

POLITECNICO DI TORINO



**Politecnico
di Torino**

Corso di Laurea in Magistrale in Ingegneria Aerospaziale

Tesi di Laurea Magistrale

**Simulazioni DSMC di flussi
rarefatti mediante il software
SPARTA**

Analisi di sensitività termofluidodinamica per anemometri HWA in
regime di transizione subsonico

Relatori

prof. Andrea Ferrero
prof. Sergio Lavagnoli

Candidato

Luca RANNI
matricola: 323305

ANNO ACCADEMICO 2025-2026

Abstract

L'interesse sul comportamento dei motori aeronautici è recentemente aumentato con il proposito di avere una maggiore conoscenza sugli aspetti e le dinamiche interne ad essi, permettendo un miglioramento dell'efficienza e una riduzione dei consumi, avallando le direttive internazionali sulla riduzione delle emissioni. In particolare, ha preso il sopravvento l'utilizzo di simulazioni numeriche e strumenti CFD per analizzare i flussi interni. Per avere riscontri sperimentali, nei test in laboratorio si utilizzano differenti sonde per captare le condizioni del flusso, quali sonde termiche, tubi di pitot e anemometria filo caldo, gli ultimi dei quali sono oggetti del presente studio. In condizioni di rarefazione, il flusso nell'intorno del filo caldo non è più descrivibile attraverso le leggi della fluidodinamica del continuo di Navier-Stokes, ma necessita di una descrizione attraverso un modello molecolare. Verrà simulato, tramite l'utilizzo del software SPARTA DSMC, un flusso rarefatto in varie condizioni dettate dal numero di Knudsen e dal Reynolds attorno ad un anemometro a filo caldo (HWA). In tali scenari, l'HWA presenta una sensibilità alle fluttuazioni di densità e velocità maggiore rispetto alle condizioni operative standard. L'obiettivo è quello di ottenere una relazione empirica tra i numeri di Nusselt, Reynolds e Knudsen con lo scopo di rendere possibile la calibrazione di tale strumento di misura al di fuori delle condizioni nominali.

Interest in the behavior of aeronautical engines has significantly increased with the aim of gaining deeper knowledge of their internal aspects and dynamics, thereby enabling improvements in efficiency and reductions in fuel consumption, in line with international directives on emissions reduction. In particular, the use of numerical simulations and CFD tools has become prevalent for analyzing internal flows. To obtain experimental validation, laboratory tests employ various probes to capture flow conditions, such as thermal probes, Pitot tubes, and hot wire anemometers—the latter being the focus of this study. In rarefied conditions, the flow around the hot wire is no longer describable by the Navier-Stokes continuum fluid dynamics equations, but requires a molecular-based description. Using the SPARTA DSMC software, rarefied flows under various conditions defined by the Knudsen and Reynolds numbers around a hot-wire anemometer (HWA) will be simulated. In such scenarios, the HWA exhibits greater sensitivity to density and velocity fluctuations compared to standard operating conditions. The objective is to derive an empirical correlation between Nusselt, Reynolds and Knudsen numbers to enable calibration of this measurement instrument beyond nominal conditions.

Indice

Elenco delle tabelle	7
Elenco delle figure	8
I Prima Parte	11
1 Introduzione Generale	13
1.1 Modello Molecolare	15
1.1.1 Modelli di collisione binaria	19
1.2 Teoria cinetica dei gas	25
1.3 Equazione di Boltzmann	27
1.4 La teoria di Chapman-Enskog	29
1.5 Interazioni Gas-Superficie	30
1.5.1 Diffuse-Specular Kernel	31
1.5.2 Cercignani-Lampis Kernel	32
1.5.3 Coefficienti di accomodamento	32
2 Anemometri a filo caldo	35
2.1 Generalità sugli HWA	35
2.2 Constant Temperature Anemometer CTA	40
2.3 HWA in flussi compressibili e rarefatti	41
2.4 Applicazioni degli HWA nelle turbomacchine	42
3 Sparta DSMC	45
3.1 Metodi Monte Carlo	45
3.2 Direct Simulation Monte Carlo	47
3.3 Sparta DSMC	49

II	Seconda Parte	53
4	Set-Up Sparta	55
4.1	Definizione del problema	55
4.2	Analisi di convergenza statistica	60
4.2.1	Fase Transitoria	60
4.2.2	Fase Stazionaria	63
4.3	Domain and Mesh independence study	64
4.3.1	Indipendenza dal domino	64
4.3.2	Indipendenza dalla mesh	65
4.4	Validazione del set-up	67
5	Elaborazione Dati	71
5.1	Flussi termici e Coefficiente di resistenza	71
5.2	Campi di temperatura, velocità e densità	73
5.3	Estrazione della temperatura adiabatica di parete	75
5.4	Calcolo del coefficiente di scambio termico convettivo	78
5.5	Calcolo del Nusselt	79
5.6	Relazione Nu-Re-Ma	80
5.7	Studio sulla sensibilità del Nusselt	83
5.7.1	Dipendenza dall'accomodation coefficient	83
5.7.2	Sensibilità alla densità e alla velocità	85
5.7.3	Relazione Nu-Re-Kn-Tau	88
5.7.4	Studio alla sensibilità del Nusselt completo	89
6	Conclusioni	91
	Bibliografia	93

Elenco delle tabelle

1.1	Coefficienti α_d per diversi gas nobili (tab.4.1 [2])	33
4.1	VKI S-1/C test case	55
4.2	Condizioni del flusso per il caso in esame	56
4.3	Spazio dei parametri simulati	56
4.4	Dati delle specie molecolari per N_2 e O_2	57
4.5	Parametri del modello di collisione VSS per N_2 e O_2	58
4.6	Caso Test per convergenza statistica	61
4.7	Test case per studio di indipendenza dal dominio	64
5.1	Coefficienti del modello di best-fit $Nu - Re - Ma$ e coefficiente di determinazione	80
5.2	Riepilogo dei risultati delle simulazioni	82
5.3	Caso Test per studio sul coefficiente di accomodamento	83
5.4	sensibilità a velocità e densità per caso test	87
5.5	Coefficienti del modello di best-fit $Nu - Re - Kn - \tau$ e coefficiente di determinazione	88
5.6	Riepilogo dati simulazioni: Analisi dell'effetto di τ sul numero di Nusselt	88
5.7	Sensibilità a velocità e densità per caso test	90

Elenco delle figure

1.1	Regimi molecolari in funzione del Knudsen	15
1.2	Andamento tipico della forza intermolecolare (fig 1.3 [1])	16
1.3	Regimi molecolari in funzione della densità e della lunghezza caratteristica (fig 1.7 [1])	19
1.4	Parametri d’impatto (fig. 2.3 [1])	21
1.5	Interazione della massa ridotta nel sistema di riferimento centrato nel punto di collisione (fig 2.1 [1])	22
1.6	Potenziale in funzione della distanza intermolecolare (fig. 1.1 [2])	25
1.7	Sistema di riferimento per collisione gas-superficie (fig.4.1 [2])	30
2.1	Materiali per HWA (tab 3.1 [8])	36
2.2	Distribuzione di temperatura lungo HWA (fig. 3.6 [8])	37
2.3	Curva di calibrazione per CTA (fig. 3.7 [8])	40
2.4	Schema elettrico del CTA (fig. 2.2 [17])	40
4.1	Variazione delle dev. std. in funzione dei parametri statistici	61
4.2	Flussi termici	62
4.3	Variazione percentuale di \dot{q} relativamente al caso migliore	62
4.4	Analisi di convergenza spazio-temporale	63
4.5	Domain Indipendence Study	64
4.6	Mesh per test case	66
4.7	Convergenza del Cd e Nu per mesh independence study	66
4.8	Confronto con simulazione Xie et al. N_2	67
4.9	Confronto con relazione slip flow Xie et al.	68
4.10	Confronto con relazione Pastorino et al.	69
5.1	Distribuzione angolare dei flussi termici e delle forze	71
5.2	Campi di temperatura e densità	73
5.3	Campi di velocità - componente orizzontale a sx , verticale a dx	74
5.4	Confronto della T_{aw} per i tre metodi di estrazione	77
5.5	Andamento angolare di h	78

5.6	Dati SPARTA vs Relazione Nu-Re-Ma	80
5.7	Dati SPARTA vs Relazione Nu-Ma-Kn	82
5.8	Analisi di dipendenza da α	84
5.9	Sensibilità del Nusselt a velocità e densità	85
5.10	Sensibilità del Nusselt a velocità, densità e tratio	89

Parte I

Prima Parte

Capitolo 1

Introduzione Generale

In numerose applicazioni in ambito ingegneristico, le tradizionali equazioni applicate nella fluidodinamica del continuo, ovvero le equazioni di Navier-Stokes (o quelle di Eulero se si tratta del caso inviscido), perdono la loro validità, poiché non si tratta più di un insieme di particelle fluide, ma si passa ad un modello microscopico o molecolare, dove la singola molecola, con le sue proprietà, quali posizione, velocità, gradi di libertà rotazionali e vibrazionali, costituisce un singolo tassello necessario poi per la conoscenza delle proprietà macroscopiche della termodinamica. Il modello matematico che descrive tale regime è dato dall'equazione di Boltzmann. Tuttavia, la soluzione analitica a tale equazione, anche per i problemi più semplici, non è possibile e anche tramite i convenzionali metodi numerici si presentano comunque delle difficoltà. Proprio per tale motivo, come vedremo in seguito, vengono applicati dei modelli fisici diretti risolutivi, come i metodi Monte Carlo. Essi semplificano la fisica del problema andando ad analizzare un gruppo finito di particelle, che rappresentano un insieme di atomi o molecole, e simulano le collisioni tra di esse in modo randomico. Il vantaggio è quello di ridurre notevolmente il costo computazionale andando però ad ottenere risultati meno accurati e con fluttuazioni.

I termini di trasporto delle equazioni di NS si annullano quando i gradienti delle grandezze termodinamiche sono così elevati che la loro scala di lunghezza è confrontabile con il libero cammino medio molecolare (o *mean free path* mfp o λ), ossia la distanza media percorsa da una particella tra due collisioni consecutive. Il grado di rarefazione di un fluido è indicato con il **numero di Knudsen** Kn , rappresentante il rapporto tra il libero cammino medio e la

dimensione caratteristica L :

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

In accordo con la teoria di Tsien [3], vengono definiti tre regimi fondamentali della dinamica dei flussi:

- **Continuum Flow** $Kn < 0.01$, regione di validità delle equazioni di Navier Stokes. Si assume che le proprietà macroscopiche locali siano descrivibili come medie sulle particelle fluide, le quali sono grandi rispetto alla scala molecolare ma sufficientemente piccole per garantire l'uso del calcolo differenziale. Nel caso di $Kn \rightarrow 0$ le equazioni di N.S. possono essere ridotte a quelle di Eulero, andando a trascurare i termini diffusivi e di trasporto nelle equazioni dell'energia e della quantità di moto;
- **Slip Flow** $0.01 < Kn < 0.1$, dove il flusso è quasi continuo, ma si verificano fenomeni di scorrimento sulla superficie e la non completa accomodazione della temperatura con la nascita di un salto termico. Infatti, quando il Knudsen aumenta diminuiscono le interazioni molecole-superficie generando delle zone di non equilibrio nell'intorno delle pareti. Fisicamente si osserva che la temperatura e la velocità del gas a parete differiscono da quelle della parete stessa. Le equazioni di N.S. sono tuttavia ancora valide andando ad inserire delle condizioni a contorno relative alle due grandezze appena elencate: le c.c. di Maxwell per la *velocity-slip* e le c.c. di Von Smoluchowski per il *temperature-jump* [4];
- **Transition Region** $0.1 < Kn < 10$, dove prevalgono gli effetti di non equilibrio e perde di validità l'equazione di N.S. Va ricercata la soluzione dell'equazione di Boltzmann
- **Free Molecular Flow** $Kn > 10$, dove il mfp è così elevato che la probabilità di collisione è quasi nulla, quindi prevalgono le collisioni con le superfici.

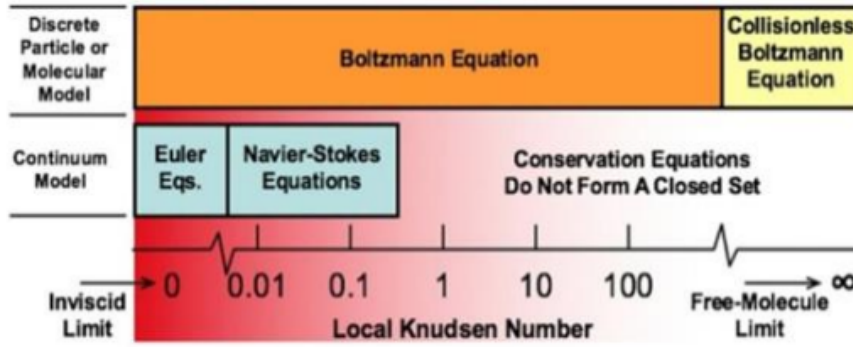


Figura 1.1: Regimi molecolari in funzione del Knudsen

Talvolta, al posto del numero di Knudsen viene utilizzato il **parametro di rarefazione** δ :

$$\delta = \frac{L}{EFP} = \frac{L p}{\mu v_m}$$

con $EFP = \mu v_m / p$ *equivalent free path*, $v_m = \sqrt{2RT}$ *most probable velocity*. In casi di flussi completi in cui la definizione di una dimensione caratteristica è controversa, si ricorre al numero di Knudsen locale L , che rappresenta la dimensione della scala dei gradienti di densità:

$$L = \frac{\rho}{\frac{d\rho}{dx}}$$

1.1 Modello Molecolare

Le proprietà di base di una molecola (si specifica che in tale contesto indica sia atomi che molecole) quali massa, gradi di libertà, energia interna, dimensione e velocità, sono direttamente correlate al libero cammino medio molecolare e alla frequenza di collisione, dunque, per definire lo stato di rarefazione sono necessarie alcune nozioni relative ad esse e all'interazione reciproca (ch. 1 [1]).

La validità dell'equazione di stato dei gas perfetti è invariata:

$$p = n k_b T$$

con $k_b = R_g / N_a$ costante di Boltzmann e n *number density*, che rappresenta il numero di molecole per unità di volume ed è correlata alla densità:

$$\rho = m n$$

Si può dedurre che il volume disponibile per una singola molecola è pari a $1/n$ e definire il *mean molecular spacing* $\delta = n^{-1/3}$, che rappresenta la distanza media tra le molecole.

Per un gas rarefatto, le interazioni intermolecolari sono di fondamentale importanza per la descrizione dei fenomeni di trasporto di massa, calore e quantità di moto. Il potenziale intermolecolare $U(r)$ è definito in modo che l'energia potenziale tra due molecole a distanza r sia pari a U ; nel caso in cui è noto si può risalire alla forza d'interazione F :

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr}$$

Come vedremo nel paragrafo successivo, molti modelli di collisione molecolare si basano sui potenziali generati dalle molecole, i quali sono sferici in prima approssimazione e l'andamento della forza tra due particelle neutre, mostrato in fig 1.2, è una funzione della distanza tra i due nuclei: nulla all'infinito, poi cresce con l'avvicinarsi delle molecole a causa della nascita delle interazioni di Van der Waals, poi decresce bruscamente per repulsione coulombiana dei due nuclei.

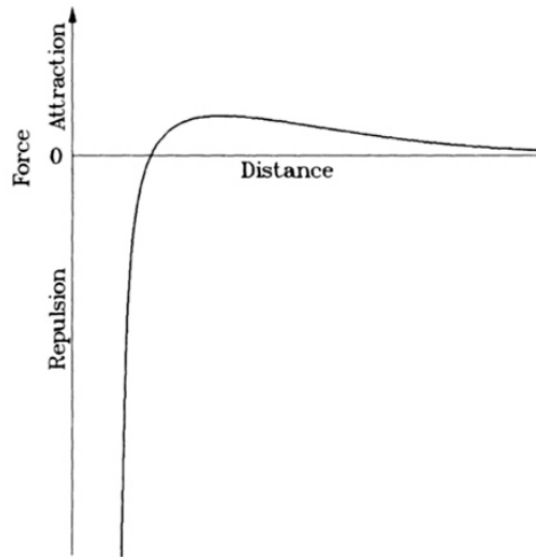


Figura 1.2: Andamento tipico della forza intermolecolare (fig 1.3 [1])

In caso di collisione elastica tra due molecole indeformabili identiche di diametro d si definisce la sezione d'urto o *total collision cross-section*

$$\sigma_T = \pi d^2$$

Un gas è rarefatto quando la distanza media molecolare è ordini di grandezza superiore al diametro molecolare:

$$\delta \gg d$$

ossia le particelle occupano un spazio ristretto rispetto al volume complessivo e questo permette loro di muoversi liberamente. Nel caso avvenga una collisione è ragionevole supporre che essa sia binaria. Vengono definite il *mean collision time* τ e la *collision frequency o mean collision rate* ν , rappresentanti rispettivamente l'intervallo di tempo medio tra due collisioni successive, riferite ad una qualsiasi molecola, e il suo reciproco. Considerando un insieme di molecole con velocità che variano tra c e $c + \Delta c$ con number density pari a Δn : prendendo una molecola test a velocità assoluta c_t e relativa $c_r = c_t - c$, in un intervallo Δt di tempo inferiore a τ , essa colliderà con qualsiasi altra molecola dell'insieme che risiede nel cilindro di volume $\sigma_T c_r \Delta t$ spazzato dalla molecola di test. Allora, la probabilità di collisione in questo caso vale $\Delta n \sigma_T c_r \Delta t$. A seguito di un impatto, il volume spazzato da una singola particella verrà distorto, ma per l'ipotesi di gas rarefatto, si può estendere la definizione all'unità di tempo $\Delta n \sigma_T c_r$. Sommando per tutte le classi di velocità e quindi su tutti i valori di velocità relativa si ottiene la definizione della frequenza di collisione:

$$\nu = \sum (\Delta \sigma_T c_r) = n \sum \left[\frac{\Delta n}{n} \sigma_T c_r \right] = n \overline{\sigma_T c_r}$$

per il modello Hard Sphere HS $\nu = \pi d^2 n \bar{c}_r$. Il libero cammino medio molecolare, definito in un sistema di riferimento che si muove alla velocità del gas indisturbato v_∞ , corrisponde al rapporto tra la velocità termica media *mean thermal speed* \bar{c}' e la collision frequency:

$$\lambda = \frac{\bar{c}'}{\nu} = \frac{1}{n \left(\frac{\sigma_T \bar{c}_r}{\bar{c}'} \right)}$$

per modello HS $\lambda = \left[(\bar{c}_r / \bar{c}') \pi d^2 n \right]^{-1}$

Per dedurre le proprietà macroscopiche nel continuo, si fa riferimento a una particella fluida, che costituisce un vero e proprio punto del fluido. Per gas rarefatti, si fa riferimento a un determinato volume V con numero di molecole N ; tale numero di molecole sarà soggetto a fluttuazioni statistiche attorno al valor medio nV . La probabilità di un particolare valore di N è data dalla distribuzione di Poisson:

$$P(N) = (nV)^N \exp(-nV) / N!$$

Per grandi valori di nV , tale distribuzione tende a quella di Gauss o distribuzione normale:

$$P(N) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi nV}} \exp \left[-\frac{(N - nV)^2}{2nV} \right]$$

Integrando tale distribuzione, la probabilità che un singolo dato cada entro la distanza $A\sqrt{nV}$ dal valor medio nV è pari a $erf(A/\sqrt{2})$. La deviazione standard delle fluttuazioni vale allora $\frac{1}{\sqrt{nV}}$.

Utilizzando la definizione precedente di mean molecular spacing, vale $nV = V/\delta^3$. Per avere un numero sufficientemente elevato di campioni per garantire, in seguito, valori accettabili delle grandezze macroscopiche, deve essere soddisfatta la seguente condizione:

$$V^3 \gg \delta$$

Sostanzialmente, anche se le dimensioni dei volumi di controllo sono sufficientemente piccole rispetto alla scala dei gradienti macroscopici, le proprietà macroscopiche dipendono dalla dimensione dell'elemento scelto.

A questo punto, si possono definire i regimi di rarefazione in funzione della densità e della lunghezza caratteristica. Prendendo come riferimento il diametro molecolare medio dell'aria $d = 4 \cdot 10^{-10}m$, l'ipotesi di gas rarefatto $\delta/d \gg 1$ è ritenuta valida scegliendo come limite inferiore 10. Visto che sia il mean molecular spacing che il diametro sono indipendenti dalla lunghezza caratteristica L , nel grafico sottostante, una linea verticale separa il regime gas rarefatto da quello denso. La validità delle equazioni di Navier-Stokes è imposta fino al limite di $Kn = \lambda/L = 0.1$, mentre il limite per l'insorgenza di fluttuazioni statistiche elevate è pari a $L/\delta = 100$, corrispondente ad una deviazione standard $\approx 3\%$

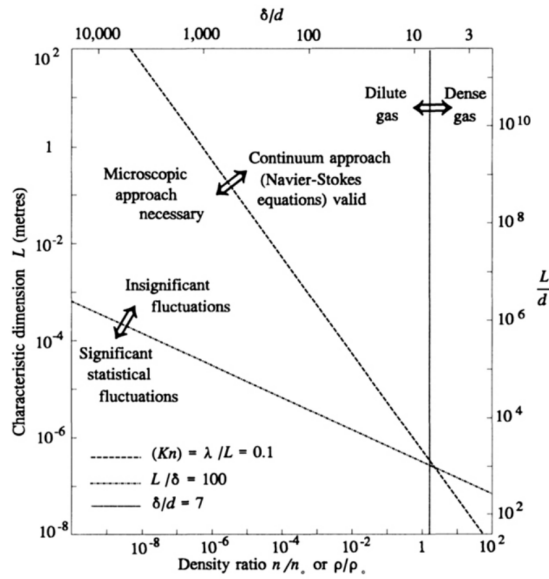


Figura 1.3: Regimi molecolari in funzione della densità e della lunghezza caratteristica (fig 1.7 [1])

Si nota come il limite del continuo sia compreso tra quello del gas rarefatto e quello per le fluttuazioni significative: diminuendo la densità o la dimensione caratteristica nella regione di gas rarefatto, le equazioni di N.S. perdono la loro validità prima dell'insorgenza dei fenomeni di fluttuazione. In secondo luogo, è presente un significativo livello di fluttuazioni anche nel regime del continuo quando il gas è denso.

1.1.1 Modelli di collisione binaria

Per risolvere il problema della collisione binaria (ch. 2 [1]) tra molecole si farà uso delle equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto, della velocità relativa, del momento angolare e dell'energia traslazionale. Considerando due particelle di massa m_1, m_2 e con velocità c_1, c_2 risolvendo il sistema seguente si otterranno le masse e velocità post-collisione $m_1^*, m_2^*, c_1^*, c_2^*$:

$$\begin{cases} m_1 + m_2 = m_1^* + m_2^* \\ m_1 c_1 + m_2 c_2 = m_1^* c_1^* + m_2^* c_2^* \end{cases}$$

c_r, c_r^* indicano le velocità relative pre e post collisione:

$$c_r = c_1 - c_2 \qquad c_r^* = c_1^* - c_2^*$$

m_r, m_r^* le masse ridotte:

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad m_r^* = \frac{m_1^* m_2^*}{m_1^* + m_2^*}$$

c_m la velocità del centro di massa :

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

E_{tr}, E_{tr}^* le energie traslazionali:

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

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

Per risolvere la routine di collisione si deducono prima il centro di massa, i vettori velocità relativa e l'energia traslazionale relativa pre collisione. L'energia totale di collisione è la somma di quella traslazionale relativa e le energie di tutti i modi interni di entrambe le molecole: nel caso di flussi reagenti chimicamente, vengono aggiunti anche i calori di formazione delle molecole, e se la reazione avviene, vengono impostate le specie molecolari per le identità post-reazione. Successivamente vengono applicati i modelli per i modi interni, andando a modificare le energie di pre-collisione. All'energia totale di collisione viene sottratta quella interna di post-collisione per ottenere l'energia traslazionale omonima. Infine, viene calcolato il modulo della velocità relativa di post-collisione e successivamente le componenti nel sistema di riferimento.

Nelle informazioni di pre-collisione, oltre ai parametri descritti precedentemente, sono necessari due parametri d'impatto: *distance of closest approach* b , ossia la distanza minima tra le 2 traiettorie nel sistema di riferimento, ε che indica l'angolo tra il piano di collisione e un piano di riferimento.

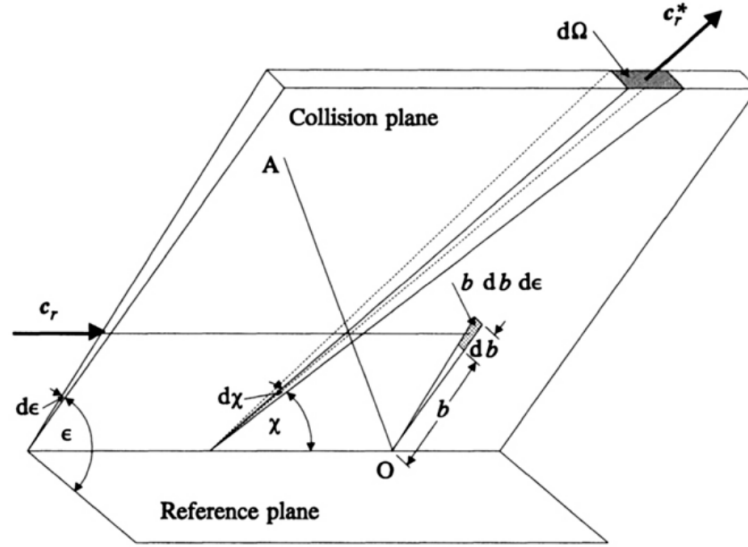


Figura 1.4: Parametri d'impatto (fig. 2.3 [1])

A questo punto possiamo considerare un piano normale al vettore velocità relativa e contenente la sezione di collisione differenziale:

$$\sigma d\Omega = b db d\epsilon$$

con $d\Omega$ angolo solido relativo al vettore c_r^* , che può essere visto come $d\Omega = \sin \chi d\chi d\epsilon$. Segue che:

$$\sigma = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| \quad (1.1)$$

Integrando, otteniamo la *total cross-section*:

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma \sin \chi d\chi$$

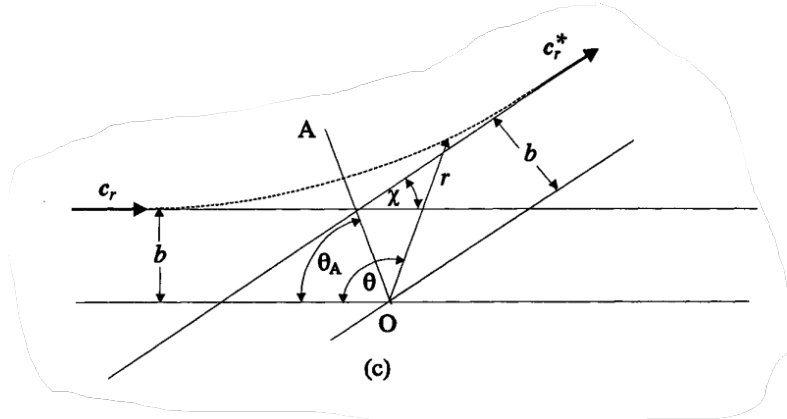


Figura 1.5: Interazione della massa ridotta nel sistema di riferimento centrato nel punto di collisione (fig 2.1 [1])

Facendo riferimento a un sistema polare centrato nel punto di collisione O, per la conservazione del momento angolare e dell'energia, che corrisponde alla somma di quella cinetica e potenziale, vale:

$$r^2 \dot{\theta} = cost = b c_r$$

$$\frac{1}{2} m_r (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + \phi = cost = \frac{1}{2} m_r c_r^2 = E_{tot}$$

Come visto in precedenza, i modelli collisionali sono di fondamentale importanza per dedurre le proprietà di trasporto. Verranno esposti alcuni dei modelli più diffusi.

Hard Sphere (HS) Model

E' il modello più semplice utilizzato, denotando il potenziale molecolare come:

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{per } r < d \\ 0 & \text{per } r > d \end{cases}$$

con d diametro della molecola, modellizzata come una sfera perfetta. La forza di repulsione è effettiva quando le 2 molecole si toccano a distanza $r = \frac{1}{2}(d_1 + d_2) = d_{12}$. Segue che:

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

$$\left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{1}{2} d_{12} \sin \left(\frac{\chi}{2} \right)$$

Sostituendo nell'equazione (1.1):

$$\sigma = \frac{d_{12}^2}{4}$$

osservando che la sezione d'urto differenziale è indipendente dall'angolo di deflessione χ e segue che la riflessione sarà isotropica relativamente al sistema di riferimento della massa ridotta. La sezione d'urto totale vale:

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega = \pi d_{12}^2$$

Il diametro delle molecole può essere dedotto dai coefficienti di trasporto come viscosità e conducibilità termica, presentando però l'ambigua definizione relativa alla temperatura scelta. Nel caso delle proprietà definite da Chapman-Enskog [5]:

$$d_{HS} = \sqrt{\frac{5\sqrt{\frac{m k_B T}{\pi}}}{16\mu}}$$

ossia, il diametro della particella deve essere aggiornato per ogni condizione di temperatura che si verifica. Il vantaggio di tale modello è la semplicità di calcolo per la simmetria dell'urto, ma nella realtà tale legge di scattering non è realistica. Inoltre, l'indipendenza della sezione d'urto dall'energia relativa traslazionale non è valida per temperature basse, dove si ha una diminuzione di tale area a causa di un aumento dell'energia totale di collisione e della velocità relativa.

Variable Hard Sphere (VHS) Model

Per porre rimedio ai limiti del modello HS, viene introdotto il VHS in cui il diametro della molecola è una funzione della velocità relativa:

$$d = d_{ref} \left(\frac{c_{r,ref}}{c_r} \right)^v$$

dove il pedice $_{ref}$ indica dei valori a una temperatura di riferimento. L'angolo di deflessione è pari:

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left(\frac{b}{d} \right)$$

e, pur avendo la dipendenza di d da c_r , per l'angolo di deflessione non è accoppiata ad essa, conducendo, di conseguenza, alle stesse formulazioni sulla sezione d'urto viste per il modello HS.

Variable Soft Sphere (VSS) Model

In entrambi i modelli precedenti la *viscosity cross-section* e la *momentum cross-section* erano definite come:

$$\sigma_M = \sigma_T \qquad \sigma_\mu = \frac{2}{3}\sigma_T$$

Tuttavia, ciò comporta un disaccordo tra i coefficienti di diffusione dei risultati sperimentali. Il modello VSS considera una dispersione post-collisione anisotropa: a differenza del modello VHS, viene modificata la formula dell'angolo di scattering χ , aggiungendo un parametro $1 < \alpha < 2$:

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left(\frac{b^{\frac{1}{\alpha}}}{d} \right)$$

Le sezioni d'urto ora valgono:

$$\sigma_\mu = \frac{2\pi S_\mu d^2}{3} \qquad \sigma_D = \pi S_D d^2$$

dove S_μ è il *soft coefficient of viscosity* e S_D il *soft coefficient of diffusion cross-section*.

$$S_\mu = \frac{6\alpha}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \qquad S_D = \frac{2}{\alpha + 1}$$

Il parametro introdotto influenza principalmente la sezione d'urto della quantità di moto, la quale scende fino a circa il 70% del valore nominale $\sigma_M = \sigma_T$.

Lennard-Jones (LJ) Potential

Il potenziale di Lennard-Jones (ch.1 [2]), descrive con maggior precisione rispetto all'HS l'andamento spaziale della forza tra le due molecole. Viene considerata l'attrazione tra due particelle vicine e la repulsione, seppure elevata, non è infinita come prevista dal modello HS. Ciò permette di colmare le discrepanze relative alle proprietà, quali la viscosità, presenti tra i dati sperimentali e quelli dei modelli HS.

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right]$$

con ε *potenital well depth*, che insieme a d , vengono estratti dai riscontri sperimentali.

Ab Initio (AI) Potential

Similmente al potenziale di LJ, l'Ab Initio potential (ch.1 [2]) descrive meglio il campo di forza nell'intorno di una particella, ma ha il vantaggio di non richiedere alcun dato sperimentale, trattandosi di espressioni interpolanti. Ad esempio:

$$\frac{\phi(r)}{k_b} = A \exp \left[a_1 r + a_2 r^2 + \frac{a_3}{r} + \frac{a_4}{r^2} \right] - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{r^{2n}} \left(1 - e^{-br} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right)$$

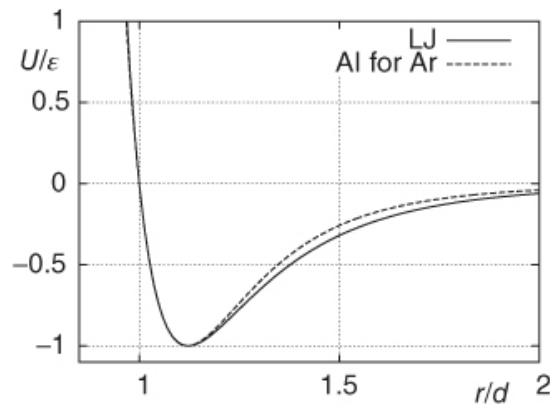


Figura 1.6: Potenziale in funzione della distanza intermolecolare (fig. 1.1 [2])

In figura 1.6 notiamo che i potenziali non differiscono qualitativamente, anche se a distanze maggiori di $r/d = 1.2$ si può osservare una lieve variazione. Il potenziale di LJ, basandosi su riscontri sperimentali, presenta le migliori caratteristiche di riproducibilità e affidabilità.

1.2 Teoria cinetica dei gas

Nel continuo, ogni particella fluida viene definita con le informazioni relative a posizione e velocità, ma nel caso del modello molecolare andrebbero elencate le caratteristiche di ogni singola particella, cosa impensabile per via del numero eccessivo di molecole (ch.3 [?]). Per tale motivo viene in aiuto la statistica. Considerando un gas con N molecole identiche, ognuna con la propria posizione (x,y,z) nello spazio fisico e velocità (u,v,w) nello spazio

delle velocità, la *velocity distribution function* VDF $f(\vec{c})$ è definita come:

$$dN = Nf(\vec{c})dudvdw \quad (1.2)$$

con dN numero di molecole nel campione con componenti di velocità negli intervalli $[u, u + du], [v, v + dv], [w, w + dw]$. L'elemento di volume $dudvdw$ nello spazio delle velocità è indicato anche come $d\vec{c}$. Esprimendo il numero delle molecole come number density e andando ad integrare la VDF:

$$dn/n = f d\vec{c} \quad (1.3)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f dudvdw = \int_{-\infty}^{+\infty} f d\vec{c} = N/N = 1 \quad (1.4)$$

ottenendo dunque una funzione normalizzata nello spazio delle velocità. Prendendo una quantità molecolare Q , la quale può essere funzione della velocità molecolare o una costante, definendo la sua media:

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \int_N Q dN$$

e sostituendo la VDF al suo interno:

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} Q f(\vec{c}) N d\vec{c} = \int_{-\infty}^{+\infty} Q f d\vec{c} \quad (1.5)$$

Le proprietà macroscopiche dei fluidi sono, però, delle funzioni di posizione e tempo: per questo è necessario esplicitare la VDF in queste due variabili o coordinate. Abbiamo definito $d\vec{c}$ come l'elemento di volume nello spazio delle velocità; ugualmente, andiamo a definire $d\vec{r}$ come quello nello spazio fisico. Il prodotto $d\vec{c}d\vec{r}$ rappresenta un elemento di volume nello spazio delle fasi, il quale è una combinazione dei due precedenti e quindi ha dimensione 6. La VDF per una singola particella nello spazio delle fasi vale:

$$dN = \mathcal{F}(\vec{c}, \vec{r}, t) d\vec{c}d\vec{r} \quad (1.6)$$

L'integrale di tale funzione restituisce il numero di molecole nel sistema N ed è legata alla VDF nello spazio delle velocità dalla seguente relazione:

$$nf(\vec{c}) = \mathcal{F}(\vec{c}, \vec{r}, t) \quad (1.7)$$

Nel caso di N molecole, la VDF più specifica è quella che descrive il sistema nello spazio delle fasi in ogni istante e prende il nome di *N particle distribution function* $F^{(N)}$. In particolare, la *single particle distribution function*

F^1 , rappresenta la probabilità di trovare la molecola numero 1 all'interno dell'elemento $d\vec{c}_1 d\vec{r}_1$ al tempo t nello spazio delle fasi ed è indipendente dalle altre molecole. Per una miscela omogenea, il numero di molecole all'interno di tale elemento vale $NF^{(1)}$. Per le collisioni binarie, è di fondamentale importanza la funzione di distribuzione per due particelle $F^{(2)}$: sotto l'ipotesi di gas rarefatto solo una piccola porzione di spazio è occupata dalle molecole, quindi si può assumere che la probabilità di trovare un paio di molecole in una particolare configurazione è semplicemente il prodotto tra le probabilità delle singole particelle nelle corrispondenti configurazioni ad una particella, ossia il principio del caos molecolare:

$$F^{(2)}(\vec{c}_1, \vec{r}_1, \vec{c}_2, \vec{r}_2, t) = F^{(1)}(\vec{c}_1, \vec{r}_1, t)F^{(1)}(\vec{c}_2, \vec{r}_2, t) \quad (1.8)$$

1.3 Equazione di Boltzmann

Per un volume di gas a temperatura costante T , in completo equilibrio e in assenza di scambi di calore e di reazioni chimiche, la VDF è data dall'equazione di Maxwell globale o distribuzione di Maxwell-Boltzmann (ch.3 [1]):

$$f^M(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right) \quad (1.9)$$

Tale espressione è un risultato ottenuto dai principi base della fisica statistica [6]. Quando il gas non è in equilibrio, la VDF viene espressa dall'equazione di Boltzmann. Le ipotesi di base per derivare tale espressione sono:

- Pure collisioni binarie, andando a trascurare quelle con tre o più molecole;
- Validità del principio del caos molecolare (1.8)

In un volume di controllo fisso $d\vec{c}d\vec{r}$ nello spazio delle fasi, la variazione del numero di molecole è data da:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf)d\vec{c}d\vec{r} \quad (1.10)$$

e i processi che contribuiscono a generarla sono:

- Convezione di molecole attraverso una faccia di $d\vec{r}$ alla velocità molecolare \vec{c} . Il flusso netto di molecole di classe \vec{c} attraverso la superficie S_r vale:

$$- \int_{S_r} n f \vec{c} \cdot \vec{n}_r dS_r d\vec{c} \quad (1.11)$$

Applicando il teorema di Gauss, considerando che nf e \vec{c} sono costanti rispetto alla variabile \vec{r} , definiamo il flusso di molecole di classe \vec{c} attraverso l'elemento infinitesimo $d\vec{r}$:

$$-\vec{c} \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{r}} d\vec{c} d\vec{r} \quad (1.12)$$

- Convezione di molecole attraverso una superficie di $d\vec{c}$ come risultato dell'azione di una forza esterna per unità di massa \vec{F} . In analogia a quanto visto per il flusso di particelle nello spazio fisico, possiamo definire l'analogo per lo spazio delle velocità:

$$-\vec{F} \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{c}} d\vec{c} d\vec{r}$$

- Diffusione delle particelle verso l'interno e l'esterno del volume come risultato delle collisioni molecolari. In particolare, è necessario conoscere le velocità pre c e post c^* collisione: prendendo come esempio una generica particella test di classe c che impatta con la molecola di classe c_1 , essa avrà velocità c_r rispetto al sistema di riferimento stazionario alla classe c_1 . Il numero di collisioni subite dalla particella test dalle molecole di tale classe 1 è pari alla sezione d'urto differenziale per il numero di molecole 1 presenti nello spazio fisico e per quello di classe c nello spazio delle fasi:

$$n^2 f f_1 c_r \sigma d\Omega d\vec{c}_1 d\vec{c} d\vec{r}$$

L'esistenza delle collisioni inverse, in questo caso d'esempio $c, c_1 \leftarrow c^*, c_1^*$ permette di giungere ad un'analogia espressione per definire il numero di collisioni nell'elemento $d\vec{c}^* d\vec{r}$:

$$n^2 f^* f_1^* c_r^* (\sigma d\Omega)^* d\vec{c}_1^* d\vec{c}^* d\vec{r} \quad (1.13)$$

Come visto in precedenza, nelle collisioni binarie la velocità relativa si conserva e la simmetria tra collisione diretta e inversa permette di definire, in conclusione, la velocità di incremento del numero di molecole di classe \vec{c} nel volume di controllo come risultato di collisioni dirette e inverse di classe $c, c_1 \leftrightarrow c^*, c_1^*$:

$$\xrightarrow{\text{integrando nel phase space}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f^* f_1^* - f f_1) c_r \sigma d\Omega d\vec{c}_1 d\vec{c} d\vec{r} \quad (1.14)$$

Infine, possiamo scrivere l'equazione di Boltzmann, che corrisponde al bilancio sulla velocità di aumento del numero di particelle di classe c , dovuto ai tre fenomeni precedentemente elencati:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf) + \vec{c} \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{c}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f^* f_1^* - f f_1) c_r \sigma d\Omega d\vec{c}_1 \quad (1.15)$$

Il termine a destra è detto *collision integral* ed è in contrasto con la forma parziale differenziale degli altri due termini, generando così la gran parte delle problematiche relative alla soluzione dell'equazione. Inoltre, anche se l'unica variabile dipendente nell'intera equazione è nf , vengono aggiunte le coordinate dello spazio delle velocità alla lista delle variabili indipendenti, rendendo, di fatto, impossibile risolvere analiticamente l'espressione.

1.4 La teoria di Chapman-Enskog

Il metodo di Chapman-Enskog [5] fornisce una soluzione all'equazione di Boltzmann per dei problemi dove la VDF f è perturbata in modo minimale dall'equilibrio, descritto dalla distribuzione di M.B. (1.9). Esprimendo in serie la VDF:

$$f = f^{(0)} + \varepsilon_0 f^{(1)} + \varepsilon_0^2 f^{(2)} + \dots = f_0(1 + \Phi_1 + \Phi_2 + \dots) \quad (1.16)$$

dove il termine ε_0 è deducibile dal mean collision time o dal numero di Knudsen, mentre f_0 rappresenta la distribuzione di Maxwell. La soluzione per l'equazione arrestata al primo ordine $f = f_0(1 + \Phi_1)$ inserita all'interno delle espressioni del tensore degli sforzi e del vettore flusso termico, permette di ricavare le formulazioni del coefficiente di viscosità e della conducibilità termica:

$$\mu = \frac{\frac{5}{8} \sqrt{\pi m k_B T}}{\left(\frac{m}{4k_B T}\right)^4 \int_0^\infty c_r^7 \sigma_\mu \exp\left(-\frac{m c_r^2}{4k_B T}\right) dc_r} \quad (1.17)$$

$$K = \frac{15k_B}{4m} \mu = \frac{15}{4} R \mu \quad (1.18)$$

Il numero di Prandtl per un gas monoatomico, il cui calore specifico a pressione costante vale $c_p = 5R/2$, vale:

$$Pr = \frac{\mu c_p}{K} = \frac{2}{3}$$

La *viscosity cross section* σ_μ varia in funzione del modello collisionale scelto e una volta nota, è possibile inserirla nell'equazione del coefficiente di viscosità

per dedurre il diametro molecolare a una temperatura di riferimento T_{ref} . Ad esempio, per il modello HS e VSS si ottengono i seguenti risultati:

$$d = \sqrt{\frac{5}{16} \frac{\sqrt{\frac{mk_b T_{ref}}{\pi}}}{\mu_{ref}}} \quad (1.19)$$

$$d = \sqrt{\frac{5(\alpha + 1)(\alpha + 2)\sqrt{m/\pi}(\omega T_{ref})^\omega}{16\alpha\Gamma(9/2 - \omega)\mu_{ref}E_t^{\omega-1/2}}} \quad (1.20)$$

1.5 Interazioni Gas-Superficie

L'interazione del flusso con una superficie solida influenza direttamente la VDF, per cui l'equazione di Boltzmann deve essere risolta tenendo conto di ciò (ch.4 [2]). Indicando con v' la velocità delle molecole incidenti e v quella delle particelle riflesse, con $f(v')$ la VDF del bulk incidente, possiamo allora definire il numero di particelle che si scontrano con una superficie unitaria e nell'unità di tempo:

$$-v'_n f(\vec{v}') d^3 \vec{v}' \quad \text{con} \quad v'_n = \vec{v}' \cdot \vec{n} \quad (1.21)$$

con \vec{n} normale alla superficie in direzione del gas.

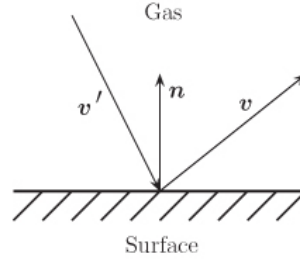


Figura 1.7: Sistema di riferimento per collisione gas-superficie (fig.4.1 [2])

Analogamente, la superficie rifletterà delle molecole pari a:

$$v_n f(\vec{v}) d^3 \vec{v} \quad \text{con} \quad v_n = \vec{v} \cdot \vec{n} \quad (1.22)$$

Definiamo con *scattering kernel* la probabilità di una particella con classe di velocità v' di essere riflessa in un intorno $d^3 \vec{v}$ di classe v :

$$R(\vec{v}', \vec{v}) d^3 \vec{v} \quad (1.23)$$

Moltiplicando l'espressione precedente (1.21) per tale probabilità e integrando nell'intervallo di velocità incidente si ottiene lo stesso risultato dell'equazione (1.22):

$$v_n f(\vec{v}) = - \int_{v'_n \leq 0} v'_n f(\vec{v}') R(\vec{v}', \vec{v}) d^3 \vec{v}' \quad (1.24)$$

permettendo, così, di avere una relazione tra la VDF incidente e quella riflessa. Dato che per una superficie impermeabile la particella incidente viene sempre riflessa, allora la somma di tutte le probabilità è unitaria, con lo scattering kernel normalizzato come:

$$\int_{v_n \geq 0} R(\vec{v}', \vec{v}) d^3 \vec{v}' = 1 \quad (1.25)$$

Inoltre, la funzione scattering kernel soddisfa una proprietà aggiuntiva, detta di reciprocità, valida per superfici in equilibrio locale:

$$v'_n \exp\left(-\frac{v'^2}{v_w^2}\right) R(\vec{v}', \vec{v}) = -v_n \exp\left(-\frac{v^2}{v_w^2}\right) R(-\vec{v}', -\vec{v})$$

con $v_w = \sqrt{2k_B T_w / m}$ *most probable speed* MPS relativa alla temperatura di parete.

1.5.1 Diffuse-Specular Kernel

Nel caso di collisione diffusiva si applica la diffuse scattering o cosine law:

$$R_d(\vec{v}', \vec{v}) = \frac{2v_n}{\pi v_w^4} \exp\left(-\frac{v^2}{v_w^2}\right) \quad (1.26)$$

ovvero le particelle possono essere diffuse in ogni direzione e in maniera indipendente dalla velocità di collisione. Tale interazione è detta anche accomodazione completa ed è adatta a casi reali dove la superficie è ruvida e con gas adsorbito. Dalla relazione (1.24) si ottiene una VDF Maxwelliana della temperatura di parete.

Nel caso opposto invece abbiamo la riflessione speculare, dove la componente tangenziale di velocità non varia, mentre quella normale cambia di segno:

$$R_s(v_n, \vec{v}_t) = \delta(\vec{v}'_t - \vec{v}_t) \delta(v'_n + v_n) \longrightarrow f(v_n, \vec{v}_t) = f(-v'_n, \vec{v}'_t)$$

Nella realtà non si verifica mai tale tipologia di collisione, ma avviene un accomodazione parziale, dove le molecole in parte sono diffuse α_d e in parte

sono riflesse specularmente ($1 - \alpha_d$). Lo scattering kernel sarà quindi una combinazione lineare dei due modelli precedentemente esposti. Si ottiene la seguente VDF per le particelle riflesse:

$$f(\vec{v}) = \alpha_d \frac{n_r}{(\sqrt{\pi}v_w)^3} \exp\left(-\frac{v^2}{v_w^2}\right) + (1 - \alpha_d)f(-v'_n, \vec{v}'_t) \quad (1.27)$$

1.5.2 Cercignani-Lampis Kernel

Il precedente kernel, anche se ampiamente usato nelle simulazioni, mostra contraddizioni con i casi sperimentali: per tale motivo, Cercignani e Lampis [7] proposero un modello con due parametri variabili:

$$R_{CL}(\vec{v}', \vec{v}) = \frac{2v_n}{\pi v_w^4 \alpha_n \alpha_t (2 - \alpha_t)} \exp\left[-\frac{(\vec{v}_t - (1 - \alpha_t)\vec{v}'_t)^2}{v_w^2 \alpha_t (2 - \alpha_t)} - \frac{v_n^2 + (1 - \alpha_n)v_n'^2}{v_w^2 \alpha_n}\right] \cdot \mathcal{I}_0\left(\frac{2\sqrt{1 - \alpha_n}v_n v_n'}{v_w^2 \alpha_n}\right) \quad (1.28)$$

con \mathcal{I}_0 funzione di Bessel del primo tipo e di ordine zero:

$$\mathcal{I}_0(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m!)^2} \left(\frac{z}{2}\right)^{2m} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(z \sin \theta) d\theta \quad (1.29)$$

I coefficienti $0 \leq \alpha_n \leq 1$ e $0 \leq \alpha_t \leq 2$, se entrambi nulli, producono una VDF valida per il caso di riflessione speculare, mentre se entrambi unitari, forniscono il caso diffusivo. Il caso $\alpha_n = 0, \alpha_t = 2$ è quello di back-scattering, che non può essere descritto dal modello speculare-diffusivo.

1.5.3 Coefficienti di accomodamento

Non è sempre necessario conoscere la densità di probabilità dello scattering kernel, ma conoscendo le quantità integrali, come il coefficiente di accomodamento AC, per risolvere il problema di interazione gas-superficie. L'AC è definito come:

$$\alpha(\Psi) = \frac{J_n^{(i)}(\Psi) + J_n^{(r)}(\Psi)}{J_n^{(i)}(\Psi) + J_n^{(diff)}(\Psi)} \quad (1.30)$$

dove J_n è il flusso incidente, riflesso o diffuso, per la generica grandezza Ψ . Ad esempio per l'energia cinetica $\Psi(\vec{v}) = mv^2/2$, il coefficiente diffusivo sarà l'energy AC. Si ottengono i seguenti risultati per i vari modelli di scattering:

- Speculare

$$J_n^{(r)}(\Psi) = -J_n^{(i)}(\Psi) \longrightarrow \alpha = 0$$

- Diffuso

$$J_n^{(r)}(\Psi) = J_n^{(diff)}(\Psi) \longrightarrow \alpha = 1$$

- Diffuso-speculare

$$J_n^{(r)}(\Psi) = \alpha_d J_n^{(diff)}(\Psi) - (1 - \alpha_d) J_n^{(i)}(\Psi) \longrightarrow \alpha = \alpha_d$$

- CL

$$\text{Per } \Psi = mv_t \rightarrow J_n^{(r)} = -(1 - \alpha_t) J_n^{(i)} \longrightarrow \alpha = \alpha_t$$

ossia il parametro α_t assume il significato fisico di coefficiente di accomodamento per la quantità di moto tangenziale.

$$\text{Per } \Psi = mv_n^2/2 \rightarrow J_n^{(r)} = -(1 - \alpha_t) J_n^{(i)} + \alpha_n J_n^{(diff)} \longrightarrow \alpha = \alpha_n$$

quindi il parametro α_n è fisicamente l'AC dell'energia cinetica in direzione normale delle particelle.

I coefficienti di accomodamento sono tipicamente estratti da dati sperimentali, come flussi attraverso capillari o scambi di calore con flussi rarefatti. Alcuni valori sono riportati nella tabella seguente:

Gas	α_d		
	a	b	c
He	0.71	0.71	0.96
Ne	0.80		
Ar	0.88	0.87	0.98
Kr	0.92	0.92	1.00

Tabella 1.1: Coefficienti α_d per diversi gas nobili (tab.4.1 [2])

con a, b e c ad indicare la tecnica di rifinitura superficiale, rispettivamente; a e b, alluminio e titanio puliti atomicamente, c titanio ricoperto da ossigeno.

Capitolo 2

Anemometri a filo caldo

2.1 Generalità sugli HWA

Gli anemometri a filo caldo (HWA hot wire anemometers) [8], vedono la loro applicazione per la misura della velocità specialmente in flussi turbolenti per la loro elevata risposta in frequenza.

L'anemometro base è costituito da un filo metallico sorretto da due supporti percorso da corrente elettrica, quindi riscaldato per effetto Joule, e viene raffreddato dal flusso esterno che lo lambisce: visto che la resistenza elettrica del filo varia con la temperatura, attraverso la lettura delle variazioni della differenza di potenziale alle estremità della sonda è possibile dedurre la velocità del flusso esterno con accuratezza elevata ed un'elevata frequenza, a patto di una calibrazione ottimale.

A confronto con gli altri strumenti di misura della velocità, quali i PIV (Particle Image Velocimetry) o i LDA (Laser Doppler Anemometer), l'output analogico ha un'elevata risoluzione temporale che permette una successiva analisi spettrale del segnale.

Un altro aspetto di significativa importanza è il costo relativamente basso dei materiali e della fabbricazione di queste sonde, solitamente costituiti da Tungsteno, Platino o leghe di Platino-Iridio, Platino-Rhodio. L'uso di tali elementi per il filo è giustificato dalla legge lineare che lega la resistenza elettrica e la temperatura:

$$R_w = R_a [1 + \alpha(T_w - T_a)] \quad (2.1)$$

dove R_a è la resistenza alla temperatura di riferimento T_a , mentre $\alpha[K^{-1}]$ è il coefficiente termico della resistenza. L'idea è quella di usare materiali con un elevato valore di α per aumentare la sensibilità a piccole variazioni di temperatura, oltre ad avere una buona resistenza meccanica e una buona lavorabilità.

- Il Tungsteno rispetta le caratteristiche appena elencate, ma non può essere utilizzato ad elevate temperature in quanto si ossida facilmente a contatto con l'aria;
- Il Platino ha lo svantaggio di avere una bassa resistenza meccanica, specialmente a temperature elevate, di contro ha una buona resistenza all'ossidazione e un alto valore di α ;
- La lega di Platino-Rodio è un compromesso tra Platino e Tungsteno, con una buona resistenza all'ossidazione e buone proprietà meccaniche, ma un basso coefficiente termico della resistenza.

	Breaking stress $\times 10^{-4}$ (Ncm ⁻²)	Maximum temperature (°C)	Soft-solderable	Weldable	Available as Wollaston wire	Minimum diameter (μ m)	$\alpha(K^{-1})$	Resistivity at 0°C $\times 10^6$ Ω (cm)	Thermal conductivity at 0°C (Wcm ⁻¹ K ⁻¹)
Tungsten	20 ÷ 25	300 (oxidizes) melting point 3382	No	Yes if plated	No	2.5 ÷ 3.8	0.0035 ÷ 0.0047	4.9 ÷ 5.5	1.9
Platinum	2 ÷ 3.6	800 ÷ 1200 melting point 1800	Yes	Yes	Yes	1.0 ÷ 1.25	0.0030 ÷ 0.0038	9.8 ÷ 10	0.7
Platinum-iridium (80/20)	7	750	Yes	Yes		38	0.00085	32	0.2
Platinum-rhodium (90/10)	6	1400 melting point 1600	Yes	Yes	Yes	0.6	0.0016	9	0.4

Figura 2.1: Materiali per HWA (tab 3.1 [8])

Come detto in precedenza, il filo è retto da due supporti metallici a forma di ago e ha un diametro dell'ordine dei micrometri (tipicamente $5 - 6\mu m$) per permettere una rapida risposta alle variazioni di temperatura, mentre la lunghezza è limitata dalla risoluzione spaziale che si vuole ottenere e dai fenomeni aerodinamici: tipicamente si cerca la velocità in un unico punto, e per tale motivo la lunghezza deve essere anche minore della dimensione dei vortici presenti nel flusso. A tal proposito si usano delle sonde estremamente piccole (miniature probe) con lunghezza del filo dell'ordine dei mm . Le dimensioni eccessivamente piccole del filo introducono però il problema relativo all'interferenza aerodinamica con i supporti, che viene risolto usando un filo

più lungo (circa 3mm) con parte attiva nella sola zona centrale. Tali sonde sono utilizzate in flussi con intensità turbolenta fino al 25%.

Applicando un bilancio energetico al filo:

$$\frac{c_w dT_w}{dt} = W - \dot{Q} \quad (2.2)$$

dove c_w è il calore specifico del filo, W è la potenza elettrica fornita, \dot{Q} è la potenza termica scambiata con l'ambiente esterno, attraverso i meccanismi di convezione, conduzione e radiazione.

In prima analisi, si può trascurare lo scambio radiativo, in quanto le temperature operative del filo sono relativamente basse (fino a 300K) e non eccessivamente alte rispetto alla temperatura ambiente.

Il fenomeno conduttivo tra filo e supporti, i quali hanno un diametro molto più grande rispetto al filo per motivi meccanici e di surriscaldamento dovuto al passaggio della corrente, è apprezzabile, ma resta complicato effettuare una valutazione teorica, specialmente quando sono presenti fluttuazioni di velocità ed è necessario calibrare ogni singola sonda. Di fatto, la distribuzione di temperatura lungo il filo è funzione della coordinata z lungo l'asse:

$$1 - \frac{\cosh z/l_c}{\cosh l/2l_c}$$

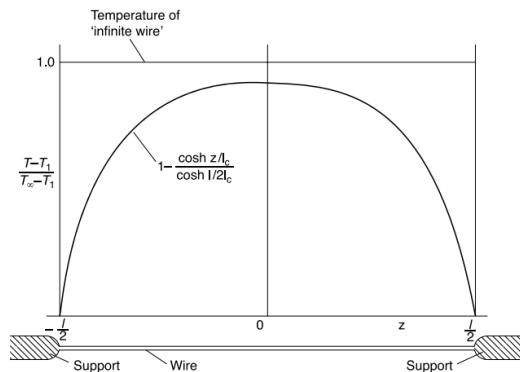


Figura 2.2: Distribuzione di temperatura lungo HWA (fig. 3.6 [8])

Si riscontra una regione centrale dove la temperatura è circa costante e delle zone di disturbo alle estremità, dove si registra un calo della grandezza.

Le distribuzioni di temperatura tendono a diventare paraboliche andando a ridurre la lunghezza caratteristica del filo l/d .

La convezione libera è solitamente trascurabile, a parte i casi dove:

$$Re_d > 2\sqrt[3]{Gr} \quad \text{dove} \quad Gr = \frac{d^2 \beta g (T_w - T_a)}{\nu^2}$$

con Gr numero di Grashof, che misura l'importanza della convezione naturale rispetto alla diffusione viscosa in un fluido, β è il coefficiente termico di espansione del gas, Re_d è il numero di Reynolds riferito al diametro del filo. Con i valori tipici solitamente $Gr \approx 5 \cdot 10^{-6}$ quindi già a velocità di 5cm/s la convezione libera può essere trascurata.

La convezione forzata è quella che gioca un ruolo fondamentale nello scambio termico tra sonda e ambiente: il filo può essere schematizzato come un cilindro di diametro d e altezza l , con $d/l \ll 1$, posto in direzione perpendicolare alla velocità U . La potenza termica scambiata per convezione forzata vale:

$$\dot{Q} = hA(T_w - T_a) = \pi l Nu_d \lambda (T_w - T_a) \quad (2.3)$$

con $h[W/(m^2 \cdot K)]$ coefficiente di convezione o di scambio termico, $A = 2\pi r l$ è la superficie laterale del filo, $Nu_d = hd/\lambda$ è il numero di Nusselt riferito al diametro e $\lambda[W/(m \cdot K)]$ è il coefficiente di conducibilità termica del fluido. Nell'equazione precedente si sono applicate due importanti ipotesi semplificative:

- Il filo è così sottile da poter assumere la temperatura interna pari a quella superficiale;
- Il flusso è incompressibile $M \ll 1$, quindi la temperatura adiabatica a parete T_a coincide con la temperatura statica del gas.

In seguito, il numero di Nusselt può essere scritto come una funzione del numero di Reynolds e del numero di Prandtl, sotto le ipotesi di cilindro infinito $d/l \rightarrow \infty$ e moto laminare $Re_d < Re_{d,cr}$:

$$Nu_d = 0.42Pr^{0.2} + 0.57Pr^{0.33}Re_d^{0.5} = a_1 + b_1\sqrt{Re_d} \quad (2.4)$$

dove le costanti a_1 e b_1 dipendono dalla calibrazione e dalla specifica sonda. Sostituendo all'interno dell'equazione (2.3):

$$\dot{Q} = \pi l \lambda \left(a_1 + b_1\sqrt{Re_d} \right) (T_w - T_a) = \pi l \lambda \left(a + \sqrt{U} \right) (T_w - T_a) \quad (2.5)$$

Si deduce da tale relazione che gli anemometri possono essere utilizzati non solo per misurare la velocità, ma anche altri parametri fluidodinamici, come la temperatura, la conducibilità termica, la pressione e i flussi termici.

Nel caso stazionario, dal bilancio sulla potenza al filo, segue che la potenza termica scambiata con il fluido è equivalente alla potenza elettrica dissipata per effetto Joule:

$$W = I^2 R_w = \frac{V^2}{R_w} \quad (2.6)$$

Sostituendo all'interno dell'equazione precedente (2.5) si ottiene la **Legge di King**:

$$I^2 R_w = \frac{V^2}{R_w} = \pi l \lambda (a + \sqrt{U}) (T_w - T_a) \quad (2.7)$$

che può essere scritta anche in termini di *overheating ratio*:

$$\frac{R_w - R_a}{R_a} = \alpha (T_w - T_a) \longrightarrow I^2 R_w = \frac{V^2}{R_w} = (a + b\sqrt{U}) \frac{R_w - R_a}{\alpha R_a} \quad (2.8)$$

la quale mette in diretta relazione le 3 variabili di interesse: velocità U , corrente I e resistenza elettrica R_w .

Nel caso in esame si vuole relazionare la velocità a un singolo parametro e, per tale motivo, si hanno due possibili strade:

- Mantenere costante la temperatura e quindi la resistenza del filo, permettendo variazioni della corrente elettrica $U = f(I)$ *constant temperature anemometer* **CTA**;
- Mantenere costante la corrente del filo, permettendo variazioni della temperatura del filo e, di conseguenza, della sua resistenza $U = f(T_w \text{ o } R_w)$ *constant current anemometer* **CCA**;

Differenziando l'equazione precedente (2.8) nel caso di corrente costante abbiamo un comportamento inversamente proporzionale di V rispetto a U , mentre positivo nel caso di temperatura costante. In entrambi i casi, la sensibilità diminuisce con la velocità.

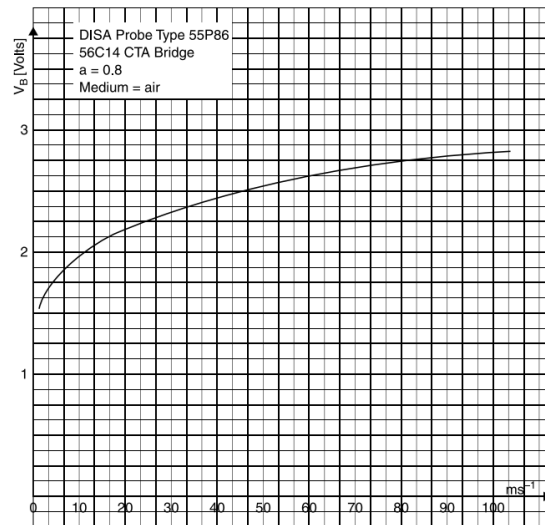


Figura 2.3: Curva di calibrazione per CTA (fig. 3.7 [8])

2.2 Constant Temperature Anemometer CTA

In un anemometro a temperatura costante viene eliminata l'inertza termica dello strumento, a differenza del caso CCA, grazie all'introduzione di un circuito di regolazione della corrente.

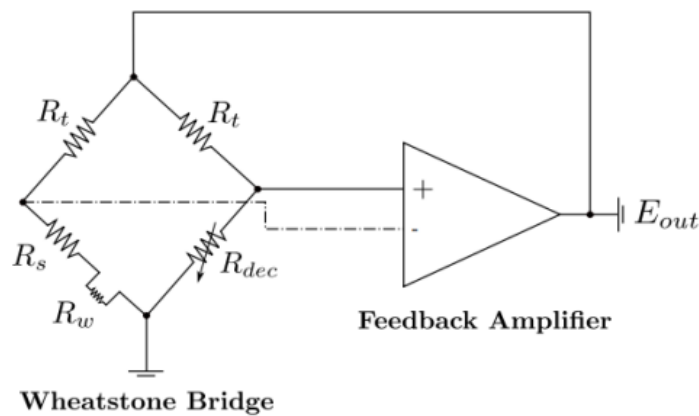


Figura 2.4: Schema elettrico del CTA (fig. 2.2 [17])

Il filo è posto in un braccio di un ponte Wheatstone in opposizione ad una

resistenza variabile R_{dec} , la quale è connessa ad un servo-amplificatore, mentre le altre resistenze del ponte R_t sono costanti. L'input dell'amplificatore corrisponde alla differenza di potenziale attraverso la diagonale del ponte: se la velocità del flusso aumenta, allora lo scambio di calore con il filo aumenta e il sensore tende a diminuire la propria temperatura e resistenza; interviene allora l'amplificatore inviando maggior corrente in modo da mantenere la stessa resistenza. Se il servo-amplificatore ha un guadagno sufficiente, allora sarà in grado di controllare il segnale di input in modo da avere un ponte bilanciato ad ogni variazione di resistenza del sensore.

La costante di tempo di un CTA rappresenta l'intervallo necessario allo strumento per adattarsi ad una variazione del flusso esterno e dipende dalle proprietà termiche del sensore e del fluido, dall'overheating ratio, dal coefficiente termico della resistenza, dalla velocità del fluido, dal guadagno, dalle resistenze del ponte e dalla banda dell'amplificatore. Per tali motivi, la *time constant* viene dedotta per via sperimentale e tipicamente si aggira tra frazioni di *ms* fino a raggiungere in alcuni casi i μs .

2.3 HWA in flussi compressibili e rarefatti

Nel caso di flussi rarefatti la legge di King (2.8) perde validità, o per meglio dire, cambia formulazione. In effetti, il bilancio energetico è identico al caso continuo, ma non possono essere adottate le ipotesi semplificative che portavano ad ottenere il Nusselt come unica funzione del Reynolds e del numero di Prandtl. Il potenziale per un CTA può essere espresso come:

$$\frac{V_w^2}{R_w} = \pi l_w k (T_w - T_{ad,w}) Nu \quad (2.9)$$

Essendo il Nusselt una funzione $Nu = f(Re, M, Pr, Gr, \alpha, \beta, \tau_w, l_w/d_w)$ segue che:

$$V_b = f(\rho, U, \alpha, \beta, T_w, T_0, l_w, d_w) \quad (2.10)$$

Eliminando la dipendenza dalle variabili costanti, che sono rispettivamente la temperatura e la geometria del filo, abbiamo:

$$V_b = f(\rho, U, \alpha, \beta, T_0) \quad (2.11)$$

La legge di King:

$$V_b^2 = A + BU^2 \quad (2.12)$$

è valida sotto delle specifiche condizioni di flusso, il quale deve essere isoter-
mo, incompressibile e perpendicolare alla sonda, per eliminare le dipenden-
ze da ρ, T_0, α, β . Nei regimi compressibili $0.3 \leq M \leq 1$, accantonando la
dipendenza dalla direzionalità del flusso, si avrà una sensitività del poten-
ziale, non solo alla velocità, ma anche alla densità e alla temperatura totale
 $V_b = f(U, \rho, T_0)$. Alcuni autori come Bofundi e Fontaneto [10], Cuckurel et al
[11], Biondi [12] e Lousada [13] studiarono la dipendenza da queste variabili
e proposero come risultato una correlazione del Nusselt espressa in funzione
del Reynolds relativo al diametro del filo e al Knudsen, basandosi su un flusso
di massa adimensionale ρu .

$$Nu = f(Re_w, Kn) = f(Re_w, M)$$

Questa tipologia di approccio del problema mostra però un limite relativa-
mente al disaccoppiamento delle variabili densità e velocità.

L'analisi di sensitività nei regimi compressibili e rarefatti, viene dedotta an-
dando a differenziale logaritmicamente l'equazione (2.11) per il caso di filo
perpendicolare alla direzione del flusso:

$$\frac{V'_b}{V_b} = S_u \frac{u'}{u} + S_\rho \frac{\rho'}{\rho} + S_{T_0} \frac{T'_0}{T_0} \quad (2.13)$$

con le sensitività dello strumento che possono essere calcolate nel seguente
modo:

$$\begin{aligned} S_\rho &= \left(\frac{\partial V_b}{\partial \rho} \right)_{u, T_0 = \text{cost}} \\ S_u &= \left(\frac{\partial V_b}{\partial u} \right)_{\rho, T_0 = \text{cost}} \\ S_{T_0} &= \left(\frac{\partial V_b}{\partial T_0} \right)_{u, \rho = \text{cost}} \end{aligned} \quad (2.14)$$

2.4 Applicazioni degli HWA nelle turbomacchine

All'interno delle turbomacchine per uso aeronautico, nell'ingresso delle Low
Pressure Turbine LPT, nei canali dei flussi secondari o nell'intercapedine al
tip delle pale, possono verificarsi delle condizioni di basso Knudsen locale, le
quali, causano l'alterazione dello scambio termico con le superfici circostanti.

Gli HWA, come sottolineato in precedenza, sono adottati principalmente per la lettura delle fluttuazioni dei campi di moto, pressione e temperatura all'interno di flussi turbolenti, per questo una delle loro applicazioni principali è quella di delineare l'effetto delle wake delle palette sia di turbina che di compressore, misurando l'intensità turbolenta Ti , il profilo di velocità a valle. All'uscita dei canali secondari, invece, gli HWA rilevano le caratteristiche dei vortici e le perdite per mixing; mentre al tip delle palette sono valutate le perdite aerodinamiche e l'interferenza dei vortici del tip con il flusso principale.

Capitolo 3

Sparta DSMC

3.1 Metodi Monte Carlo

I metodi Monte Carlo (MCM) [14] sono una classe di tecniche numeriche usate in differenti ambiti per trovare soluzioni a problemi matematici o fisici che sarebbero troppo complessi da trattare in modo deterministico. Il concetto di base è di non andare alla ricerca della soluzione analitica esatta, ma di costruire un modello del sistema e farlo evolvere con un grande numero di prove casuali, per poi dedurre da esse le grandezze di interesse, le quali saranno delle medie statistiche.

Tali metodi si basano su un algoritmo di generazione casuale di numeri tra loro non correlati, che seguono la distribuzione di probabilità che si suppone abbia il fenomeno in esame. Essi hanno la seguente struttura di base:

- Definizione del dominio delle variabili;
- Generazione randomica delle variabili, tramite una distribuzione di probabilità definita sul dominio;
- Calcolo deterministico dell'output;
- Accumulo e ripetizione delle prove per scoprire il singolo risultato finale.

Il principio di probabilità su cui si fondano i MCM (*Monte Carlo Methods*) è la legge dei grandi numeri LLN, la quale studia la convergenza in probabilità delle medie aritmetiche di sequenze di variabili aleatorie. In particolare, elenchiamo due delle LLN più rilevanti:

- LLN di Chebyshev: data una sequenza di variabili aleatorie v.a. $\{X_n\}$ identicamente distribuite, se le v.a. hanno un secondo momento, ovvero la media del quadrato del valore atteso, $E(X_1^2) < \infty$, allora detto $\mu = E(X_1) < \infty$:

$$\overline{X}_n \xrightarrow{P} \mu \quad (3.1)$$

- LLN di Khinchine: identica alla definizione precedente, ma relativa al valore atteso della sequenza $\mu = E(X_1) < \infty$

Lo schema matematico di base dei MCM è il seguente:

$$E[f(X)] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \quad (3.2)$$

con f funzione misurabile.

Il calcolo dell'errore è fondamentale per poi misurare la probabilità $P(|X_n - \mu| \leq \varepsilon)$. Grazie al teorema del limite centrale CLT si può effettuare tale computazione anche per un elevato numero di campioni. Data una sequenza di variabili aleatorie $\{X_n\}$ identicamente distribuite con $E(X_1^2) < \infty$ e varianza $\sigma^2 > 0$, allora vale:

$$\frac{\sqrt{n}}{\sigma} (\overline{X}_n - \mu) \xrightarrow{D} \mathcal{N}(0,1) \quad (3.3)$$

con \mathcal{N} distribuzione gaussiana standardizzata. Dal CLT si ricava:

$$P(|X_n - \mu| \leq \varepsilon) \approx 2\Phi\left(\frac{\sqrt{n}\varepsilon}{\sigma}\right) - 1 \quad (3.4)$$

con $\Phi(z) = P(Z \leq z)$ funzione di distribuzione cumulativa della variabile normale standard Z .

Per quanto riguarda la generazione di numeri casuali ci si affida ad un *random number generator* RNG, che è un dispositivo o software in grado di generare un stringa di numeri o simboli che non può essere predetta con probabilità migliore della scelta casuale. I dispositivi hardware si basano su fenomeni termici o quantistici, i quali hanno alcune problematiche relative alla modellizzazione matematica del fenomeno e alla riduzione dell'entropia a causa di attacchi esterni, ma restano, ad oggi, gli RNG più efficaci. I software di generazione casuale o *Pseudo Number Generator* PRNG, producono stringhe di numeri tramite un algoritmo, partendo da un valore specifico iniziale detto *seed*. Si osserva che partendo da un stesso seed avremo la stessa sequenza di numeri e dopo una certa soglia, l'algoritmo ripeterà la sequenza. I più importanti sono il Middle-square method e il Linear Congruential generator.

3.2 Direct Simulation Monte Carlo

Prima di elencare le azioni svolte dal software Sparta, si esporrà il metodo numerico DSMC *Direct Simulation Monte Carlo*, sviluppato da G.A. Bird [1]. Il metodo consiste nella simulazione numerica del moto delle particelle e della loro interazione reciproca e con le superfici. In primo luogo, viene definito il dominio o regione dove risiede il flusso da simulare; poi viene definita una griglia di calcolo costituita da più celle, in modo da non avere salti eccessivi delle proprietà del flusso tra una cella e quella adiacente; successivamente, vengono introdotte le particelle simulate, che si specifica essere rappresentative di un numero pari a F_{num} di particelle reali, ognuna con posizione e velocità casuali estratte dal RNG; in conclusione, si avanza di un intervallo di tempo Δt , con il moto e le collisioni delle molecole disaccoppiate secondo la procedura seguente:

1. Moto uniforme della particella:

$$\vec{r}_{i,new} = \vec{r}_{i,old} + \vec{v}_i \Delta t \quad (3.5)$$

Se lungo la traiettoria la particella incontra una superficie, allora verrà attuata una simulazione di collisione gas-superficie, la quale produrrà un nuovo vettore velocità \vec{v}_i . Invece, se la traiettoria esce dal dominio, le informazioni relative alla particella verranno eliminate.

2. Viene simulato un numero rappresentativo di collisioni intermolecolari.
3. Calcolo delle proprietà macroscopiche del flusso.

Il metodo DSMC utilizza molte distribuzioni di probabilità: quella di Poisson per inizializzare le particelle nel dominio, quella di Maxwell-Boltzmann per le componenti di velocità. Serve un unico generatore uniforme di numeri casuali R_f sull'intervallo (0,1), poiché le altre distribuzioni si ottengono attraverso 2 metodi principali: inversione della funzione cumulativa di distribuzione e metodo di accettazione/rifiuto. Nel primo si va a normalizzare una funzione di distribuzione nel range di interesse $[a, b]$ e poi si inverte la funzione cumulativa $F(x)$, ove possibile per generare il set di valori x da dare in input:

$$\int_a^b f(x)dx = 1 \longrightarrow F(x) = \int_a^x f(y)dy \longrightarrow x = F^{-1}(R_f) \quad (3.6)$$

Nel secondo metodo, principalmente usato dove la funzione cumulativa di distribuzione non è invertibile, il set di valori in input viene generato in modo

uniforme nell'intervallo di interesse, ma viene considerato solo se soddisfa un requisito relativo alla DF:

$$x = a + (b - a)R_f \iff \frac{f(x)}{f_{max}} > R_f$$

con f_{max} pari al valore massimo della funzione di distribuzione.

Per le collisioni tra particelle, viene definita in ogni cella un tasso massimo di collisione $R_{max} = R(N, V, \sigma, \max(v_r))$, la cui funzione esplicita dipende dal potenziale intramolecolare usato. Ad esempio per HS:

$$R(N, V, \sigma, v_r) = \frac{N(N - 1)\sigma v_r}{2V} \quad (3.7)$$

con $N, V, \sigma = \pi d^2, v_r$ rispettivamente numero di particelle, volume, sezione d'urto e velocità relativa. Vengono performate ad ogni timestep $R_{max}\Delta t$ collisioni, scegliendo le 2 particelle in modo random e sono accettate come coppia collidente con probabilità R/R_{max} .

Come visto nel paragrafo 1.1, una volta selezionate le due particelle, vengono calcolate le componenti di velocità post collisione attraverso la conservazione della quantità di moto relativamente al centro di massa e alla conservazione dell'energia. Tali equazioni permettono il calcolo di sole 4 componenti delle 6 totali e per questo è necessario conoscere l'angolo di scattering, che viene selezionato in modo isotropo sulla sfera unitaria:

$$\cos\chi = 2 \left(\frac{b}{d}\right)^{\frac{2}{\alpha}} - 1 = 2R_f^{\frac{1}{\alpha}} - 1 \quad (3.8)$$

L'implementazione delle condizioni a contorno è di fondamentale importanza per stabilire una corretta simulazione dinamica della particella simulata. Le superfici a contorno del dominio computazionale possono essere principalmente di 4 tipi:

- Periodica, dove la particella esce da una faccia e rientra in quella opposta;
- Speculare, dove avviene riflessione elastica con inversione della componente normale della velocità;
- Parete termica, le componenti normali delle velocità vengono impostate in accordo con una distribuzione di Maxwell distorta:

$$f(v_{\perp}) = \frac{m}{k_B T_w} v_{\perp} e^{-\frac{mv_{\perp}^2}{2k_B T_w}} \quad (3.9)$$

mentre quelle parallele seguono la distribuzione di Maxwell-Boltzmann standard. Ovviamente, la superficie può essere non completamente accomodante, allora, una frazione α di particelle verrà termalizzato mentre la restante sarà riflessa specularmente;

- Inflow/Outflow, dove le particelle vengono rispettivamente immesse o cancellate dal dominio. Il numero di particelle immesse e le loro proprietà sono scelte in base agli input forniti (densità, temperatura, F_{num})

Lo *statistical scatter* o rumore statistico delle quantità macroscopiche calcolata rappresenta un punto delicato del metodo DSMC. Anche in condizioni di equilibrio termodinamico il sistema DSMC presenta delle fluttuazioni casuali, molto maggiori rispetto alle fluttuazioni naturali di un gas reale, di temperatura, densità, ecc..., dovute al fatto che tali grandezze sono calcolate attraverso un numero finito di particelle campione e su un altrettanto limitato intervallo di tempo. Da un punto di vista quantitativo, tale rumore segue una distribuzione di probabilità di Poisson e la deviazione standard delle grandezze mediate decresce all'incirca con la radice quadrata del numero di campioni $1/\sqrt{N}$. Inizialmente, il metodo DSMC era stato elaborato per problemi di aerotermodinamica supersonica, dove il rumore statistico risulta essere molto basso rispetto ad un caso subsonico, dove, invece, sono richiesti un numero sufficientemente grande di campioni.

3.3 Sparta DSMC

Il software SPARTA [15], *Stochastic PARallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer*, consiste in un codice DSMC che modella gas rarefatti, simulando collisioni, processi chimici, interazioni con superfici e modelli per condizioni a contorno. SPARTA è stato sviluppato da Steve Plimpton e Michael Galis nei Sandia National Laboratories ed è ideato per girare su computer in parallelo, ma funziona anche per soluzioni su un unico processore. Il codice è open-source e distribuito secondo la licenza pubblica GNU, rendendo possibile le modifiche del codice da parte dell'utente.

SPARTA utilizza griglie cartesiane gerarchiche, le quali possono essere strutturate a più livelli ove richiesto, e implementa oggetti come superfici triangolate che vengono immerse nella mesh tramite metodo cut-cell. Come vedremo in seguito, definire la griglia adeguatamente è di fondamentale importanza per il corretto funzionamento degli algoritmi di preallocazione, collisione e

reazione delle particelle. Inoltre, alcune funzionalità del programma permettono di raffinare la griglia nell'intorno di una superficie, in modo da ottenere statistiche sulle interazioni gas-parete più accurate.

L'eseguibile sparta legge un file di input, dove vengono definite le caratteristiche del problema da simulare e quali azioni di calcolo svolgere o post-processing svolgere. In input si seleziona le scelta riguardo a:

- Dominio (tra 2D,2D assialsimmetrico e 3D), condizioni a contorno, inizializzazione ed emissione delle particelle;
- Geometria, dimensione delle dominio, generazione della mesh, creazione/import delle superfici;
- Modello collisionale e chimico del gas, VSS, VHS, HS per le collisioni TCE e QK per la chimica;
- Modello collisionale e chimico gas-superficie, riflessione speculare o diffusiva;
- Diagnostica, calcolo delle statistiche per cella, per superficie e per superficie a contorno e media temporale di esse.
- Output, file di restart, log, dump, immagini o video.

Di seguito, per comprendere meglio i comandi principali di SPARTA, viene proposto uno script di input semplificato per un flusso 2D attorno a un cilindro:

```
#####
# 2d flow around a circle
#####

seed                12345
dimension           2
global              gridcut 0.0 comm/sort yes

boundary            o r p      # o is outflow p is
    periodic r is specular reflection a is axi-
    symmetric s is treat boundary as a surface

create_box          0 10 0 10 -0.5 0.5
create_grid         20 20 1
balance_grid        rcb cell
```

```

global          nrho 1.0 fnum 1e-3

species         air.species N 0
mixture        air N 0 vstream 100.0 0 0

read_surf      data.circle
surf_collide   1 diffuse 300.0 0.0
surf_modify    all collide 1

collide        vss air air.vss

fix            in emit/face air xlo twopass

timestep       0.0001

dump           2 image all 50 image.*.ppm type type
  pdiam 0.1 &
  surf proc 0.01 size 512 512 zoom
  1.75 &
  gline yes 0.005 # visualizzazione
  griglia yellow
dump_modify    2 pad 4

compute 9 property/surf all area normx normy
dump 4 surf all 100 tmp_surf.* id c_9[*]

stats          100
stats_style    step cpu np nattempt ncoll nscoll
  nscheck

restart 200 restart.*

run            1000

```

Il comando *seed* serve a impostare il "seme" o numero master utilizzato per la generazione randomica di numeri casuali. Cambiando il seed la simulazione è differente, ma statisticamente uguale. Con *dimension* si definisce la dimensione del dominio (2 o 3). *global* svolge differenti funzioni fondamentali: in tal caso con *gridcut* si imposta la dimensione entro la quale un singolo processore detiene informazioni riguardo alle ghostcell, ossia celle che non sono nella regione di competenza ma direttamente vicine, permettendo un interscambio di dati migliorato. Invece, con *nrho* si specifica la number density,

numero di particelle per unità di volume del gas reale, e con $fnum$ il rapporto di simulazione, ossia:

$$F_{num} = \frac{N_{real}}{N_{sim}} \quad (3.10)$$

boundary definisce la tipologia delle superfici di contorno del dominio, o per outflow, p per periodico, r per riflessione speculare, a per contorno assialsimmetrico, s per trattare il contorno come una superficie. *create_box* definisce le dimensioni del dominio computazionale, mentre *create_grid* la griglia gerarchica cartesiana. *balance_grid* ridistribuisce le celle tra i processori e il carico computazionale. La scelta delle specie chimiche e del miscela viene svolta dai comandi *species* e *mixture*, mentre la tipologia di collisione molecolare da *collide*. Si rimanda per questi comandi a file secondari contenenti le proprietà di ogni specie chimica necessarie al funzionamento del modello scelto. Per la superficie e la sua interazione col gas si usano *read_surf*, *surf_collide*, *surf_modify*, con lettura da un file di superficie esterno, scelta tra modello diffusivo con annessa temperatura superficiale e coefficiente di accomodamento e assegnazione del modello di interazione alle rispettive superfici. *fix*, come global, svolge molteplici funzioni e in questo caso è usato per definire la condizione di emissione della miscela dalla parete verticale sinistra *xlo*. Il *timestep* definisce l'intervallo temporale di uno step e vedremo in seguito che sarà di fondamentale importanza per la stabilità. Con *dump* e *dump_modify* si imposta la tipologia di file, immagine o video da far generare a sparta, impostando la frequenza, dimensioni, struttura, ecc... **compute** permette il calcolo di varie grandezze, in tal caso relativamente alla superficie *property surf*. Infine, vengono stabilite la frequenza e la forma delle statistiche (che verranno stampate a schermo e salvate nel file di log) con *stats*, *stats_style*, la scrittura dei file di *restart* e la durata della *run* complessiva, espressa in numero di timestep.

Per altre informazioni riguardo al funzionamento di SPARTA si rimanda al manuale (1)

Parte II

Seconda Parte

Capitolo 4

Set-Up Sparta

4.1 Definizione del problema

Per il presente lavoro si è scelto di indagare una condizione di funzionamento a valle di schiere di turbine di bassa pressione per motori aeronautici, concentrandosi sulle proprietà dei flussi secondari e di perdita, dove si possono verificare fenomeni di rarefazione. In particolare, si è esaminato l'operato di Pastorino et al. [16] e di Neroni [17] svolto nel Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Il test case nominale per gli esperimenti prevede le seguenti caratteristiche:

M	Re_{blade}	c_{blade} [mm]	Re_{wire}	U_{∞} [m s ⁻¹]	ρ_{∞} [kg m ⁻³]
0.7	70000	47.61	40.6	144	0.112

Tabella 4.1: VKI S-1/C test case

limitando il Knudsen nella fascia dello slip flow regime $0.01 \leq Kn \leq 0.1$, dove SPARTA perde di efficacia per via del numero eccessivo di particelle e sono più rapidi e affidabili metodi che modificano le condizioni a contorno delle equazioni di NS o altri, come il BGK, che risolve l'equazione della quantità di moto. A seguito di tali considerazioni, è stato scelto come campo di simulazione un regime simile al precedente, ma con condizioni di rarefazione

aumentate, in modo da ottenere, almeno dal punto di vista simulato, risultati per condizioni di funzionamento di più difficile replica in laboratorio e, simultaneamente, più adeguate al funzionamento di SPARTA:

M	Re_{wire}	Kn	U_∞ [m s ⁻¹]	ρ_∞ [kg m ⁻³]	T_∞ [K]	T_{wall} [K]	α
0.7	1.838	0.565	243.58	0.0279	300	400	0.8

Tabella 4.2: Condizioni del flusso per il caso in esame

Con lo scopo di estrapolare dai risultati una relazione $Nu - Re - Ma$, a partire dal test di riferimento, si è analizzato il comportamento del Nusselt in un dominio di variazione dei parametri riportato in tabella:

M	Re	Kn	T_∞ [K]	T_{wall} [K]	α
0.3	0.5	0.2	250	300	0.6
0.9	7	1.8	450	600	0.9

Tabella 4.3: Spazio dei parametri simulati

L’obiettivo principale delle simulazioni è quello di estrarre i flussi termici a parete \dot{Q} e il coefficiente di scambio termico convettivo h per dedurre il numero di Nusselt; in secondo luogo, dedurre i campi di temperatura, moto, pressione e densità nell’intero dominio, con particolare attenzione nell’intorno della superficie; infine, ricavare l’andamento azimutale sia della temperatura adiabatica di parete che del coefficiente di scambio termico convettivo.

Per il primo step è importante sottolineare che la legge newtoniana di scambio termico convettivo in regime di transizione o molecolare, non è più lineare [27]:

$$\dot{q} = h (T_{ad,wall} - T_w) \quad (4.1)$$

Di conseguenza h è risente delle variazioni di Kn, Re , oltre che al salto di temperatura ΔT , alla temperatura del gas indisturbato T_{inf} e al coefficiente di accomodamento termico superficiale α . Nel presente studio è stata effettuata una linearizzazione locale, estraendo un coefficiente effettivo

$h_{eff} = \dot{q}/(T_{ad,wall} - T_w)$, valido esclusivamente per le simulazione in questione, incorporando quindi tutti gli effetti di slip flow (se presenti), quali la presenza del Knudsen Layer, dei salti di velocità e temperatura, e gli effetti di non equilibrio e rarefazione. Con tale approccio è possibile effettuare successivamente un confronto con le relazioni sul Nusselt valide sia in regime continuo che di slip flow presenti in letteratura. Si specifica che il numero di Nusselt è definito come:

$$Nu = \frac{h D_{wire}}{k_{air}} \quad \text{con} \quad k_{gas} = \frac{15}{4} \cdot \frac{k_B \mu}{m} \quad (4.2)$$

con k_{gas} conducibilità termica, definita secondo la teoria di Chapman-Enskog. La viscosità dinamica per l'aria standard segue la legge di Sutherland:

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2} \frac{S + T_{ref}}{S + T} \quad (4.3)$$

con $\mu_{ref} = 1.718 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{m s}$, $S = 114.39K$, $T_{ref} = 273.15K$

La temperatura adiabatica di parete, come analizzato nel cap.5.3, non segue la relazione data nel continuo, dove il calcolo avviene attraverso un adeguato coefficiente di recupero r in funzione del numero di Prandtl Pr , ma dipende dallo scambio di energia delle particelle con la parete, e corrisponde alla temperatura che la parete raggiungerebbe quando il flusso di energia portato dalle particelle incidenti bilancia quello delle particelle riflesse.

Specie	\mathcal{M} [amu]	m [kg]	ζ_{rot} [-]	P_{rot} [-]	ζ_{vib} [-]	P_{vib} [-]	Θ_{vib} [K]	w [-]	q [-]
O ₂	32.000	5.31×10^{-26}	2	0.2	2	5.58659×10^{-5}	2256.0	1.0	0.0
N ₂	28.016	4.65×10^{-26}	2	0.2	2	1.90114×10^{-5}	3371.0	1.0	0.0

Tabella 4.4: Dati delle specie molecolari per N₂ e O₂

La miscela di gas usata è composta per il 79% da Azoto molecolare N₂ e per il 21% da Ossigeno molecolare O₂, scegliendo il modello di collisione molecolare VSS.

Specie	d_{ref} [m]	ω [-]	T_{ref} [K]	α [-]	$Z_{rot,\infty}$ [-]	T^* [K]	C_1 [K]	C_2 [K ^{1/3}]
O ₂	3.96×10^{-10}	0.77	273.15	1.4	16.5	113.5	56.5	153.5
N ₂	4.07×10^{-10}	0.74	273.15	1.6	18.1	91.5	9.1	220.0

Tabella 4.5: Parametri del modello di collisione VSS per N₂ e O₂

La tabella elenca le proprietà fondamentali delle molecole per il calcolo della sezione d'urto (1.20), l'angolo di scattering α e altre costanti per i modelli di rilassamento rotazionale e vibrazionale, che definiscono la frazione dell'energia totale delle le particelle in collisione che si trasforma in calore rotazionale o vibrazionale. Visto che le temperature in gioco non superano mai la temperatura vibrazionale Θ_{vib} , possiamo assumere che i gradi di libertà vibrazionali siano congelati. Di conseguenza, il rapporto tra i calori specifici γ dipende unicamente dalla somma dei gradi di libertà traslazionali e rotazionali che per una molecola biatomica sono $f = 5$:

$$\gamma = 1 + \frac{2}{f} = \frac{7}{5} = 1.4 \quad (4.4)$$

In funzione dei parametri in input definiti nella tabella 4.3, vengono calcolate la velocità media molecolare e la velocità del flusso indisturbato:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8k_B T}{m\pi}} \quad v_\infty = \sqrt{\frac{\gamma k_B T}{m}} \quad (4.5)$$

Conseguentemente, si ricavano densità e pressione:

$$\rho_\infty = \frac{Re_w \mu}{v D_w} \quad n = \frac{\rho_\infty}{m} \quad p = n k_B T \quad (4.6)$$

Nello script di input viene definito un dominio bidimensionale, le cui dimensioni sono scelte dopo un adeguato studio di indipendenza 4.3, con condizioni a contorno per tutti e 4 i bordi del tipo outflow: SPARTA immette all'inizio di ogni step di calcolo le particelle simulate secondo l'equazione (4.22) di G.A. Bird [1], dipendente dal rapporto di simulazione $fnum$, dalla densità, velocità, temperatura del gas, e, infine, dalla mesh e l'orientamento della cella relativamente al flusso. Le particelle posso uscire liberamente dal dominio.

L' $fnum$ rappresenta il rapporto tra numero di particelle reali e quelle simulate, ovvero quante particelle reali sono rappresentate in media da una singola simulata. In tutte le simulazioni è stato applicato il meccanismo *global weight cell volume*, che permette di avere per ogni cella, indipendentemente dalla sua dimensione, lo stesso numero di particelle simulate, riducendo i tempi di calcolo e preservando ugualmente l'accuratezza spaziale e temporale delle medie delle grandezze termodinamiche. Per tale motivo $fnum$ è definito come $\frac{n}{ppc}$, con ppc *particle per cell*, queste ultime stabilite in base ad un adeguato studio di convergenza statistica 4.2.

La geometria è caricata sul software tramite un file `Pizza.py` contenente i dati relativi a punti e linee della circonferenza, la quale è costituita da una serie di segmenti consecutivi: la scelta è stata effettuata a discrezione dell'utente ed pari a 157 segmenti ($\approx 1/50 D$) per garantire una sufficiente risoluzione spaziale e angolare delle grandezze senza appesantire eccessivamente il costo computazionale.

Il modello di collisione con la superficie è di tipo diffusivo-speculare semplice, fornendo in input l'*accomodation coefficient* relativo allo scambio di energia termica.

Il valore da attribuire al timestep viene selezionato come il minimo tra il tempo medio collisionale e il tempo medio di attraversamento della cella, in modo da garantire che il meccanismo collisionale funzioni correttamente ad ogni step. Vengono applicati gli opportuni fattori di sicurezza:

$$\Delta t = \min \left(0.25 \tau, 0.1 \frac{\Delta x}{(V_\infty + V_{mp})} \right) \quad (4.7)$$

con $V_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$ *most probable velocity*, che rappresenta la velocità di agitazione termica posseduta da circa il 90% delle molecole, ossia dove la distribuzione di Maxwell-Boltzmann ha il massimo.

Il programma di calcolo per l'estrazione del grandezze obiettivo segue tale andamento:

- **Fase transitoria**, con 2 loop di controllo rispettivamente sul timestep e sul valor medio dei flussi termici, entrambi con un threshold imposto sull'errore relativo degli ultimi 3 dati consecutivi. Il thrshold per il ciclo sul timestep è pari all' 1%, mentre per i flussi termici " ". Per il primo loop la finestra temporale di accumulo delle statistiche è variabile, dato che il timestep viene aggiornato ciclicamente. Una volta

fissato il timestep segue il secondo loop dove la finestra di accumulo delle statistiche è definito dall'analisi di convergenza statistica.

- **Fase stazionaria** di accumulo delle statistiche, in questo caso il controllo sui flussi termici valuta sia la risoluzione temporale attraverso un threshold sulla variazione relativa (o deriva temporale) della media cumulativa su ogni singolo segmento di circonferenza, che quella spaziale attraverso un indice di rugosità:

$$R = \frac{|\dot{q}_i - \frac{1}{2}(\dot{q}_{i-1} + \dot{q}_{i+1})|}{\dot{q}_{i,max}} \quad (4.8)$$

Si consideri che per il calcolo del Nusselt non è richiesta un'eccessiva risoluzione spaziale, di conseguenza il limite imposto dall'indice di rugosità è applicato solo allo scopo di dedurre una legge azimutale dei flussi termici lungo la circonferenza.

A conclusione della fase stazionaria, i file di superficie e di flusso prodotti dal software vengono elaborati adeguatamente per produrre visualizzazioni su VisIt e per effettuare il post-processing in MatLab.

4.2 Analisi di convergenza statistica

Per garantire che i risultati in uscita dalle simulazioni SPARTA siano statisticamente corretti, è stato svolto uno studio parametrico facendo variare due fattori fondamentali per il calcolo delle grandezze termodinamiche da cui si ricava il numero di Nusselt, ovvero il numero di particelle per cella ppc e il numero di timestep di accumulo delle statistiche, i quali impattano direttamente sulla quantità di campioni a disposizione.

4.2.1 Fase Transitoria

Come detto in precedenza, dopo un loop di stabilizzazione del timestep minimo richiesto nel dominio, avviene il ciclo di monitoraggio della grandezza di interesse, ossia il flusso termico. Per determinare la soglia per lo stop della run è stato effettuato uno studio di convergenza asintotica al variare di $ppc = [2, 5, 10, 20]$ e della finestra di accumulo delle statistiche pari a $length_{window} = [0.1, 0.2, 0.5] t_{dom}$. In questo caso la media delle grandezze è di tipo *ave one*, ossia i dati accumulati in una finestra di campionamento sono indipendenti dalle altre. Questo permette di svincolare le statistiche

da qualsiasi fluttuazione temporale che può verificarsi, come ad esempio la formazione e lo sviluppo di onde d'urto. E' stato preso come caso test per l'analisi la simulazione col punto di funzionamento che può generare maggiori fluttuazioni statistiche (per il momento si fissano α , T_{wall} , T_{inf}), ossia:

M	Re	Kn	T_{∞} [K]	T_{wall} [K]	α
0.3	2.2	0.2	300	400	0.8

Tabella 4.6: Caso Test per convergenza statistica

Tramite il file di controllo, che agisce contemporaneamente alla run, si valuta la deviazione standard relativa e la pendenza relativa della retta di regressione ai minimi quadrati degli ultimi 10 valori.

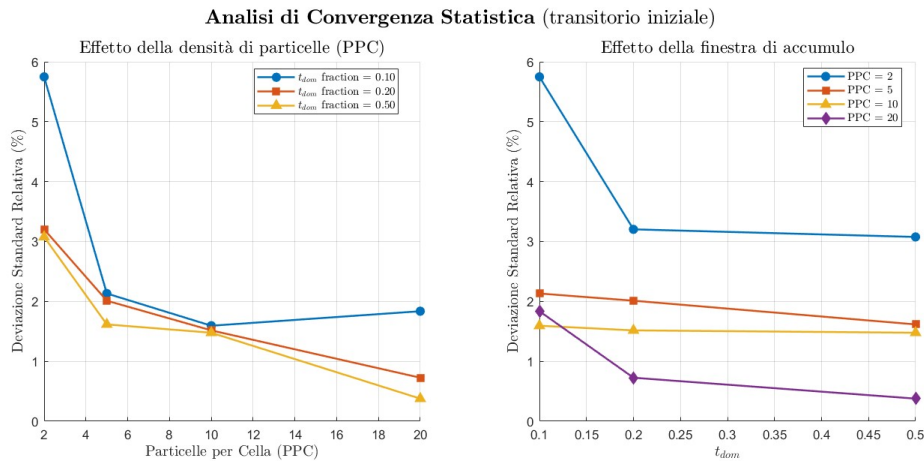


Figura 4.1: Variazione delle dev. std. in funzione dei parametri statistici

Dai grafici si evince che un aumento della finestra di accumulo, comporta una diminuzione della dev. std. rel. e in particolare si osserva per tutti i casi un gomito per una lunghezza della finestra pari a **0.2 t_{dom}** , che viene quindi scelto come valore di riferimento. Per quanto riguarda la dipendenza dal numero di particelle per cella, anche qui è presente un gomito più o meno evidente per la selezione di 5 *ppc*. In tal caso però si è optato per **10 *ppc*** per avere delle statistiche migliorate soprattutto nelle zone di depressione

nella zona posteriore del cilindro. Inoltre, anche nel caso peggiore, la deviazione standard non supera il 6% mentre la pendenza relativa massima della retta di regressione non supera il 0.17% , sintomo che le statistiche non presentano oscillazioni particolari che rifletterebbero l'instazionarietà del flusso. Vengono riportati anche i valori del flusso medio per i vari casi:

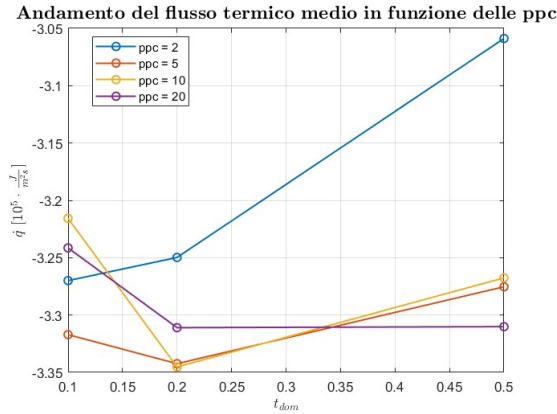


Figura 4.2: Flussi termici

Successivamente, è stato preso come riferimento il caso statisticamente più accurato con 20 ppc , 0.5 t_{dom} ed è stato valutato l'errore percentuale dei flussi termici estratti relativamente ad esso.

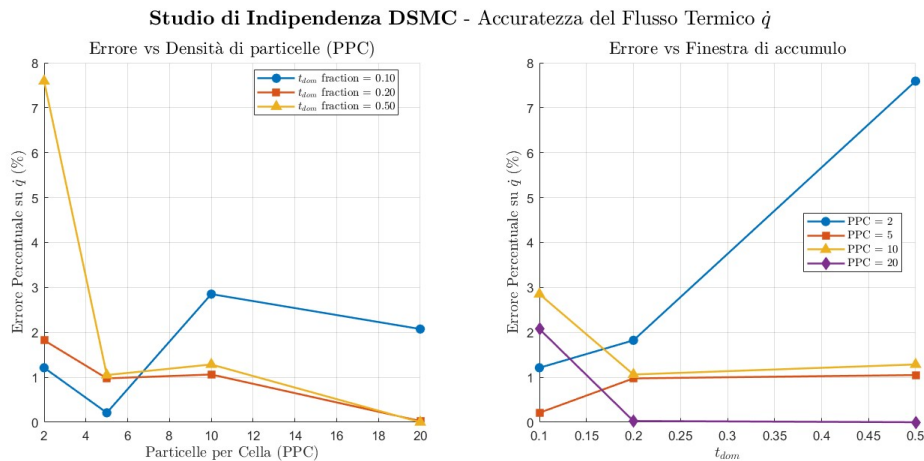


Figura 4.3: Variazione percentuale di \dot{q} relativamente al caso migliore

I risultati confermano le valutazioni fatte in precedenza e, in particolare,

evidenziano le criticità delle simulazioni a basse ppc e con finestre di accumulo troppo brevi: di fatto per $ppc = 5$ e $0.1 t_{dom}$ presentano gli errori maggiori e un comportamento non decrescente all'aumentare di uno dei 2 parametri.

4.2.2 Fase Stazionaria

Nella fase di accumulo delle statiche i controlli avvengono sia sulla risoluzione temporale che per quella spaziale, nel primo caso andando ad osservare il drift della media spaziale della grandezza, ovvero la variazione relativa tra 2 step consecutivi della media temporale cumulativa effettuata con *ave running* in SPARTA; nel secondo valutando l'indice di rugosità tra segmenti adiacenti (4.8). A partire dalle considerazioni effettuate nel transitorio, sono state effettuate 2 simulazioni con $ppc = [5, 10]$ imponendo una soglia sul drift e sulla rugosità rispettivamente pari al 0.1% e 2%

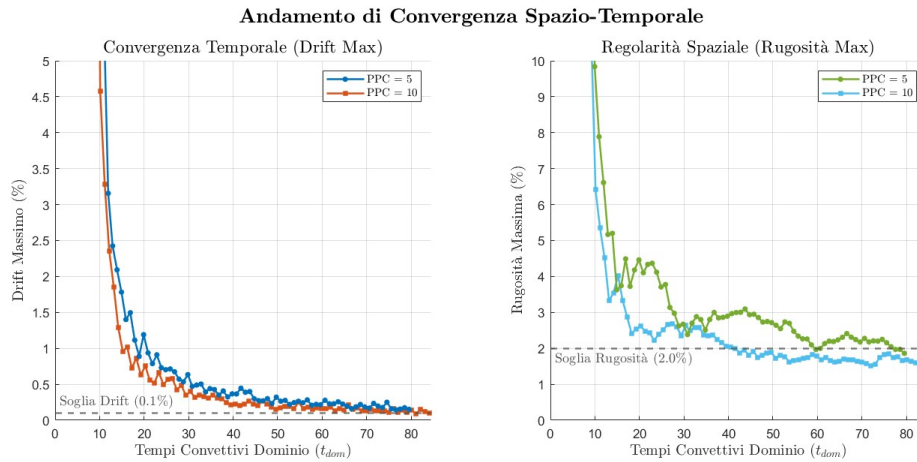


Figura 4.4: Analisi di convergenza spazio-temporale

Si osserva che la soglia sul drift è quella che viene soddisfatta per ultima all'incirca a $80 t_{dom}$ in entrambi i casi di ppc . Per evitare delle run troppo lunghe è stata aumentata la soglia sul drift a 5%, dove si può assumere che l'accumulo di statistiche si arresti nell'intorno dei $30t_{dom}$.

4.3 Domain and Mesh independence study

4.3.1 Indipendenza dal domino

Per la scelta del dominio ci si è affidati a una serie di simulazioni imponendo le condizioni più critiche nello spazio parametrico di simulazione 4.3 e variando le dimensioni del dominio, verificando la convergenza del coefficiente di resistenza e del numero di Nusselt. Il caso in esame è il seguente:

M	Re_{wire}	Kn	T_{∞} [K]	T_{wall} [K]	α
0.9	6.67	0.2	300	400	0.8

Tabella 4.7: Test case per studio di indipendenza dal dominio

La geometria a monte del cilindro deve essere limitata, per via della scarsa interazione con il flusso, mentre quella a valle, quella superiore e inferiore, devono essere sufficientemente lunga per evitare che le condizioni a contorno vadano ad influenzare il flusso nell'intorno del cilindro. La lunghezza del dominio L è imposta essere $2H$ con H altezza del dominio. Il cilindro è posto lungo l'asse x a distanza $0.2L$ dal bordo di immissione (sx).

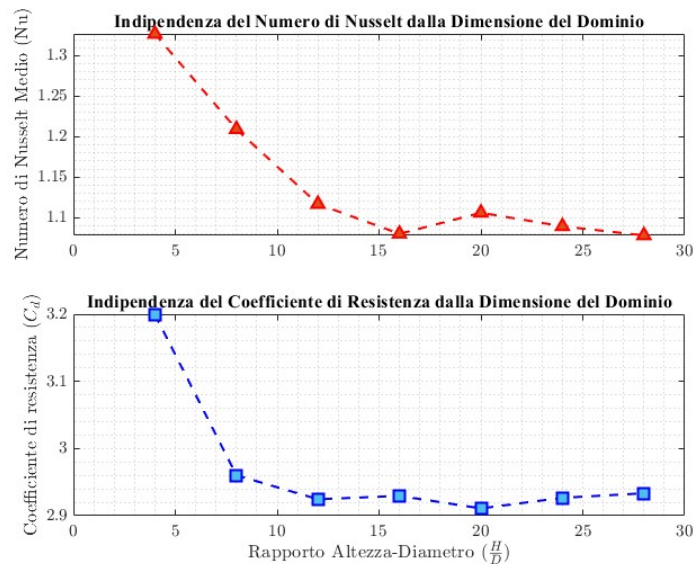


Figura 4.5: Domain Independence Study

Per il punto di funzionamento scelto, si osserva che un rapporto $H/D = 16$ è già sufficiente per garantire dei risultati accurati. L'andamento del coefficiente di resistenza è per lo più monotono e, dopo $H/D = 12$ giunge ad avere una variazione percentuale massima dello 0.6%. L'effetto di bloccaggio iniziale è evidente, con dei valori di C_d al di sopra di quelli previsti. In modo simile, l'andamento del Nusselt presenta un minimo per $H/D = 16$, poi si stabilizza con variazione percentuale massima del 1.5%. Il Nusselt dipende quasi esclusivamente dai gradienti termici vicini a parete: la presenza dei confini superiore e inferiore troppo ravvicinati aumenta la velocità assottigliando lo strato limite termico, presentando quindi un massimo del Nusselt. Aumentando H/D l'effetto di schiacciamento diminuisce, il gas accelera maggiormente ed entra in gioco la dissipazione viscosa, che aumenta la temperatura nell'intorno della parete, riducendo lo scambio termico. Quando il dominio è sufficientemente largo per ammettere uno sviluppo corretto del gradiente termico, il Nusselt si assesta, ma subentrano le oscillazioni tipiche DSMC. Il Nusselt si stabilizza dopo rispetto al coefficiente di resistenza e con una variazione percentuale maggiore poiché i flussi termici a parete dipendono dal trasporto dell'energia cinetica, la quale è proporzionale a v^3 , rappresentando il terzo momento della distribuzione di velocità, e richiede un numero di campioni immensamente più alto rispetto ad un secondo momento, come le forze e le pressioni, per raggiungere la stabilità.

4.3.2 Indipendenza dalla mesh

Date le caratteristiche di generazione delle griglie computazionali in SPARTA, per garantire una risoluzione accurata delle grandezze d'interesse, si è optato per una mesh a più livelli, definiti in funzione del libero cammino medio molecolare. Per ridurre gli oneri computazionali è stata applicata la pesatura delle particelle in funzione del volume, in tal caso l'area, della cella: ciò permette di avere un numero costante di particelle per cella anche se essa varia dimensione, ma non possono esserci dei salti eccessivi tra un livello e il successivo, poiché l'algoritmo di clonazione delle particelle andrebbe a generare distribuzioni non più realistiche delle stesse. Per tale motivo tra un livello ed un altro il tasso di incremento dimensionale è stato fissato a 2. Nella zona far-field è possibile avere celle anche con dimensioni pari a $\lambda/2$, anche se di regola la condizione CFL per il metodo DSMC è $\Delta x = \lambda/3$ [1], ma in caso di flusso indisturbato è possibile rilassare tale condizione di stabilità. Specificate tali condizioni, viene esposto l'algoritmo di generazione della mesh, il quale prende in input il numero delle celle per singolo mfp, che

chiameremo n , desiderate nella regione prossima alla superficie, e successivamente estrapola i livelli più esterni. Viene imposto un limite di 6 livelli, i quali sono definiti come dei cerchi concentrici, la cui sezione circolare aumenta secondo un fattore 2 a partire dalla regione più interna, che ha raggio pari a 1.5λ .

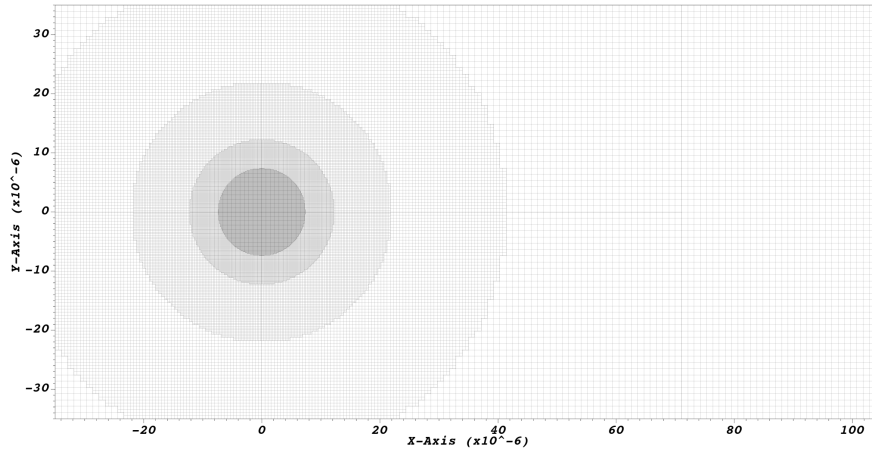


Figura 4.6: Mesh per test case

Per il caso test 4.2 sono state svolte delle simulazioni con fattore n che varia nell'intervallo $[2,30]$ ottenendo i seguenti risultati:

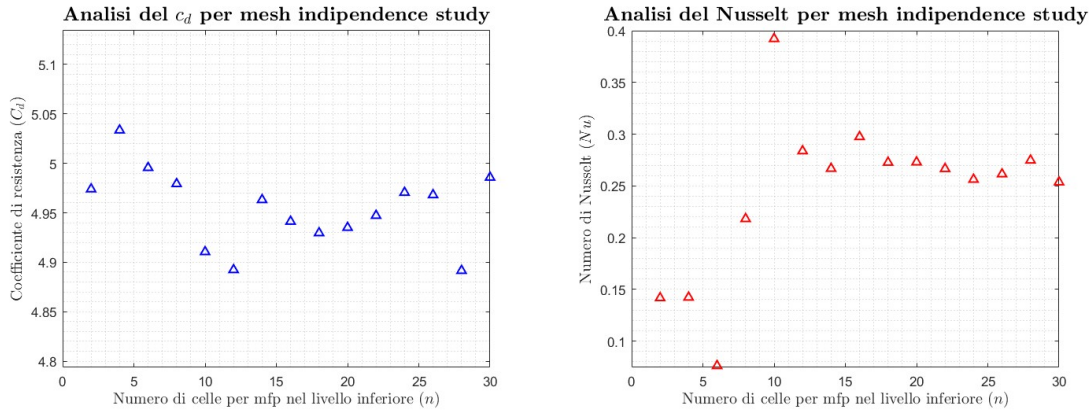


Figura 4.7: Convergenza del Cd e Nu per mesh independence study

Analizzando i risultati relativi al coefficiente di resistenza si nota una variazione percentuale minima tra selezioni di n successive, anche se non è possibile individuare un trend monotono. Comunque si può affermare che

per la valutazione del c_d , anche le griglie meno raffinate (ad esempio per $n = 2,4$) sono adatte. Il trend del Nusselt sembra essere crescente con n , ma va ad appiattirsi dopo $n = 12$. Si specifica che l'utilizzo del comando *global weight* e una riduzione della dimensione della cella, portano ad un'amplificazione dello scatter delle particelle, conducendo a risultati contaminati da un rumore statistico, dunque sarà sempre presente una deviazione tra un dato e il seguente, non implicando la riduzione monotona dell'errore. In tal caso, è stato imposto come limite inferire un errore relativo pari al 3%. A seguito di ciò, facendo affidamento principalmente al comportamento del Nusselt e volendo ottenere delle risoluzioni adeguate dello strato limite termico a parete, la scelta finale ricade su $\mathbf{n} = 16$.

4.4 Validazione del set-up

Per la validazione del set-up si è effettuato un confronto con i dati in letteratura, anche se nell'intorno del caso di studio proposto sono scarsi. Oltre ai già citati lavori svolti nel VKI, i risultati di Xie et. al [19] sono di particolare importanza: nell'articolo si cita un'analisi sperimentale sullo scambio termico di un anemometro in tungsteno, svolta a bassi Re e Knudsen variabile [0.0043,1.31], usando come gas l'azoto molecolare. I risultati sono stati poi elaborati per produrre una correlazione empirica del Nusselt in funzione del Reynolds e del Mach.

Simulando alcuni punti relativi al test di Xie et al. per $Kn = 1.31$ su SPARTA si ottengono i seguenti risultati:

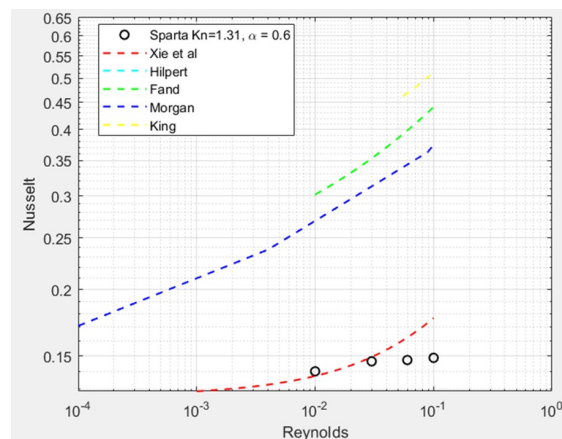


Figura 4.8: Confronto con simulazione Xie et al. N_2

Oltre alla relazione empirica di Xie et al sono state riportate le relazioni di Hilpert, Morgan, Fand e King le quali sono valide unicamente per il regime continuo e a pressione ambiente. La scarsità dei dati simulati è dovuta alla difficoltà del software nel simulare casi a basso Mach, dove il rumore termico è predominante e raggiungere la convergenza statistica non è sempre possibile. I dati, anche se prossimi alla relazione sperimentale, non sembrano seguire l’andamento crescente all’aumentare del Reynolds. Data la difficoltà nell’estrazione del Nusselt per tali condizioni del flusso, tale confronto è stato accantonato.

Anche Neroni [17] ha proposto una correlazione empirica per il Nusselt a 8 coefficienti, ma il range di validità $0.02 \leq Kn \leq 0.2$, $4 \leq Re \leq 15$ è al di fuori del range di studio indagato.

Al contrario, un’altra correlazione di Xie et. al [18], dedotta da una serie di simulazioni cfd applicando le equazioni di NS con *boundary condition* corrette, anche se elaborata inizialmente per i regimi di slip flow, risulta descrivere adeguatamente i risultati ottenuti con SPARTA:

$$Nu = 0.2491 + 0.5589 Re^{0.4573} - 0.6245 Re^{0.5639} Kn^{0.8565} \quad (4.9)$$

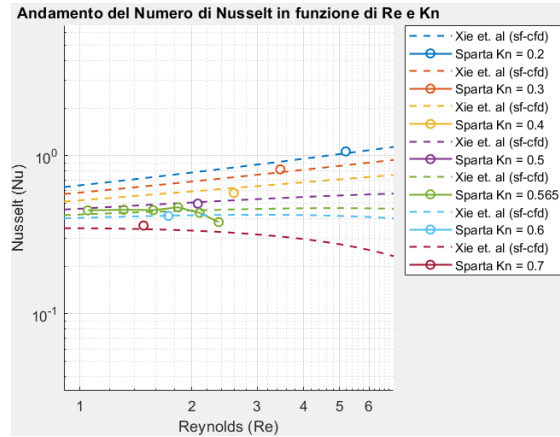


Figura 4.9: Confronto con relazione slip flow Xie et al.

Lo studio di Pastorino et al. [16], a partire dalla forma della relazione precedente, ha portato ad una formulazione simile basata sui dati sperimentali:

$$Nu = 1.045 + 0.601 Re^{0.314} - 2.177 Kn^{0.900} \quad (4.10)$$

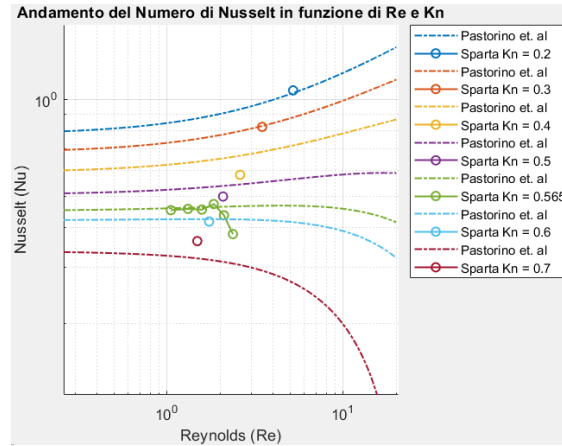


Figura 4.10: Confronto con relazione Pastorino et al.

Per entrambi i casi i limiti di validità delle espressioni erano per $Kn = 0.1$, per tanto gli andamenti riportati in figura sono un'estensione non garantita sperimentalmente. Tuttavia, facendo riferimento ai dati a Knudsen minore possiamo notare che i dati estratti dalle simulazioni SPARTA non si discostano di molto dalle previsioni di Xie e Pasottrino. L'andamento decrescente per il caso a $Kn = 0.565$ è dettato con tutta probabilità dagli effetti di compressibilità, fenomeno che porta ad un incremento della temperatura statica soprattutto nella parte anteriore del corpo, producendo una diminuzione dell'efficienza dello scambio energetico. Per le relazioni presentate il fluido era trattato come incompressibile, con $M \leq 0.3$.

Capitolo 5

Elaborazione Dati

5.1 Flussi termici e Coefficiente di resistenza

Per il caso test 4.2, a seguito dei controlli effettuati sul drift e sulla rugosità dei flussi termici dei singoli segmenti di circonferenza, è stato ricavato l'andamento angolare dei flussi termici e delle forze:

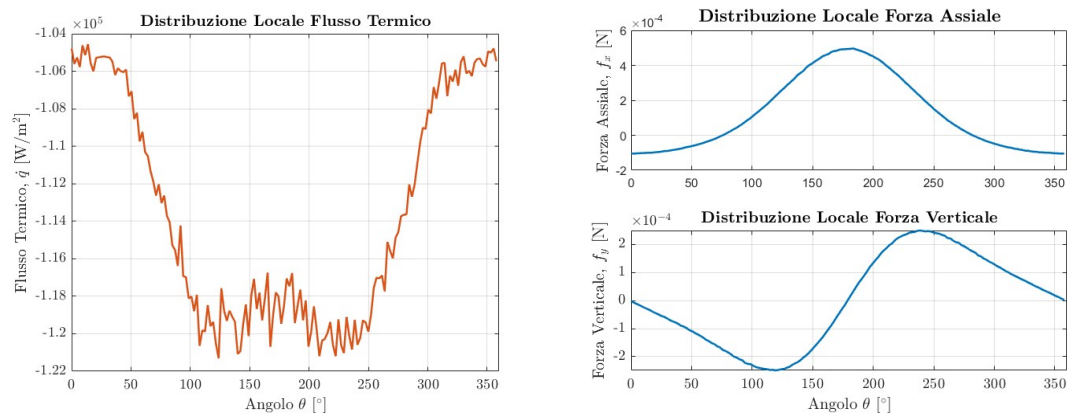


Figura 5.1: Distribuzione angolare dei flussi termici e delle forze

Dal profilo angolare del flusso termico si osserva che il modulo massimo della grandezza viene raggiunto nella zona frontale. Tale riscontro potrebbe sembrare contro intuitivo se analizzato unicamente dal punto di vista termico statico: nel punto d'arresto di fatto la compressione aerodinamica innalza la

temperatura adiabatica di parete locale $T_{aw,loc}$, riducendo complessivamente il salto di temperatura con la parete ΔT e di conseguenza \dot{q} . Tuttavia, tale effetto termodinamico viene sovrastato da quello fluidodinamico: la forte compressione anteriore al cilindro aumenta drasticamente la densità, di conseguenza, il Knudsen locale scende, mentre la frequenza di collisione gas-superficie si innalza. Pertanto, questa modifica della conduttanza convettiva locale (ossia di h) governa lo scambio termico. Il picco del flusso termico presenta un modulo medio all'incirca costante per $110^\circ \leq \theta \leq 250^\circ$, con l'assenza di un picco in prossimità di $\theta = 180^\circ$. Questo comportamento, che va in netto contrasto con la fluidodinamica del continuo, è coerente con il campo di densità analizzato precedentemente: a causa degli elevati numeri di Knudsen e Mach, la zona di compressione nella zona anteriore al corpo diffonde in una regione più ampia, che avvolge omogeneamente il bordo d'attacco. Inoltre, l'intensa agitazione termica molecolare in tale settore provoca adeguamento della frequenza di collisione gas-superficie a un valore pressoché costante, trasformando il teorico punto di ristagno, in una regione cuscino più estesa a h quasi uniforme.

La forza orizzontale segue un andamento tipico a campana $\propto \cos(\theta)$, con picco massimo nel bordo d'attacco e leggere zone di depressione nella parte posteriore. La simmetria della forza verticale dimostra che il set-up è corretto e, non mostrando oscillazioni o discontinuità, giustifica anche l'assenza di zone di distacco del flusso o di vorticità, anche per il fatto che viene analizzato un flusso a basso Reynolds.

Nonostante la bassa soglia imposta sulla rugosità, si evincono comunque delle oscillazioni dei flussi termici, direttamente collegate alle numero di particelle che impattano la superficie. Ottenere dei trend più regolari avrebbe richiesto un numero di campioni N e quindi un costo computazionale eccessivi, ricordando che il rumore o la deviazione standard delle grandezze mediate decresce secondo \sqrt{N} . Lo scopo di tale studio è quello di ottenere un Nusselt medio e quindi non è richiesta una risoluzione spaziale eccessiva dei flussi termici, usati per il conseguente calcolo del coefficiente di scambio termico convettivo h . Tuttavia, si può riscontrare di come le forze a parete presentino meno variazioni angolari. Questo è dovuto principalmente al fatto che tali grandezze sono un primo momento rispetto alla velocità delle singole particelle v , mentre i flussi termici sono un terzo momento di v , richiedendo conseguentemente un numero³ di campioni per convergere spazialmente.

In conclusione, normalizzando la forza orizzontale con il fattore $q_a = \frac{1}{2}\rho_\infty u_\infty^2 l_{segm}$

relativo alle condizioni di monte, si ricava il coefficiente di resistenza medio $c_D = 3.73563$

5.2 Campi di temperatura, velocità e densità

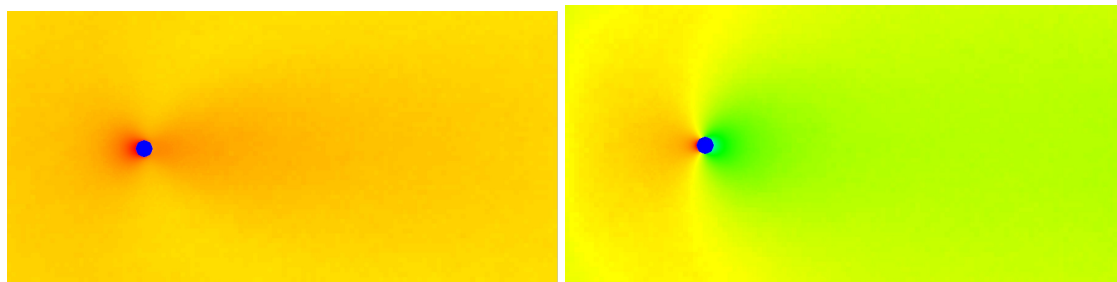


Figura 5.2: Campi di temperatura e densità

Osservando il campo di temperatura si evidenzia una zona di ristagno anteriore e la formazione di uno strato limite termico, dovuti rispettivamente al riscaldamento aerodinamico e all'effetto della parete calda. A valle del cilindro c'è un'ampia scia termica ad alta temperatura, che sembra andare in contrasto con la fluidodinamica del continuo, ma giustificata dal regime transizionale. L'elevato libero cammino medio favorisce la diffusione molecolare rispetto al trasporto convettivo, dunque le particelle riflesse diffusamente dalla parete calda penetrano a valle del cilindro in profondità prima di incontrare altre molecole e termalizzarsi. Va anche specificato che a valle del cilindro, come si può notare dal campo di densità, è presente una zona a forte rarefazione, e dato che in SPARTA DSMC la temperatura macroscopica rappresenta l'energia cinetica traslazionale media per molecola, la presenza di uno scarso numero di particelle ad elevata energia (ossia quelle diffuse dalla parete) aumenta drasticamente il valore statistico del campo di temperatura.

Dal campo di densità si evince una zona di compressione anteriormente al cilindro, con la formazione di 2 urti (simmetrici) ad arco: l'elevata rarefazione permette di spalmare la discontinuità in modo più tenue e su una regione più ampia. Anche la compressione propaga nella regione di monte in modo maggiore, generando dei gradienti di pressione più attenuati rispetto al regime continuo. A valle del cilindro c'è invece un'ampia scia rarefatta, con riduzione del numero di particelle, la quale provoca problematiche e rumore nel calcolo delle proprietà termodinamiche.

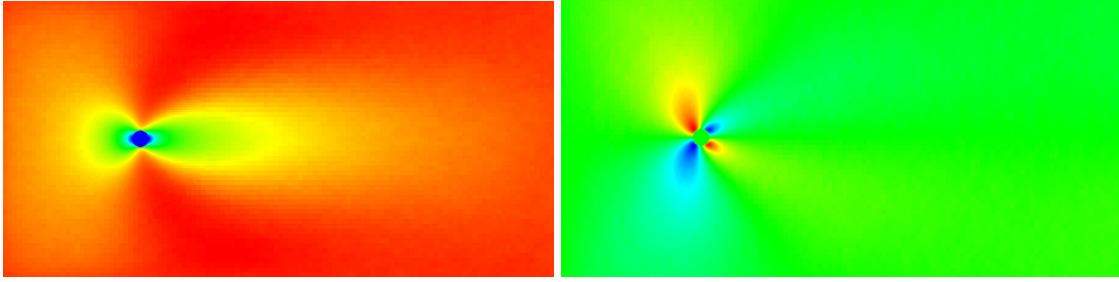


Figura 5.3: Campi di velocità - componente orizzontale a s_x , verticale a d_x

Nel campo di velocità orizzontale si notano delle estese zone di decelerazione-accelerazione a monte e a valle del cilindro, con le dimensioni che variano in funzione del libero cammino medio molecolare. Nella parte anteriore, infatti, le molecole riflesse dal cilindro viaggiano per distanze pari al mfp prima di incontrare le particelle incidenti, rallentandole in modo anticipato. A valle, dove il Kn aumenta e le particelle diminuiscono, è necessaria una distanza maggiore prima che le collisioni molecolari ripristinino le condizioni di monte, giustificato anche dal fatto che la viscosità è elevata (flussi a basso Re , con $Re \propto \frac{1}{Kn}$). Le zone superiori e inferiori sono di accelerazione periferica. Si osserva anche il fenomeno dello slip flow che caratterizza tali regimi di Kn , con il flusso in moto, e non fermo come avviene nel continuo (no slip), nelle regioni adiacenti a parete. Il campo di velocità verticale ha la classica struttura a quattro lobi, descrive perfettamente lo scivolamento verso l'alto e il basso per adattarsi alle pareti e richiudersi a valle per colmare il vuoto della scia.

5.3 Estrazione della temperatura adiabatica di parete

Per l'estrazione della temperatura adiabatica di parete sono state predisposte 3 metodologie differenti:

- Estrazione della temperatura delle celle a parete tramite la funzione *Pick* del software di visualizzazione VisIt, effettuato a distanza dalla parete pari a $R/100$ e in numero pari a quello dei segmenti di circonferenza;
- Algoritmo basato sul dump delle grandezze delle particelle (posizione, velocità ed energia rotazionale) nell'intorno della parete, a distanza massima di $1.1 R$, così strutturato:
 - Selezione delle sole particelle incidenti con le superfici $\vec{c} \cdot \vec{n} < 0$, con \vec{c} vettore contenente le componenti di velocità della particella e \vec{n} vettore normale alla superficie;
 - Calcolo dell'energia termica:

$$E_{th} = E_{tr} + e_{rot} = \frac{1}{2}m(\vec{c} - \vec{u})^2 + e_{rot} \quad \text{con} \quad \vec{u} = (\bar{v}_x, \bar{v}_y) \quad (5.1)$$

- Per ogni particella si applica un peso w_i all'energia termica, corrispondente al prodotto scalare $\vec{c} \cdot \vec{n}$ e tale energia e peso vengono assegnati al settore circolare di appartenenza;
 - Calcolo della temperatura adiabatica di parte del settore circolare di interesse:
- $$T_{aw,sector} = \frac{2}{5k_B} \frac{\sum_i E_{th} w_i}{\sum_i w_i} \quad (5.2)$$
- con i indice relativo alla particella;
- Produzione del file di output per post-processing.
 - Algoritmo basato su *fnum*, *ppc* e il calcolo del numero di particelle pesate incidenti e dei flussi termici per ogni segmento:
 - Calcolo del flusso di particelle reali incidenti con la superficie:

$$\dot{n}_{real} = \frac{n_{w,sim} \cdot fnum}{\Delta t \cdot l_{segment}} \quad (5.3)$$

- Calcolo della temperatura adiabatica di parete come somma di quella di parete e di quella dovuta alla cessione di calore da parte della parete:

$$T_{aw} = T_w + \frac{\dot{q}_i}{3 \alpha k_B \dot{n}_{real}} \quad (5.4)$$

Si specifica che in tal caso il fattore 3, poiché nei pressi della parete l'energia traslazionale è aumentata per via delle collisioni con la superficie [1]

L'estrazione in VisIt, anche se intuitivamente giusta, richiede l'esecuzione di una run secondaria con collisione adiabatica e, inoltre, non garantisce la giusta affidabilità in determinate situazioni. Infatti, le celle vicino a parete possono presentare dei picchi a causa di un numero limitato di particelle dovuto al metodo cut-cell implementato da SPARTA: il tutto si ripercuote in una statistica non affidabile delle grandezze di interesse.

L'algoritmo basato sul *dump_particle*, era stato ideato per permettere l'esecuzione della sola run con collisione diffusiva ed essere totalmente indipendente dalla mesh, ma i valori estratti presentavano un andamento differente a quello previsto, sintomo del fatto che le particelle incidenti a parete vengono comunque energizzate da quelle riflesse e termalizzate dalla superficie. Per questo, la sua validità, come per il caso che usa VisIt, è garantita esclusivamente da una run con collisione diffusiva.

L'ultimo algoritmo, seppur più semplice, fa riferimento alle grandezze statistiche a parete proprie di SPARTA e per tale motivo risulta essere il più affidabile, oltre al fatto che è perfettamente valido nel caso diffusivo.

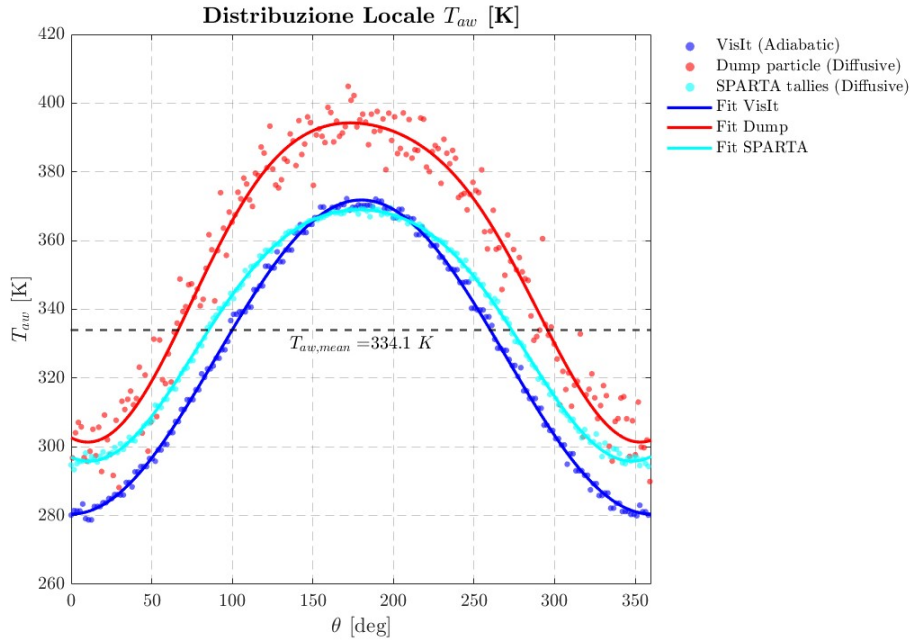


Figura 5.4: Confronto della T_{aw} per i tre metodi di estrazione

Dalla figura si può notare evidentemente che la metodologia *dump_particle* raggiunge valori nel bordo d'attacco del cilindro simili alla temperatura di parete, andando quindi a confermare la dipendenza termica dalla parete. Inoltre, il rumore statistico è elevato a causa di un campionamento non eccessivo per motivi computazionali. I dati VisIt e quelli statistici SPARTA sono confrontabili: presentano all'incirca la stessa temperatura di picco al punto di arresto e la stessa forma, che risulta essere una funzione del coseno di tipo $a + b \cos(\theta)$, ma differiscono nelle zone del bordo di fuga. In VisIt viene captato in modo più marcato il fenomeno di raffreddamento dovuto all'espansione nella parte posteriore, dato che la parete del cilindro tende ad adattarsi alle condizioni del flusso locale modificando la sua temperatura, rispettando sempre il vincolo $q = 0$. Nel caso del calcolo analitico della T_{aw} tramite le statistiche superficiali di SPARTA, la parete ha temperatura fissata e, quindi, influenza la scia e le zone di depressione, in quanto la superficie continua a riflettere diffusivamente le particelle alla T_w , inquinando il flusso incidente e quello termico. In conclusione, la temperatura adiabatica estratta da VisIt è quella più coerente dal punto di vista fisico, ma lo scopo di tale lavoro è quello di estrarre il coefficiente di scambio termico convettivo h tramite la linearizzazione locale della legge di Newton $\dot{q} = h(T_{aw} - T_w)$ e,

quindi, non sarebbe adeguato mescolare i dati di due campi di moto differenti. La scelta finale adottata per garantire coerenza matematica nel calcolo del Nusselt è quella del calcolo analitico a partire dalle statistiche superficiali calcolate da SPARTA.

5.4 Calcolo del coefficiente di scambio termico convettivo

Conoscendo la temperatura di parete T_w , l'andamento angolare dei flussi termici e quello della temperatura adiabatica di parete è possibile estrarre il coefficiente di scambio termico convettivo h in funzione della coordinata polare:

$$\dot{q}(\theta) = h(\theta) [T_{aw}(\theta) - T_w] \longrightarrow h(\theta) = \frac{\dot{q}}{T_{aw} - T_w} \quad (5.5)$$

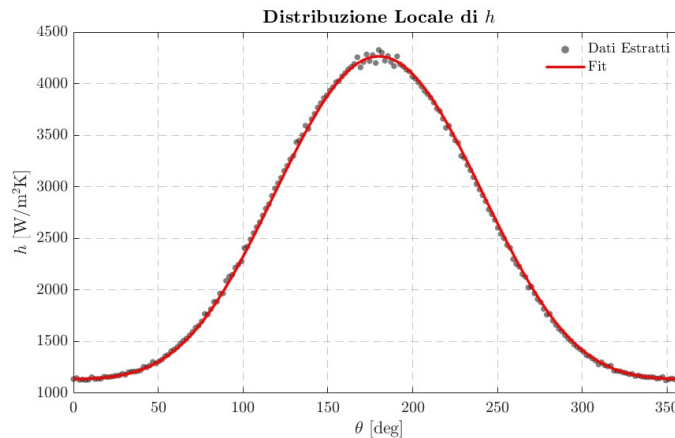


Figura 5.5: Andamento angolare di h

Come per la temperatura adiabatica di parete, si nota che nella zona anteriore, dove pressione e temperatura aumentano, il coefficiente di scambio termico aumenta in modulo per via della minor condizione di rarefazione. Passando alle regioni laterali h diminuisce drasticamente, poiché le particelle incontrano il cilindro con maggiore inclinazione, quindi l'efficacia degli impatti scende, così come si riduce la sezione di impatto. A tutto ciò si aggiunge un'accelerazione del flusso che aumenta il salto di velocità tra particelle e parete, provocando una riduzione dell'accomodamento termico. Dopo aver

raggiunto la velocità massima a $90^\circ, 270^\circ$, il flusso rallenta attenuando il fenomeno di slip. Al bordo di fuga 360° h si stabilizza a valori bassi a causa della forte rarefazione presente a valle del cilindro. La forma del fit è una serie coseno arrestata al secondo ordine, ossia aumentata di 1 ordine rispetto a quella vista in precedenza per la T_{aw} :

$$h(\theta) = 237 - 1563 \cos \theta + 334.1 \cos(2\theta) \quad (5.6)$$

5.5 Calcolo del Nusselt

La precedente metodologia, seppur corretta, conduceva ad un'oscillazione eccessiva dei valori del Nusselt, soprattutto nei regimi ad alto Mach, il tutto riconducibile al fatto che l'incertezza intrinseca del metodo DSMC viene amplificata, conducendo a valori di T_{aw} non affidabili. Per aumentare l'affidabilità della campagna di simulazione, è stato deciso di affidarsi al numero di Stanton e, quindi, normalizzare i flussi termici estratti per le condizioni del flusso di monte:

$$St = \frac{\dot{q}}{\rho_\infty u_\infty (T_\infty^0 - T_{wall})} \quad (5.7)$$

Ricordando che la temperatura d'arresto o totale vale:

$$T^0 = T \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \quad (5.8)$$

Il numero di Stanton è legato a quello di Nusselt tramite una relazione valida anche in regime transizionale:

$$St = \frac{Nu}{Pr} = \frac{Nu}{\frac{\mu c_p}{k}} \quad (5.9)$$

Tale approccio è comunemente applicato nella fluidodinamica rarefatta, dove il concetto di temperatura adiabatica di parete diventa ambiguo a causa dei fenomeni di *slip* e *temperature jump*.

In conclusione, il passaggio dal metodo di estrazione locale della T_{aw} a quello basato sul numero di Stanton è dettato dalla necessità di minimizzare l'incertezza statistica dei dati SPARTA DSMC. L'utilizzo della temperatura d'arresto come riferimento globale permette di avere una definizione più robusta del numero di Nusselt, abbattendo completamente il rumore numerico puntuale e garantendo un modello di fitting al variare dei parametri che consenta di catturare i trend macroscopici di sensibilità del Nusselt.

5.6 Relazione Nu-Re-Ma

In prima analisi, per ottenere una relazione rappresentativa del Nusselt in funzione dei parametri Re e Ma sono state effettuate più simulazioni a $T_\infty, T_{wall}, \alpha$ costanti, campionando dei punti su una griglia cartesiana 2D nello spazio dei parametri $Kn - Ma$. Per il fit dei risultati è stata applicata prima la forma della funzione proposta da Xie et al. [19] nei casi a $0.1 < Kn < 3$, che permette di osservare l'accoppiamento dei 2 parametri, tipicamente non previsto per il regime continuo:

$$Nu = a + b Re^c + d Kn^e + f Re^g Kn^h \quad (5.10)$$

con i seguenti coefficienti:

a	b	c	d	e	f	g	h	R^2
-0.09135	0.05299	1.188	0.3345	-0.5674	-0.05275	2.726	2.176	0.9999

Tabella 5.1: Coefficienti del modello di best-fit $Nu - Re - Ma$ e coefficiente di determinazione

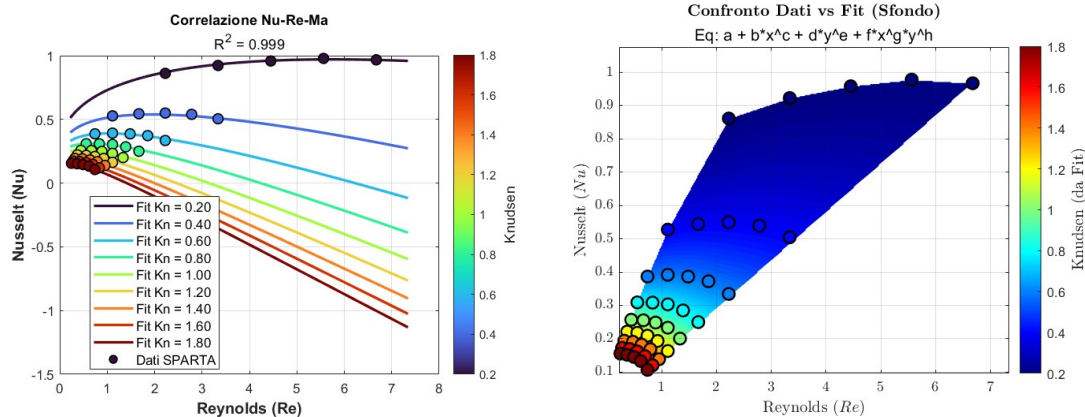


Figura 5.6: Dati SPARTA vs Relazione Nu-Re-Ma

L'effetto del Knudsen è evidente, con una diminuzione dell'efficienza dello scambio termico all'aumentare di tale parametro: la presenza del salto termico a parete, tipica di tali regimi, combinata con una riduzione della densità molecolare e di conseguenza degli urti gas-superficie.

L'andamento globale di tale relazione in funzione del Reynolds sembra andare in direzione opposta a quello che accade nel continuo, dove non avviene scivolamento a parete e dominano i fenomeni di conduzione e convezione termica $Nu \propto Re^m$ con $0.33 \leq m \leq 0.8$ in range differenti di Reynolds (Hilpert [28]). Si riscontra, invece, un andamento generale decrescente del Nusselt, con accentuazione della concavità delle curve Nu-Re per Knudsen decrescenti. Ciò è dovuto principalmente agli effetti di compressibilità: aumentando il Mach, quindi il Reynolds nelle iso-linee a Knudsen costante dato che $Re \propto \frac{Ma}{Kn}$, nella zona anteriore del cilindro la concentrazione di molecole cresce portando ad un aumento della temperatura locale e di conseguenza riducendo lo scambio termico $\dot{q} \propto \Delta T$. Prevale quindi l'effetto del riscaldamento aerodinamico del flusso, che si accentua in regimi di rarefazione più elevati per via dell'assenza di uno strato limite: in un ambiente con poche molecole e conseguentemente urti, l'apporto energetico di ogni singola particella sposta l'equilibrio termico in modo più veloce e meno attenuato, ovvero la temperatura nei pressi della parete cresce ed in un flusso rarefatto è estremamente sensibile ad una variazione del Mach. Si può osservare dalla relazione estratta, anche se non direttamente campionato in SPARTA, che per $Ma \leq 0.3$ il comportamento è opposto e quindi in linea con la teoria classica.

Inoltre, pur se si tratti unicamente di proiezioni in una regione non campionata in SPARTA, per alti valori di $Kn - Re$ può verificarsi addirittura un'inversione termica del flusso, a causa del fenomeno precedentemente esposto, portando la temperatura nei pressi della parete a superare quella effettiva della superficie. Si specifica che questi punti di simulazione portano con tutta probabilità il Mach a superare la soglia sonica, passando da regime subsonico a supersonico. Di conseguenza, le supposizioni appena effettuate non trovano riscontro sperimentale nella campagna di test effettuati e rimarranno perciò tali.

Per analizzare meglio l'impatto della compressibilità, è stata estratta anche una relazione $Nu - Ma - Kn$ sostituendo la relazione $Re - Kn - Ma$ all'interno del modello matematico appena prodotto. Tale equazione risulterà utile successivamente anche per lo studio di sensibilità a densità e velocità. :

$$Nu = a + b \left(\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{Ma}{Kn} \right)^c + d Kn^e + f \left(\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} Ma \right)^g Kn^{(h-g)} \quad (5.11)$$

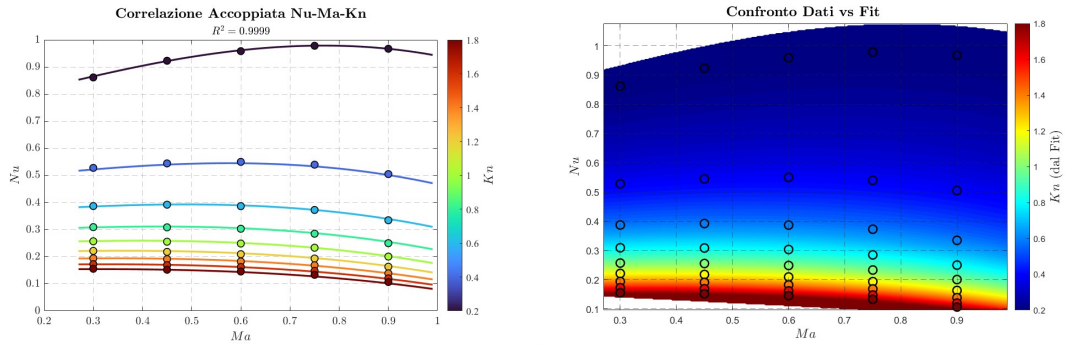


Figura 5.7: Dati SPARTA vs Relazione Nu-Ma-Kn

Si osserva evidentemente l'andamento del Nusselt in funzione del Mach, che presenta una crescita iniziale per poi diminuire con l'entrata in gioco degli effetti di compressibilità. Tale fenomeno è meno evidente in regimi ad alto knudsen, con delle linee più piatte e decrescenti per le ragioni viste in precedenza.

#	Kn	Ma	Re	u	Nu	#	Kn	Ma	Re	u	Nu
1	0.2	0.30	2.22	104.4	0.861	24	1.2	0.60	0.74	208.8	0.209
2	0.4	0.30	1.11	104.4	0.528	25	1.4	0.60	0.64	208.8	0.182
3	0.6	0.30	0.74	104.4	0.387	26	1.6	0.60	0.56	208.8	0.162
4	0.8	0.30	0.56	104.4	0.309	27	1.8	0.60	0.49	208.8	0.145
5	1.0	0.30	0.44	104.4	0.257	28	0.2	0.75	5.56	261.0	0.978
6	1.2	0.30	0.37	104.4	0.221	29	0.4	0.75	2.78	261.0	0.540
7	1.4	0.30	0.32	104.4	0.194	30	0.6	0.75	1.85	261.0	0.372
8	1.6	0.30	0.28	104.4	0.173	31	0.8	0.75	1.39	261.0	0.285
9	1.8	0.30	0.25	104.4	0.155	32	1.0	0.75	1.11	261.0	0.233
10	0.2	0.45	3.34	156.6	0.923	33	1.2	0.75	0.93	261.0	0.193
11	0.4	0.45	1.67	156.6	0.544	34	1.4	0.75	0.79	261.0	0.168
12	0.6	0.45	1.11	156.6	0.392	35	1.6	0.75	0.70	261.0	0.148
13	0.8	0.45	0.83	156.6	0.308	36	1.8	0.75	0.62	261.0	0.133
14	1.0	0.45	0.67	156.6	0.255	37	0.2	0.90	6.67	313.2	0.967
15	1.2	0.45	0.56	156.6	0.218	38	0.4	0.90	3.34	313.2	0.505
16	1.4	0.45	0.48	156.6	0.191	39	0.6	0.90	2.22	313.2	0.334
17	1.6	0.45	0.42	156.6	0.169	40	0.8	0.90	1.67	313.2	0.250
18	1.8	0.45	0.37	156.6	0.152	41	1.0	0.90	1.33	313.2	0.200
19	0.2	0.60	4.45	208.8	0.958	42	1.2	0.90	1.11	313.2	0.163
20	0.4	0.60	2.22	208.8	0.550	43	1.4	0.90	0.95	313.2	0.139
21	0.6	0.60	1.48	208.8	0.387	44	1.6	0.90	0.83	313.2	0.120
22	0.8	0.60	1.11	208.8	0.303	45	1.8	0.90	0.74	313.2	0.107
23	1.0	0.60	0.89	208.8	0.249						

Tabella 5.2: Riepilogo dei risultati delle simulazioni

5.7 Studio sulla sensibilità del Nusselt

5.7.1 Dipendenza dall'accomodation coefficient

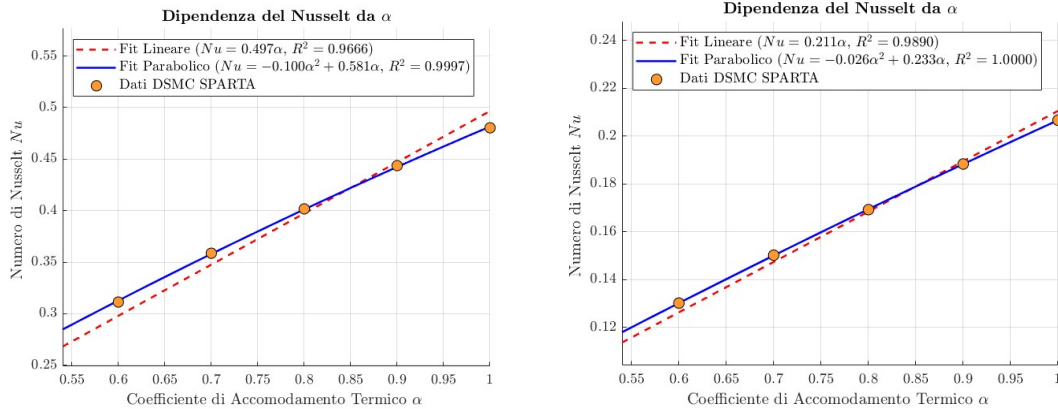
Il coefficiente di accomodamento termico, come visto nella sezione 1.5, rappresenta la frazione di particelle che, successivamente all'impatto con la parete, si equilibrano termicamente con essa, perdendo il precedente stato energetico e acquisendo quello determinato dalla parete. I casi limite sono:

- $\alpha = 0$ dove avviene riflessione speculare pura, con assenza di scambio termico con la parete che risulta essere adiabatica;
- $\alpha = 1$ per la riflessione diffusiva pura, dove ogni singola molecola è accomodata termicamente e, di conseguenza, lo scambio termico e il Nusselt sono massimi. Si specifica che tale condizione non si verifica mai in natura, ma α si aggira nel range 0.6 – 0.95 a seconda della tipologia di superficie.

Dalle premesse fatte, tale parametro influenza linearmente lo scambio energetico tra flusso e parete, quindi $Nu(\alpha) = \alpha Nu_{max}$. Per validare tale comportamento è stata effettuata un'analisi per il caso test 4.2 e per un caso estremo 5.3 al variare del coefficiente di accomodamento $\alpha = [0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0]$.

M	Re	Kn	T_∞ [K]	T_{wall} [K]
0.9	0.741	1.8	250	600

Tabella 5.3: Caso Test per studio sul coefficiente di accomodamento

Figura 5.8: Analisi di dipendenza da α

Come dimostrato nei grafici, sebbene la potenza termica vari drasticamente tra i due scenari, si osserva una conservazione della forma funzionale $Nu \propto \alpha$. Nella realtà, il fit dei dati più adeguato è di tipo parabolico, questo giustificato dalla presenza di un lieve effetto di schermatura dovuto alle collisioni tra le particelle riflesse e quelle incidenti in regime di transizione, che producono una resistenza termica aggiuntiva, riducendo di conseguenza l'efficienza dello scambio termico. Tale comportamento aumenta con α . Tuttavia, per semplificare l'analisi del Nusselt, si trascura questo aspetto e si andrà ad estrarre un modello globale del tipo:

$$Nu = f(Re, Ma, \tau) \cdot g(\alpha) \quad \text{con: } g(\alpha) = \alpha \quad (5.12)$$

In conclusione, con lo studio di indipendenza e di linearità del coefficiente di accomodamento si riduce il numero di campioni della campagna DSMC ed è possibile disaccoppiare α dalla matrice di test principale 4.3.

5.7.2 Sensibilità alla densità e alla velocità

Dalla relazione $Nu - Ma - Kn$ (5.11) è possibile calcolare le sensibilità a densità e velocità calcolando le derivate parziali logaritmiche, fissando gli altri parametri di simulazione. Dalle definizioni di Knudsen e Mach e applicando la regola della catena, vale che:

$$\begin{aligned}
 Kn &= \frac{\lambda}{D} = f(\rho) & Ma &= \frac{u}{\sqrt{\gamma RT}} = f(T, u) \\
 S_u &= \frac{\partial \log Nu}{\partial \log Ma} \frac{\partial \log Ma}{\partial \log u} \\
 S_\rho &= \frac{\partial \log Nu}{\partial \log Kn} \frac{\partial \log Kn}{\partial \log \rho}
 \end{aligned}
 \tag{5.13}$$

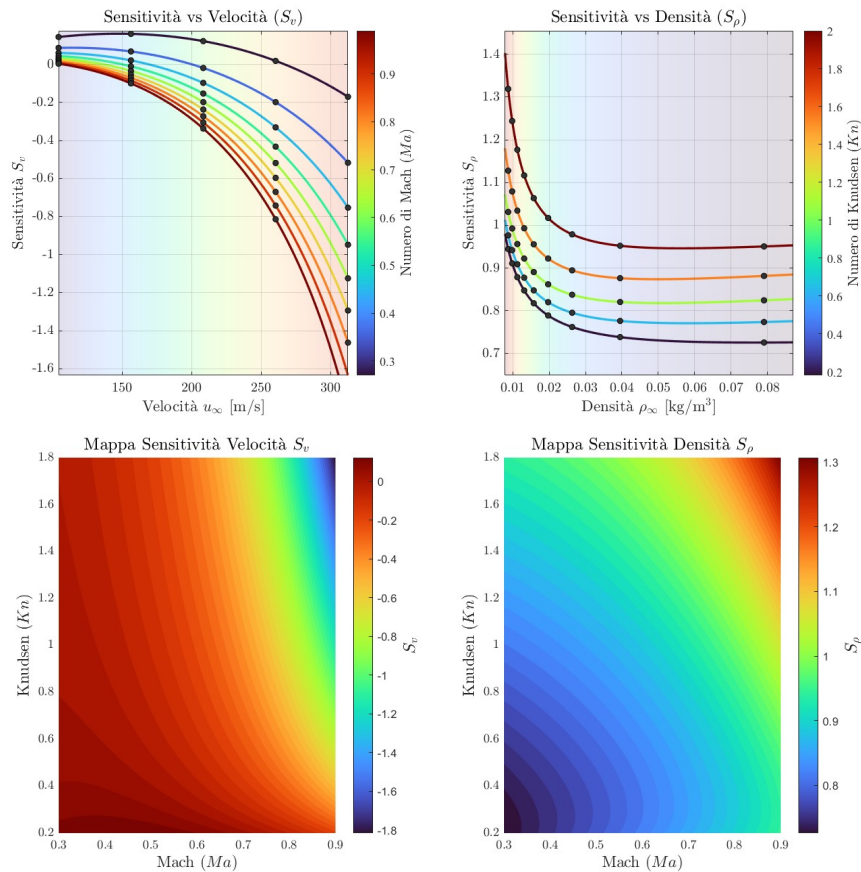


Figura 5.9: Sensibilità del Nusselt a velocità e densità

Dal primo grafico, in linea con le considerazioni effettuate in precedenza sugli andamenti della relazione del Nusselt, si può osservare che:

- La sensibilità a velocità assume per la gran parte dei punti test valori negativi e mostra un trend decrescente, dove la comprimibilità dovuta ad un aumento del Mach (e quindi di u_∞ visto che il test è condotto a temperatura costante, porta ad una penalizzazione dello scambio termico.
- L'aumento del Knudsen trasla le curve verso il basso e con pendenze crescenti all'aumentare della velocità, poiché in regimi rarefatti la bassa densità molecolare prossima a parete aumenta gli effetti penalizzanti legati alla velocità, quali lo scivolamento e il salto termico, rendendo il sistema estremamente sensibile a questo parametro.

Dal secondo grafico si nota che:

- I valori sono tutti positivi e nel range $0.7 \leq S_\rho \leq 1.4$, mostrando una tendenza asintotica verso un valore costante per le alte densità, mentre un'elevata pendenza a bassi valori di ρ , sintomo che in condizioni rarefatte una piccola variazione di densità ha un grande impatto sul Nusselt;
- Il Mach sposta la curva verso l'alto, descrivendo nuovamente che l'impatto della comprimibilità amplifica l'importanza della densità locale e conseguentemente l'equilibrio energetico con la parete.

I due grafici in basso mostrano come le variabili $Kn - Ma$ siano accoppiate, giustificando la necessità di utilizzare un modello $Nu - Ma - Kn$, poiché le variabili fisiche densità e velocità agiscono in modo non lineare con i parametri adimensionali di regime $Kn - Ma$. Inoltre, per il caso estremo a $Ma = 0.9$, $Kn = 1.8$ si ha che:

- La sensibilità a velocità crolla al valor minimo (≈ -1.8), ciò vuol dire che un incremento dell'1% di velocità provoca una riduzione del Nusselt più del doppio di quanto accade in zone a basso Mach e Knudsen.
- La sensibilità a densità tocca il picco massimo ≈ 1.3 , dimostrando che ad alte rarefazioni le superfici diventano estremamente dipendenti dal numero di impatti per lo scambio termico.

Nella zona a bassi Mach e Knudsen invece si osservano valori nulli o lievemente positivi della sensibilità a velocità, mentre valori all'incirca stabili e

confrontabili con quelli del regime continuo.

Si riportano i valori di sensibilità estratti per il caso test [4.2](#):

S_ρ	S_v
0.870	-0.220

Tabella 5.4: sensibilità a velocità e densità per caso test

5.7.3 Relazione Nu-Re-Kn-Tau

Successivamente, per conoscere l’impatto della temperatura di parete sullo scambio termico, si è scelto di individuare una relazione con 3 parametri di funzionamento variabili: Reynolds , Knudsen e rapporto di temperature τ . Sulla base del *Design of Experiment* (DOE) precedente 5.2, sono state effettuate 15 nuove simulazioni su 4 livelli di τ

$$Nu = a\tau^i + b Re^c \cdot \tau^j + d Kn^e \cdot \tau^k + f Re^g \cdot Kn^h \cdot \tau^l \quad (5.14)$$

a	b	c	d	e	f	
-0.0533	-5.0238	0.7023	0.2012	-0.4018	5.0734	
g	h	i	j	k	l	R^2
0.6712	-0.0510	1.1998	-1.1946	0.6615	-1.1627	0.9999

Tabella 5.5: Coefficienti del modello di best-fit $Nu - Re - Kn - \tau$ e coefficiente di determinazione

#	Kn	Ma	Re	u	T_g	τ	Nu	#	Kn	Ma	Re	u	T_g	τ	Nu
46	0.2	0.3	2.22	95.3	250	2.00	0.853	54	1.0	0.6	0.89	208.8	300	1.67	0.261
47	0.2	0.3	2.22	95.3	250	2.40	0.847	55	0.2	0.9	6.67	285.9	250	2.00	0.952
48	0.2	0.3	2.22	104.4	300	1.67	0.859	56	0.2	0.9	6.67	285.9	250	2.40	0.939
49	1.8	0.3	0.25	95.3	250	2.00	0.158	57	0.2	0.9	6.67	313.2	300	1.67	0.965
50	1.8	0.3	0.25	95.3	250	2.40	0.158	58	1.8	0.9	0.74	285.9	250	2.00	0.165
51	1.8	0.3	0.25	104.4	300	1.67	0.157	59	1.8	0.9	0.74	285.9	250	2.40	0.170
52	1.0	0.6	0.89	190.6	250	2.00	0.264	60	1.8	0.9	0.74	313.2	300	1.67	0.155
53	1.0	0.6	0.89	190.6	250	2.40	0.265								

Tabella 5.6: Riepilogo dati simulazioni: Analisi dell’effetto di τ sul numero di Nusselt

5.7.4 Studio alla sensibilità del Nusselt completo

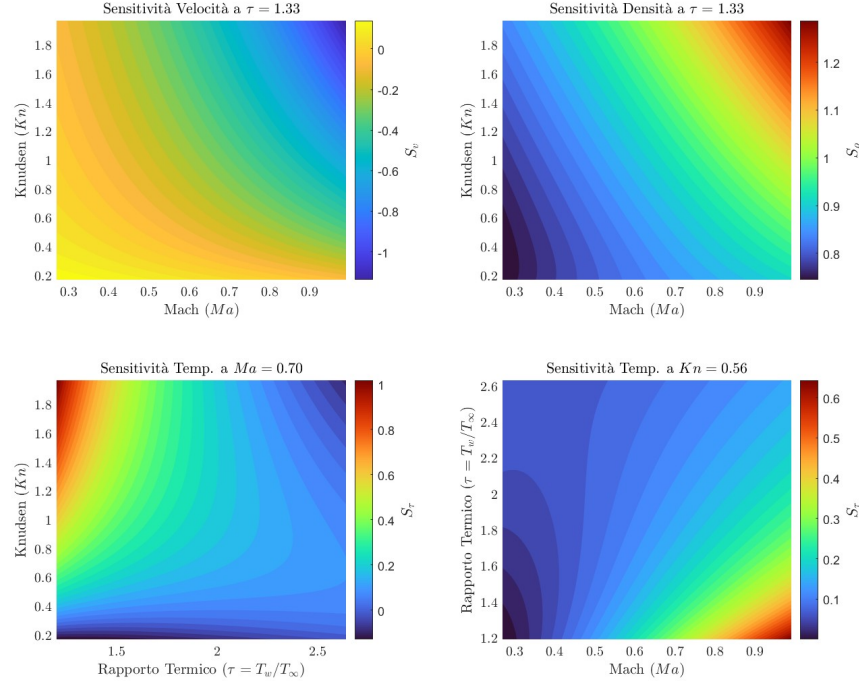


Figura 5.10: Sensibilità del Nusselt a velocità, densità e tratio

Dalle prime due immagini, che mostrano rispettivamente le sensibilità a velocità e densità per il caso $\tau = 1.33$ riscontriamo similitudini sia nell'andamento che nei valori rispetto alla precedente relazione $Nu - Ma - Kn$, che permettono di confermare il modello precedente e, inoltre, l'introduzione del parametro τ non ha stravolto i regimi di dominanza di Knudsen e Mach sul Nusselt per il caso test.

Nella coppia di grafici in basso notiamo che:

- L'aumento di Knudsen porta ad un incremento della sensibilità al rapporto delle temperature S_τ , specialmente quando τ è basso, ossia parete e fluido hanno temperature simili.
- La sensibilità a τ cresce con il numero di Mach, specialmente a bassi valori di τ . Questo perchè aumenta la temperatura adiabatica di parete e si riduce il salto effettivo delle temperature, soprattutto quando non c'è una differenza eccessiva tra la temperatura del gas e quella di parete.

- Si notano delle zone di stabilizzazione della sensibilità per valori bassi di Knudsen e Mach.
- Le zone ad elevato τ presentano delle sensibilità che si possono approssimare a valori nulli, quanto, in tal caso, essendo la parete molto più calda del gas, essa risente in modo minore e trascurabile il riscaldamento aerodinamico dovuto al Mach.

In conclusione, l'aggiunta del nuovo parametro τ , permette di esaminare un nuovo fenomeno di accoppiamento, di tipo termo-meccanico, precedentemente trascurato. Il rapporto tra la temperatura di parete e quella del gas indisturbato risulta essere fondamentale nell'influenza del Nusselt, ma aumentando il gap la sensibilità decresce, fino a diventare trascurabile.

Vengono riportati i risultati nel punto di test [4.2](#)

S_ρ	S_v	S_τ
0.8873	-0.1593	0.2528

Tabella 5.7: Sensibilità a velocità e densità per caso test

Capitolo 6

Conclusioni

Nel presente lavoro di tesi sono state analizzate le problematiche relative allo scambio termico di anemometri a filo caldo in ambienti subsonici compressibili e rarefatti. L'utilizzo del software SPARTA DSMC ha consentito il campionamento efficace nel range $0.3 \leq M \leq 0.9$, $0.2 \leq Kn \leq 1.8$ delle grandezze termodinamiche di superficie, agendo facilmente sulle condizioni del flusso in ingresso e sullo stato termico della superficie. Le simulazioni raccolte sono in linea con quelle presenti in letteratura, specificando però che il confronto è stato effettuato principalmente rispetto a relazioni empiriche estrapolate dal range dello *slip flow* a quello di transizione. Lo studio di dipendenza del Nusselt dall'*accomodation coefficient* α ha permesso il disaccoppiamento di tale variabile dalla matrice di test principale. A seguito della raccolta dati, è stata proposta una relazione di fit che esprime il Nusselt in funzione dei parametri di interesse ($Re - Ma - Kn - \tau$) (5.14). In conclusione, sono state calcolate e analizzate le sensitività a velocità, densità e τ : rispetto ai casi test in letteratura in regimi continuo e *slip flow*, si osserva un impatto penalizzante della velocità sullo scambio termico e una sensitività a densità e al rapporto di temperature aumentate in regimi ad alto $Kn - Ma$ e con τ bassi. Sviluppi futuri del presente lavoro possono prevedere il completamento del campionamento nell'intero regime di transizione ($0.1 \leq Kn \leq 10$) verificando l'allineamento al comportamento molecolare libero, ma anche una validazione sperimentale, nei limiti degli strumenti a disposizione.

Bibliografia

- [1] Bird G.A., *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon Press, 1976.
- [2] Sharipov F., *Rerefied Gas Dynamics: Fundamentals for Research and Practice*, Wiley-VCH, 2016.
- [3] Tsien H.S., *Superaerodynamics, Mechanics of Rarefied Gases*, Journal of the Aeronautical Sciences, Vol. 13, pp. 653-664, 1946.
- [4] Smoluchowski M., *Über Wärmeleitung in verdünnten Gasen*, Annalen der Physik, 64, pp. 101-130, 1898.
- [5] Chapman S., Cowling T.G., *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, 1952.
- [6] Maxwell J.C., *Illustrations of the Dynamical Theory of Gases*, Philosophical Magazine, 19(124), pp. 19-32, 1860.
- [7] Cercignani C., Lampis C.D., *Cercignani-Lampis Problem for the Linearized Boltzmann Equation*, Transport Theory and Statistical Physics, 1(1), pp. 101-114, 1971.
- [8] Russo G.P., *Aerodynamic Measurements: From Physical Principles to Turnkey Instrumentation*, Woodhead Publishing Limited, 2011.
- [9] King L.V., *On the Convection of Heat from Small Cylinders in a Stream of Fluid*, Philosophical Transactions of the Royal Society A, 214, pp. 373-432, 1914.
- [10] Boufidi E. and Fontaneto F., *Towards a more reliable application of hot-wire anemometry in complex compressible flows*, XXIII Biannual Symposium on Measuring Techniques in Turbomachinery, Transonic and Supersonic Flow in Cascades and Turbomachines, 2016
- [11] Acarer S. Cukurel, B. and T. Arts, *A novel perspective to high-speed cross-hotwire calibration methodology*, Experiments in Fluids, Vol. 53 No. 4:1073–1085, 2012.
- [12] Biondi F., *On the application of hot-wire anemometry in a transonic turbine cascade*, von Karman Institute For Fluid Dynamics, Master report,

- 2021.
- [13] Lousada M.C., *Hot-Wire Measurements in a Low Pressure Turbine Linear Cascade*, von Karman Institute For Fluid Dynamics, Master report, 2022
 - [14] Dapor M., *Monte Carlo Methods: Theoretical and Practical Aspects*, arXiv:2001.04471 [physics.comp-ph], 2020.
 - [15] SPARTA Direct Simulation Monte Carlo DSMC Simulator, <https://sparta.github.io/>
 - [16] Pastorino G., Simonassi L., Lopes G., Boufidi E., Fontaneto F., and Lavagnoli S., *Measurements of turbulence in compressible low-density flows at the inlet of a transonic linear cascade with and without unsteady wakes*, Journal of Turbomachinery, 146(7), 2024.
 - [17] Neroni S., *Thermal anemometry in a low-density high-speed cascade*, Università di Pisa, Master report, 2023.
 - [18] Xie F., Li Y., Wang X., Wang Y., Lei G., and Xing K.. *Numerical study on flow and heat transfer characteristics of low pressure gas in slip flow regime*, International Journal of Thermal Sciences, 124:131–145, 2018.
 - [19] Xie F., Li Y., Liu Z., Wang X., Wang L., *A forced convection heat transfer correlation of rarefied gases cross-flowing over a circular cylinder*, Experimental Thermal and Fluid Science, 80, pp. 327-336, 2017.
 - [20] Dewey C.F., *A correlation of convective heat transfer and recovery temperature data for cylinders in compressible flow*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 8 No. 2:pp. 245–252., 1965.
 - [21] Lopes G., Simonassi L., Gendebien S., Torre A.F.M., Patinios M., Zeller N., Pintat L. and Lavagnoli S., *An Open Test Case for High-Speed Low-Pressure Turbines: The SPLEEN C1 Cascade*, International Journal Turbomachinery Propulsion and Power, 2025.
 - [22] Bliidi S., Miton H., *Use of the Hot Wire Anemometry for Velocity and Temperature Measurements in a Turbomachine*, Journal de Physique III, 1995, 5 (10), pp.1513-1535. ff10.1051/jp3:1995208ff. ffjpa-00249399f.
 - [23] Barros D.C., Larchevêque L., Dupont P., *A model of heat transfer from a cylinder in high-speed slip flow and determination of temperature jump coefficients using hot-wires*, Aix Marseille Université, CNRS, IUSTI.
 - [24] Pich J., *The Drag of a Cylinder in the Transition Region*, Institute of Physical Chemistry, Prague, Czechoslovakia, 1968.
 - [25] Cevdet Çelenligil M., *Heat transfer simulation of rarefied laminar flow past a circular cylinder*, AIP Conf. Proc., 2016; 1786 (1): 070001.

- [26] Gu X-J, Barber RW, John B, Emerson DR., *Non-equilibrium effects on flow past a circular cylinder in the slip and early transition regime* Journal of Fluid Mechanics,. 2019;860:654-681. doi:10.1017/jfm.2018.869 .
- [27] Dai L., Wu, H. (April 27, 2022). *Rarefaction Effect, Heat Transfer, and Drag Coefficient for Gas Flow Around Square Cylinder in Transition Flow Regime.*, ASME. J. Heat Transfer., July 2022; 144(7): 071801
- [28] Hilpert, R. (1933). *Forschung auf dem Gebiete des Ingenieurwesens*, Wärmeabgabe von geheizten Drähten und Rohren, 4(4), 215–224.

Ringraziamenti

La mia più sincera riconoscenza va ai professori Andrea Ferrero e Sergio Lavagnoli, che fornendo aiuto, materiali e consigli, hanno coadiuvato lo sviluppo del presente elaborato.

Un doveroso e sentito grazie va a chi mi ha sostenuto durante il percorso di studi: la vostra presenza e il vostro sostegno ha permesso la realizzazione di tutto questo e della persona che sono. In particolare, vorrei dedicare un pensiero di gratitudine alla mia famiglia, Mamma, Papà, Nicola, tutti i Nonni, gli Zii, i Cugini e i parenti, e dedicare il raggiungimento di tale obiettivo a chi se ne è andato, ma è sempre presente nel cuore e nei ricordi.

Poi vorrei ringraziare gli amici di sempre e quelli incontrati lungo il cammino: avete permesso di alleggerire il percorso attraverso momenti di spensieratezza e siete stati un punto di riferimento nei periodi migliori e peggiori di questi ultimi anni.

A tutti voi, un sincero Grazie.