orion CEV111
29. Mach (a) e Campo di temperatura (b)- capsula di rientro (Argon)113
30. Mesh computazionale - capsula CEV in atmosfera terrestre116
31. Campi del (a) Mach, (b) temperatura, (c) pressione e (d) number density
– capsula CEV in atmosfera terrestre117-118
32. Velocity Streamlines - capsula CEV in atmosfera terrestre119
33. Pressure contours - capsula CEV in atmosfera terrestre119
34. Mach contours - capsula CEV in atmosfera terrestre120
35. Velocity vectors - capsula CEV in atmosfera terrestre120
36. Andamento della pressione lungo la superficie della capsula
– capsula CEV in atmosfera terrestre121
37. Andamento della temperatura lungo la superficie della capsula
– capsula CEV in atmosfera terrestre121
<ul> <li>- capsula CEV in atmosfera terrestre</li></ul>
<ul> <li>- capsula CEV in atmosfera terrestre</li></ul>
<ul> <li>- capsula CEV in atmosfera terrestre</li></ul>

41. (a) Campo di velocità , (b) number density, (c) temperatura e
(d) pressione – capsula CEV in atmosfera marziana127-128
42. Andamento della pressione lungo la superficie della capsula
– capsula CEV in atmosfera marziana129
43. Andamento della temperatura lungo la superficie della capsula
– capsula CEV in atmosfera terrestre129
44. Andamento del number density lungo la superficie della capsula
– capsula CEV in atmosfera terrestre130
45. Geometria del low thrust nozzle131
46. Mesh computazionale (a) con zoom (b) – espansione
del flusso nell'ugello divergente132
47. Campo di (a) Mach (b) velocità (c) Temperatura – espansione
del flusso nell'ugello divergente135-136
48. Velocity contours - espansione del flusso nell'ugello divergente137
49(a),(b). Velocity streamlines – espansione
del flusso nell'ugello divergente137
50(a),(b). Velocity vectors - espansione del flusso nell'ugello divergente138
51. Andamento delle pressioni lungo la parete – espansione
del flusso nell'ugello divergente140
52. Andamento di (a) p (b) number density (c) T e (d) M lungo l'asse
di simmetria- espansione del flusso nell'ugello divergente140

# LISTA DELLE TABELLE

## Numero

# Pagina

1. Proprietà molecolari Argon90
2. Dati di input – colpo d'ariete91
3. Dati di output – colpo d'ariete91
4. Condizioni del flusso downstream – colpo d'ariete96
5. Proprietà molecolari dell'aria98
6. Proprietà molecolari dell'ossigeno e dell'azoto (VHS)
7. Dati di ingresso – flusso ipersonico sul cuneo
8. Time step e discretizzazione spaziale a diversi Kn
- flusso ipersonico sul cuneo101
9. Angolo d'urto - flusso ipersonico sul cuneo102
10. Variazione del number density per Kn=0.17 e Kn=1
- flusso ipersonico sul cuneo102
11. Dati di input - flusso ipersonico attorno al cilindro105
12. Dati di input – capsula di rientro (Argon)112
13. Proprietà molecolari dell'aria – capsula CEV in atmosfera terrestre114
14: Proprietà molecolari O2 ed N2 (VHS)
- capsula CEV in atmosfera terrestre114
15. Dati di input – capsula CEV in atmosfera terrestre115
16. Dati cluster HACTAR (HPC POLITO) e durata simulazione
– capsula CEV in atmosfera terrestre117
17. Modello Larsen Borgnakke – capsula CEV in atmosfera terrestre118
18. Dati di input - capsula CEV in atmosfera marziana125
19. Modello Larsen Borgnakke – capsula CEV in atmosfera marziana126

20. Proprietà molecolari CO2 (VHS)
– capsula CEV in atmosfera marziana126
21. Condizioni del flusso in ingresso e condizioni ambiente
- espansione del flusso nell'ugello divergente133
22. Ccondizioni statiche nella sezione d'ingresso
– espansione del flusso nell'ugello divergente134
23. Dati cluster HACTAR (HPC POLITO) e durata simulazione
- espansione del flusso nell'ugello divergente135
24. Confronto risultati sul rapporto di pressione statica
- espansione del flusso nell'ugello divergente139

# Capitolo I

#### INTRODUZIONE

In molte applicazioni ingegneristiche, dallo space shuttle al *vacuum pump*, le equazioni di Eulero o Navier-Stokes che governano la meccanica dei fluidi non danno una corretta descrizione del problema fisico e dunque è necessaria un'accurata descrizione cinetica attraverso l'equazione di Boltzmann, applicabile alla dinamica dei gas rarefatti (*Rarefied Gas Dynamics*) [36].

Dal punto di vista computazionale, la soluzione numerica dell'equazione di Boltzmann è molto più costosa rispetto alle equazioni della fluidodinamica e dunque rappresenta una vera e propria sfida per i metodi numerici. Ciò è dovuto principalmente all'elevato numero di variabili del problema e all'integrale non lineare e multi-dimensionale che definisce l'operatore di collisione. Inoltre, questa integrazione va gestita con attenzione poiché è alla base della conservazione delle proprietà dell'equazione di Boltzmann.

Dagli inizi degli anni 70, i metodi dominanti per il calcolo del RGD erano basati sulle tecniche probabilistiche **Monte Carlo**. I pionieri di questi metodi sono il DSMC (*Direct Simulation Monte Carlo*) di Bird e più avanti il metodo DSMC modificato, proposto da Nanbu.

La caratteristica comune di questi metodi è che coinvolgono un finito set di particelle (intese come insieme di atomi, molecole, ecc.) muovendole in un dominio ben definito a seconda della loro velocità e simulando le diverse collisioni tra le particelle scelte in modo random.

I metodi Monte Carlo (MC) presentano diversi vantaggi e vengono utilizzati con successo in un ampio range di applicazioni.

Innanzitutto, confrontandolo con il tipico approccio deterministico, il costo computazionale è nettamente ridotto e può essere considerato dell'ordine del numero di particelle simulate nello spazio delle velocità. Infatti, le particelle possono avere qualsiasi velocità e dunque i punti di discretizzazione sono sempre ben definiti indipendentemente dal problema fisico.

Oltre alla complessità computazionale, uno dei principali svantaggi associati ai metodi deterministici che utilizzano una discretizzazione fissa nel dominio delle velocità è che lo spazio delle velocità è approssimato a una regione finita. Dunque sarebbe necessaria una vasta regione con un numero elevato di punti di discretizzazione nei problemi con Mach elevati, il che aumenta il costo computazionale.

Dall'altro lato però, i *particle methods* portano risultati meno accurati e con fluttuazioni e la convergenza è in generale bassa. In particolare, esiste una situazione fondamentale dove i metodi DSMC perdono di efficacia, ossia per flussi dove il numero di Knudsen varia di diversi ordini di grandezza: in questi problemi ci sono regioni dove il Kn è abbastanza basso da avere un *collision rate* grande ma non abbastanza piccolo da descrivere correttamente il flusso con la meccanica dei fluidi.

Per queste regioni vicine al continuo, un approccio cinetico standard sarebbe troppo costoso, dal momento che i metodi DSMC dipendono dalla risoluzione della *collisional length* e delle scale temporali.

I primi metodi MC seguivano un approccio diverso, ossia avevano lo scopo di costruire metodi numerici semplici ed efficienti per la soluzione dell'equazione di Boltzmann in regioni con un'ampia variazione del *mean free path*. Successivamente sono stati sviluppati versioni del metodo MC nel caso di problemi di trasporto (ad es. per l'equazione lineare del trasporto dei fotoni) e metodi cosiddetti ibridi, in cui vengono utilizzati entrambi gli approcci deterministico e probabilistico nei problemi in cui, come detto pocanzi, il Kn varia in un certo range che comprende l'applicazione di entrambi i metodi.

## STRUTTURA DELLA TESI

La tesi verrà strutturata nel seguente modo:

- Nel capitolo 1 viene fatto un breve cenno relativamente alla cinetica dei gas e la descrizione molecolare, alla base della comprensione del metodo DSMC.
- Nel capitolo 2 viene esposto nel dettaglio il metodo Monte Carlo. Per maggiori dettagli si rimanda al riferimento [3].
- Il capitolo 3 è dedicato alla spiegazione del metodo numerico utilizzato nei vari test case proposti nel presente lavoro, e dunque il software considerato per le simulazioni.
- Nel capitolo 4 vengono presentati i diversi casi di studio su configurazioni di base, simulati con il solver *dsmcFoam*. In particolare viene studiato la gestione dell'urto tramite tale metodo.
- Nel capitolo 5 viene presentato il caso della capsula CEV in atmosfera terrestre e marziana, con i risultati visualizzati su Paraview.
- Nel capitolo 6 viene presentato il caso dell'espansione del flusso nell'ugello divergente in atmosfera a pressione bassa.

### 1.1. LA TEORIA CINETICA DEI GAS E L'EQUAZIONE DI BOLTZMANN

La teoria cinetica dei gas e' lo studio del comportamento microscopico delle molecole o degli atomi, che costituiscono la materia, e delle loro interazioni che conducono alle equazioni tra quantità macroscopiche (quali la pressione, il volume, la temperatura ecc.) come ad esempio la legge dei gas perfetti.

Tale teoria fu sviluppata da Boltzmann e Maxwell e quest'ultimo in particolare derivò nel 1859 la funzione di distribuzione delle velocità molecolari in equilibrio termico, dando inizio alla meccanica statistica poiché per la prima volta il concetto termodinamico macroscopico (ossia la temperatura) viene collegato quantitativamente alla dinamica microscopica delle molecole del gas.

Infatti, con opportune ipotesi, si giunge all'equazione dell'energia cinetica media della molecola:

$$K = \frac{3}{2}k_bT \tag{1.1}$$

da cui si evince che l'energia cinetica media di molecole diverse è la stessa alla stessa temperatura. L'energia interna del gas sarà dunque la somma delle N energie cinetiche di ogni molecola  $K = \frac{3}{2}Nk_bT$ .

L'equazione di Boltzmann, conosciuta anche come equazione di Boltzmann per il trasporto (*Boltzmann Transport Equation* o BTE), è un'equazione della meccanica statistica, formulata da Ludwig Boltzmann nel 1872, che descrive il comportamento statistico di un sistema in uno stato di non-equilibrio termodinamico ed è dunque alla base della teoria cinetica dei gas in quanto è il modello matematico standard a livello molecolare. In particolare descrive le variazioni spaziali e temporali della funzione di distribuzione della velocità molecolare. Il metodo di MC risolve tale equazione che può essere scritta, trascurando il termine che include le forze esterne, come:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_{x} f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f)$$
(1.2)

è un'equazione integro-differenziale per la funzione di distribuzione f (x, v, t) che ha come condizione iniziale

$$f(x, v, t = 0) = f_0(x, v)$$
(1.3)

f = f(x, v, t)è una funzione non negativa che descrive l'evoluzione nel tempo della distribuzione di particelle che si muovono con velocità  $v \in \mathbb{R}^3$ nella posizione  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ al tempo t > 0. Il parametro  $\varepsilon > 0$  è il numero di Knudsen che è proporzionale al libero cammino medio (*mean free path*) tra le collisioni. L'integrale di collisione Q(f, f) descrive le collisioni binarie delle particelle ed è dato da

$$Q(f,f)(v) = \int \sigma(|v - v_*|, \omega) [f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)] d\omega dv_*$$
(1.4)

in questa espressione,  $\omega$  è il vettore unitario della sfera  $S^2$  dunque d $\omega$  è l'area elementare della superficie della sfera unitaria  $S^2$  in  $\mathbb{R}^3$ [30]. Inoltre, (v', $v'_*$ ) rappresentano le velocità (v,  $v_*$ ) post-collisionali associate a  $\omega$  e alle velocità pre-collisionali

$$v' = \frac{1}{2}(v + v_* + |v - v_*|\omega)$$
(1.5)

$$v'_{*} = \frac{1}{2}(v + v_{*} - |v - v_{*}|\omega)$$
(1.6)

 $\sigma$  è una funzione non negativa che caratterizza i dettagli delle interazioni binarie. Per un gas Maxwelliano,  $\sigma$  è costante.

Le equazioni (1.4), (1.5) e (1.6) vengono in genere completate con le condizioni al contorno  $v \cdot n \ge 0$  e  $x \subset \partial \Omega$  dove n è il vettore normale che punta all'interno del dominio  $\Omega$ . Di solito il contorno rappresenta la superficie di un oggetto solido (es. ostacolo, parete, container ecc.) . Le particelle di gas che colpiscono la superficie interagiscono con gli atomi dell'oggetto solido e vengono riflesse all'interno del dominio.

Matematicamente, queste condizioni al contorno vengono modellate con la seguente espressione

$$|v \cdot n| f(x, v, t) = \int_{v_* \cdot n < 0} |v_* \cdot n(x)| K(v_* \to v, x, t) f(x, v, t) dv_*$$
(1.7)

Questa è la cosiddetta condizione riflessa su  $\partial \Omega$ . Il flusso in ingresso è definito in termini di flusso in uscita modificato dal parametro K, che fa sì che la conservazione della massa è garantita:

$$K(v_* \to v, x, t) \ge 0 \tag{1.8}$$

$$\int_{v \cdot n(x) \ge 0} K(v_* \to v, x, t) dv = 1$$

$$(1.9)$$

Le condizioni al contorno riflettenti sono chiamate condizioni di Maxwell. Dal punto di vista fisico, si assume che al contorno solido una frazione  $\alpha$  delle molecole vengono assorbite dalla parete e poi riemesse con una velocità che corrisponde a quelle del gas alla temperatura a parete  $T_w$ , mentre la rimanente parte (1- $\alpha$ ) viene riflessa specularmente. Ciò equivale ad impostare per le velocità in ingresso:

$$f(x, v, t) = (1 - \alpha)Rf(x, v, t) + \alpha Mf(x, v, t)$$
(1.10)

in cui  $x \in \partial \Omega$ ,  $v \cdot n(x) \ge 0$ . Il coefficiente  $\alpha$  (0< $\alpha$ <1) è chiamato accomodation coefficient mentre:

$$Rf(x, v, t) = f(x, v - 2n(n \cdot v), t)$$
(1.11)

$$Mf(x, v, t) = \mu(x, t)M_{\omega}(v)$$
(1.12)

Con:

$$M_{\omega}(v) = \exp(-\frac{v^2}{2T_{\omega}}) \tag{1.13}$$

e il valore di  $\mu$  è determinato dalla conservazione della massa sulla superficie:

$$\mu(x,t)\int_{v\cdot n\ge 0}M_{\omega}(v)|v\cdot n|dv = \int_{v\cdot n<0}f(x,v,t)|v\cdot n|dv \qquad (1.14)$$

Si nota che, secondo (1.10), per  $\alpha=0$  (riflessione speculare) le molecole riemesse hanno lo stesso flusso di massa, temperatura e quantità di moto tangenziale delle molecole in ingresso, mentre per  $\alpha=1$  (*full accomodation*) le molecole riemesse hanno completamente perso memoria delle molecole in arrivo, ad eccezione della conservazione del numero di molecole.

Nel caso di *inflow boundary conditions*, si assume che la funzione di distribuzione delle particelle in ingresso al dominio è nota:

$$f(x, v, t) = g(v, t) \qquad x \in \partial \Omega , \quad v \cdot n > 0 \tag{1.15}$$

Un tipico esempio di questa condizione è usata nel calcolo della *shock wave*, dove si assume che la funzione di distribuzione al contorno del dominio computazionale è una Maxwelliana. In questo caso, le particelle che entrano nel dominio nel passo temporale  $\Delta t$  hanno una distribuzione proporzionale a  $v \cdot ng(v, t), v \cdot n > 0$ . Infatti, il numero di particelle entranti nel dominio nel tempo  $\Delta t$  con velocità compresa tra v e v+dv attraverso l'area  $\Delta S$  è dato da

$$dN = \Delta S \Delta t \, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, \mathbf{g}(\mathbf{v}, \mathbf{t}) d^3 v \tag{1.16}$$

Per maggiori dettagli realtivamente a tale argomento, si rimanda alla ref. [31].

## 1.2. LA DISTRIBUZIONE DI BOLTZMANN

Come ben noto, le molecole del gas si muovono caoticamente e collidono tra loro, tipicamente ad una frequenza di miliardi di volte al secondo. Ciò porta di conseguenza alla domanda relativa alla distribuzione di queste molecole del gas dipendente dalla loro energia. La risposta è data dalla meccanica statistica e in particolare dalla distribuzione di Maxwell-Boltzmann.

Considerando  $\rho_{n0}$  definito in modo tale che  $\rho_{n0}dE$  è il numero di molecole per unità di volume che ha l'energia compresa nel range [0,dE], la **Boltzmann distribution law** afferma che la probabilità di trovare le molecole con un certo contenuto energetico varia esponenzialmente secondo la seguente relazione:

$$\rho_{n,V}(E) = \rho_{n0} e^{-E/k_b T} \tag{1.17}$$

Dove  $\rho_n$  rappresenta il *number density*, ossia il numero di particelle nel volume V. Questa espressione indica la **funzione di distribuzione**.

Se N è il numero totale di molecole, allora il numero di molecole con velocità comprese tra v e v+dv è:

$$dN = N_V dV \tag{1.18}$$

Con:

$$N_V = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_b T}$$
(1.19)

dove  $k_b$  è la costante di Boltzmann [J/K], T la temperatura assoluta [K] e m la massa molecolare[kg] [27],[28].

Da ciò si evince come la distribuzione delle velocità dipenda sia dalla massa che dalla temperatura. La distribuzione di velocità osservata delle molecole di gas in equilibrio termico è mostrata nella fig.1a:



Fig.1: distribuzione di velocità di Maxwell-Boltzmann. [28]

 $P(v) = \frac{N_v}{N}$  rappresenta la funzione di distribuzione di velocità di Maxwell-Boltzmann e fornisce la frazione di molecole le cui velocità sono comprese nell'intervallo dv centrato in v. La velocità media  $\bar{v}$  è compresa tra la *root mean square speed*  $v_{rms}$  (la velocità a cui tutte le molecole hanno la stessa energia cinetica totale come nel caso della velocità attuale del gas) e la *most probable speed*  $v_{mp}$  (la velocità a cui la funzione raggiunge il valore di picco ed è la velocità posseduta dalla massima frazione di molecole gassose a una determinata temperatura). In particolare:  $v_{mp} > \bar{v} > v_{rms}$ . Le relazioni delle due velocità appena menzionate sono:

$$v_{rms} = \sqrt{\frac{3k_bT}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \qquad \qquad v_{mp} = \sqrt{\frac{2k_bT}{m}} \qquad (1.20)$$

Il picco si sposta verso destra e decresce all'aumentare della velocità, come si nota nella fig.1b:



Fig.2: distribuzione della velocità in funzione della temperatura.[28]

Ciò mostra come all'aumentare della temperatura, aumenta la velocità media. L'area sottesa alla curva deve essere sempre uguale a 1 e di conseguenza il grafico si "appiattisce".

$$\int_0^\infty P(v)dv = 1 \tag{1.21}$$

L'asimmetria della curva è dovuta al fatto che i valori limite inferiore e superiore sono  $[0,\infty)$ .

### 1.3. IL MODELLO MOLECOLARE

Il gas può essere modellato a livello macroscopico o microscopico.

Il modello macroscopico vede il gas come un mezzo continuo e la descrizione è in termini di variazioni spaziali e temporali delle proprietà del flusso come densità, velocità, pressione e temperatura. Le equazioni di Navier-Stokes forniscono il modello matematico convenzionale del gas come continuo. Le proprietà macroscopiche sono variabili dipendenti in queste equazioni, mentre quelle indipendenti sono le coordinate spaziali e il tempo [4].

Il modello microscopico o molecolare riconosce la particolare struttura del gas come una miriade di molecole discrete e idealmente fornisce informazioni sulla posizione, velocità e lo stato di ogni molecola nel tempo. Il modello matematico a questo livello è, come detto precedentemente, l'equazione di Boltzmann. Si considera una frazione di molecole in una certa posizione e stato, ma in tal caso le variabili indipendenti sono aumentate del numero di variabili fisiche a cui lo stato dipende. Nel caso più semplice di gas monoatomico senza gradi di libertà interni, le dimensioni addizionali dello spazio delle fasi sono le tre componenti di velocità delle molecole.

Dunque un problema come questo unidimensionale per un flusso di gas stazionario, diventa un problema 3D nello spazio delle fasi (la distribuzione di velocità è assialsimmetrica nella componente di velocità nella direzione del flusso), mentre un *twodimensional steady flow* diventa 5D. Ciò significa che l'equazione di Boltzmann non è applicabile a soluzioni analitiche di problemi non banali e ciò porta delle difficoltà nei metodi numerici convenzionali.

Tuttavia, la struttura discreta del gas a livello molecolare porta ad aggirare queste difficoltà attraverso una diretta modellizzazione fisica più che matematica.

E' importante sottolineare le circostanze in cui il modello continuo perde di validità e deve essere sostituito da quello molecolare.

#### 1.4. LA NECESSITA' DI UNA DESCRIZIONE MOLECOLARE

Come anticipato pocanzi, le equazioni di N.S. ignorano la natura molecolare del gas reale in quanto lo assumono come mezzo continuo. Le proprietà macroscopiche possono essere identificate mediando le quantità molecolari in ogni posizione nel flusso. Possono essere definite finché c'è un numero sufficiente di molecole all'interno del più piccolo volume significativo di gas. Questa condizione è quasi sempre soddisfatta e i risultati dal modello molecolare possono essere espressi in termini di proprietà del flusso continuo. Inoltre, le equazioni di conservazione della massa, quantità di moto ed energia sono comuni ad ogni modello. I termini di trasporto delle equazioni di N.S. nella dinamica del gas continuo decadono quando i gradienti delle variabili macroscopiche diventano così ripidi che la loro lunghezza di scala è dello stesso ordine della distanza media percorsa dalle molecole tra due collisioni (*mean free path*)[4].

Il grado di rarefazione del gas è generalmente espresso attraverso il numero di Knudsen Kn, che è il rapporto tra il libero cammino medio e la lunghezza caratteristica del problema fisico in esame:

$$Kn = \lambda/L \tag{1.22}$$

Il requisito di validità delle equazioni di N.S è che Kn deve essere minore di 0.1. Ciò può essere fuorviante se la lunghezza L è scelta come dimensione complessiva del flusso al fine di definire un singolo *overall Knudsen number* per il flusso completo. Il limite può essere specificato precisamente se il Kn locale è definito con L come lunghezza di riferimento dei gradienti macroscopici:

$$L = \rho / (d \rho / dx) \tag{1.23}$$

E' preferibile infatti impiegare i numeri di Knudsen locali in base alle lunghezze di scala dei gradienti nelle proprietà del flusso. Tali valori forniscono l'informazione sulla validità o meno delle equazioni di N.S. L'errore nel risultato delle equazioni di N.S. (e quindi

nell'assunzione del flusso continuo) è significativo quando il numero di Knudsen (sia locale che complessivo) è al di sopra di 0.02-0.03.

I termini di trasporto svaniscono per Kn che tende a zero e le equazioni di N.S. si riducono dunque alle equazioni di Eulero nel caso inviscido. Il flusso è isentropico dal punto di vista continuo mentre da quello molecolare la funzione di distribuzione di velocità è dappertutto di tipo maxwelliana o di equilibrio locale. Il limite opposto di Kn è il cosiddetto regime di flusso libero o *collisionless flow regime.* 



Tali limiti vengono ben rappresentati graficamente nella figura 1c.

Fig.3: I limiti di Kn sui modelli matematici [4].

Dunque, possiamo dedurre che:

- $Kn \rightarrow 0$ : flusso inviscido (equazioni di Eulero);
- Kn  $\leq 0.001$  : regime continuo (equazioni di Navier-Stokes) ;
- 0.001 ≤ Kn ≤ 0.1 : *slip regime* (equazioni di Navier-Stokes con *velocity-slip* e temperature-jump come condizioni al contorno);
- 0.1 ≤ Kn ≤ 10 : regime di transizione (equazione di Boltzmann o *particle* methods come il DSMC) ;
- Kn  $\geq 10$ : regime di flusso libero molecolare (equazione di Boltzmann trascurando il termine collisionale o *particle methods* come il DSMC).

#### Nel dettaglio:

#### Regime continuo

In tale regime, le equazioni di N.S nel continuo forniscono un'ottima approssimazione del flusso di gas che è vicino alla condizione di equilibrio. Si assume che le proprietà macroscopiche locali possano essere descritte come medie sugli elementi di fluido che sono grandi paragonati alla struttura microscopica del fluido, ma piccoli abbastanza nel rispetto dei fenomeni macroscopici per permettere l'uso del calcolo differenziale. Le collisioni inter-molecolari sono dominanti a basso numero di Knudsen, cioè ci sono abbastanza collisioni molecolari che si verificano per l'equilibrio locale termodinamico che si raggiunge in breve tempo rispetto alla scala temporale macroscopica. Per Kn  $\rightarrow$ 0, le equazioni di N.S. possono essere ridotte a quelle per il flusso inviscido (equazioni di Eulero) perché la diffusione molecolare può essere trascurata così come i termini di trasporto (che includono i coefficienti di viscosità, conduzione di calore e diffusione) nelle equazioni dell'energia e quantità di moto [48].

#### Slip regime

Quando Kn cresce in modo significativo, le interazioni molecole-superficie diventano meno frequenti e iniziano a comparire vicino le pareti regioni di non equilibrio. Ciò può essere osservato dal punto di vista macroscopico, poiché la velocità e la temperatura del gas  $(U_g, T_g)$  alla superficie sono diverse rispetto a quelle a parete  $(U_s, T_s)$ . Questi fenomeni sono noti con il nome di *velocity-slip* e *temperature-jump*, rispettivamente. Se questa condizione di non equilibrio è presente nel flusso, il range di validità delle equazioni di N.S. può essere esteso allo slip regime applicando le condizioni al contorno di Maxwell per la *velocity-slip* e di Von Smoluchowski per la t*emperature-jump* [48].

#### Regime di transizione e flusso libero

In questi regimi, gli effetti di non equilibrio sono dominanti e va cercata la soluzione all'equazione di Boltzmann, poiché le equazioni di N.S non sono più valide. Esempi in questo caso sono i flussi nei condotti in scala microscopica (*micro-channels*) e flussi ipersonici in ambienti a bassa pressione ambiente. In tali casi, le equazioni di N.S. non formiscono una descrizione accurata del comportamento del flusso perché non sono più valide le assunzioni del flusso continuo e dell'equilibrio locale.

Nel 1992, venne pubblicata una dimostrazione matematica riguardo il metodo DSMC che è in grado di fornire una soluzione all'equazione di Boltzmann per un gas monoatomico nel caso di un numero infinito di particelle [48].

Come detto pocanzi, i numeri di Knudsen locali danno indicazione sulla validità o meno delle equazioni di N.S. Ciò perché i termini di trasporto sono validi solo se la distribuzione delle velocità molecolari f è una piccola perturbazione della distribuzione Maxwelliana di equilibrio  $f_0$ .

Un importante risultato nella classica teoria cinetica, descritta da Chapman e Cowling (1952), era lo sviluppo della teoria di Chapman-Enskog (nel dettaglio nel paragrafo 1.5.) per i coefficienti di viscosità, conduzione di calore e diffusione, i quali vennero ottenuti sperimentalmente finché non vennero legate alle proprietà microscopiche del fluido. Tale teoria convalida l'assunzione, inerente alla formulazione di N.S., che lo *shear stress,* i flussi di calore e la velocità di diffusione sono funzioni lineari del gradiente di velocità, temperatura e concentrazione della specie. Per esempio, nel caso di un flusso nella direzione x con gradienti nella sola direzione y, la funzione di distribuzione di Chapman-Enskog può essere scritta come

$$f = f_0 \left\{ 1 - C\beta \nu' \left[ 3 \left( \beta^2 c'^2 - \frac{5}{2} \right) \frac{\lambda}{T} \frac{\partial T}{\partial y} + 4\beta u' s \frac{\lambda}{u_0} \frac{\partial u_0}{\partial y} \right] \right\}$$
(1.24)

dove C è un fattore numerico che dipende dal gas. Da notare che i valori di Kn locali, basati sulla velocità del flusso e la temperatura, appaiono esplicitamente nei termini attribuibili allo *shear stress* e al flusso di calore, rispettivamente. Poichè il risultato dell'equazione di Chapman-Enskog è il primo termine dell'espansione in serie relativa ai numeri di Kn locali, la teoria è valida solo quando questi sono piccoli rispetto all'unità. Le proprietà di trasporto sono più significativi all'interno degli strati limite e le *shock waves*.

Il libero cammino medio è inversamente proporzionale alla densità del gas e, ad una certa intensità dell'onda d'urto, lo spessore dell'onda è anch'essa inversamente proporzionale alla densità. I valori locali del Kn sono inoltre indipendenti dalla densità e la validità delle equazioni di N.S. dipende dal numero di Mach (in particolare, la si ha per M≤2). Nel caso dello strato limite laminare in un flusso a bassa velocità, lo spessore dello strato limite è inversamente proporzionale alla radice della densità. Con la densità che si riduce, i gradienti decrescono meno rapidamente rispetto all'aumento del *mean free path* e dunque, i valori di Kn locale diventano maggiori a basse densità.

L'aumento dello spessore in entrambi i casi sopra citati significa che, in un flusso con strato limite e onda d'urto, la parte di flusso viscoso aumenta con la rarefazione del gas. A bassissime densità, l'onda d'urto e lo strato limite dapprima si 'fondono' e poi perdono la loro identità non appena si incontrano le condizioni di flusso libero.

Al di fuori di essi, il flusso continuo è assunto iso-entropico e si può pensare che le equazioni di Eulero portano risultati corretti ad ogni numero di Kn. I gradienti delle proprietà macroscopiche in un flusso iso-entropico dipendono solo dalla dimensione del flusso. Comunque, questi cambiamenti nelle proprietà macroscopiche possono avvenire solo attraverso collisioni intermolecolari e, non appena la densità diminuisce, il *collision rate* diventa troppo piccolo per il mantenimento di questi gradienti. Il modello continuo dunque decade, con il primo sintomo del tensore degli sforzi anisotropo [4].

Questo tipo di *breakdown* nell'espansione del gas è stato studiato da Bird nel 1970 ed è stato correlato al cosiddetto *breakdown parameter:* 

$$P = \frac{1}{\nu} \left| \frac{D(\ln \rho)}{Dt} \right| \tag{1.25}$$

che per un flusso stazionario può essere scritto come:

$$P = \frac{\pi^{1/2}}{2} s \frac{\lambda}{\rho} \left| \frac{d\rho}{dx} \right|$$
(1.26)

Il primo *breakdown* in entrambe le espansioni stazionarie lo si ha per un valore di P approssimativamente di 0.02 [4].

Un numero di Knudsen alto può risultare sia per  $\lambda$  (*mean free path*) grande che lunghezza caratteristica piccola. Il primo è di solito il caso ed è una conseguenza di una densità di gas molto bassa. Tuttavia, va tenuto presente che invece il requisito di una piccola dimensione caratteristica può essere soddisfatto a qualsiasi densità. È già stato notato che la struttura interna di un'intensa onda d'urto sembra richiedere il modello molecolare a tutti i valori di densità. Allo stesso modo, l'approccio molecolare è richesto per lo studio delle forze in ogni particella sospesa o che si muove in atmosfera, o per la propagazione del suono ad altissime frequenze.

I limiti nell'utilizzo dei modelli di fluido possono essere osservati anche nel grafico sottostante:



Fig.4: Regimi di gas in funzione della densità e lunghezza caratteristica [19].

Sono visualizzati i diversi regimi di gas in funzione della densità (rispetto alla densità dell'aria in condizioni standard STP) e lunghezza di scala: la descrizione del modello continuo diventa inaccurato quando la lunghezza caratteristica è dell'ordine del *mean free path*.



Fig.5: Diversi regimi molecolari in fuinzione del Mach e numero di Reynolds. [19]



Fig.6: Diversi scenari per alti Kn [19].

Nella fig.1f sono visibili diversi scenari relativi a diversi numeri di Kn: ad esempio, per l'aria alla pressione atmosferica, il *mean free path* è dell'ordine di 50 nm (circa la lunghezza d'onda nel visibile) mentre nell'atmosfera rarefatta a 120 km di quota, il *mean free path* è di diversi metri [20].

La natura discreta di un gas si manifesta anche in fenomeni di fluttuazione spontanea (es. la diffusione della luce di Rayleigh che rende il cielo azzurro). In un gas cosiddetto *dilute*, il numero di particelle all'interno del libero cammino medio cubico  $\lambda^3$  è grande (circa 3000 molecole per l'aria a STP), quindi i fenomeni di fluttuazione sono solo evidenti per un grande numero di Knudsen.

Per maggiori approfondimenti, si rimanda alla ref. [4].

## 1.5. LE PROPRIETA' DI TRASPORTO DI CHAPMAN-ENSKOG

La teoria di Chapman-Enskog (C.E., 1970) fornisce una soluzione all'equazione di Boltzmann che è basata sull'assunzione che la funzione di distribuzione è una piccola perturbazione della distribuzione di equilibrio:

$$f = f_0(1+\varphi)$$
 (1.27)

Dove  $\phi$  è piccola rispetto all'unità.

Il risultato di C.E. per il coefficiente di viscosità nel gas VHS è (Bird, 1994):

$$\mu = \frac{15(\pi MK)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4k}{m}\right)^{\omega - \frac{1}{2}} T^{\omega}}{8\Gamma\left(\frac{9}{2} - \omega\right) \sigma c_r^{2\omega - 1}}$$
(1.28)

La soluzione di Chapman coinvolge la serie di polinomi di Sonine per cui l'equazione (1.28) caratterizza la prima approssimazione (ossia il primo termine) di questa espansione [4].

Per un gas che ha  $\mu \propto T^{\omega}$ , con  $\omega = 1/2(\eta + 3)/(\eta - 1)$  detto *temperature coefficient of viscosity,* l'equazione relativa al diametro diventa:

$$d = \left\{ \frac{15\left(\frac{mkT}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}}{2(5-2\omega)(7-2\omega)\mu} \right\}^{1/2}$$
(1.29)

La prima approssimazione del coefficiente di conduzione termica K è legata al coefficiente di viscosità dalla seguente relazione:

$$K = \frac{\frac{15}{4}k\mu}{m} \tag{1.30}$$

Così il numero di Prandtl in un gas monoatomico , per il quale il calore specifico a pressione p costante  $c_p = \frac{\frac{5}{2}k}{m}$ , è pari a:

$$P_r = \frac{\mu c_p}{K} = \frac{2}{3} \tag{1.31}$$

La prima approssimazione del coefficiente di diffusione per le specie 1 e 2 è:

$$D_{12} = \frac{3\pi^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2kT}{m}\right)^{\omega_{12}}}{8\Gamma\left(\frac{7}{2} - \omega_{12}\right) n\sigma_{12} c_r^{2\omega_{12} - 1}}$$
(1.32)

E il coefficiente di autodiffusione è:

$$D_{11} = \frac{3\pi^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4kT}{m}\right)^{\omega}}{8\Gamma(\frac{7}{2}-\omega)n\sigma c_r^{2\omega-1}}$$
(1.33)

Di conseguenza, il diametro può essere scritto anche in funzione di  $D_{11}$  nel seguente modo:

$$d = \left\{ \frac{3\left(\frac{mkT}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}}{2(5-2\omega)\rho D_{11}} \right\}^{1/2}$$
(1.34)

Questa equazione stima un numero di Schmidt, che per il modello VHS può essere scritto come:

$$S_c = \frac{\mu}{\rho D_{11}} = \frac{5}{7 - 2\omega} \tag{1.35}$$

Del valore di 10/11, per un valore di  $\omega = 0.75$  che è tipico dei gas reali.

# Capitolo II

### IL METODO MONTE CARLO

Il DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) fornisce una simulazione di tipo fisicoprobabilistico del flusso di gas sviluppato dal Professore G. A. Bird dell'Università di Sydney ed utilizza la visione lagrangiana, ossia segue nello stesso istante le diverse molecole all'interno di un dominio fisico ben definito [3].

E' importante precisare che le cosiddette *DSMC particles* simulate sono rappresentative di tante molecole e atomi del flusso reale. Pertanto è facile dedurre che, essendo presenti milioni di particelle (intese come insieme di atomi e molecole) all'interno di un gas rarefatto, nel caso di un gas denso potrebbe esserci una corrispondenza tra molecole simulate e quelle reali.

Ad oggi, dunque, una tipica simulazione numerica coinvolge milioni di particelle e richiede il calcolo di miliardi di interazioni sia tra particelle che a parete.

Per quanto riguarda il tempo fisico, questo risulta sempre una variabile indipendente e qualsiasi flusso stazionario (*steady-state flow*) si sviluppa una volta che è trascorso un certo transitorio (*unsteady-state flow*).

E' interessante fare un confronto tra il metodo DSMC e il metodo *Molecular Dynamics* (MD) (Alder e Wainwright,1957): quest'ultimo è il predecessore del metodo DSMC ma vengono calcolate collisioni e interazioni particelle-parete in maniera deterministica e non probabilistica [3].

I due approcci sono complementari in quanto il metodo MD viene applicato a fluidi ad alta densità (*dense gases*) mentre il DSMC a gas rarefatti (*rarefied* o *dilute gases*), in cui il libero cammino medio è maggiore rispetto al diametro molecolare.

L'assunzione di gas rarefatto unito all'approccio statistico del metodo permette di disaccoppiare il moto molecolare e le collisioni nell'intervallo di tempo considerato, che

è minore rispetto al *mean collision time*. Ciò permette al metodo di impiegare il reale diametro molecolare, avendo dei requisiti da rispettare in termini di definizione della mesh e step temporale.

Come già menzionato precedentemente, l'equazione di Boltzmann è il modello matematico standard a livello molecolare e nei primi anni di sviluppo del metodo DSMC, la domanda che ricorreva spesso era se quanto si otteneva poteva essere la soluzione a tale equazione. La risposta è stata fornita da Wagner che dimostrò come, tendendo a zero la dimensione della griglia e time step e tendendo ad infinito il numero di molecole, la forma più semplice del metodo DSMC fornisce la soluzione a tale equazione [3].

Mentre i confronti analitici sono istruttivi ed importanti, non dovrebbe essere necessario dimostrare che i risultati dalla simulazione di un modello fisico sono equivalenti alla soluzione di un modello matematico. Ciò è rilevante da evidenziare riguardo l'equazione di Boltzmann, in quanto questa ha delle restrizioni che non sono presenti nel DSMC e il metodo può "gestire" effetti fisici (come reazioni chimiche e radiazioni termiche) che vanno oltre la formulazione di Boltzmann. Questi effetti infatti, sono più realisticamente incorporati in un modello fisico rispetto a quello matematico. Ad esempio, la formula di Boltzmann assume l'esistenza di collisioni inverse e fallisce se sono presenti reazioni chimiche.

I metodi continui, che assumono un mezzo continuo e variabili distribuite in modo continuo, non possono direttamente simulare gli effetti fisici che si verificano a livello molecolare. Le equazioni di Navier-Stokes sono il modello standard matematico assunto nel continuo e può trattare reazioni chimiche e radiazioni termiche solo attraverso quantità mediate.

Il maggior svantaggio del metodo DSMC è che il numero di molecole reali  $F_N$ , che sono rappresentate dalle particelle simulate, è molto elevato. Ciò comporta che le fluttuazioni

delle proprietà macroscopiche del gas campionate nella simulazione, sono generalmente molto maggiori delle fluttuazioni presenti nel gas reale. In caso di flusso stazionario, il *sample size* va costruito tenendo presente il tempo medio delle proprietà del gas. Invece, in caso di flusso permanentemente instazionario, possono essere fatti diversi run simili e il *sample size* va costruito attraverso la media complessiva di questi. Il livello di fluttuazioni decresce con la radice quadrata del *sample size*. Dunque, le fluttuazioni possono essere generalmente ridotte ad un livello accettabile relativo al modulo delle velocità macroscopiche nel flusso ma ciò diventa più complicato quando queste sono molto piccole. Questo è dovuto al fatto che le fluttuazioni di velocità sono legate a quelle molecolari che sono a loro volta legate alla velocità del suono.

Mentre, come detto pocanzi, le fluttuazioni non sono fisiche quando  $F_N$  è grande, queste sono fisicamente realistiche quando il gas è sufficientemente denso da permettere la corrispondenza biunivoca tra molecole reali e simulate.

Ciò è un altro esempio che va oltre l'equazione di Boltzmann perché le fluttuazioni sono trascurate dal relativo modello.

Le instabilità numeriche sono assenti dalle applicazioni della forma semplice del metodo DSMC, in cui i potenziali partners che collidono sono scelti ovunque all'interno della cella computazionale.

Per maggiori dettagli relativamente a questo capitolo, si rimanda alla ref. [4].

#### 2.1. MODELLAZIONE FENOMENOLOGICA



Fig 7: La transizione dai modelli di analogia meccanica a quelli fenomenologici [4].

Come mostrato in figura 7, le prime applicazioni del DSMC hanno impiegato modelli molecolari che sono stati utilizzati nella teoria cinetica classica. I modelli *point centre of force* e Lennard-Jones possono essere classificati come modelli fisici approssimati e rimangono utili per i DSMC. Il modello molecolare di Maxwell è di tipo matematico, introdotto per semplificare la teoria. Il più utilizzato è l'*Hard Sphere model* (HS) per le collisioni elastiche, in cui la *cross section* è costante e può essere classificato come l'analogo meccanico. E' inoltre il più efficiente dal punto di vista computazionale perchè lo scattering è isotropo nel centro di massa del sistema di riferimento. Tutti i modelli classici per le molecole con gradi di libertà interni appartengono a tale classe. Questi forniscono una scarsa rappresentazione del gas reale e sono difficili da implementare nei modelli DSMC. Di conseguenza, sono stati sostituiti dai modelli fenomenologici molecolari che semplicemente mirano a riprodurre le proprietà osservate nel gas reali. Lo studio dell'onda d'urto fu uno di quei studi che portarono alla consapevolezza che, per tutti i flussi che erano stati studiati, gli effetti del modello molecolare sono legati al cambio della sezione d'urto e che il modo in cui le molecole venivano 'disperse' postcollisione era apparentemente una conseguenza. Ciò portò al modello Variable Hard Sphere (VHS, Bird 1981) che combina la semplicità del modello HS ma con miglior accuratezza. Tale modello può essere visto come fenomenologico, in cui il raggiungimento delle proprietà di trasporto a livello macroscopico è dato dall'impiego di potenziali molecolari più realistici a livello microscopico. L'introduzione del VHS per le collisioni elastiche arrivò anni dopo l'introduzione del modello di Larsen-Borgnakke (L.B., 1974) per molecole diatomiche e poliatomiche. Quest'ultimo può essere visto come l'archetipo dei modelli fenomenologici, in cui è richiesto solo di mantenere la funzione di distribuzione dell'equilibrio rotazionale riproducendo uno specifico rotational relaxation collision number. Il termine traslazionale nelle distribuzioni precedenti è valido solo per le molecole del modello di Maxwell, mentre il termine vibrazionale è valido solo per le molecole HS. L'estensione al caso vibrazionale è complicato dal fatto che la vibrazione è generalmente eccitata solo parzialmente e la classica estensione dell'approccio di L.B. a tale modo era inefficiente a livello computazionale. Infatti il modello di scambio di energia di L.B. non include quello vibrazionale ma solo quello traslazionale e rotazionale. La situazione cambiò con l'introduzione del metodo di Bergemann (1994) del modello quantico per il modo vibrazionale [3].

Nella maggior parte delle applicazioni DSMC ai flussi chimicamente reagenti vengono impiegate procedure chiamate *TCE method* (Bird, 1979). Le procedure di L.B. portano all'equilibrio nel caso di gas non reagente, ma la loro applicazione al caso del gas
reagente (modello TCE) porta ad una incapacità di equipartizione in riferimento alla temperatura vibrazionale.

Una tipica applicazione DSMC coinvolge milioni di particelle simulate e miliardi di collisioni intermolecolari. Tutti i modelli molecolari sono fenomenologici fino ad un certo punto e, mentre il grado di 'realismo fisico' viene tenuto a mente, l'accuratezza dei risultati prodotti dal modello scelto è la prima considerazione. Un modello con un maggior grado di realismo fisico non porta necessariamente a risultati più accurati.[3]

## 2.2. LA MECCANICA DELLE COLLISIONI BINARIE

I modelli per l'energia interna sono aggiuntivi ai modelli VHS e VSS per il modo traslazionale. Essi influenzano i modi traslazionali solo nel caso in cui l'energia traslazionale post-collisione differisce da quella di pre-collisione. Inoltre, la possibilità di reazione chimiche va tenuta in conto e ci possono essere, di consguenza, cambiamenti nelle masse molecolari pre e post-collisione.

Si consideri una collisione tra le due molecole di massa  $m_1, m_2$  con velocità  $c_1, c_2$  rispettivamente. Le variabili post—collisionali saranno dunque  $m_1^*, m_2^*, c_1^*, c_2^*$ . La conservazione della massa e della quantità di moto porta a scrivere che

$$m_1 + m_2 = m_1^* + m_2^* \tag{2.1}$$

$$m_1 c_1 + m_2 c_2 = m_1^* + m_2^* \tag{2.2}$$

La velocità del centro di massa  $c_m$  è definito come

$$c_m = \frac{m_1 c_1 + m_2 c_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1^* c_1^* + m_2^* c_2^*}{m_1^* + m_2^*}$$
(2.3)

Ed è invariata nella collisione. Le velocità relative di pre e post-collisione delle molecole sono:  $c_r = c_1 - c_2$  (2.4)

$$c_r^* = c_1^* - c_2^* \tag{2.5}$$

L'equazione (2.3) può essere combinata con le equazioni (2.4) e (2.5) per ottenere le espressioni delle velocità relative in funzione di  $c_m$ :

$$c_1 = c_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r$$
 ,  $c_2 = c_m - \frac{m_1}{m_1 + m_2} c_r$  (2.6)

$$c_1^* = c_m + \frac{m_2^*}{m_1^* + m_2^*} c_r^*$$
 ,  $c_2^* = c_m - \frac{m_1^*}{m_1^* + m_2^*} c_r^*$  (2.7)

Qunaod si considera l'energia traslazionale con la collisione, è consuetudine introdurre la massa ridotta  $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ . L'energia traslazionale pre-collisione può essere ottenuta dalle equazioni (2.6) e (2.7) e scritta come

$$E_{tr} = \frac{1}{2}m_1c_1^2 + \frac{1}{2}m_2c_2^2 = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)c_m^2 + \frac{1}{2}m_rc_r^2$$
(2.8)

La massa si conserva nella collisione e la velocità del centro di massa non cambia, di conseguenza si ha:

$$E_{tr}^* = \frac{1}{2}m_1^*c_1^{*2} + \frac{1}{2}m_2^*c_2^{*2} = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)c_m^2 + \frac{1}{2}m_r^*c_r^{*2}$$
(2.9)

Va notato che, per le collisioni che coinvolgono le reazioni chimiche, la massa ridotta di post-collisione differisce dal valore di pre-collisione. I dati di input nella simulazione DSMC della collisione binaria comprendono dunque le specie molecolari, le tre componenti di velocità di ogni molecola e l'energia di ogni modo interno [3].

La routine di collisione segue i seguenti steps:

- 1) I componenti del centro di massa e i vettori di velocità relativa vengono calcolati con le equazioni (2.3) (2.4) e (2.5), così come viene calcolata l'energia traslazionale relativa nella collisione  $1/2m_rc_r^2$ .
- L'energia totale di collisione è la somma dell'energia traslazionale relativa e le energie di tutti i modi interni di entrambe le molecole.
- 3) Nel caso di flussi reagenti chimicamente, i calori di formazione di ogni molecola vengono aggiunti all'energia totale di collisione. Viene applicato il modello di reazione e, se la reazione avviene, le specie molecolari vengono impostate per le identità post-reazione e l'energia totale di collisione viene modificata per i diversi calori di formazione.
- 4) Vengono applicati i modelli per i modi interni e le energie di pre-collisione sono o conservate o cambiate. Le energie interne di post-collisione sono sottratte dall'energia totale di collisione per ottenere l'energia traslazionale relativa di post-collisione  $\frac{1}{2}m_r^*c_r^{*2}$ .
- 5) Viene calcolato il modulo della velocità relativa di post-collisione ed applicato il modello di collisione elastica, come descritto nella sezione 2.4, per determinare le componenti della velocità relativa di post-collisione. Vengono infine calcolate le componenti della velocità di post-collisione nel sistema di riferimento, tramite l'equazione (2.7).

# 2.3. MODELLI MOLECOLARI PER IL DSMC:

## MODELLI DI COLLISIONI BINARIE

Il comportamento della particella durante il processo di collisione dipende dalla scelta del campo di forza molecolare. Due molecole di gas con velocità relativa  $c_r$  e distanti r, si incontrano e collidono una contro l'altra. Dopo la collisione, le due molecole vengono disperse dall'angolo  $\chi$  con una velocità relativa post-collisione  $c_r^*$ , come mostra la figura 2b.



Fig.8:Collisione elastica tra due molecole [11].

Nel processo di collisione, le velocità relative non sono cambiate, ossia  $c_r = c_r^*$ . Inoltre, il parametro d'impatto b è la distanza tra le due molecole misurata perpendicolarmente alla velocità relativa di collisione. La collisione frontale è per b=0, mentre non avviene la collisione quando  $b \rightarrow \infty$  [11].

## Modello HS

E' il primo modello di interazione molecolare , oltre che il più semplice da utilizzare nella simulazione del gas rarefatto, infatti per una singola specie di gas la *collision cross* 

section rimane invariata e l'angolo di scattering (o di deflessione) è isotropo. Il suo angolo di deflessione  $\chi$  e la sezione d'urto totale  $\sigma_T$  sono infatti:

$$\chi = 2\cos\left(\frac{b}{d_{12}}\right) \tag{2.10}$$

$$\sigma_T = \pi d_{12}^2 \tag{2.12}$$

Dove  $d_{12} = (d_1 + d_2)/2$  è la distanza tra i centri delle due molecole che collidono, con  $d_1, d_2$  che sono i rispettivi diametri. Se le due molecole sono uguali, allora  $d_{12} = d_1 = d_2$ . Riguardo il modello HS, il diametro  $d_{HS}$  sarà:

$$d_{HS} = \left(\frac{5\left(\frac{mkT_{ref}}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}}{16\mu_{ref}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.13)

Dove m è la massa, k la costante di Boltzmann,  $T_{ref} e \mu_{ref}$  sono la temperatura e la viscosità di riferimento. Si nota subito come  $\chi e \sigma_T$  sono costanti nel modello HS, il quale è quindi indipendente dall'energia relativa traslazionale  $E_t$ . Infatti,  $\sigma_T$  decresce con  $E_t$  che aumenta, ossia si riduce con l'aumentare di  $c_r$ . Dunque, tale modello non è realistico in quanto la  $\sigma_T$  è indipendente dalla velocità relativa della coppia di particelle coinvolte nella collisione. Di conseguenza, Bird propone il modello VHS.

#### Modello VHS

Tale modello ha le stesse relazioni del modello HS per quanto riguarda  $\chi e \sigma_T$  (2.10),(2.12) ma il diametro molecolare sarà:

$$d_{VHS} = \left(\frac{5\left(\frac{m}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (kT_{ref})^{\omega}}{8\Gamma\left(\frac{9}{2} - \omega\right) \mu_{ref} E_t^{\omega - 0.5}}\right)^{1/2}$$
(2.14)

Mentre per la collision cross section si ha:

$$\sigma_T \propto c_r^{-4(\eta-1)} \propto T^{-2(\eta-1)}$$
 (2.15)

Con  $\eta$  che rappresenta un parametro libero,  $E_t = \frac{m_r c_r^2}{2}$ ,  $m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  che è la massa ridotta,  $\Gamma$  è la funzione Gamma e  $\omega$  (0.5 <  $\omega$  < 1) è la *temperature index of viscosity*, funzione della coppia di molecole coinvolte nella collisione. In particolare, l'equazione corrisponde al modello HS con  $\omega = 0.5$ . Quindi, il modello VHS tratta le particelle come HS per quanto riguarda la distribuzione dello *scattering angle*, cioè tutte le direzioni sono equamente possibili per la velocità di post-collisione in un sistema di riferimento basato sul centro di massa. Inoltre,  $\sigma_T$  varia con la velocità relativa della coppia di particelle, per cui il problema presente con il modello HS è risolto con l'applicazione del modello VHS. Entrambi i modelli HS e VHS hanno la stessa rappresentazione del rapporto tra la *viscosity cross-section*  $\sigma_{\mu}$  e la *diffusion cross-section* 

$$\sigma_D: \qquad \qquad \frac{\sigma_\mu}{\sigma_D} = \frac{2}{3} \tag{2.16}$$

Il modello VHS è quello maggiornmente utilizzato nelle applicazioni DSMC. Tale modello però porta quasi in disaccordo i coefficienti di diffusione con i risultati sperimentali. Di conseguenza, Koura e Matsumoto migliorano il modello VHS introducendo il modello *Variable Soft Sphere* (VSS).

#### Modello VSS

Tale modello considera una dispersione post-collisione anisotropa. Ha la stessa equazione del modello VHS per  $\sigma_T$  ma viene aggiunto un ulteriore parametro  $\alpha$  (1< $\alpha$ <2) per controllare l'angolo di scattering  $\chi$ :

$$\chi = 2\cos\left(\frac{b}{d_{12}}\right)^{1/\alpha} \tag{2.17}$$

Per  $\alpha=1$  si torna all'equazione (2.10). La viscosity cross-section  $\sigma_{\mu}$  e la diffusion cross-section  $\sigma_D$  sono rispettivamente:

$$\sigma_{\mu} = \frac{2\pi S_{\mu} d_{12}^2}{3} \tag{2.18}$$

$$\sigma_D = \pi S_D d_{12}^2 \tag{2.19}$$

Dove  $S_{\mu} = \frac{6\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)}$  è il soft coefficient of viscosity cross-section, mentre  $S_D = 2/(\alpha+1)$  è il soft coefficient of diffusion cross-section. Il rapporto tra  $\sigma_{\mu}/\sigma_D$  è funzione di  $\alpha$ :

$$\frac{\sigma_{\mu}}{\sigma_{D}} = \frac{2\alpha}{\alpha+2} \tag{2.19}$$

Scelto il parametro  $\alpha$ , entrambi i valori  $\sigma_{\mu}$ ,  $\sigma_{D}$  sono automaticamente dati, per una coppia di molecole che collidono. Il diametro nel modello VSS è invece dato dalla seguente relazione:

$$d_{VSS} = \left(\frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)\left(\frac{m}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (kT_{ref})^{\omega}}{16\alpha\Gamma\left(\frac{9}{2}-\omega\right)\mu_{ref}E_t^{\omega-0.5}}\right)^{1/2}$$
(2.20)

Con  $\alpha$ =1, si torna all'equazione (2.14) per il modello VHS, metre per  $\alpha$ =1 e  $\omega$  = 0.5 si ottiene la (2.13) del modello HS [11].

Le velocità relative post-collisionali delle molecole dei modelli HS,VHS,VSS sono:

$$c_{r(HS)}^{*} = c_{r(VHS)}^{*} = \begin{cases} u_{r}^{*} = \cos\chi\sqrt{u_{r}^{2} + v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \\ v_{r}^{*} = \sin\chi\cos\phi\sqrt{u_{r}^{2} + v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \\ w_{r}^{*} = \sin\chi\sin\phi\sqrt{u_{r}^{2} + v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \end{cases}$$
(2.21)

$$c_{r(VSS)}^{*} = \begin{cases} u_{r}^{*} = \cos\chi u_{r} + \sin\chi \sin\phi \sqrt{v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \\ v_{r}^{*} = \cos\chi v_{r} + \sin\chi (c_{r}w_{r}\cos\phi - u_{r}v_{r}\sin\phi)/\sqrt{v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \\ w_{r}^{*} = \cos\chi w_{r} - \sin\chi (c_{r}v_{r}\cos\phi + u_{r}w_{r}\sin\phi)/\sqrt{v_{r}^{2} + w_{r}^{2}} \end{cases}$$
(2.22)

Dove  $cos\chi = 2R_F^{1/\alpha} - 1$ ,  $\phi = 2\pi R_F$  con  $R_F$  è un numero casuale uniformemente distribuito tra 0 e 1.  $u_r$ ,  $v_r e w_r$  sono le componenti della velocità relativa  $c_r$  precollisione nelle direzioni x,y,z rispettivamente. Allo stesso modo  $u_r^*$ ,  $v_r^* e w_r^*$  sono le componenti della velocità relativa  $c_r^*$  post-collisione nelle direzioni x,y,z rispettivamente. Si nota una differenza sostanziale tra le equazioni (2.21) e (2.22) per i tre modelli. È evidente che il modello VSS non solo riflette bene l'effetto di diffusione molecolare ma ha anche quasi la stessa semplicità computazionale del modello VHS. Da ciò si evince come applicare tale metodo porta ad una migliore simulazione del movimento delle molecole per una miscela di gas e di conseguenza ad una miglior accuratezza dei risultati numerici [15].

## 2.4. MODELLI PER L'ENERGIA INTERNA

Per un gas in equilibrio termico, ogni molecola continuamente acquisisce e perde energia attraverso le collisioni con altre molecole ma la variazione totale dell'energia è zero. Il raggiungimento dell'equilibrio lo si ha dopo un certo tempo, ad esempio il tempo che serve alla funzione di distribuzione di raggiungere quella maxwelliana è di diversi *mean collision time* per un sistema con molecole HS che hanno inizialmente la stessa velocità. Le molecole poliatomiche e diatomiche hanno una certa energia interna e questa energia può essere anche scambiata nelle collisioni, oltre all'energia traslazionale. **Nell'equilibrio, l'energia totale termica è equipartizionata**:

"Each energy mode of a molecule on average has energy proportional to the number of degrees of freedom

times temperature 
$$E = \frac{\zeta}{2} kT$$
 "

Ogni molecola si muove nello spazio fisico 3D, dunque l'energia traslazionale ha 3 gradi di libertà  $\zeta_{tr} = 3$ .

Le molecole diatomiche hanno 2 gradi di libertà ( $\zeta_{rot} = 2$ ) per l'energia rotazionale, mentre le molecole poliatomiche non lineari ne hanno 3 ( $\zeta_{rot} = 3$ ).

Molecole diatomiche approssimate ad oscillatori armonici hanno  $\zeta_{vib}$  gradi di libertà vibrazionali, ottenuti dalla seguente formula:

$$\zeta_{vib} = \frac{\frac{2\theta_v}{T}}{\exp(\frac{\theta_v}{T}) - 1} \tag{2.23}$$

Il tempo necessario a raggiungere l'equilibrio per un certo modo dell'energia interna è dato da:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{E_{eq} - E}{\tau} \tag{2.24}$$

Dove  $\tau$  è il *relaxation time*, ossia il tempo richiesto per la deviazione dall'energia di equilibrio di decadere a 1/e dal suo valore iniziale.

Il numero di collisioni necessario per un particolare modo interno a raggiungere la condizione di equilibrio può essere approssimato a:

$$Z = \frac{\tau}{\tau_{coll}} \tag{2.25}$$

Dove  $\tau_{coll}$  è il *mean collision time*. Per molecole diatomiche si ha il *rotational relaxation number*  $Z_{rot}$  e il *vibrational collision number*  $Z_{vib}$ . Per ossigeno e azoto alla temperatura standard si ha  $Z_{rot} \approx 3 - 5$  e, in particolare, decresce con la temperatura. Invece, i *vibrational collision numbers* per le molecole diatomiche a temperature moderate (T < 3000 K) può essere approssimato a

$$Z_{vib} = C_1 \exp\left(\frac{C_2}{T^{\frac{1}{3}}}\right) \tag{2.26}$$

Dove  $C_1$ ,  $C_2$  sono costanti positive che dipendono dalle proprietà fisiche del gas. I valori di queste costanti ottenute sperimentalmente da Millikan e White sono per l'azoto  $C_1 = 9.1$ ,  $C_2 = 220.0$  [48].

#### 2.4.1. ROTATIONAL ENERGY EXCHANGE

Il modo rotazionale viene in genere simulato usando il classico approccio fisico in cui l'energia rotazionale  $E_{rot}$  è assunta continuamente distribuita in condizione di equilibrio secondo la distribuzione di Boltzmann:

$$f(E_{rot})dE_{rot} = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{\zeta}{2}\right)} \left(\frac{E_{rot}}{kT}\right)^{\frac{\zeta}{2}-1} \exp\left(-\frac{E_{rot}}{kT}\right) d\left(\left(\frac{E_{rot}}{kT}\right)\right)$$
(2.27)

Con  $\zeta$  che rappresenta il numero di gradi di libertà rotazionali. Quando una particella viene iniettata nella simulazione DSMC, le viene data una energia rotazionale iniziale campionata dall'equazione (2.27). L'energia rotazionale della particella può cambiare durante le collisioni con le altre particelle e con la parete. In un'analisi continua dello scambio di energia rotazionale, a partire dalla (2.24) viene spesso impiegata l'equazione di rilassamento rotazionale (*rotational relaxation equation*):

$$\frac{dE_{rot}}{dt} = \frac{E_{rot,eq} - E_{rot}}{\tau_{rot}}$$
(2.28)

Dove  $E_{rot}$  è la specifica energia rotazionale,  $E_{rot,eq}$  è il valore di equilibrio alla temperatura T e  $\tau_{rot}$  è il *rotational relaxation time* [7] [8].

La procedura DSMC coinvolge la valutazione della probabilità di scambio di energia rotazionale per ogni collisione seguendo il meccanismo dello scambio d'energia per quelle collisioni che portano al rilassamento rotazionale. La probabilità media dello scambio di energia rotazionale è:

$$< P_{rot} > = \frac{1}{Z_{rot}} = \frac{\tau_{tr}}{\tau_{rot}} = \frac{1}{\tau_{tr}v}$$
 (2.29)

Con  $\tau_{tr}$  che è il *translational relaxation time* e  $\nu$  la frequenza di collisione.

Boyd [7] [8] ha sviluppato la seguente probabilità di scambio dell'energia rotazionale istantanea basato sul modello di Parker per  $Z_{rot}$  e il modello VHS :

$$P_{rot} = \frac{1}{(Z_{rot})_{\infty}} \left[ 1 + \frac{\Gamma(\zeta + 2 - \omega)}{\Gamma(\zeta + \frac{3}{2} - \omega)} \left(\frac{kT^*}{E_{tot}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{2} + \frac{\Gamma(\zeta + 2 - \omega)}{\Gamma(\zeta + 1 - \omega)} \left(\frac{kT^*}{E_{tot}}\right) \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi\right) \right]$$
(2.30)

Dove  $E_{tot}$  è l'energia totale di collisione (somma di quella traslazionale e rotazionale),  $T^*$  è la temperatura caratteristica del potenziale intermolecolare e  $(Z_{rot})_{\infty}$  è il valore limite. Conseguentemente la valutazione della probabilità di scambio dell'energia rotazionale, viene usato un numero casuale per decidere se la collisione porta allo scambio di energia. Per tali collisioni, viene impiegato il modello di **Larsen-Borgnakke** (L-B) che assegna nuove energie rotazionali post-collisione [7] [8]. Questo assume l'equilibrio termodinamico locale, per campionare una frazione dell'energia totale di collisione dovuta alla rotazione,  $E_{rot}/E_{tot}$ , dalla seguente espressione:

$$\frac{P}{P_{max}} = \left[\frac{\zeta + 1 - \omega}{2 - \omega} \left(1 - \frac{E_{rot}}{E_{tot}}\right)\right]^{2 - \omega} \left[\frac{\zeta + 1 - \omega}{\zeta - 1} \left(\frac{E_{rot}}{E_{tot}}\right)\right]^{\zeta - 1}$$
(2.31)

Dove  $\frac{P}{P_{max}}$  è il rapporto tra la probabilità di un particolare valore di  $E_{rot}/E_{tot}$  sulla probabilità massima. Una volta che la nuova energia rotazionale è assegnata, la rimanente energia è la nuova energia traslazionale e quindi si determina la nuova velocità relativa di post-collisione.

Lumpkin [7] [8] notò che andava applicata una correzione addizionale alla probabilità di scambio dell'energia rotazionale nel metodo DSMC, allo scopo di rendere il meccanismo di scambio di energia del modello L-B consistente con l'equazione del rilassamento rotazionale nel continuo, data dall'equazione (2.28). Tale correzione risulta essere:

$$P_{particle} = P_{continuum} \left( 1 + \frac{2\zeta}{4 - 2\omega} \right) \tag{2.32}$$

Che è di solito vicino ad un valore pari a 2. Mentre l'energia rotazionale è simulata mediante un approccio classico, è stato sviluppato anche un approccio meccanico quantistico da Boyd [7] [8].

Il modello di Larsen-Borgnakke verrà ripreso nel dettaglio nella sezione 2.4.3.

# 2.4.2. VIBRATIONAL ENERGY EXCHANGE

Nel caso di flussi ipersonici, l'energia vibrazionale inizia ad essere rilevante e va presa in considerazione. La simulazione del rilassamento vibrazionale segue una procedura simile a quella per la rotazione. La probabilità media di scambio di energia vibrazionale viene in genere valutata usando il tempo di rilassamento vibrazionale usato nei modelli CFD ipersonici dovuti a Millikan e White [48] con la correzione dell'elevata temperatura di Park (*Park high temperature correction):* 

$$\tau_{vib} = \tau_{MW} + \tau_{Park} \tag{2.33}$$

Per riprodurre accuratamente questo tempo di rilassamento vibrazionale nella simulazione DSMC, a causa della sua complessa dipendenza dalla temperatura, è necessario valutare una probabilità media di scambio vibrazionale nella collisione. A differenza del rilassamento rotazionale, viene sempre impiegato un approccio meccanico-quantistico per la simulazione del rilassamento dell'energia vibrazionale nei flussi ipersonici. Un modello di scambio dell' energia vibrazionale quantizzata, che corrisponde all'approccio classico di L-B, è quello sviluppato da Boyd e Bergemann [48] Si basa inizialmente sul determinare il massimo livello quantico vibrazionale disponibile, in base all'energia totale di collisione:

$$v_{max} = \left\lfloor \frac{E_{tot}}{k\theta_v} \right\rfloor \tag{2.34}$$

In cui tali parentesi indicano un trocamento e  $\theta_v$  la temperatura caratteristica per la vibrazione di una molecola. Di conseguenza, il *post-collision vibrational quantum number* v viene campionato da:

$$\frac{P}{P_{max}} = \left(1 - \frac{\nu k \theta_v}{E_{tot}}\right)^{1-\omega} \tag{2.35}$$

Anche qui viene applicata il fattore di correzione di Lumpkin.

Modelli più dettagliati per il rilassamento vibrazionale sono stati sviluppati e applicati a flussi ipersonici. Per citarne uno, il *Multiple Quantum-Step Transition* (MQST), basato sul modello FHO (*Forced Harmonic Oscillator*) di Kerner, è uno dei modelli usati per simulazioni DSMC. Per maggiori dettagli e dimostrazioni, si rimanda alla ref. [48].

#### 2.4.3. IL MODELLO DI LARSEN-BORGNAKKE

Il modello di Larsen-Borgnakke (L-B) è diventato un modello standard per il calcolo di collisioni anelastiche nel DSMC. L'assunzione principale del modello L-B è che lo stato di post-collisione della coppia di collisione è soggetta a un equilibrio temporale. Il modello non è di tipo dinamico ma statistico. Il problema nell'usare tale modello è su come assegnare le probabilità degli eventi anelastici nella collisione: queste non hanno una diretta connessione con le probabilità misurate o con i *relaxation time*, che sono il risultato della dinamica delle collisioni delle molecole reali. Quindi, il metodo DSMC simula i modi dell'energia interna di atomi e molecole assegnando le energie interne (vibrazionale, rotazionale e elettronica) per ogni particella. Nei flussi ipersonici, così come nei casi di studio CFD, l'energia elettronica viene trascurata.

Le procedure di Larsen-Borgnakke (L-B) impostano la distribuzione delle energie interne post-reazione a valori che soddisfano il principio di equilibrio. Queste procedure mantengono, inoltre, la distribuzione di equilibrio di tutti i modi e la struttura dell'equilibrio di ogni modo porta automaticamente all'equilibrio tra i modi e all'equipartizione.

Procedure L-B separate sono richieste per ogni modo dell'energia interna e l'adattamento dell'energia ad ogni modo conivolge una distribuzione dell'energia tra i modi. Ci sarebbe inoltre una certa difficoltà nella sua implementazione se la distribuzione dell'energia post-collisione fosse dipendente dall'ordine in cui le procedure sono applicate alle due molecole nella collisione o ai modi interni di ogni molecola. Questo quesito è stato investigato analiticamente da Bird nel 1964 e si dimostra che la distribuzione finale delle energie è indipendente dall'ordine di applicazione delle procedure [4].

Il modello L-B è quindi quello più usato per lo scambio energetico tra i modi traslazionale e interno nel metodo DSMC e assume che solo una frazione 1/Z di tutte le collisioni sono anelastiche. Per la collisione anelastica, l' energia interna e l'energia traslazionale post-collisionali delle molecole sono campionate dalla distribuzione di equilibrio. In particolare, sono usati i seguenti *collision numbers* :

$$Z_{rot,LB} = \frac{\zeta_{tr}}{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}} Z_{rot} \qquad \qquad Z_{vib,LB} = \frac{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}}{\zeta_{tr} + \zeta_{rot} + \zeta_{vib}} Z_{vib} \qquad (2.36)$$

Dunque, lo scambio di energia traslazionale-rotazionale è modellato nella collisione se $R_f < \frac{1}{Z_{rot,LB}} , \text{ con } R_f \text{ che indica il } random \ fraction \ [27].$ 

Per quanto riguarda la redistribuzione di energia nella collisione secondo il modello LB, se la collisione è considerata come anelastica, allora l'energia post-collisionale è scelta dalla distribuzione di equilibrio corrispondente all'energia totale di collisione della coppia. L'energia totale di collisione (*collision total energy*) è

$$E_c = E_{tr} + E_{int} \tag{2.37}$$

Dove:  $E_{tr} = \frac{1}{2}m_r c_r^2$   $E_{int} = E_{rot,1} + E_{rot,2} + E_{vib,1} + E_{vib,2}$  (2.38)

Nel modello VHS, la funzione di distribuzione di equilibrio dell'energia traslazionale della coppia è

$$f(E_{tr}) \propto E_{tr}^{\left(\frac{3}{2}-\omega\right)} \exp\left(-\frac{E_{tr}}{kT}\right)$$
 (2.39)

Mentr per l'energia interna è

$$f(E_{int}) \propto E_{int}^{\overline{\zeta}/2} \exp\left(-\frac{E_{int}}{kT}\right)$$
 (2.40)

Dunque la funzione di distribuzione mista in condizione di equilibrio risulta essere

$$f(E_{tr}, E_{int}) \propto E_{tr}^{\left(\frac{3}{2} - \omega\right)} E_{int}^{\overline{\zeta}/2} \exp\left(-\frac{E_{tr} + E_{int}}{kT}\right) \propto E_{tr}^{\left(\frac{3}{2} - \omega\right)} E_{int}^{\overline{\zeta}/2} \exp\left(-\frac{E_c}{kT}\right)$$
(2.41)

L'energia interna post-collisionale della coppia può essere campionata da tale distribuzione attraverso il metodo *acceptance-rejection* [27].

Ora, questa energia interna post-collisionale va divisa per le due molecole collidendi:

$$f(E_{int,1}^*, E_{int,2}^*) \propto E_{int,1}^{*\zeta_{1/2}} E_{int,2}^{*\zeta_{2/2}} \exp\left(-\frac{E_{int}^*}{kT}\right)$$
 (2.42)

Infine,  $E_{int}^*$  per le due molecole viene campionata dalla distribuzione

$$f(E_{int,1}^{*}) \propto E_{int,1}^{*} \frac{\zeta_{1}}{2} (E_{int} - E_{int,1}^{*})^{\frac{\zeta_{2}}{2}} , f(E_{int,2}^{*}) \propto E_{int,2}^{*} \frac{\zeta_{2}}{2} (E_{int} - E_{int,2}^{*})^{\zeta_{1}/2} (2.43)$$

## 2.5. INTERAZIONI GAS - SUPERFICIE

Le proprietà della superficie sono certamente molto sensibili al modello assunto nel DSMC per l'interazione gas-superficie. Il più comune è il *fully diffuse reflection* in cui

la particella riflette dalla parete con nuove componenti di velocità che sono campionate dalla distribuzione maxwelliana caratterizzata dalla temperatura a parete. Nel modello diffuso, le energie interne della particella sono anch'esse campionate dalla distribuzione di equilibrio, come la (2.27) per la rotazione, usando la temperatura a parete. Il limite opposto alla riflessione diffusa è la *specular reflection*, in cui l'unica variazione alle proprietà della particella è la sua componente di velocità normale alla parete che viene semplicemente invertita di segno. Molte simulazioni DSMC usano il cosiddetto *accomodation coefficient*  $\alpha$  (visto nella sezione 1.2) per simulare la combinazione tra le due riflessioni appena citate, cosicchè per  $\alpha=1$  è *fully diffuse*, mentre per  $\alpha=0$  è *fully specular*. Le superfici reali in campo ingegneristico generalmente richiedono un valore nel range di  $\alpha=0.8-0.9$  [36][37].

Esistono due importanti fenomeni risultati dall'interazione gas-parete sotto alti numeri di Knudsen: *velocity slip e temperature jump*. Il numero relativamente basso di collisioni nel gas ad alto Kn significa che la velocità media a parete ha un valore finito, anche per una superficie con riflessione completamente diffusa. Tale fenomeno riduce lo *shear stress* e può portare a separazione. Similarmente, a causa del basso *collision rate*, la temperatura del gas a parete non è equilibrata con la superficie. In un flusso ipersonico, dove la temperatura a parete è più bassa di quella del gas, tale fenomeno porta a una riduzione del trasferimento di calore. Tali effetti sono naturalmente inclusi nella simulazione DSMC usando la riflessione diffusa e modelli CLL (Cercignani-Lampis-Lord) in cui il solito approccio CFD è quello di assumere *no-slip* e nessuna *temperature jump* a parete. Comunque, mentre alcuni di questi modelli migliorano l'accordo tra i risultati CFD e DSMC per le quantità a parete, ciò non è sempre ottenuto con un corrispondente miglioramento nei confronti delle proprietà del flusso. Questa situazione illustra di nuovo il bisogno di ricorrere a simulazioni numeriche *non-continuum* per flussi con alti Kn, usando quindi metodi cinetici come il DSMC.

# Capitolo III

# IL METODO NUMERICO dsmcFoam

Il metodo DSMC è un metodo stocastico, *particle-based* che è stato sviluppato quasi esclusivamente da Bird tra il 1960 e 1980 ed è diventato uno dei più importanti metodi numerici per risolvere problemi di gas rarefatto in regime di transizione. In particolare, è uno dei metodi preferiti per la simulazione dei gas in non equilibrio termodinamico, per cui viene necessariamente considerato la sua natura molecolare. É basato su concetti fisici dei gas rarefatti e nell'assunzione fisica che è alla base della derivazione dell'equazione di Boltzmann, ma tale metodo non è derivato direttamente da essa. Entrambi sono basati sulla teoria cinetica classica, per cui il DSMC è soggetto ad alcune restrizioni dell'equazione di Boltzmann (es. Caos molecolare e restrizioni legate al *dilute gas*).

Il DSMC è basato su tre caratteristiche principali del *dilute gas*. Il primo è che il moto delle molecole su scale temporali comparabili al *mean collision time* può essere considerato come *free flight* senza interazioni. Il secondo è che i parametri di impatto delle molecole che collidono non hanno bisogno di essere simulati deterministicamente. Il terzo è che per un'accurata rappresentazione del flusso è sufficiente simulare solo una frazione del numero massivo di molecole nel gas reale presenti in  $\lambda^3$ , per cui la simulazione avviene utilizzando particelle computazionali chiamate anche *simulators*.

Nel seguente capitolo si vedrà nel dettaglio il metodo numerico *dsmcFoam*. In particolare, viene introdotto il software *open source* utilizzato per le simulazioni e viene analizzata la struttura del codice *dsmcFoam*. Per completezza di informazioni, è

presente un breve cenno agli errori presenti con l'uso di tale solutore e viene infine tabulato un confronto tra i due *particle methods* DSMC e PIC.

#### 3.1. OpenFOAM: INTRODUZIONE AL SOFTWARE

L'intero lavoro è basato sulla versione 7 di OpenFOAM. Questo è un software open source con linguaggio di programmazione C++, che è disponibile gratuitamente sotto la licenza pubblica generale GNU. È realizzato per i sistemi operativi Linux e sono disponibili le istruzioni di installazione sulla stessa pagina web (https://openfoam.org/). Il pacchetto sorgente viene fornito con un manuale utente e una breve guida per programmatori. È stato sviluppato OpenFOAM (precedentemente FOAM che sta per Field Operation And Manipulation) come risolutore di problemi numerici di meccanica del continuo, ma potrebbe essere utilizzato come risolutore per tutti i sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali dipendenti dal tempo. Fa un uso massiccio delle *features* di programmazione di C++ e la struttura centrale comune con interfacce semplici ha portato allo sviluppo di diversi solutori. Il programma è centrato attorno a un 'nucleo' generico che fornisce un'infrastruttura comune che può essere interfacciata con i vari solutori. Il nucleo stesso è costituito da molte classi con un complicata struttura gerarchica e fa un uso intensivo di modelli. A partire da OpenFOAM versione 1.6 un risolutore per i problemi DSMC è il dsmcFoam che implementa il metodo di Bird, ampiamente discusso nelle sezioni precedenti.

## 3.2. SVILUPPO DEL CODICE dsmcFoam

Il solutore dsmcFoam è stato sviluppato nell'ambito dell' open source CFD toolbox OpenFOAM. Il codice è stato scritto, con la collaborazione degli autori, da OpenCFD Ltd., per il rilascio in OpenFOAM versione 1.6. OpenFOAM è un set flessibile di moduli efficienti con linguaggio di programmazione C++ per la risoluzione di problemi di fluidodinamica complessi. È stato modificato un codice di dinamica molecolare (MD) preesistente e contenuto all'interno di OpenFOAM per generare il dsmcFoam. Caratteristiche fondamentali del codice MD esistente, inclusa l'inizializzazione delle particelle in geometrie arbitrarie e il tracciamento delle particelle in mesh non strutturate, arbitrarie e poliedriche, sono tra gli elementi centrali del nuovo codice dsmcFoam. Il toolbox OpenFOAM CFD è stato sviluppato in C++; la natura flessibile e modulare dei blocchi di codifica C++ e l'accesso al source code porta al fatto che la codifica modificata dall'utente per i nuovi modelli DSMC è relativamente facile da implementare. La filosofia open source dietro OpenFOAM è che i costi di licenza commerciale dei CFD vengono eliminati, mentre la capacità illimitata di parallel processing significa che i problemi pratici di ingegneria possono essere affrontati entro scale temporali realistiche e su hardwares modesti [19].

Le caratteristiche attuali del *dsmcFoam* possono essere riassunte come segue:

- Simulazioni transitorie e stazionarie
- Capacità illimitata di *parallel processing*
- Geometrie arbitrarie 2D-3D
- Generazione automatica di sotto-celle per promuovere il 'neighbour' più vicino
- Numero arbitrario di specie di gas

- Condizioni al contorno per flusso freestream
- Modello collisionale VHS
- Modello di redistribuzione di energia di Larsen-Borgnakke
- Interazioni a parete: riflessione speculare o diffusa
- Contorni periodici (cyclic)



Fig.9: Struttura della directory di dsmcFoam [19].

La directory di *dsmcFoam* è mostrata in fig.9. L'albero mostra la location dei *submodels* contenenti il codice sorgente relativo alla collisione binaria, condizioni di flusso in ingresso (*inflow*) e modelli di interazione con la parete. La locazione delle *utilities dsmcFieldsCalc* e *dsmcInitialise* sono evidenziate in giallo, così come il solver *dsmcFoam*.

### Procedura generale di soluzione

In maniera simile alla CFD convenzionale, viene creata una mesh che descrive il dominio fisico, con eventuali ostacoli interni ben definiti. Come già detto precedentemente, una buona pratica del DSMC è quella di scegliere la dimensione della cella come una frazione del libero cammino medio e il *time step* come una frazione del *mean collision time* delle molecole di gas. I tipi di contorni vengono poi definiti per descrivere la natura di essi (es. *Diffuse/specular, freestream, cyclic*, ecc.) e su questi vengono poste le proprietà del fluido (es. Velocità, temperatura, *number density*, ecc.). Esistono inoltre dei traduttori all'interno di OpenFOAM che permettono all'utente di importare le mesh generate su altri software, usati per la generazione della griglia.

Conseguentemente la generazione della mesh e la definizione delle condizioni al contorno, vengono mandati in *run* sul terminale tre *features* di *dsmcFoanr*.

- dsmcInitialise una pre-processing utility per creare la configurazione iniziale delle particelle DSMC in geometrie arbitrarie (definite richiamando l'utility blockMesh sul terminale).
- 2. dsmcFoam il solver DSMC
- 3. dsmcFieldsCalc una post-processing utility per calcolare i campi intensivi (come velocità, densità e temperatura) da quelli estensivi (massa, quantità di moto ed energia). Questa utility può essere eseguita al tempo di esecuzione del solutore permettendo così all'utente di visualizzare il campo del flusso in esame durante la simulazione.

La location delle *utilities* sopra descritte e del solutore sono mostrate in fig.9. Inoltre, tutto può essere simulato con un calcolo in parallelo. Tutto il *post-processing* viene eseguito utilizzando il visualizzatore *open source* **Paraview**, fornito dalla suite di OpenFOAM [19].

Feature	dsmcFoam
Arbitrary 2D geometries	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>
Arbitrary 3D geometries	1
Arbitrary axisymmetric geometries	×
Parallel processing	1
Rotational energy	1
Vibrational energy	×
Electronic energy	×
Chemical reactions	×
Gravitational force controller	×
Mass flow rate measurement	×
Simulation quality reports	×
Dynamic load balancing	×

Fig.10: Capacità del dsmcFoam [48].

## 3.3. ALGORITMO BASE

L'algoritmo DSMC può essere diviso in 5 step differenti [48]:

- 1) Si muovono le particelle nel tempo  $\Delta t$ . Si aggiornano dunque le posizioni delle N particelle simulate usando l'algoritmo di *particle tracking* di OpenFOAM, che gestisce il moto di queste attraverso le facce della mesh (oltre che considerare l'interazione con i contorni).
- Si applicano le condizioni al contorno come: introdurre nuove particelle al contorno d'ingresso (*inflow boundary*), rimuovere le particelle dal contorno d'uscita (*outflow boundary*), elaborare le riflessioni sui contorni solidi.
- Si aaggiornano la lista di particelle in ogni cella computazionale per preparsi alla collision routine: si selezionano dunque le particelle nella cella e si calcolano le collisioni sulla base del modello di collisione binaria definito dall'utente.
- Si campionano le posizioni delle particelle, le velocità, le energie interne ecc. mediando le informazioni relative alle particelle simulate in modo da ottenere i valori macroscopici.

5) Si torna allo step 1) dove ora  $t = t + \Delta t$  e si ripete la simulazione finchè non si raggiunge il tempo  $t_{finale}$  (definito nel dictionary *ControlDict* per *dsmcFoan*).

Tali step possono essere visti nella fig.11, in cui si mostra l'algoritmo base seguito dai solutori DSMC, come *dsmcFoam*.



Fig.11: Algoritmo base del metodo DSMC [48].

Il dominio computazionale è inizializzato sotto l'assunzione dell'equilibrio termodinamico in base alle condizioni *freestream* nello spazio fisico. Viene quindi inizializzato il calcolo numerico riempiendo il dominio computazionale definito con un set di particelle pre-collocate all'interno [48]. Questo processo è ottenuto utilizzando dei *tools* di *pre-processing* specificando le loro posizioni, velocità e tipo di particelle (specie, massa, parametri di energia interna). Attraverso questi *pre-processing utilites* che permettono di settare il *DSMC case*, possono essere assegnati diversi valori all'interno

della mesh computazionale (ciò in particolare può essere fatto con il dictionary *setFieldsDict*). La densità, la temperatura, la velocità e l'energia interna delle particelle che entrano nel dominio in ogni passo temporale sono specificate in accordo con le condizione al contorno impostate. Infatti, l'utente specifica i valori macroscopici di temperatura, velocità, densità che vengono poi usate per inserire le particelle DSMC con energie e posizioni che riportano, nella media, a questi valori macroscopici definiti. La velocità della particella simulata è assunta come combinazione lineare della velocità termica e la velocità del flusso *freestream*. Le *boundary conditions* che corrispondono al flusso desiderato sono impostate al tempo iniziale. Il flusso stazionario è stabilito dopo che è trascorso un tempo sufficientemente lungo e il risultato stazionario è una media temporale di tutti i valori calcolati dopo aver raggiunto le condizioni stazionarie [36][37][48].

Dopo aver definito la posizione e la velocità, tutte le particelle vengono messe in moto attraverso distanze appropriate alle componenti di velocità e alla dimensione del passo temporale [48]. L'algoritmo di tracciamento delle particelle si basa su una funzionalità esistente in OpenFOAM per il moto discreto delle particelle all'interno della mesh, con due importanti obiettivi di conoscere quando le particelle cambiano cella e di considerare le interazioni di queste con i contorni. Per facilitare ciò, c'è un modo robusto di tracciare le particelle. Invece che applicare il  $\Delta \vec{r_i}$  sulla particella in moto (nella forma matematica, il moto della i-esima particella è dato da:  $\vec{r_i}(t + \Delta t) = \vec{r_i}(t) +$  $\vec{v_i}(t)\Delta t = \vec{r_i}(t) + \Delta \vec{r_i}$ ) viene calcolato dapprima il numero delle facce della mesh che una particella potenzialmente attraversa. La particella viene quindi tracciata in ciascuna faccia (e indice di cella) in sequenza. Dopo ogni intersezione, le proprietà della faccia vengono controllate per prendere una decisione sulla fase successiva del moto della particella. Se la faccia è interna, non c'è altro da fare e la particella procede verso la sua posizione successiva. Tuttavia, se la faccia fa parte di un confine, verrà applicata un'azione (a metà della sua fase di spostamento) e successivamente la particella continua il suo tragitto. Si è scoperto che questo è un algoritmo robusto che assicura che le particelle non si allontanino mai dal dominio.

Dunque, dopo aver mosso le particelle, viene determinata la loro posizione nel dominio computazionale. Ciò può essere ottenuto in modi diversi. Per griglie cartesiane, la nuova posizione della particella viene prontamente identificata, e la cella di destinazione è calcolata usando lo schema ad indici definito da Bird. Per griglie strutturate e non strutturate, così come per griglie più complesse (es. *Hexahedral, tetrahedral*) vengono usate diverse tecniche [36][37].

Dopo aver definito la nuova posizione, si procede con determinate azioni nel momento in cui le particelle incontrano i contorni che possono essere pareti solide, inlet,outlet e piani di simmetria. Le particelle che escono dal dominio sono rimosse dal flusso quando il contorno è definito come vuoto e nuove particelle sono introdotte attraverso contorni definiti come *flow patches*. Le collisioni con le superfici possono essere trattate come speculari, diffuse o combinazione dei due tipi. Il trattamento delle interazioni particellasuperficie richiede l'applicazione delle leggi di conservazione e l'applicazione della funzione di distribuzione di velocità di Maxwell. Questo tipo di trattamento permette al metodo DSMC di poter includere effetti fisici come reazioni chimiche, pareti catalitiche, effetti di radiazione e flussi ionizzati senza grandi cambiamenti nell'algoritmo di base.

Dopo aver determinato la nuova posizione delle particelle, quest'ultime vengono indicizzate in base alla posizione della cella per i due steps successivi: calcolo delle collisioni intermolecolari e campionamento del flusso. Per la selezione e il calcolo di queste collisioni, ogni cella è definita tramite indici tale che le altre particelle nella cella possono essere valutate attraverso una cross-reference list. Uno schema ad indici efficiente è stato introdotto da Bird nell'algoritmo DSMC originale.

Nel successivo step, le collisioni intermolecolari sono considerate in modo probabilistico. Per far ciò , diverse tecniche di collisione sono state formulate, come tecniche TC (*Time-Counter*) , NTC (*No-Time-Counter*) e NC (*Null-Collision*). Lo schema NTC proposto da Bird è quello dominante nel DSMC e viene descritto dettagliatamente nella sezione 3.6.

La procedura di collisione avviene *cell-by-cell*. Inoltre, il time step, il volume della cella e il numero di particelle nella cella, sono parametri che determinano il numero di possibili coppie delle particelle candidate nel processo di collisione. Le coppie di particelle sono scelte in modo random con la restrizione che il mean separation tra loro sia una frazione del *mean free path*. Questa restrizione è imposta selezionando le coppie dalla lista delle particelle nella sottocella. Il metodo DSMC valuta collisioni individuali su base probabilistica , conservando massa, quantità di moto e energia tra le collisioni.

Infine, la descrizione corrente viene completata considerando il processo di campionamento delle proprietà macroscopiche del flusso. Queste proprietà (densità, velocità,temperatura e pressione) sono calcolate attraverso una media appropriata dello stato microscopico delle particelle in ogni cella. Per maggiori informazioni, si rimanda alla ref. [36][37].

## 3.4. DESCRIZIONE DEL SOLVER dsmcFoam

Il solutore per i calcoli DSMC è chiamato dsmcFoam in OpenFOAM. Oltre alle classi presenti nell'infrastruttura comune, ce ne sono solo alcune nuove speciali per il solutore che derivano principalmente da una generica *parent class*. I due più importanti sono le template classes *DsmcParcel<ParcelType>* e *DsmcCloud<ParcelType>*. Inoltre, ci sono le due classi base basate su modelli *BinaryCollisionModel<CloudType>*, *InflowBoundaryModel<CloudType>* e *WallInteractionModel<CloudType>* insieme ai loro modelli specifici come ad es. *VariableHardSphere* per le collisioni binarie. Queste classi sarà descritto nella sezione seguente mentre alcune *helper classes* non saranno spiegate nel dettaglio [19].

## PARTICLES

Ogni particella simulata nel programma è rappresentata come un' istantanea di dsmcParcel che è una child class e una type definition di DsmcParcel <Parcel Type> che specializza il template a *DsmcParcel<dsmcParcel>* (Fig.12). Questo design complicato con il parametro modello che è la classe stessa viene utilizzato per la massima efficienza in alcuni chiamate di funzione, evitando funzioni virtuali usando statistiche. Tutte le funzionalità del dsmcParcel sono già implementate nella parent class DsmcParcel che a sua volta eredita la maggior parte delle sue funzionalità dalla sua parent class *Particle* dal core di OpenFOAM. La classe *Particle* gestisce lo smistamento delle particelle nelle celle, esegue il tracciamento lungo linee rette alle facce delle celle e gestisce le interazioni con i diversi tipi di patch. Per questo, ha bisogno degli attributi mostrati nel diagramma UML sottostante, indicando ad esempio in quale posizione e in quale cella si trova la particella, in quale faccia si trova e a quale processore è assegnato. La classe DsmcParcel sovraccarica parte delle funzioni di interazione della patch e ha una funzione *move()*, che usa le funzioni di tracciamento dal suo parent class per spostare la particella in un certo intervallo di tempo. Come attributi aggiuntivi mantiene la velocità, l'energia interna e la *label* che indica il tipo di particella che è uguale alla posizione nella *typeIdList* nel file di configurazione *dsmcProperties*. Le altre classi mostrate sul lato destro della Fig. (sotto) sono classi di supporto (helper classes). iNew è usato per leggere-costruire particelle quando vengono trasferite da un processore all'altro. trackData è una classe che fornisce dati ad alcune tracking functions e constantProperties mantiene le proprietà

costanti della particella come la sua massa e il suo diametro d. Questa classe è solo strutturalmente un membro di *DsmcParcel* ma non viene istanziata per ogni *dsmcParcel*. In realtà, viene istanziata una volta per ogni tipo di particella dal *DsmcCloud*.[19]



Fig.12: Diagramma UML semplificato per le particelle in OpenFOAM; vengono mostrati tutti gli attributi di classe mentre diverse funzioni membro vengono omesse. Le frecce indicano l'ereditarietà e le classi a monte di Particle<ParticleType> vengono omesse. Ogni particella ha come attributo la classe trackData per la quale viene mostrato il tipo di dati degli attributi per chiarimento. Tutte le classi sopra la linea rossa tratteggiata appartengono al core OpenFOAM e vengono utilizzate anche da altri solutori mentre le classi sotto la linea rossa sono specifiche per il dsmcFoam.[19]

## DSMCCLOUD

La seconda classe principale del solutore è la classe DsmcCloud. Dal punto di vista più elementare è un elenco di tutte le particelle, che è indicato nel diagramma UML (Fig.13) dall'eredità da *IDLList* e dall'eredità di *DsmcParcel* da *IDLList::link*. Ma il cloud è

molto di più. È la prima classe specifica del solutore che viene istanziata dal programma e conserva tutti i dati del solutore, direttamente o indirettamente tramite le classi membri. Esegue anche l'intero calcolo all'interno della sua funzione evolve(). Prima, potrebbe essere necessario inizializzare il cloud, ovvero le celle della mesh devono essere riempite con particelle simulate con proprietà tali che le condizioni iniziali specificate dall'utente siano rispettati. Questa attività viene eseguita dalla funzione *initialise().* Poi, le particelle devono essere aggiunte alle patch di afflusso (*inflow patches*), che può essere eseguita in base a diversi modelli. Così come BinaryCollisionsModels e WallInteractionModels, anche gli InflowBoundaryModels sono implementati con il meccanismo runTimeSelection, dove il DsmcCloud contiene solo un (auto-)puntatore all' abstract base class del sottomodello come in Fig.13. Il corretto modello da utilizzare durante il calcolo viene scelto dall'utente tramite il file di configurazione dsmcProperties. Dopo che la funzione evolve() ha chiamato la funzione inflow() adatta, chiama la funzione move() dalla parent class Cloud. Questa funzione chiama la funzione move() di ogni particella e gestisce l'assegnazione delle particelle al processore corretto. Successivamente, viene chiamata la funzione *collisions()* per selezionare i partner di collisione all'interno delle sotto-celle della mesh ed esegue le collisioni in base alla BinaryCollisionModel. L'ultimo passaggio del ciclo consiste nel calcolare le nuove proprietà del campo dalle proprietà della particella, che viene eseguita dalla funzione calculateFieldsProperties(). Il loop attorno ad evolve() è guidato durante il runtime dalle voci del file controlDict.

Esistono diverse funzioni membro di *DsmcCloud* che calcolano alcune proprietà macroscopiche del sistema, come *massInjected()*, e funzioni che calcolano le proprietà medie delle particelle dalla distribuzione di Maxwell. Le funzioni *equipartitionLinearVelocity()* ed *equipartitionInternalEnergy()* creano un valore di campionamento casuale dall'idonea distribuzione della velocità e dell'energia interna, rispettivamente, utilizzando il *random number generator* tenuto dall'attributo di classe

*rndGen.* Un elenco di *constantProperties* per ciascun tipo di particella è archiviato in *constProps* e il *DsmcCloud* contiene tutti i campi come variabili membro. Infine, la funzione *autoMap()* della *parent class Cloud* viene utilizzata per ordinare le particelle nella corretta cella della mesh dopo che la mesh è cambiata. Questa *parent class* implementa anche le principali funzioni di input/output. La seconda *parent class* di *DsmcCloud*, ovvero *DsmcBaseCloud*, non consente la costruzione di copie bit per bit standard e l'assegnazione bit per bit, dichiarando queste operazioni come private.



Fig.13: Diagramma UML semplificato per i cloud in OpenFOAM; sono mostrati tutti gli attributi di classe mentre diverse funzioni membro sono omesse, ad es. tutte le funzioni setter e getter. Le frecce indicano l'ereditarietà e le classi a monte di IDLList<ParticleType> e objectRegistry vengono omessi. Le classi cloud e DsmcBaseCloud vengono utilizzate solo per non consentire operazioni di copia bit per bit e costruzione di copie. Tutte le classi a sinistra della linea rossa tratteggiata appartengono al core OpenFOAM e sono utilizzati anche da altri risolutori mentre le classi sono corrette alla linea rossa sono specifici del solutore dsmcFoam.[19]



Fig.14: Diagramma UML semplificato per BinaryCollisionModels in OpenFOAM; vengono mostrati tutti gli attributi di classe mentre tutte le funzioni setter e getter vengono omesse. Le frecce indicare eredità.[19]

## 3.5. SENSIBILITA' DEL CODICE

Come accennato in precedenza, il flusso nel metodo DSMC è un insieme di particelle (atomi,molecole ecc) che posseggono una loro posizione, velocità ed energia interna. Lo stato della particella è immagazzinato e modificato con il tempo mentre essa si muove nel dominio fisico definito, collide e interagisce con le superfici. L'assunzione del *dilute gas* (dove il *mean free path* è molto più piccolo del *mean molecular space* nel gas) permette di disaccoppiare il moto molecolare dalle collisioni. Il moto delle particelle è modellato deterministicamente mentre le collisioni sono trattate statisticamente. Poichè è impossibile simulare il numero reale di particelle nel dominio computazionale, viene usato un numero contenuto di particelle rappresentative e ognuno di queste rappresenta un ampio numero di molecole e atomi. Le simulazioni possono variare da migliaia a milioni di particelle DSMC simulate nei problemi di gas rarefatto. E' richiesta per

l'esecuzione del metodo una griglia computazionale, rappresentativa dello spazio fisico da investigare.[36][37][41] Ogni cella fornisce un riferimento per il *sampling* delle proprietà macroscopiche del gas e per la scelta della coppia potenziale di collisione. L'accuratezza della simulazione dipende principalmente da quattro *constraints*:

- i) Le dimensioni della cella computazionale
- ii) Il passo temporale
- iii) Il numero di particelle per cella
- iv) Numero di samples (campioni)

1° Constraint: Le dimensioni lineari delle celle devono essere piccole rispetto alla lunghezza dei gradienti nel flusso macroscopico, normali alla direzione del flusso, il che significa che le dimensioni delle celle devono essere dell'ordine o più piccole del *mean free path* locale, cioè la distanza percorsa dalla particella tra due collisioni:  $\Delta x < \lambda = Kn \cdot L$  (3.1)

Il mean free path per l' hard sphere gas è  $\lambda = 1/(\sqrt{2\pi}d^2\rho_n)$ , dove d è il diametro della molecola (dell'ordine di  $10^{-10}$  m) e  $\rho_n = N/V$  è il number density  $[m^{-3}]$ , ossia la concentrazione di molecole in un  $m^3$ . Il volume disponibile per una particella è dunque  $1/\rho_n$ , per cui è possibile definire anche il mean molecular spacing  $\delta = \rho_n^{-\frac{1}{3}}$ . Tramite  $\delta$ , è possibile definire inoltre il range di applicabilità del metodo DSMC: in particolare, quando  $\frac{\delta}{d} \gg 1$  allora le molecole occupano solo una piccolissima frazione dello spazio e ciò comporta che queste si muovono fuori dal range di influenza delle altre. Quando tale condizione viene soddisfatta il regime del fluido viene chiamato dilute

gas ed è il caso in cui il metodo DSMC è applicato. Per l'aria in condizioni standard, l'ipotesi di dilute gas può essere considerata valida per  $\frac{\delta}{d} > 7$ .

 $2^{\circ}$  Constraint: Altro requisito fondamentale è l'impostazione del *time step*. Le traiettorie delle particelle nello spazio fisico definito sono calcolate sotto l'ipotesi del disaccoppiamento tra il moto della particella e le collisioni intermolecolari. Dunque, il passo temporale va scelto sufficientemente piccolo in confronto al *mean collision time*  $\tau$  (MCT: il periodo trascorso tra due collisioni, pari all'inverso del *collision frequency* generalmente rappresentata con Z) e al *cell residence time* (tempo speso dalla particella DSMC nell' attraversare una cella computazionale in condizioni di *freestream*):

$$\Delta t < \min(\tau, \tau_{res}) \tag{3.2}$$

$$\tau = Z^{-1} = \frac{\lambda}{\bar{v}} \quad ; \quad \tau_{res} = \frac{\Delta x}{v_{freestream}} \qquad \qquad \bar{v} = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi m}} \tag{3.3}$$

Con  $\bar{v}$  che è l'*averaged molecular speed* (cioè il valore medio delle velocità con cui le molecole si stanno muovendo nel gas, vista nella sezione 1.2), m la massa molecolare [kg],  $k_b$  la costante di Boltzmann [1.38  $10^{-23}$  J/K] e T la temperatura [K].[41]

*3° Constraint:* Un requisito addizionale è legato anche al numero di particelle simulate nelle celle. Ciò perchè il DSMC usa un sistema cell-based per il campionamento delle proprietà macroscopiche e la selezione dei partners collidendi. Diverso è il caso dei metodi particle-in-cell (PIC), di cui si analizzeranno brevemente le differenze nella sezione 3.10. Nelle simulazioni DSMC, le collisioni intermolecolari sono il principale motore nello sviluppo del flusso. Queste avvengono in ogni cella e quindi deve esserci un unmero sufficiente di particelle DSMC non solo per ridurre l'errore statistico durante il processo di campionamento ma anche per assicurare l'accuratezza del *collision rate* simulato. Poichè, infatti, il *collision rate* è funzione del numero di particelle presenti

nelle celle del dominio, è preferibile che ogni cella abbia il più grande numero di particelle possibile. Comunque, il numero possibile di partners collidendi è funzione del numero di particelle per ogni cella. In tale scenario, più è grande il numero di particelle, maggiore sarà il numero di possibili collisioni binarie ma anche il costo computazionale. Come risultato, dunque, è necessario determinare il numero ottimale di particelle per ogni cella, per garantire accuratezza statistica mantenendo un costo computazionale realistico. Per risolvere tale problema, Bird introdusse l'opzione di poter suddividere le celle in un numero arbitrario di sotto-celle per la selezione delle collisioni binarie. Tale procedura migliora l'accuratezza del metodo, assicurando in questo modo che la collisione avviene solo tra particelle 'neighbour'. Dunque, è preferibile avere in ogni cella minimo 20-30 particelle simulate. Esistono simulazioni che utilizzano circa 10 particelle per ogni cella e altre che ne usano 50-120. Il numero dipende molto dalla scelta del modello collisionale. Nel caso del dsmcFoam, si usa il metodo *No Time-Counter* (NTC), che si vedrà nel dettaglio nella sezione 3.6.

 $4^{\circ}$  Constraint: La dispersione statistica è determinata dal numero di campioni e per problemi steady-state il campionamento non deve iniziare finchè non termina un sufficiente periodo transitorio. Poichè le proprietà macroscopiche del flusso sono ottenute campionando tutte le particelle nella cella, il numero di samples deve essere sufficientemente piccolo da minimizzare l'errore statistico (ossia un basso livello di fluttuazioni), che si riduce con la radice quadrata del *sample size*  $N_s$ .

Studi recenti [36][37] hanno dimostrato come l'accuratezza della simulazione con il metodo DSMC sia **indipendente** dal valore scelto di  $N_s$ ,  $\Delta t$ ,  $\Delta x$  e numero di particelle in ogni cella, **purchè siano rispettati i quattro constraints** appena analizzati.



Fig.15: simulazione DSMC del gas Argon in a cube di dimensione laterale L, con pareti speculari sui contorni.[37]

# 3.6. SELEZIONE DELLE COPPIE DI COLLISIONE in dsmcFoam: NO TIME COUNTER

Dopo che tutte le particelle vengono mosse e monitorate nelle loro posizioni all'interno della mesh computazionale definita, è necessario re-indicizzarle prima di iniziare la routine di collisione, poichè le routine di collisione e il campionamento dipendono dalle informazioni relative all'occupazione corrente di ogni cella. Le collisioni sono poi trattate in maniera probabilistica, il che separa il DSMC dalle tecniche deterministiche come il Moleculr Dyamics (MD). Esistono diversi metodi che assicurano che il numero attuale di collisioni sia eseguito in modo da rimanere consistente con la teoria analitica, ma il metodo principale usato nel *dsmcFoam*, come detto pocanzi, è lo schema **No-Time-Couter (NTC)** di Bird. Brevemente si introducono i metodi TC e NTC [7] [37].

La definizione del corretto collision rate è essenziale nell'approccio DSMC. Per la teoria cinetica, il numero di coppie di collisione  $N_{coll}$  simulate nella cella nel tempo  $\Delta t$  è:

$$N_{coll} = \frac{1}{2} \frac{N \rho_n(\overline{\sigma_T c_r}) \Delta t}{V_c}$$
(3.4)
Con N numero istantaneo di particelle nella cella,  $V_c$  il volume della cella,  $\sigma_T$  la collision cross section e  $c_r$  la velocità relativa. Al fine di determinare  $N_{coll}$ , il prodotto medio  $\overline{\sigma_T c_r}$  deve essere calcolato per tutte le possibile coppie di collisione. Risulterebbe costoso computazionalente calcolarlo per ogni coppia di collisione (tempo computazionale  $\propto N^2$ ) e quindi viene adottato uno schema detto *acceptance-rejection scheme* per scegliere quali coppie collidono, considerando il massimo valore del prodotto  $\sigma_T c_r$  nella cella. Considerando il Dunque, il prodotto  $(\sigma_T c_r)_{max}$  viene usato per determinare la collisione reale secondo le seguenti operazioni:

- Una coppia di particelle DSMC viene casualmente scelta all'interno del volume della cella;
- 3. Viene calcolato il prodotto ( $\sigma_T c_r$ ) per la coppia selezionata;
- 4. Se  $(\sigma_T c_r)$  è maggiore di  $(\sigma_T c_r)_{max}$ , il massimo valore viene aggiornato;
- 5. La probabilità che la collisione avvenga è dunque data da  $P_{coll} = \frac{\sigma_T c_T}{(\sigma_T c_T)_{max}}$ . Se la probabilità  $P_{coll}$  è maggiore di  $R_f$ , allora la coppia di particelle è accettata per la collisione. Al contrario, una nuova coppia una nuova coppia viene scelta casualmente e la procedura si ripete.
- 6. Se la coppia di particelle è accettata per il processo di collisione, allora il tempo nella cella viene incrementato di  $\delta t = \frac{2}{N\rho_n \sigma_T c_r}$  impostando  $N_{coll} = 1$ .
- 7. Il numero di collisioni viene calcolato nella cella finche la somma di  $\delta t$  è leggermente maggiore del time step  $\Delta t$ . Tale procedura appena descritta è il metodo **Time-Counter (TC)** proposto da Bird nel 1976.

Nonostante riproduca il corretto collision rate di non equilibrio con un'ottima performance computazionale, la tecnica TC può portare ad alcuni problemi in condizioni estreme di non equilibrio, come in forti onde d'urto. L'accettazione della bassa probabilità di collisioni, cioè le coppie con un piccolo valore di  $\sigma_T c_r$ , danno come risultato grandi valori di  $\delta t$ . Di conseguenza, la somma dell'incremento temporale può superare  $\Delta t$  di valori inaccettabili. Dal punto di vista computazionale, come riportato da uno studio Baganoff e McDonald, il numero totale di collisioni simulate può essere molto diverso da una cella all'altra. Inoltre, questo numero è sconosciuto fino a quando non viene determinato il passo temporale  $\Delta t$ . Tale implementazione rende difficile la vettorizzazione numerica della procedura di collisione. Per superare questo problema, Bird ha proposto il modello di collisione denominato **No-Time-Counter (NTC)** [36][37].

Le tecniche NTC e TC hanno la stessa regola di selezione per la coppia di collisioni, che si basa sul metodo *acceptance-rejection*; tuttavia, nella tecnica NTC il numero massimo  $N_{coll}$  di collisioni da selezionare in  $\Delta$ t in una cella è impostato prima della selezione delle coppie in collisione. In questo nuovo metodo di collisione, il conteggio del tempo è sostituito da una dipendenza esplicita di  $N_{coll}$  sul passo temporale, cioè il numero di collisioni non dipende dalla scelta delle coppie o valori particolari di  $\sigma_T c_r$ .

Nel metodo NTC si ha dunque che il numero di coppie di collisioni selezionate nel tempo  $\Delta t$  è:

$$N_{coll} = \frac{1}{2V_c} F_N N \overline{N} (\sigma_T c_r)_{max} \Delta t$$
(3.5)

Con  $(\sigma_T c_r)_{max}$ , il massimo prodotto tra la collision cross section e la velocità relativa di tutte le possibili coppie di particelle nella cella,N il numero di particelle nella cella  $\overline{N}$ il valore medio di N e  $F_N$  il numero di atomi o molecole reali che ogni particella DSMC rappresenta. La probabilità  $P_{coll}$  della particella i-esima che collide con la particella jesima all'interno della cella è

$$P_{coll}[i,j] = \frac{|c_i - c_j|}{\sum_{m=1}^{N} \sum_{n=1}^{m-1} |c_m - c_n|}$$
(3.6)

La particella i-esima è scelta in modo casuale tra le particelle della cella, mentre la particella j-esima è scelta nella sottocella che assicura la collisione con il vicino 'neighbour'. Ogni coppia di collisione i-j viene poi testata usando il metodo acceptance-rejection; in particolare la collisione è accettata se:

$$\frac{(\sigma_T c_r)_{ij}}{(\sigma_T c_r)_{max}} > R_f \tag{3.7}$$

Dove  $R_f$  è un numero casuale uniformemente scelto tra [0,1]. Una volta che la coppia è stata selezionata per la collisione, le particelle devono collidere tra loro. Se viene usato il modello di reazione chimica, le particelle selezionate vengono testate per possibili reazioni.

In genere, nei dilute gas, le collisioni intermolecolari sono considerate binarie e vengono simulate resettando le velocità di entrambi i partners della coppia, le loro posizioni non vengono alterate. Inoltre, un urto elastico è definito come un urto in cui non c'è scambio di energia tra il modo traslazionale e quello interno. Le velocità di precollisione di due particelle in collisione possono essere indicate con  $c_1 e c_2$  come mostrato in Fig.16. Se sono note le proprietà fisiche e le traiettorie di queste particelle, si possono determinare le velocità post-collisione  $c_1^* e c_2^*$ . Per determinare le velocità post-collisione, la quantità di moto lineare e l'energia devono essere conservate durante l'urto:

$$m_1c_1 + m_2c_2 = m_1c_1^* + m_2c_2^* = (m_1 + m_2)c_m$$
(3.8)

$$m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 = m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2}$$
(3.9)

Considerando dunque collisioni elastiche che avvengono tra due particelle generiche (i,j) che non scambiano energia rotazionale e vibrazionale, la quantità di moto lineare viene conservata assicurando che la velocità del centro di massa rimane costante, ossia  $c_m = c_m^*$ :

$$\frac{m_i c_i + m_j c_j}{m_i + m_j} = \frac{m_i c_i^* + m_j c_j^*}{m_i + m_j}$$
(3.10)

E l'energia si conserva mantenendo il modulo della velocità relativa costante:

$$c_r = |c_i - c_j| = |c_i^* - c_j^*| = c_r^*$$
 (3.11)

Le due eq sopra insieme all'equazione relativa all'angolo di scattering, permettono di determinare  $c_r^*$ . Nel modello VHS, gli angoli di scattering  $\theta \in \phi$  sono uniformemente distribuite attorno la sfera unitaria. L'angolo azimutale  $\phi$  è uniformemente distribuito tra  $0 \in 2\pi$ :  $\phi = 2\pi R_f$ (3.12)

L'angolo di elevazione  $\theta$  è uniformemente distribuito nell'intervallo [-1,1] e calcolato attraverso  $cos\theta = 2R_f - 1$  e  $sin\theta = \sqrt{1 - cos^2 \theta}$ . Le tre componenti di velocità di post-collisione sono definite come

$$\boldsymbol{c}_{r}^{*} = c_{r}^{*}[(\cos\theta)\hat{\boldsymbol{x}} + (\sin\theta\cos\phi)\hat{\boldsymbol{y}} + (\sin\theta\sin\phi)\hat{\boldsymbol{z}}]$$
(3.14)

E le velocità post-collisione diventano

$$\boldsymbol{c}_{i}^{*} = \boldsymbol{c}_{m}^{*} + \left(\frac{m_{j}}{m_{i} + m_{j}}\right) \boldsymbol{c}_{r}^{*} \qquad \boldsymbol{c}_{j}^{*} = \boldsymbol{c}_{m}^{*} - \left(\frac{m_{i}}{m_{i} + m_{j}}\right) \boldsymbol{c}_{r}^{*} \qquad (3.15)$$

Si assume che le particelle siano centri di forza, cioè che la forza tra di loro agisca solo tra i loro centri. Di conseguenza, durante la collisione, la forza intermolecolare e le traiettorie rimangono sullo stesso piano precedentemente determinato dalle velocità di pre-collisione. L'equazione dell'energia può essere rischitta anche in questo modo:

$$m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 = (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^2$$
(3.16)

$$m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2} = (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^{*2}$$
(3.17)

Dove  $m_r$  è la massa ridotta. Poiché  $c_m e c_r$  possono essere calcolate dalle velocità di pre-collisione, la determinazione delle velocità post-collisione riduce il calcolo a una determinazione del vettore velocità relativa di post-collisione. Se F è la forza tra due centri di forza tra le particelle sfericamente simmetrici e  $r_1 e r_2$  sono i loro vettori posizione, allora le equazioni del moto delle particelle sono le seguenti:

$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F} \qquad m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = -\mathbf{F} \tag{3.18}$$

Combinando le due equazioni, si ottiene:

$$m_1 m_2 (\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = (m_1 + m_2) F$$
 (3.19)

considerando la velocità relativa  $c_r=\dot{r_1}-\dot{r_2}=\dot{r}$ , allora $m_r\dot{r}=F.$ 

Il moto della particella di massa  $m_1$  rispetto alla particella di massa  $m_2$  è equivalente al moto della particella di massa  $m_r$  rispetto al centro di forza fisso. Per completezza, i risultati sopra discussi sono riassunti in Fig.16. In base a tale figura, la trasformazione dal sistema di coordinate del centro di massa cambia le traiettorie tridimensionali in bidimensionali, che sono simmetriche rispetto al tratto AA'.



Fig.16: Schema delle collisioni binarie: a) Rappresentazione della collisione planare. b) Collisione binaria nel sistema di riferimento del centro di massa. c) Interazione della particella con massa ridotta e centro di scattering fissato [36][37].

Le traiettorie delle due particelle sono ridotte a una nell'ulteriore trasformazione al sistema di riferimento di massa ridotta e questa traiettoria rimane simmetrica rispetto la linea absidale trasformata che passa per il centro di dispersione (scattering) O. Questa simmetria riflette la simmetria dell'equazione rispetto alle velocità di pre-collisione e post-collisione.

Nel caso di molecole biatomiche con energia rotazionale, le collisioni anelastiche devono accadere allo scopo di scambiare energia tra i modi traslazionale e rotazionale. Nel DSMC, il metodo di scambio di energia rotazionale è, come visto, il modello Larsen-Borgnakke, che tratta una certa frazione di collisioni come anelastiche. Nel dsmcFoam, viene utilizzato  $Z_{rot}$  costante, che viene impostato nel campo *rotationalRelaxationCollisionNumber* nel file *[case]/constant/dsmcProperties.* Quando una collisione sta per avvenire, viene accettata se  $\frac{1}{Z_{rot}} > R_f$  e alla particella è assegnata una nuova energia rotazionale. Per la conservazione dell'energia, l'energia totale

traslazionale disponibile alla coppia di collisione decresce di conseguenza e viene calcolata una nuova velocità relativa di post-collisione:

$$c_r^* = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{tr}}{m_r}} \tag{3.20}$$

Dove  $\varepsilon_{tr}$  è l'energia totale traslazionale disponibile alla coppia in seguito all'avvenuta correzione per il rilassamento rotazionale e  $m_r$  è la reduced mass della coppia. Il processo di collisione rimanente procede dall'eq.di  $\phi$ .

# 3.7. BOUNDARY CONDITIONS in dsmcFoam

Nei problemi gasdinamici, ci sono due tipi di *boundary conditions* : quelle specificate dalle proprietà macroscopiche del flusso *freestream* e quelle definite dal comportamento fisico di una superficie solida che interagisce con le particelle. Nell'approccio discreto-molecolare, il primo tipo di contorno riguarda l'inlet e l'outlet delle particelle attraverso un dato contorno. L'idea principale della procedura relativa all'inlet è quella di definire il flusso e lo stato termale delle molecole che si muovono nel dominio computazionale. Le particelle sono inserite nei contorni d'ingresso sulla base del cosiddetto *equilibrium maxwellian number flux*  $N_{in}$  al contorno:

$$\dot{N}_{in} = \frac{n_{in}}{\beta(2\pi^{\frac{1}{2}})} \left[ \exp(-s^2 \cos^2 \theta) + \pi^{\frac{1}{2}} s \cos\theta (1 + er f(s \cos\theta)) \right]$$
(3.21)

Con:

$$\beta = \left(\frac{m}{2kT_{in}}\right)^{1/2} \qquad \qquad s = c_{0,in}\beta \qquad (3.22)$$

Dove il pedice 'in' indica inlet e  $\theta$  l'angolo tra il vettore velocità  $c_{0,in}$  e l'inlet.[36][37]

La procedura per l'outlet consiste semplicemente nel rimuovere le particelle che lasciano il dominio. Ovviamente, entrambe le procedure devono essere consistenti con le condizioni del flusso. Il secondo tipo di boundary condition tratta le interazioni gassuperficie, che può modificare lo stato termico delle particelle che collidono su parete. L'influenza del modello di interazione gas-superficie sulle forze aerodinamiche e il trasferimento di calore aumenta significativamente al diminuire del grado di rarefazione del gas e gioca un ruolo importante nei calcoli aerodinamici ipersonici.

Il primo modello di interazione gas-superficie per la teoria cinetica è stato supposto da Maxwell nel 1879. In questo modello, sono considerati i due tipi di interazione appena visti nel capitolo 2: speculare e diffuso. La riflessione speculare è perfettamente elastica, invertendo di segno la componente di velocità normale alla superficie mentre la componente parallela rimane invariata, come come non c'è scambio di energia. Dunque, l'angolo di deflessione è pari all'angolo d'incidenza. In genere, la condizione speculare a parete viene considerata per rappresentare una perfetta superficie liscia o un piano di simmetria, infatti la specular wall patch funziona nello stesso modo del symmetry boundary.

La riflessione diffusa rappresenta una superficie microscopicamente rugosa, in cui la velocità della particella post-interazione non è uguale a quella pre-interazione. Infatti, nella fully diffuse wall patch l'energia e la velocità delle particelle simulate viene sostituita da valori casuali campionati dalla distribuzione di equilibrio con la stessa velocità che si ha a parete. In altre parole, La velocità post-interazione viene calcolata numericamente sulla base dell'equilibrio termico con la temperatura locale a parete e la direzione del vettore velocità è scelta con stessa probabilità in tutte le direzioni secondo la funzione di distribuzione di maxwell. Nel modello di interazione gas-superficie diffusa, viene richiesto solo un accomodation coefficient  $\alpha$  e l'angolo di scattering è indipendente

dall'angolo di arrivo della particella. L'accomodation coefficient dipende dal fluido, rugosità e materiale della superficie. Lavori teorici e sperimentali mostrano che quando una particella viene riflessa dalla superficie solida, la direzione preferenziale di riflessione risulta essere una distribuzione ellittica di scattering come mostrato in fig.17. Tale comportamento è rappresentato in modo scarso dal modello di Maxwell e per aggirare tale problema, un modello fenomenologico è stato proposto da Cercignani e Lampis (CL) in 1971. Tale modello CL è basato sulla definizione dei coefficienti  $\alpha_n e \alpha_t$ che sono gli accomodation coefficient relativi,rispettivamente, alle componenti di velocità normale e tangenziale. Inoltre l'angolo di scattering è sempre funzione dell'angolo di arrivo della particella. Questo modello è relativamente semplice e mostra un buon accordo con i risultati sperimentali. Un'applicazione DSMC del modello CL è stato supposto da Lord nel 1990 attraverso un algoritmo relativamente semplice. Di conseguenza il modello CLL (Cercignani-Lampis-Lord) per giustificare lo scambio di energia rotazionale e vibrazionale a parete. Tale modello è attualmente implementato nel codice *dsmcFoam* [37].



Fig.17: modello di interazione gas-superficie: (a) di Maxwell 'fully diffuse' e 'specular', (b) modello di interazione gas-superficie Cercignani-Lampis-Lord.[37]

## 3.8. SAMPLING

Nella maggior parte dei casi, lo scopo di qualsiasi simulazione DSMC è recuperare le proprietà macroscopiche del flusso di gas. Per fare ciò, è necessario campionare le proprietà delle particelle dopo che le collisioni sono state elaborate, quindi utilizzare queste proprietà delle particelle mediate nel tempo per calcolare i campi macroscopici. Ad esempio, il *number density* in una cella di calcolo viene calcolata come:

$$\rho_n = \frac{F_N \overline{N}}{V_C} \tag{3.23}$$

dove  $\overline{N}$  è il numero medio di particelle DSMC nella cella durante l'intervallo di misurazione e  $V_C$  è il volume della cella. Se il flusso è *steady*, la simulazione può raggiungere il suo stato stazionario e quindi le proprietà vengono misurate su una sa*mple size* sufficientemente ampia per ridurre l'errore statistico a un livello accettabile, che può essere stimato utilizzando le relazioni fornite da Hadjiconstantinou [48] Per un problema transitorio, la simulazione deve essere ripetuta un numero sufficiente di volte per fornire un campione sufficientemente grande e quindi i risultati possono essere presentati come una media d'insieme.

## 3.9. CONVERGENZA ED ERRORI NELLA SIMULAZIONE

La maggior parte degli algoritmi DSMC richiede la discretizzazione nel tempo e nello spazio. I passaggi temporali in una tale discretizzazione devono essere nell'ordine del tempo necessario affinché una molecola entri in collisione con un'altra molecola o atomo per garantire che i parametri previsti del flusso corrispondano ad una soluzione dell'equazione di Boltzmann. I valori del mean free path dipendono dall'andamento del flusso e quindi è buona norma scegliere la dimensione delle celle collisionali a livello locale. Tuttavia, così facendo, è necessario assicurarsi che il numero di particelle computazionali in una cella sia sufficiente ad ottenere un valore fisicamente ragionevole. Il metodo tradizionale per stabilire la convergenza è aumentare il numero di particelle e celle nel dominio computazionale fino a quando il campo di flusso non cambia. In particolare, si considera raggiunta la convergenza quando il numero di particelle inserite varia di poco tra un passo iterativo e l'altro, mantenendosi dunque quasi stabile. Per i sistemi ad alta intensità di calcolo, tuttavia, questo approccio non funziona. Pertanto, è necessario comprendere, quantificare e prevedere i principali tipi di errori:

- i) un errore statistico che corrisponde alla natura stocastica del metodo
- un errore deterministico che dipende dalla selezione di parametri numerici come il passo temporale, dimensione della cella e numero totale di particelle simulate.

È necessario essere in grado di analizzare separatamente tali errori per comprendere la loro influenza sui risultati. Tale argomento esula dallo scopo del presente lavoro, dunque per maggiori informazioni sull'analisi di tali errori si rimanda alla ref.[44]. Verrà fatto un breve cenno nella presente sezione.

## Errori statistici

Innanzitutto, consideriamo gli errori dovuti alla natura stocastica del metodo DSMC. I macroparametri del flusso in regime stazionario sono ottenuti mediando le proprietà delle particelle, come densità numerica e velocità, su un numero di passi temporali  $N_t$ . quindi, la sorgente degli errori statistici è dovuta al processo di acquisizione di una media del campione in un volume finito. Gli errori hanno un comportamento asintotico e svaniscono man mano che la dimensione del campione va all'infinito. Questi errori sono inversamente proporzionali alla radice quadrata della dimensione del campione, e

quindi possono essere diminuiti aumentando la dimensione del campione, cioè il numero di particelle in un dominio computazionale o numero di fasi temporali utilizzate nel campione. Generalmente possiamo assumere che la varianza di una proprietà calcolata X sia indipendente dalla dimensione del campione, quindi questo parametro ha un errore statistico pari a:

$$\left|X_{computed} - X_{true}\right| \le 3\sqrt{\frac{\sigma_X^2}{N_S}} \tag{3.24}$$

Con  $\sigma_X^2 = E\{X^2\} - E^2\{X\}$  è la varianza (dispersione) di X,  $E\{X\}$  è il *mean* (*expectation*) di X e  $N_S$  è il *sample size*.[44] L'eq. (3.24) è la cosiddetta *three-sigma rule*. Dunque, dalla stima della varianza  $\sigma_X^2$ , si può fare una predizione dell'errore commesso per un dato *sample size*:

$$Err(X) = \frac{|X_{computed} - X_{true}|}{X_{computed}}$$
(3.25)

Gli errori statistici copprispondenti alla natura statistica del metodo DSMC possono essere caratterizzati dalla varianza dei risultati numerici che possono essere ottenuti con il calcolo in corso. Attraverso uno studio, si è visto che i campi di temperatura traslazionale del microugello risultano più sensibili alla selezione dei parametri numerici DSMC rispetto alla pressione o velocità, come ci si può aspettare poiché la temperatura è proporzionale al momento di ordine 2 della funzione di distribuzione. Quindi, utilizziamo questo macroparametro per illustrare sia gli errori numerici statistici che deterministici. La stima empirica della varianza della temperatura stimata su  $M_s$  passi temporali in una data cella è:

$$T_{M_S} = \frac{m}{3k_B} \frac{\sum_{k=1}^{M_S} \sum_{i=1}^{N_k} (v_{x_i}^2 + v_{y_i}^2 + v_{z_i}^2)}{\sum_{k=1}^{M_S} N_k}$$
(3.26)

dove m è la massa molecolare,  $k_B$  è la costante di Boltzmann,  $N_k$  è il numero di particelle nella particolare cella di interesse durante il k-esimo passo temporale,  $(v_{x_i}, v_{y_i}, v_{z_i})$  sono le componenti di velocità delle particelle, la somma interna (i) è sulle le particelle durante il k-esimo passo temporale e la somma esterna è sui passi temporali. Bisogna ripetere la procedura data dall'eq. (3.26) per il calcolo di  $T_{M_s}$  L volte, dove L è uguale a Ns nell'eq. (3.24). Con queste definizioni, la varianza empirica della serie di temperature viene calcolata come  $\sigma_{T_{M_s}}^2 = E\{T_{M_s}^2\} - E^2\{T_{M_s}\}$  e rappresenta la varianza della temperatura simulata su  $M_s$  passi temporali. Dunque, l'errore sulla temperatura per passo temporale in una cella, normalizzata con  $\overline{T_{M_s}} = E\{T_{M_s}\}$  è

$$Err(T_{M_S}) = 3 \frac{\sqrt{\sigma_{T_{M_S}}^2}}{\sqrt{L T_{M_S}}}$$
(3.27)

#### Errori deterministici

In secondo luogo, consideriamo gli errori che si verificano perché i parametri numerici non possono essere considerati infinitamente piccolo. Questi errori non sono di natura statistica e quindi non può essere ridotto utilizzando un campione di grandi dimensioni. In effetti, questo tipo di errore potrebbe avere a maggiore impatto sui risultati rispetto all'errore statistico, soprattutto quando la dimensione del campione,  $N_S$ , è abbastanza grande in modo che gli errori statistici diventino piccoli rispetto a quelli deterministici. Assumento che i parametri  $\Delta t$ ,  $\Delta l \ e \ N^{-1}$  sono piccoli, il macroparametro A stimato del flusso in ogni cella può essere approssimato a una funzione lineare (trascurando i termini di ordine superiore e i termini in croce) di questi parametri:

$$A_{DSMC}(\Delta t, \Delta l, N^{-1}) = A_0 + A_1 \Delta t + A_2 |\Delta l| + A_3 N^{-1}$$
(3.28)

dove, in generale, i coefficienti  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  sono funzioni della posizione della cella nella griglia computazionale.[44] In particolare,  $A_0$  sta per la soluzione esatta,  $A_{DSMC}$  è il macroparametro calcolato nel DSMC e il resto dei termini nell'equazione rappresentano la deviazione di A dalla soluzione esatta. Eseguendo i calcoli DSMC per diversi parametri numerici, si può studiare la dipendenza della soluzione del flusso in esame da questi parametri, oltre a stimare la vera soluzione  $A_0$ . In sostanza, si può ottenere un numero di soluzioni sequenziali al problema con dimensioni delle celle sempre più piccole, step temporali e un numero maggiore di particelle per cella.

La selezione dei parametri numerici deve essere ragionevolmente buona per garantire che l'approssimazione lineare usata nell'eq. (3.28) sia valida. Ad esempio, il passo temporale  $\Delta t$  e la dimensione della cella  $\Delta l$  dovrebbero essere scelti sufficientemente piccoli rispetto al tempo caratteristico e la length scale del flusso in esame. Il numero di particelle in una cella, N, dovrebbe essere sufficientemente grande da prevenire correlazioni tra particelle e soddisfare i requisiti degli schemi DSMC, come lo schema No-Time-Counter (NTC) di Bird. Nei metodi CFD la dimensione delle celle considerando il metodo alle differenze finite causa errori di discretizzazione tra la soluzione numerica delle equazioni differenziali e le loro soluzioni esatte. Anche in questo caso, a causa di limitazioni computazionali, è spesso possibile che una mesh indipendente dalla soluzione non è realizzabile ed è dunque necessaria una stima del possibile errore residuo nelle soluzioni. La tecnica di estrapolazione di Richardson viene spesso utilizzata per approssimare la soluzione finale in base ai risultati preliminari disponibili. La forma e l'applicazione dell'eq. (3.28) al metodo DSMC è simile a quello della procedura di estrapolazione Richardson tranne per il fatto che la procedura DSMC impiega una discretizzazione del tempo, della dimensione della cella e di un numero finito di particelle computazionali, N per rappresentare la struttura cinetica del gas. Si noti che sebbene i metodi CFD utilizzino anch'essi un intervallo di tempo finito, il criterio per la sua selezione è diverso da quello del DSMC.

# 3.10. CONFRONTO PARTICLE METHODS: DSMC - PIC

Per completezza, si introduce brevemente il metodo Particle-In-Cell (PIC) ponendolo a paragone con il metodo DSMC. [8] Di seguito i punti chiave del confronto:





- Nonequilibrium gas flows
- Le particelle si muovo e collidono nello spazio fisico
- Le particelle possiedono proprietà molecolari (es. Thermal velocity)
- Cell size  $\Delta x \sim \lambda$
- Time step  $\Delta t \sim \tau$
- Collisioni trattate statisticamente
- Include: internal energy relaxation, chemistry, gas-surface interactions.
- Tipicamente, si assume F=0 (nessuna forza esterna)



- Nonequilibrium plasma
- Le particelle cariche si muovo nello spazio fisico
- Le particelle possiedono proprietà molecolari (es. Thermal velocity)
- Cell size  $\Delta x < \lambda_D$  (lunghezza di Debye) per evitare 'calore numerico'.
- Time step  $\Delta t < 2/\omega_p$  ( $\omega_p$ : *plasma frequency*)
- F rappresenta campi elettrici e magnetici
- Può essere combinato con il DSMC per particelle di plasma collisionali
- Tipicamente, si considera il plasma come non collisionale, per cui il termine

nell'equazione di Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

É un metodo completamente locale, per cui sono rilevanti solo le informazioni all'interno della cella. Le collisioni binarie sono disaccoppiate dal moto delle particelle. collisionale dell'equazione di Boltzmann non viene considerato:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + F \cdot \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = 0$$

Si deve inoltre soddisfare la condizione CFL:

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{v}$$

In entrambi i casi, i vincoli posso idealmente essere applicati alle condizioni più estreme (es. Minimo mean free path, massima plasma frequency,ecc.) ma poichè le proprietà della particella sono stocastiche, ciò non può essere garantito a pieno. Ciò è un tema ricorrente nei *kinetic particle methods*.

In generale, si possono dire di tali metodi i pro e i contro che sono i seguenti:

# STRENGTHS

- Risultati consistenti con la teoria cinetica
- Capacità di gestire geometrie compresse
- Diversi modelli fisici avanzati

### INEFFICIENCIES

- Processing di regioni con alto numero di collisioni
- Risoluzione di eventi e popolazioni a bassa probabilità
- Flussi a bassa velocità (statistical noise)
- Algoritmo esplicito (piccolo time step)

# Capitolo IV

# SIMULAZIONI NUMERICHE DI CONFIGURAZIONI DI BASE

Nel seguente capitolo, si presentano i casi con configurazioni di base studiati con il metodo DSMC utilizzando il software OpenFOAM ed in particolare il solver dsmcFoam appena analizzato nel capitolo precedente.

In particolare, sono stati considerati i seguenti *test cases* :

- 1. Colpo d'ariete
- 2. Flusso ipersonico sul cuneo
- 3. Flusso ipersonico attorno a un corpo cilindrico

### 4.1. Colpo d'ariete

Il colpo d'ariete ( in inglese, *hammer effect* ) è un fenomeno non stazionario che si manifesta quando un flusso in movimento all' interno del condotto viene bruscamente fermato dalla repentina chiusura di una valvola, causando un'onda di compressione che viaggia all'indietro. Quest'onda d'urto costituisce dunque una discontinuità che viaggia all'interno del condotto e separa due regioni di flusso uniformi.

### Impostazione e risoluzione del test case in OpenFOAM

Si considera per lo studio del fenomeno l'Argon, un gas monoatomico con le proprietà riportate nella tabella 1, per il quale si considera il modello VHS (con  $T_{ref} = 273 K$ ).

temperature	Diametro	Gradi di libertà	Massa	Costante	Specific
coefficient	d [m]	interni	m [kg]	caratteristica	heat
of viscosity				R [J/kg/K]	ratio
ω					γ
0.81	4.17e-10	0	66.3 <i>e</i> – 27	208.1	1.66

Tab.1: Proprietà molecolari Argon

La condizione iniziale del flusso in ingresso e le dimensioni del condotto sono invece riportate nella tabella 2:

Mach in ingresso Ma	0.8
Temperatura del flusso T [K]	300
Number density $\rho_N$ [m^-3]	1.257e19
Numero di Knudsen Kn	0.0106
Lunghezza del condotto L [m]	10

Tab. 2: Dati di input - colpo d'ariete

Utilizzando l'equazione di stato, le relazioni del Mach e del *number density* si ottengono come output i seguenti valori in tabella 3:

Tab.5: Dan di ouiput - coipo d'ancie				
Pressione p [Pa]	0.052			
Densità $ ho~[kg/m^3]$	8.33e-7			
Velocità del suono a [m/s]	321.95			
Velocità del flusso u [m/s]	257.56			
Mean free path $\lambda_{VHS} [m]$	0.106			

Tab.3: Dati di output - colpo d'ariete

Buona pratica del metodo DSMC è il soddisfacimento di alcuni requisiti come le scelte legate alla discretizzazione spaziale e temporale e al numero di particelle *simulators* nel dominio computazionale.

Avendo il *mean free path* pari a 0.106 m, si sceglie una dimensione della cella di almeno la metà per cui il dominio è discretizzato con 200 celle. Sulla scelta del passo temporale, si calcola l'*averaged molecular speed*  $\bar{v} = 398.76 \frac{m}{s}$  e conseguentemente il passo temporale sarà almeno pari al *mean collision time*  $\Delta t < \tau = \frac{\lambda}{\bar{v}} = 2.51e - 4s$ . In particolare si è scelto  $\Delta t = 2e - 5s$  ed un tempo finale di  $t_f = 0.02s$  visualizzando 20 passi temporali. Il numero di particelle DSMC simulate è pari a 139'674 e la simulazione è stata eseguita in parallelo su 6 processori. Inoltre, il modello impostato di interazione con la parete è la *SpecularReflection,* considerando condizioni di no-slip sulla superficie.

Di seguito, i grafici relativi a due diversi istanti temporali di campionamento di diverse grandezze in funzione della lunghezza del condotto.



(a) Velocità media U [m/s]



(b) Pressione p [Pa]





Fig.18: Andamento lungo il condotto della (a) velocità media (b) pressione (c) densità (d) number density (e) temperatura - colpo d'ariete

La perturbazione che risale è un urto isentropico. La particella che si trova *upstream*, viaggia all'interno del condotto ad una velocità che cambia in funzione delle collisioni intermolecolari che subisce durante il tragitto. Nel momento in cui incontra l'onda di compressione, la sua velocità è quasi nulla (come è visibile mediamente nel grafico di Umean (a). In sostanza, va asintoticamente a velocità nulla e tende dunque a fermarsi. Dove si ferma il flusso, come visibile dal grafico (b) si ha una ricompressione e dunque un aumento di densità  $\rho \ e \ \rho_N$  (fig.18 (c) e (d)) e temperatura (fig.18(e)).

Per verificare i risultati ottenuti, è stato poi implementato un codice MATLAB per poter fare un confronto con la soluzione teorica.

In particolare, denominando con il suffisso 1 le condizioni *upstream* e con 2 le condizioni *downstream* (ossia a valle dell'onda di compressione), dall'uguaglianza della invariante di Riemann P si ha:

$$P_1 = P_2 \tag{4.1}$$

In cui:

$$P = \frac{2}{\gamma - 1}a + u \tag{4.2}$$

Dove a è la velocità del suono e u la velocità del flusso. L'invariante di Riemann è il segnale che viaggia lungo la linea caratteristica. Sviluppando, si ottiene:

$$\frac{p_2}{p_1} = \left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2}M_1\right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}}$$
(4.3)

Dalla quale, insieme all'equazione di stato, si ottengono le condizioni a valle dell'onda d'urto riportate nella tabella 4.

	1
Pressione p [Pa]	0.1691
Densità $\rho$ [kg/m^3]	1.69e-6
Velocità del suono a [m/s]	406.95
Velocità del flusso u [m/s]	0
Number density $ ho_N [m^{-3}]$	2.556e19
Temperatura T [K]	479

Tab.4: Condizioni del flusso downstream - colpo d'ariete

Tali risultati sono coerenti con quanto ottenuto dalla simulazione con dsmcFoam.

La velocità dell'onda d'urto che viaggia all'interno del condotto è data dalla relazione:

$$v_{SW} = u_1 - a_1 \sqrt{\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \left(\frac{p_2}{p_1} - 1\right) + 1} = 281.39 \ m/s \tag{4.4}$$

E' stata dunque costruita la soluzione nel tempo in diversi istanti temporali compresi nel range considerato per la simulazione con *dsmcFoam*. Per l'istante di tempo t=0.018 s , sono stati sovrapposti i due grafici come riportato in figura 19. Dal grafico ottenuto si evince che la soluzione ottenuta con il metodo stocastico, quale è il DSMC, si avvicina alla soluzione esatta ottenuta dal codice MATLAB implementato. La discontinuità risulta non netta ma "spalmata" in certo intervallo  $\Delta x$  e il valore medio delle fluttuazioni (che sono il risultato di medie delle proprietà delle particelle effettuate in ogni cella) è coerente con i risultati ottenuti dalla soluzione esatta.



Fig.19: Confronto tra soluzione teorica e dsmcFoam (t=0.018s) - colpo d'ariete

### 4.2. Flusso ipersonico sul cuneo

A partire dal test case presente tra i tutorial della suite OpenFOAM, è stato fatto uno studio parametrico del caso 2D del flusso supersonico attorno ad un cuneo. Per simmetria, è stato considerato solo metà del cuneo.

Il gas utilizzato è aria, composta dal 22,3% di ossigeno e 77.7% di azoto. Le proprietà sono elencate nelle tabelle 5 e 6.

Temperature coefficient of viscosity ω	Diametro d [m]	Gradi di libertà interni	Massa molecolare m [kg]	Costante caratteristica R [J/kg/K]	Specific heat ratio
0.755	4.12e-10	2	4.797 <i>e</i> – 26	287	γ 1.4

Tab.5: Proprietà molecolari dell'aria

O2		N2		
Massa molecolare [kg] 53		Massa molecolare [kg]	46.5e-	
	27		27	
Diametro molecolare [m]	4.07e-	Diametro molecolare [m]	4.17e-	
	10		10	
Gradi di libertà interni	2	Gradi di libertà interni	2	
Temperature coefficient of	0.77	Temperature coefficient of	0.74	
viscosity		viscosity		

Tab.6: Proprietà molecolari dell'ossigeno e dell'azoto (VHS)

A partire dal caso di riferimento del tutorial, sono stati effettuati le seguenti analisi:

• Influenza del *time step* 

• Urto a diversi valori Kn

I dati in ingresso per la simulazione sono riportati in tabella 7.

Mach a monte	5
Velocità del flusso a monte [m/s]	1736
Temperatura del flusso a monte [K]	300
Temperatura a parete [K]	500
Angolo di rampa [°]	15
Number density $\rho_N \left[\frac{1}{m^3}\right]$	1e20
mo	

Tab.7: Dati di nigresso - flusso ipersonico sul cuneo



Fig.20: Campo di pressione - Flusso ipersonico sul cuneo

### Influenza del time step

Come visto nel capitolo 3, la scelta del time step è tra i *constraints* relativi al buon utilizzo di tale metodo. Infatti, il valore del passo temporale deve essere una frazione del mean collision time. In tal caso, il valori limite è  $\Delta t = 9.65e - 6 s$ . A partire dal valore di riferimento di  $\Delta t = 2e - 6 s$ , è stato simulato lo stesso caso con i seguenti valori di  $\Delta t$ : 5e-7, 8e-7.

Come si evince dalla figura 21, cambiare il valore del passo temporale rispettando il valore limite non comporta alcuna variazione sulla soluzione del problema.



Fig.21: Andamento della pressione lungo x ad y=0.1 m per  $\Delta t = (a)$  2e-6 s (b) 5e-7 s (c) 8e-7 s.

### Urto a diversi valori Kn

Il caso di riferimento è con valore di Kn=0.17. Considerando costanti i valori del flusso di ingresso (tab.7) , si è variato il valore di Kn di: 0.1 , 0.8, 1.

La variazione del Kn, e quindi del libero cammino medio, influisce sul number density con conseguente variazione del passo temporale e della discretizzazione spaziale. I valori sono elencati nella tabella 8.

Kn	$\Delta x [m]$	$\Delta t_{max} [s]$
0.1	40 x 40	5.81e-6
0.17	40 x 40	9.65e-6
0.8	20 x 20	4.64e-5
1	20 x 20	5.81e-5

Tab.8: Time step e discretizzazione spaziale a diversi Kn

Per il confronto a diversi Kn, vengono di seguito riportati i risultati relativi al caso di riferimento rispetto al caso con grado di rarefazione maggiore (Kn=1). In particolare, analizzando l'angolo d'urto, graficamente è possibile vedere come questi varino di poco tra loro (tab.9) , ma differiscono dal valore dell'angolo d'urto teorico per gas continuo e perfetto ( ricavabile dal grafico M – angolo di rampa  $\delta$  – angolo d'urto  $\sigma$ ). Le differenze principali che si riscontrano sono relative alla discontinuità meno netta nel caso con Kn maggiore e allo spessore dell'onda d'urto, maggiore nel caso con Kn più alto (fig. 22). A dimostrazione del fatto che, al variare di Kn, l'intensità dell'urto non varia a parità di gas e Mach a monte, dalla figura 22 è possibile ricavare la variazione del number density a

monte e valle dell'urto ad un fissato y. I dati estratti dal grafico sono riportati in tabella 10.

$\sigma_{teorico}$	$\sigma_{Kn=0.17}$	$\sigma_{Kn=1}$		
24.32°	36.87°	35°		

Tab.9: Angolo d'urto

Tab.10: variazione del number density per Kn=0.17 e Kn=1.

Kn	$\rho_{\rm N1}  [m^{-3}]$	$\rho_{N2} [m^{-3}]$	$\rho_{N2}/\rho_{N1}$
0.17	1e20	2.47e20	2.47
1	1.65e19	4.25e19	2.57



Fig.22: Andamento del number density lungo x ad y=0.1 m nel caso (a) Kn=0.17 e (b) Kn=1.



Fig.23: Campo di pressione a (a) Kn=0.17 e (b) Kn=1.

### 4.3. Flusso ipersonico attorno al cilindro

Viene considerato per il terzo *test case* un flusso ipersonico (Mach number 10) attorno ad un cilindro di raggio 0.5 m. Il gas in esame è l'Argon, le cui proprietà sono elecante nella tabella 1. Viene preso in consideranzione di nuovo il modello VHS, con  $T_{ref} =$ 273K. Non vengono dunque considerate reazioni chimiche.

Le condizioni al contorno sono tali che viene impostata la velocità del flusso *freestream* e la sua temperatura sui bordi a  $x_{min}$ ,  $x_{max}$ ,  $y_{max}$ , mentre  $y_{min}$  corrisponde all'asse di simmetria (*patch type: symmetryPlane*) e dunque la *boundary condition* è di tipo *symmetry*. Attorno al cilindro viene impostata la *wall boundary condition* di tipo *fully diffusive* ( $\alpha$ =1), con una temperatura a parete  $T_w$ =500K. La geometria è riportata in fig.24, ottenuta suddividendo in 10 blocchi il dominio computazionale sulla *dictionary BlockMeshDict*:



Fig.24: Dominio computazionale – flusso ipersonico attorno al cilindro



Fig. 25: Mesh computazionale (a) con zoom (b) - flusso ipersonico attorno al cilindro

In tale analisi, è stato fatto in particolare un confronto tra il caso continuo (caso 1) e il caso rarefatto (caso 2) mantenendo costanti le proprietà del flusso in ingresso nel dominio computazionale e la geometria. I valori di input inseriti nelle due simulazioni sono riportate nella tabella 11:

	CASO 1	CASO 2
Diamentro del cilindro d [m]	1	1
Mach in ingresso M	10	10
Velocità del flusso u [m/s]	2628.5	2628.5
Temperatura del flusso T [K]	200	200
Temperatura a parete $T_w$ [K]	500	500
Knudsen number Kn	0.005	0.05
Mean free path $\lambda_{VHS} [m]$	0.005	0.1
Pressione p [Pa]	0.6488	0.0649
Densità $\rho$ [kg/m^3]	1.558e-5	1.558e-6
Number density $\rho_N$ [1/m^3]	2.35e20	2.35e19

Tab.11: Dati di input - flusso ipersonico attorno al cilindro

La differenza del Kn, e quindi del *mean free path*, porta ad impostare due diverse discretizzazioni spaziali. In particolare, nel caso 1 si è suddiviso il dominio computazionale in 100 celle lungo x ed y, mentre nel caso 2 sono 80 in entrambe le direzioni (lungo z, si ha una sola cella essendo l'analisi 2D). Riguardo invece la scelta del time step, l'*averaged molecular speed* risulterà la stessa per i due casi essendo la temperatura del flusso uguale e sarà pari a  $\bar{v} = 325.6 \frac{m}{s}$  ma il  $\Delta t$  è 5e-6 s nel caso 1 e 2e-6 s nel caso 2. Sono state eseguite 20000 iterazioni nel tempo, con una simulazione in parallelo su 6 processori. Il tempo di esecuzione risulta ovviamente maggiore nel caso

continuo (36.3 h) rispetto al caso rarefatto (15 h). Infine, il numero di particelle DSMC inserite nel dominio sono circa 3 milioni nel primo caso e circa 1'800'000 nel secondo.

Di seguito, vengono riportati i risultati ottenuti dalla simulazione su OpenFOAM con l'utilizzo del solutore *dsmcFoam*.





(c)

Fig.26: Confronto caso continuo e rarefatto: (a) temperatura (b) velocità (c) Mach – flusso ipersonico attorno al cilindro

Si può notare come nonostante nei due diversi casi si ha un grado di rarefazione diverso (dato dal Kn), la temperatura in prossimità della parete del cilindro rimane attorno a 3500 K, a valle dell'onda d'urto. La prima osservazione è sicuramente relativa allo spessore dell'onda d'urto, nettamente diverso tra i due casi. Come accennato nella sezione 1.4, lo spessore della *shock wave* è dell'ordine di qualche mean free path  $\lambda$  (in genere tra i 10 e 100 nm nel caso continuo) per cui nel caso del flusso rarefatto, essendo il  $\lambda$  maggiore, lo spessore della *shock wave* sarà maggiore rispetto al caso continuo (Fig. 26). Inoltre, all' aumentare del numero di Knudsen , la temperatura massima si riduce mentre la *shock wave standoff distance* (SSD) aumenta. Quest'ultima, è la distanza tra la shock wave e la superficie del cilindro, misurata sull'asse di simmetria. Ciò è possibile spiegarlo tramite relazioni empiriche ottenute tramite la cosiddetta tecnica *schlieren* da Lobb relativamente alla SSD per sfere di diverso diametro, nel caso di *frozen flows* (come in questo caso, poichè non vengono considerate reazioni chimiche) [14][18][42] E' stato dimostrato sperimentalmente che per il cilindro si ha qualitativamente lo stesso comportamento. In particolare, si è visto che:

$$\frac{\Delta}{D} \propto \frac{1}{\frac{\rho_2}{\rho_1}} \tag{4.5}$$

Dove  $\Delta$  è la SSD, D è il diametro della sfera mentre  $\frac{\rho_2}{\rho_1}$  è il rapporto tra la densità del flusso immediatamente a valle dell'onda d'urto (M<1) e la densità del flusso indisturbato a monte della SW (M>1). Maggiore sarà la variazione di densità (quindi maggiore sarà tale rapporto) e minore sarà la SSD. Dalla figura 27, è visibile come la variazione di densità sia più evidente nel caso continuo, e quindi maggore rispetto al caso rarefatto.



Fig. 27: Campo di densità nel caso rarefatto (a) e continuo (b) – flusso ipersonico attorno al cilindro
# Capitolo V

## RIENTRO DELLA CAPSULA CEV IN ATMOSFERA

#### 5.1. Capsula di rientro

L'obiettivo della capsula di rientro è quello di trasportare l'equipaggio o il pavload in condizioni di sicurezza attraversando i diversi strati dell'atmosfera di un pianeta. E' parte integrante della missione di esplorazione aerospaziale e presenta notevoli difficoltà in quanto sono in gioco elevate temperature, e dunque una gran quantità di calore prodotta al rientro dall'orbita di partenza che deve essere dissipata. Per tale motivo, il veicolo possiede necessariamente un sistema di controllo chiamato thermal protection system (TPS). Inoltre, la velocità del veicolo è molto alta (si arriva a regime ipersonico) per cui le collisioni molecolari portano a dissociare il gas. Di conseguenza diventano importanti gli effetti di gas reale in quanto il rapporto dei calori specifici è funzione delle temperature, che sono appunto molto alte. Fino ad un certo Mach di volo, l'aumento di temperatura è legato alla formazione dell'onda d'urto e le grandezze presentano un salto a cavallo dell'onda (non linearità del flussi supersonici). Nel progettare tali veicoli si tende a realizzare strutture di forma tozza in quanto, nel caso del rientro in atmosfera terrestre, si vuole la dissociazione dell'aria. L'incremento della temperatura totale a cavallo dell'onda d'urto che si forma di fronte la superficie della capsula è notevole e ciò porta l'aria a dissociarsi. Teale fenomeno è endotermico, per cui assorbe energia: in particolare l'energia cinetica del veicolo viene trasformata in energia termica dalla shock *wave* che va a dissociare l'aria invece di scaldare la superficie del veicolo.

## 5.2. Capsula Orion CEV

La Orion Crew Exploration Vehicle (CEV) è parte del programma di volo spaziale con equipaggio chiamato Constellation, sviluppato dalla NASA dal 2005 al 2009. Era un veicolo spaziale destinato a missioni in orbita bassa (LEO) alla ISS e missioni lunari. Infatti era destinato all'utilizzo nelle missioni Ares ma è stato sostituito dalla moderna capsula Orion denominata Multi-Purpose Crew Vehicle (Orion MPCV): Servirà come veicolo per missioni lunari e interplanetarie; le missioni LEO su ISS saranno invece eseguite su veicoli commerciali.

CEV ha ereditato la sua forma dalla capsula Apollo ma è più grande in termini di dimensioni e la massa è circa il doppio. A differenza di Apollo, l'atterraggio doveva avvenire a terra, assistito da airbag o retrorazzi. Inizialmente erano previste tre versioni:

- La versione Orion Block-1 doveva essere utilizzata per i voli verso la ISS per la consegna di un equipaggio di tre astronauti e un carico di 400 kg o un equipaggio di sei persone e nessun carico.
- La versione Orion Block-1B è un derivato senza equipaggio e doveva essere utilizzata per trasportare rifornimenti sulla ISS e riportare materiale sulla terra. Questa versione poteva portare alla stazione 3500 kg di carico nella capsula pressurizzata. Questa versione è stata cancellata nel 2006.
- La versione Orion Block-2 era progettata per missioni lunari e poteva supportare quattro astronauti. Queste capsule Orion dovevano attraccare in orbita terrestre bassa con i lander lunari Altair (LSAM) lanciati separatamente e dovevano essere spinte in orbita di trasferimento lunare dall'EDS (Earth Departure Stage), con l'utilizzo del lanciatore Ares-5 [31] [34].

La *Orion spacecraft* è composta da tre parti, come mostrato in figura 28. La Orion Crew Module porta dai quattro ai sei passeggeri a seconda del tipo di missione legata, come visto pocanzi, ad un tipo di versione della capsula.



Fig.28: Progetto Orion CEV. [24]

Rispetto alla capsula Apollo, ha notevoli vantaggi tra cui:

- La forma più sicura ed efficiente per andare oltre l'orbita LEO.
- Uso di materiali avanzati, avionica e processo di manufacturing.
- La tecnologia a bordo.
- Volume maggiore che permette di trasportare più payload.
- Efficienza operativa e capacità complessiva migliorate.

#### Simulazione numerica

## 5.3. Capsula di rientro immersa in un flusso di Argon

Per il presente *test case*, è stato dapprima implementato il caso con gas Argon per semplicità di impostazione, le cui proprietà sono riportate nella tabella 1. In particolare, è stata riprodotta la geometria della capsula in scala e sono state considerate le condizioni presenti nella tabella 12.

Lunghezza caratteristica [m]	0.306
Mach M	2
Velocità del flusso u [m/s]	525.7
Temperatura del flusso T [K]	200
Knudsen number Kn	0.0212
Mean free path $\lambda_{VHS}[m]$	0.0065
Pressione p [Pa]	0.5
Densità $\rho$ [kg/m^3]	1.20e-5
Number density $\rho_N$ [1/m^3]	1.81e20

Tab.12: Dati di input - capsula di rientro (Argon)

Di seguito, sono riportati i risultati visualizzati nel programma di post-processing Paraview:



Fig.29: Mach (a) e Campo di temperatura (b)- capsula di rientro (Argon)

#### 5.4. Rientro della capsula CEV in atmosfera terrestre

Successivamente, è stata considerata la capsula CEV immersa in un flusso d'aria (composta dal 77.7% di N2 e dal 22.3% di O2) ad una quota di 100 km. Il Mach di volo è M=2 e non sono stati dunque considerati le reazioni chimiche che avvengono a determinate velocità e temperature, ossia non sono stati presi in considerazione gli effetti della ionizzazione dell'aria.

Le dimensioni considerate per la geometria sono quelle riportate in fig.28. Di seguito, vengono riportate le proprietà dell'aria riportate nel codice:

temperature	Diametro	Gradi di libertà	Massa	Costante	Specific
coefficient	d [m]	interni	molecolare	caratteristica	heat
of viscosity			m [kg]	R [J/kg/K]	ratio
ω					γ
0.755	4.12e-10	2	4.797 <i>e</i> – 26	287	1.4

Tab.13: Proprietà molecolari dell'aria - capsula CEV in atmosfera terrestre

O2		N2	
Massa molecolare [kg]	53.12e-	Massa molecolare [kg]	46.5e-
	27		27
Diametro molecolare [m]	4.07e-	Diametro molecolare [m]	4.17e-
	10		10
Gradi di libertà interni	2	Gradi di libertà interni	2
Temperature coefficient of	0.77	Temperature coefficient of	0.74
viscosity		viscosity	

Tab.14: Proprietà molecolari O2 ed N2 (VHS) - capsula CEV in atmosfera terrestre [3]

In particolare per il diametro e il *temperature coefficient of viscosity* è stato preso il valore medio tra i valori relativi alle due molecole O2 e N2 che compongono l'aria, mentre la massa è stata calcolata prendendo in considerazione le concentrazioni riportate pocanzi.

Le condizioni iniziali del presente test case sono le seguenti:

Lunghezza caratteristica [m]	5
Mach M	2
Quota [km]	100
Temperatura $T_z$ [K]	170
Pressione $p_z$ [Pa]	0.04
Velocità del flusso u [m/s]	522.71
Knudsen number Kn	0.014
Mean free path $\lambda_{VHS}$ [m]	0.0689
Densità ρ [kg/m^3]	1.20e-5
Number density $\rho_N(02)$	3.80e18
[1/m^3]	
Number density $\rho_N$ (N2)	1.32e19
[1/m^3]	

Tab.15: Dati di input – capsula CEV in atmosfera terrestre

La mesh computazionale è strutturata e composta da 218 celle in x ed y, per i due blocchi costruiti nel *blockMeshDict*. Nella stessa *dictionary* sono impostate come *type patch* i contorni di inlet ed outlet, a differenza della capsula che è *type wall*. Il caso è inoltre assialsimmetrico, con i restanti contorni *type cyclic*.

Di seguito la rappresentazione grafica del dominio computazionale.



Fig.30: Mesh computazionale - capsula CEV in atmosfera terrestre

Il caso è inizializzato riportando i valori del flusso all'infinito (in particolare la temperatura e la velocità) e la composizione dell'aria in termini di  $\rho_N$  nel *dsmcInitialiseDict*. Il tempo finale della simulazione è  $t_f = 0.6 \ s$ , con passo temporale di 6e-5 secondi ad ogni iterazione per un totale di 10000 step temporali. Il *sample size* è 4000, per il calcolo delle proprietà macroscopiche del flusso di gas. Il numero di particelle DSMC simulate è circa pari a 16 milioni (circa 450 particelle per ogni cella), distribuite in 48 processori (2 nodi) attraverso l'esecuzione del *parallel processing* sul cluster HACTAR Dual Xeon da 24 processori per ogni nodo (tab.16). Inoltre, il modello impostato di interazione con la parete è relativo alla distribuzione Maxwelliana con una temperatura a parete di 300 K e con condizioni di *slip* sulla superficie. Contrariamente ai test case precedenti in cui si aveva come fluido l'Argon, considerando l'aria composta da utilizzare è quello dato dalla combinazione dei modelli VHS e Larsen-Borgnakke (tab.17.).

Tab.16: Dati cluster HACTAR (HPC POLITO) e durata simulazione

CPU	Computing cores	Numero di nodi	Tempo di esecuzione
2x Intel Xeon E5-2689	696	29	25 h
v3 2.50GHz			

Di seguito sono riportati i risultati visualizzati su Paraview.













(d)

Fig.31: Campi del (a) Mach, (b) temperatura, (c) pressione e (d) number density – capsula CEV in atmosfera terrestre

LarsenBorgnakkeVariableHardSpher	eCoeffs
<i>T<sub>ref</sub></i> [K]	273
relaxationCollisionNumber	5.0

Tab.17: Modello Larsen Borgnakke – capsula CEV in atmosfera terrestre

All'interno del programma Paraview, è possibile effettuare diverse azioni visibili nella sezione *Filters* presente sulla barra dei comandi, come visualizzare *streamlines* e *contours* per le diverse variabili del campo:



Fig.32: Velocity Streamlines - capsula CEV in atmosfera Terrestre



Fig.33: Pressure contours - capsula CEV in atmosfera terrestre



Fig34: Mach contours - capsula CEV in atmosfera terrestre



Fig.35: Velocity vectors - capsula CEV in atmosfera terrestre

Su Paraview è possibile ottenere grafici lungo una curva identificata, attraverso semplici

passaggi ( *Clip, Slice, SpreadSheetView*). Successivamente l'estrazione dei dati in formato *.csv* da *SpreadSheetView*, su Matlab sono stati ricavati i seguenti plot lungo la parete della capsula (in particolare lo scudo termico e la superficie laterale):



Fig.36: Andamento della pressione lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera terrestre



Fig.37: Andamento della temperatura lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera terrestre



Fig.38: Andamento del number density lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera terrestre

Dal grafico della pressione, si nota come il picco della pressione sia in prossimità del punto di ristagno. Spostandosi verso y crescenti lungo i punti dello scudo termico, la pressione man mano si riduce fino ad un crollo repentino in prossimità del raccordo con la superficie laterale. Infatti, come visibile in fig.36, al punto con y massimo (circa a x=1 m) si ha l'espansione del flusso con successiva separazione in prossimità del secondo raccordo, in cui la pressione aumenta leggermente. Analogo andamento lo si ha per il *number density:* si riduce nelle zone in cui il flusso accelera e viceversa. Riguardo il grafico della temperatura, si vede come i valori di picco siano in prossimità del come localmente la temperatura abbia valori leggermente diversi lungo la superficie della capsula. Lungo lo scudo termico, che costituisce la *diffuse wall*, si ha mediamente una temperatura di 300 K, valore impostato nelle condizioni al contorno *boundaryT*. Spostandosi sulla superficie laterale della capsula (ossia dal valore di x=1 m), la temperatura si riduce ma mediamente è poco distante dal valore impostato  $T_{wall}$ .

## 5.5. Rientro della capsula CEV in atmosfera marziana

E' interessante inoltre studiare il medesimo *test case*, considerando però un'atmosfera diversa da quella terrestre. E' il caso di quella di Marte, il quale risulta al giorno d'oggi la destinazione più ambita dalle agenzie spaziali.

L'atmosfera marziana è composta per lo più da anidride carbonica ed è molto più sottile rispetto a quella terrestre. La pressione media sulla superficie marziana è di circa 699 Pa, ossia meno dell' 1% rispetto al valore sulla superficie terrestre.



Fig.39: Atmosfera Marte vs Atmosfera Terra[30]

L'atmosfera su Marte risulta più fredda rispetto a quella della Terra. A causa della maggiore distanza dal Sole, riceve meno energia solare e dunque corrisponde ad una temperatura effettiva più bassa (circa 210 K). Inoltre, la temperatura sugli strati più alti dell'atmosfera marziana è molto più bassa rispetto a quella della Terra a causa della scarsa presenza dell'ozono, che permette alle radiazioni solari UV di raggiungere la superficie.



Fig.40: diagramma verticale dell'atmosfera marziana [25]

L'atmosfera di Marte può essere suddivisa in tre strati:

- Troposfera (≈0-40 km), dove avvengono maggiormente fenomeni come convezione e tempeste di polvere.
- Mesosfera (≈40-100 km), che è lo strato con temperatura più bassa. L'anidride carbonica agisce come agente refrigerante, irradiando calore nello spazio.
- Termosfera (≈100-230 km), ossia lo strato che è principalmente controllato dal calore proveniente dai raggi UV. Qui la temperatura aumenta con la quota e varia ad ogni stagione.

Si considera la capsula CEV immersa in flusso di gas CO2 ad una quota di circa 130 km, dove la pressione è pari a 1/25 rispetto a quella della Terra alla stessa quota. Di nuovo il Mach è al di sotto del regime ipersonico, in modo da trascurare gli effetti di gas reale (dissociazione).

Nella tabella 18, sono riportati i valori inseriti per il calcolo con il solutore *dsmcFoam*:

Lunghezza caratteristica [m]	5
Mach M	3
Quota [km]	130
Temperatura T <sub>z</sub> [K]	130
Pressione $p_z$ [Pa]	3.7e-3
Velocità del flusso u [m/s]	531.91
Knudsen number Kn	0.051
Mean free path $\lambda_{VHS}$ [m]	0.257
Densità $\rho$ [kg/m^3]	1.506e-7
Number density $\rho_N(CO2)$	2.06e18
[1/m^3]	

Tab.18: Dati di input – capsula CEV in atmosfera marziana

Il dominio computazionale risulta il medesimo del caso precedente in termini di dimensioni e impostazione del tipo di *patch* ai contorni, con una discrezione spaziale data da 30 celle lungo le due direzioni x e y (1 cella in direzione z). Tale differenza è dovuta alla bassissima densità dell'atmosfera alla quota considerata, utilizzando sempre il modello VHS per il calcolo del *mean free path*. Anche per questo caso in esame, il modello di collisione binaria è infatti dato dalla combinazione dei modelli VHS e Larsen-Borgnakke (tab.19), quest'ultimo valido anche per molecole poliatomiche.

LarsenBorgnakkeVariableHardSphereCoeffs		
<i>T<sub>ref</sub></i> [K]	273	
relaxationCollisionNumber	5.0	

Tab.19: Modello Larsen Borgnakke - capsula CEV in atmosfera marziana

Tab.20: Proprietà molecolari CO2 (VHS) [ref] - capsula CEV in atmosfera marziana

CO2		
Massa molecolare [kg]	73.1e-27	
Diametro molecolare [m]	5.62e-10	
Gradi di libertà interni	3	
Temperature coefficient of viscosity	0.93	
Rapporto dei calori specifici	1.28	
Costante caratteristica del gas [J/kg/K]	188.92	

Il tempo finale impostato per la simulazione è  $t_f = 0.3 s$ , con passo temporale di 1e-5 secondi per un totale di 10000 step temporali. Il *sample size* è 2000, per il calcolo delle proprietà macroscopiche del flusso di gas. Il numero N di particelle DSMC simulate è alto (1'444'080) nonostante il numero di celle in tal caso sia nettamente inferiore al caso in atmosfera terrestre. Ciò è dovuto al fatto che è stato necessario aumentare il numero di particelle DSMC nelle celle (una media di 800 per ogni cella) del dominio definito in *blockMeshDict,* portando dunque ad un costo computazionale maggiore, a causa della bassissima densità del flusso di gas in atmosfera. Quest'ultima porta infatti a valori calcolati nella simulazione così bassi da non permettere il calcolo dei *dsmcFields* in output, per valori di N minori.

Di nuovo, il modello di interazione con la parete è relativo alla distribuzione Maxwelliana (*MaxwellianThermal*) con una temperatura a parete di 300 K e con condizioni di *slip* sulla superficie della capsula.



I risultati visualizzati su Paraview sono i seguenti:

(a)



127



Fig.41: (a) Campo di velocità , (b) number density, (c) temperatura e (d) pressione – capsula CEV in atmosfera marziana

Analogamente, è possibile vedere l'andamento della pressione, number density e temperatura tramite lo stesso procedimento esposto pocanzi:



*Fig.42: Andamento della pressione lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera marziana* 



Fig.43: Andamento della temperatura lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera terrestre



Fig.44: Andamento del number density lungo la superficie della capsula – capsula CEV in atmosfera terrestre

# Capitolo VI

### ESPANSIONE DEL FLUSSO NELL'UGELLO DIVERGENTE

Il metodo DSMC è stato utilizzato per l'analisi del flusso di Argon a bassa densità che espande attraverso un ugello divergente in condizioni ambiente a pressione bassa. La geometria presa in esame è ispirata all'ugello di Rothe, i cui risultati sperimentali sono reperibili nella ref. []. Tuttavia, nel presente test case, verranno considerati condizioni d'ingresso e ambiente diverse, così come il tipo di gas utilizzato per la simulazione. Per simmetria, viene simulata solo una parte della geometria. La figura 45 illustra la geometria dell'ugello utilizzata nella simulazione:



Come spiegato nei capitoli precedenti, il metodo DSMC può essere applicato a qualsiasi flusso per cui è valida l'equazione di Boltzmann ma, a causa dei requisiti computazionali restrittivi, è applicabile nel caso di gas rarefatto o vicino al continuo. I metodi continui sono molto più efficienti invece nel caso di flussi di gas ad alta densità. E' dunque ragionevole pensare come il caso di studio relativo ad un ugello convergente-divergente debba coinvolgere entrambi i metodi: quello continuo nel tratto convergente e il DSMC nel tratto divergente. Nel presente lavoro, è stato applicato il metodo DSMC al solo tratto divergente, con un dominio esterno abbastanza ampio da evitare che i contorni influenzino i risultati della simulazione relativi alle variabili macroscopiche del flusso.

Infatti, il dominio si estende fino ad un valore di x=7.89L (con L pari alla lunghezza dell'ugello), mentre lungo y si aumenta di 0.179 m a partire dal valore massimo di y all'uscita dell'ugello (0.021 m). Pertanto, il dominio definito in *BlockMeshDict* è il seguente:





Fig.46: Mesh computazionale (a) con zoom (b) - espansione del flusso nell'ugello divergente

Il dominio della simulazione è suddiviso in 3 blocchi, ognuno composto da 30 celle lungo x ed y (una cella invece lungo z, in quanto si considera il problema 2D). Per evitare che la discretizzazione della mesh influenzi i risultati del campo, è stato considerato un certo *grading* lungo y nel blocco relativo al dominio del flusso indisturbato, in modo da avere celle comparabili in prossimità dell'uscita del nozzle. Inoltre, la griglia si infittisce lungo x verso l'ingresso, avendo in quella zona dell'ugello le particelle meno distanti tra loro con conseguente *mean free path* minore. Il gas preso in considerazione è l' Argon, le cui proprietà sono riportate nella tabella 1. Le condizioni del flusso in ingresso nella sezione dell'inlet sono riportate invece nella tabella 21:

Tab.21: Condizioni del flusso in ingresso e condizioni ambiente – espansione del flusso nell'ugello divergente

	500
I emperatura totale $I_0[K]$	300
	1.0.0
Pressione totale $p_0$ [Pa]	180
Temperatura ambiente $T$ [K]	20
remperatura ambiente ra [K]	
Number density in embients $o$ $[m^{-3}]$	1_90
Frumber density in ambiente $p_{Na}[m]$	1020

Nel presente studio, la pressione e l'entalpia totali del flusso in ingresso sono considerate costanti. Considerando un Mach in ingresso pari a 1.3, la temperatura statica e la pressione statica in ingresso sono calcolate rispettivamente dalla relatione della temperatura totale in funzione del Mach, mentre la velocità nell'inlet è ottenuta dall'uguaglianza dell'entalpia totale tra ingresso e uscita. La densità è invece calcolata utilizzando l'equazione di stato. L'ugello è considerato adiabatico isoentropico. Tali ipotesi sono valide in quanto l'ugello in questione non è molto lungo e dunque possono essere trascurati gli effetti associati allo scambio termico e alla viscosità del fluido. Inoltre,

la variazione della sezione dell'ugello è graduale, con un angolo di semiapertura pari a 20°. I paramentri nella sezione d'ingresso dell'ugello sono:

Inlet	
Temperatura T <sub>i</sub> [K]	320.98
Pressione $p_i [Pa]$	59.04
Velocità $v_i [m/s]$	432.72
Densità $\rho_i [kg/m^3]$	8.84e-4
Number density $\rho_{N_i} [1/m^3]$	1.33e22
Numero di Knudsen Kn <sub>i</sub>	0.04
Lunghezza caratteristica L= $r_i$ [m]	0.00255

Tab.22: condizioni statiche nella sezione d'ingresso – espansione del flusso nell'ugello divergente

Per la simulazione, è stato impostato i modelli di interazione con la parete di tipo *MaxwellianThermal* (che corrisponde dunque ad  $\alpha = 1$ ) e di collisione binaria di tipo VHS.

All'uscita del nozzle, il flusso è principalmente supersonico dunque le variabili del campo sono estrapolate dall'interno. La parete è assunta adiabatica e sulla quale sono poste condizioni di slip. La simulazione è stata eseguita con un tempo finale pari a  $t_f = 0.024 \ s$  e un time step di 8e-8 s. Le particelle DSMC inserite nel dominio sono 1'074'357. L'esecuzione del calcolo è stato fatto utilizzando il cluster HACTAR (tab. 23).

CPU	Computing cores	Numero di nodi	Tempo di esecuzione
Intel Xeon E5-2x	696	29	17 h
2689 v3 2.50GHz			

Tab.23: Dati cluster HACTAR (HPC POLITO) e durata simulazione

Di seguito i risultati visualizzati tramite il programma di post-processing Paraview.



(a)



Fig.47: Campo di (a) Mach (b) velocità (c) Temperatura – espansione del flusso nell'ugello divergente



Fig. 48: Velocity contours - espansione del flusso nell'ugello divergente





Fig.49(a),(b):Velocity streamlines - espansione del flusso nell'ugello divergente



(a)



Fig. 50(a), (b): Velocity vectors - espansione del flusso nell'ugello divergente

Come visto precedentemente nel caso della capsula, è possibile ottenere grafici lungo una specifica curva. In tal caso, vengono riportati di seguito gli andamenti delle variabili di campo lungo la parete dell'ugello e l'asse di simmetria.

L'andamento della pressione lungo la parete dell'ugello mostra una diminuzione di quest'ultima verso l'uscita (fig. 51), indicativa dell'espansione del flusso. Ciò è visibile anche nel grafico della pressione lungo l'asse di simmetria (fig. 52a).

Dall'analisi teorica, è possibile fare un confrronto dei risultati ottenuti. In particolare, note le aree e la funzione f(M) in ingresso, si ricava f(M) all'uscita utilizzando la relazione:

$$f(M_e) = \frac{A_i}{A_e} f(M_i) = 0.073 \tag{6.1}$$

Dal grafico f(M) in funzione del Mach, si ricava il valore del Mach d'uscita sul ramo supersonico  $M_e = 3.81$ . Ciò è coerente con il campo di Mach mostrato in fig.46a, dove all'uscita il valore è nel range di M=3-4. Con l'ipotesi di pressione totale costante (caso ideale)  $p_e^0 = p_i^0$ , si ricava la pressione statica in uscita:

$$p_e = \frac{p_i^0}{\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_e^2\right)^{\gamma/(\gamma - 1)}} = 2.17$$
(6.2)

Dunque il nozzle pressure ratio risulta essere  $NPR = \frac{p_i^0}{p_e} = 83$ .

Il rapporto di pressioni statiche, nel caso teorico, risulta essere dunque pari a:  $\frac{p_i}{p_e}$  = 27.23. Dalla fig. 52a, si può ricavare tale rapporto ottenuto con l'applicazione del metodo DSMC, riportato in tab. 24.

Tab.24: confronto risultati sul rapporto di pressione statica – espansione del flusso

псп	ugeno	aivergenie	

	DSMC			Caso teorico	
<i>pi</i>	p <sub>e</sub>	$\frac{p_i}{p_e}$	p <sub>i</sub>	p <sub>e</sub>	$\frac{p_i}{p_e}$
46.6	1.76	26.47	59.04	2.17	27.23



Fig.51: andamento delle pressioni lungo la parete - espansione del flusso nell'ugello



Fig.52: Andamento di (a) p (b)  $\rho_N$  (c) T e (d) M – espansione del flusso nell'ugello divergente

### CONCLUSIONI

Nel presente lavoro di tesi sono state dunque studiate le problematiche legate al programma di base *dsmcFoam*, che costituisce il *solver mainstream*, successivamente allo studio del metodo DSMC.

In particolare, si è analizzato il comportamento del solutore per fenomeni di interesse propulsivo (*micro-nozzle*) e per diversi fenomeni d'urto, concludendo con l'applicazione del metodo a problematiche di rientro in diverse condizioni atmosferiche.

Dai risultati ottenuti si evincono le potenzialità di questo metodo *particle-based*, dall'analisi in regime continuo e rarefatto allo studio di geometrie più complesse. Il tutto nel rispetto dei *requirements* di impostazione del problema.

E' stato scelta la suite OpenFOAM in quanto quest'ultima è in continuo sviluppo. Pertanto, il codice di base *dsmcFoam* è stato successivamente migliorato, inglobando al suo interno molteplici funzioni nuove, come il calcolo della temperatura rotazionale nella ripartizione dell'energia totale tra le molecole che costituiscono il gas, il modello Q-K relativo alle reazioni chimiche in flussi reagenti radianti e la possibilità di selezione di alcuni modelli implementati al suo interno (es. NTC). Con l'utilizzo delle nuove versioni del dsmcFoam, è dunque possibile migliorare lo studio di diversi problemi fisici grazie alla maggior flessibilità nella scelta dei modelli da utilizzare, permettendo così all'utente di poter ottenere risultati sempre più accurati. Ad esempio, con l'utilizzo del dsmcFoamPlus si è in grado di simulare il rientro della capsula in atmosfera terrestre andando a considerare le diverse reazioni chimiche dovute alla ionizzazione dell'aria. Una possibile applicazione successiva a quelle presenti in questo lavoro di tesi è relativa alla retropropulsione supersonica, utilizzata in fase di decelerazione del veicolo spaziale attraverso la generazione di una spinta opposta al verso di avanzamento del veicolo stesso e una possibile configurazione è la capsula con all'interno un ugello convergente-divergente.

## **BIBLIOGRAFIA**

- Arlemark, Erik, Gennady Markelov, and Silvia Nedea. "Rebuilding of Rothe's Nozzle Measurements with OpenFOAM Software." Journal of Physics: Conference Series 362 (May 23, 2012): 012040. <u>https://doi.org/10.1088/1742-6596/362/1/012040</u>.
- [2] "Atmosphere of Mars." In Wikipedia, June 29, 2022. <u>https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Atmosphere\_of\_Mars&oldid=109</u> <u>5717319</u>.
- [3] Bird, G. A. "The DSMC Method." Version 1.2. S.l.: G. A. Bird, 2013.
- [4] Bird, G.A. "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows." Clarendon Press, Oxford (2003).
- [5] Bird, G.A. "The Q-K Model for Gas-Phase Chemical Reaction Rates." Physics of Fluids 23, no. 10 (October 2011): 106101. https://doi.org/10.1063/1.3650424.
- [6] Bird, G.A. "Recent Advances and Current Challenges for DSMC." Computers & Mathematics with Applications 35, no. 1–2 (January 1998): 1–14. https://doi.org/10.1016/S0898-1221(97)00254-X.
- [7] Boyd, Iain D. "Direct Simulation Monte Carlo for Atmospheric Entry.1. Theoretical Basis and Physical Models." Department of Aerospace Engineering University of Michigan Ann Arbor, Michigan, USA.

- [8] Boyd, Iain D. "Approaches for Emulating the Boltzmann Equation when Particle Simulation Becomes Inefficient." Nonequilibrium Gas & Plasma Dynamics Laboratory, Department of Aerospace Engineering, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA.
- [9] Chadha, S., R. Jefferson-Loveday, and T. Hussain. "Modelling Knudsen Number Effects in Suspension High Velocity Oxy Fuel Thermal Spray." International Journal of Heat and Mass Transfer 152 (May 2020): 119454. <u>https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119454</u>.
- [10] Chung, Chan-Hong, Robert Stubbs, Paul Penko, and Kenneth De Witt.
  "Simulation of Low-Density Nozzle Plumes in Non-Zero Ambient Pressures." In 32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno,NV,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1994. <u>https://doi.org/10.2514/6.1994-357</u>.
- [11] Chung, Chan-Hong, Suk C. Kim, Robert M. Stubbs, and Kenneth J. De Witt. "Low-Density Nozzle Flow by the Direct Simulation Monte Carlo and Continuum Methods." Journal of Propulsion and Power 11, no. 1 (January 1995): 64–70. https://doi.org/10.2514/3.23841.
- [12] Chemistry LibreTexts. "3.1.3: Mean Free Path," October 2, 2013. https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical\_and\_Theoretical\_Chemistr y\_Textbook\_Maps/Supplemental\_Modules\_(Physical\_and\_Theoretical\_Che mistry)/Kinetics/03%3A\_Rate\_Laws/3.01%3A\_Gas\_Phase\_Kinetics/3.1.03% 3A\_Mean\_Free\_Path.
- [13] Chimicamo.org. "Distribuzione di Maxwell-Boltzman," May 24, 2014.

https://www.chimicamo.org/chimica-generale/distribuzione-di-maxwell-boltzman/.

- [14] "Determination of Shock Standoff Distance for Wedge at Supersonic Flow." International Journal of Engineering 32, no. 7 (July 2019). <u>https://doi.org/10.5829/ije.2019.32.07a.19</u>.
- [15] Du, Chunlin, Xiaowei Wang, Feng Han, Xiaoyu Ren, and Zhijun Zhang. "Numerical Investigation into the Flow Characteristics of Gas Mixtures in Knudsen Pump with Variable Soft Sphere Model." Micromachines 11, no. 9 (August 19, 2020): 784. <u>https://doi.org/10.3390/mi11090784</u>.
- [16] D. K. Ramesha, Akash Raj, J. Vighnesh, Shashank Tripathi, Snehjeet Chatterje. "MONTE CARLO ANALYSIS OF GAS FLOW IN CYLINDRICAL MICRO-CHANNEL USING OpenFOAM". INTERNATIONAL JOURNAL OF RESEARCH IN AERONAUTICAL AND MECHANICAL ENGINEERING. 27-28 December 2017, Pg: -57-67. www.ijrame.com
- [17] Espinoza, D. E. R., V. Casseau, T. J. Scanlon, and R. E. Brown. "An Open-Source Hybrid CFD-DSMC Solver for High Speed Flows," 050007. Victoria, BC, Canada, 2016. https://doi.org/10.1063/1.4967557.
- [18] Furudate, M. Ahn. "CALCULATION OF SHOCK STAND-OFF DISTANCE FOR A SPHERE IN NONEQUILIBRIUM HYPERSONIC FLOW." Journal of Computational Fluids Engineering 17, no. 4 (December 31, 2012): 69–74. <u>https://doi.org/10.6112/kscfe.2012.17.4.069</u>.
- [19] Gaisser, Martin. "Simulations of the Atomic Beam Transport in an Atomic Beam Source under the Influence of Spin-Selective Sextupole Magnets." (2013).
- [20] Gardner, Samuel T., and Ramesh K. Agarwal. "Effects of Rarefaction and Thermal Non-Equilibrium on a Blunt Body and a Bicone in Hypersonic Flow and Their Shape Optimization for Reducing Both Drag and Heat Transfer," 100010. Glasgow, UK, 2019. <u>https://doi.org/10.1063/1.5119605</u>.
- [21] Alejandro & Baras, Florence. (1997). " Direct simulation Monte Carlo: Novel application and new extensions."
- [22] Greenspan, Martin. "Rotational Relaxation in Nitrogen, Oxygen, and Air." The Journal of the Acoustical Society of America 31, no. 2 (February 1959): 155–60. https://doi.org/10.1121/1.1907686.
- [23] Hadjiconstantinou, Nicolas G., Alejandro L. Garcia, Martin Z. Bazant, and Gang He. "Statistical Error in Particle Simulations of Hydrodynamic Phenomena." Journal of Computational Physics 187, no. 1 (May 2003): 274– 97. https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00099-8.
- [24] Hollis, Brian. "Blunt-Body Entry Vehicle Aerothermodynamics: Transition and Turbulence on the CEV and MSL Configurations." In 40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit. Chicago, Illinois: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2010. <u>https://doi.org/10.2514/6.2010-4984</u>.
- [25] "Martian Atmosphere an Overview | ScienceDirect Topics." Accessed

July 2, 2022. https://www.sciencedirect.com/topics/earth-and-planetary-sciences/martian-atmosphere.

- [26] Hopkins, Matthew M. (Sandia National Laboratories). "Introduction to Collisional PIC Methods for Simulating Vacuum Arcs." 5th International Workshop on Mechanisms of Vacuum Arcs (MeVArc), September 1, 2015, Helsinki, Finland.
- [27] https://engineering.purdue.edu/~alexeenk/AAE590D/lec\_relax.pdf
- [28] <u>https://physicstasks.eu/2174/the-most-probable,-average-and-root-mean-</u> <u>square-speed-of-gas-molecules</u>
- [29] http://ctcp.massey.ac.nz/lein/lectures/124.102-Unit-02-Lecture-5.pdf
- [30] https://www.esa.int/ESA\_Multimedia/Images/2018/04/Comparing\_the\_at mospheres\_of\_Mars\_and\_Earth
- [31] "Modello 3D Veicolo di esplorazione dell'equipaggio Capsula spaziale CEV
   TurboSquid 1613399." Accessed June 25, 2022. <u>https://www.turbosquid.com/it/3d-models/cev-crew-exploration-vehicle-3d-1613399</u>.
- [32] "OpenFOAM: API Guide: OpenFOAM®: Open Source CFD: API." https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/api/index.html.
- [33] Nanbu, K., T. Honda, and S. Igarashi. "Probability of Inelastic Collisions for the Larsen-Borgnakke Model to the Monte Carlo Simulation Method." Journal of Thermophysics and Heat Transfer 5, no. 2 (April 1991): 251–52.

https://doi.org/10.2514/3.257.

- [34] Gunter's Space Page. "Orion (CEV → MPCV)." Accessed June 25, 2022. https://space.skyrocket.de/doc\_sdat/orion-cev.htm.
- [35] "Orion (veicolo spaziale)." In Wikipedia, August 10, 2021. https://it.wikipedia.org/w/index.php?title=Orion\_(veicolo\_spaziale)&oldid=12 2392129.
- [36] Palharini, Rodrigo C., Craig White, Thomas J. Scanlon, Richard E. Brown, Matthew K. Borg, and Jason M. Reese. "Benchmark Numerical Simulations of Rarefied Non-Reacting Gas Flows Using an Open-Source DSMC Code." Computers & Fluids 120 (October 2015): 140–57. <u>https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2015.07.021</u>.
- [37] Palharini, Rodrigo C., et al. "Atmospheric Reentry Modelling Using an Open-Source DSMC Code." University of Strathclyde, Department of Mechanical & Aerospace Engineering.
- [38] Pareschi, Lorenzo, and Giovanni Russo. "An Introduction to Monte Carlo Method for the Boltzmann Equation." Edited by Frédéric Coquel and Stéphane Cordier. ESAIM: Proceedings 10 (2001): 35–75. https://doi.org/10.1051/proc:2001004.
- [39] Patel, Rakeshkumar K., and K. Venkatasubbaiah. "Numerical Simulation of the Orion CEV Reentry Vehicle." Journal of Aerospace Engineering 28, no.
  2 (March 2015): 04014067. <u>https://doi.org/10.1061/(ASCE)AS.1943-5525.0000397</u>.

- [40] Reji R.V., Santhosh K. S., Anil Lal S. "AEROTHERMAL ANALYSIS OF HYPERSONIC FLOW AROUND A CYLINDER." International Journal of Innovative Research in Science, Engineering and Technology. Volume 2, Special Issue 1, December 2013.
- [41] Scanlon, T.J., E. Roohi, C. White, M. Darbandi, and J.M. Reese. "An Open Source, Parallel DSMC Code for Rarefied Gas Flows in Arbitrary Geometries." Computers & Fluids 39, no. 10 (December 2010): 2078–89. https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.07.014.
- [42] Shen, Hua, and Chih-Yung Wen. "Theoretical Investigation of Shock Stand-off Distance for Non-Equilibrium Flows over Spheres." Chinese Journal of Aeronautics 31, no. 5 (May 2018): 990–96. <u>https://doi.org/10.1016/j.cja.2018.02.013</u>.
- [43] tec-science. "Mean Free Path & Collision Frequency." Tec-Science (blog), March 26, 2019. https://www.tec-science.com/thermodynamics/kinetic-theoryof-gases/mean-free-path-collision-frequency/.
- [44] Titov Evgeny V. "APPLICATION OF THE DSMC METHOD TO HIGH DENSITY MICRO-FLOWS." The Pennsylvania State University, The Graduate School Department of Aerospace Engineering (2007).
- [45] "Ubc Atsc 113 Layers in the Standard Atmosphere." Accessed June 26,
   2022. <u>https://www.eoas.ubc.ca/courses/atsc113/flying/met\_concepts/03-met\_concepts/03a-std\_atmos/index.html.</u>

- [46] Volkov A. "Direct Simulations Monte Carlo (DSMC) method" Chapter 6. Non-equilibrium gas dynamics, ME 591.
- [47] Khan Academy. "What Is the Maxwell-Boltzmann Distribution? (Article)." https://www.khanacademy.org/science/physics/thermodynamics/temp-kinetictheory-ideal-gas-law/a/what-is-the-maxwell-boltzmann-distribution.
- [48] White, C., M.K. Borg, T.J. Scanlon, S.M. Longshaw, B. John, D.R. Emerson, and J.M. Reese. "DsmcFoam+: An OpenFOAM Based Direct Simulation Monte Carlo Solver." Computer Physics Communications 224 (March 2018): 22–43. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.09.030.

## RINGRAZIAMENTI

Desidero esprimere un sentito ringraziamento al prof. Michele Ferlauto per l'aiuto, la disponibilità e il sostegno ottenuti durante l'intero lavoro di tesi. Ringrazio inoltre il centro hpc del Politecnico di Torino per il supporto avuto nell'esecuzione delle simulazioni.

Un ringraziamento speciale va alla mia famiglia e ai miei Amici, a cui dedico il presente lavoro di tesi. Mi avete supportato e sopportato lungo l'intero percorso, accademico e personale. Senza il vostro continuo sostegno, i vostri consigli e le vostre parole non sarei arrivata dove sono ora e non sarei la persona che sono. Siete la parte migliore di me e non c'è giorno in cui non sia grata di avervi al mio fianco. Vi sarò riconoscente a vita.

Last but not least, vorrei ringraziare il mio team di lavoro del segmento operativo *Turbomachinery and Process Solutions* (TPS) Baker Hughes presso il Nuovo Pignone International. Grazie per l'opportunità che mi avete dato e per continuare a credere nelle mie potenzialità. Grazie per la pazienza, la comprensione e il costante sostegno avuto dal primo giorno di stage. Ad oggi, sono fiera della scelta di aver intrapreso questa nuova strada, certa che mi permetterà di migliorare e crescere professionalmente e personalmente.