

POLITECNICO DI TORINO

Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale

**Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Aerospaziale**

Tesi di Laurea Magistrale

**Analisi CFD e Modellazione
Multifidelity per lo Studio Parametrico
delle Prestazioni di un Ugello
Convergente-Divergente**



**Politecnico
di Torino**

Relatore

prof. Andrea Ferrero

Candidato

Linda Ennio

31 Marzo 2026

Indice

1	Introduzione	4
2	Stato dell'arte	6
2.1	Ugelli convergente-divergenti: prestazioni, geometria e condizioni fuori progetto	6
2.2	CFD di ugelli convergente-divergenti e ruolo dei modelli di turbolenza	8
2.3	Modelli multifidelity per l'analisi C_{FD}	10
2.4	Collocazione del presente lavoro	12
3	Simulazioni low-fidelity: Equazioni di Eulero	13
3.1	Descrizione del problema computazionale e approccio low-fidelity . . .	13
3.2	Le equazioni di Eulero	14
3.3	Formulazione tridimensionale	14
3.4	Formulazione 2D assialsimmetrica	15
3.4.1	Equazione di conservazione della massa	16
3.4.2	Equazioni della quantità di moto	16
3.4.3	Equazione dell'energia	16
3.4.4	Interpretazione fisica dei termini geometrici	17
3.5	Costruzione delle griglie nel caso 2D assialsimmetrico	18
3.5.1	Generazione della griglia - Gmsh	18
3.6	Soluzione: Metodo dei volumi finiti	21
3.6.1	Problema di Riemann e flussi numerici	23
3.6.2	Solutore di Riemann approssimato di Roe	25
3.6.3	Integrazione temporale	28
3.6.4	Condizione di stabilità C_{FL}	29
3.7	Struttura del solutore numerico	30
3.7.1	Lettura della griglia e inizializzazione	31
3.7.2	Calcolo del passo temporale	33
3.7.3	Calcolo dei flussi numerici e costruzione dei residui	33
3.7.4	Aggiornamento della soluzione	35

3.7.5	Monitoraggio della convergenza	36
3.7.6	Calcolo delle funzioni obiettivo	36
3.8	ModeFRONTIER: simulazione low-fidelity	37
3.9	Response Surface Methodology	43
3.9.1	Stepwise Regression	45
3.9.2	Gaussian Process	48
3.9.3	Radial Basis Function	53
3.9.4	Neural Networks	56
3.9.5	Scelta del modello low fidelity	59
4	Simulazioni High fidelity - Reynolds-Averaged Navier-Stokes	64
4.1	Equazioni di Navier–Stokes per flussi compressibili	65
4.1.1	Equazione di conservazione della massa	65
4.1.2	Equazione di bilancio della quantità di moto	65
4.1.3	Equazione di conservazione dell’energia	66
4.1.4	Chiusura del problema	66
4.1.5	Forma delle equazioni di Navier–Stokes comprimibili	67
4.2	Equazioni Reynolds-Averaged Navier–Stokes	68
4.2.1	Decomposizione di Reynolds	68
4.2.2	Media di Favre nel caso comprimibile	69
4.2.3	Stress di Reynolds e problema di chiusura	70
4.2.4	Ipotesi di Boussinesq	70
4.2.5	Modello di Spalart–Allmaras	71
4.2.6	Regione vicino alla parete e parametro y^+	73
4.3	Discretizzazione del dominio computazionale	75
4.4	Impostazione del solutore numerico	77
4.4.1	Discretizzazione spaziale del secondo ordine	78
4.4.2	Ricostruzione lineare del secondo ordine	78
4.4.3	Barriera di Godunov e necessità dei limitatori	79
4.4.4	Limitatori di pendenza su griglie non strutturate	79
4.4.5	Calcolo dei gradienti	80
4.4.6	Calcolo del gradiente all’interfaccia per i termini diffusivi	81
4.4.7	Condizioni al contorno e proprietà del fluido	82
4.4.8	Convergenza del calcolo	84
4.4.9	Grandezze di interesse e post-processing	84
4.5	modeFRONTIER: simulazione high-fidelity	85
5	Analisi multifidelity	88

5.1	Impostazione del problema multifidelity	89
5.2	Correction-Based Multi-Fidelity Model	89
5.3	Co-Kriging	92
5.4	Confronto tra CBMF e co-Kriging	95
6	Ottimizzazione di forma	100
6.1	Impostazione del problema di ottimizzazione	100
6.2	Setup dell'ottimizzazione in modeFRONTIER	100
6.3	Risultati dell'ottimizzazione	101
7	Conclusioni	104
	Bibliografia	106

Capitolo 1

Introduzione

Nel presente lavoro di tesi viene discusso un problema di ottimizzazione multidisciplinare focalizzato sull'analisi dell'influenza di due parametri geometrici sulle prestazioni di un ugello convergente-divergente assialsimmetrico. In particolare, si sono scelti come parametri di design la lunghezza caratteristica del tratto divergente L l'angolo di apertura θ , che definiscono la geometria dell'ugello e ne influenzano in modo diretto il comportamento fluidodinamico e le prestazioni complessive.

Gli ugelli convergente-divergenti trovano largo impiego in ambito aeronautico e spaziale, dove vengono utilizzati per accelerare flussi comprimibili in uscita dai sistemi propulsivi. In queste condizioni non è più possibile assumere il fluido come incomprimibile, poiché le variazioni di pressione sono accompagnate da variazioni apprezzabili di densità e temperatura. Diventa quindi necessario adottare modelli in grado di descrivere in modo adeguato il campo di moto e i fenomeni caratteristici dei flussi ad alta velocità.

Nel caso in esame, la variazione dei parametri geometrici modifica non solo la distribuzione di pressione all'interno dell'ugello, ma anche alcune grandezze globali di interesse progettuale. Per ciascuna configurazione vengono infatti valutate due funzioni obiettivo: il coefficiente di spinta C_F , che rappresenta una misura delle prestazioni propulsive, e la superficie totale dell'ugello, assunta come indicatore della quantità di materiale necessaria alla sua realizzazione e quindi, in prima approssimazione, del peso del componente. Il problema assume pertanto una natura multi-obiettivo, poiché una configurazione favorevole dal punto di vista della spinta non coincide necessariamente con quella più conveniente in termini di massa.

L'attività è stata sviluppata secondo un approccio a due livelli di fedeltà. In una prima fase è stato realizzato un modello *low-fidelity*, basato sulle equazioni di Eulero assialsimmetriche, implementate in un codice Fortran sviluppato nel corso della tesi. Questo strumento ha permesso di analizzare un elevato numero di confi-

gurazioni geometriche con costi computazionali contenuti, fornendo una descrizione semplificata ma utile del comportamento del flusso e delle tendenze principali delle grandezze di interesse.

Successivamente, l'analisi è stata estesa a un livello di descrizione più accurato mediante simulazioni *high-fidelity* condotte in *ANSYS Fluent*, attraverso la risoluzione delle equazioni di Navier–Stokes mediate secondo Reynolds (RANS). Questo secondo approccio consente di tenere conto degli effetti viscosi e turbolenti, che nel caso reale influenzano in modo significativo il comportamento del flusso e possono determinare scostamenti anche rilevanti rispetto alle previsioni ottenute con il modello inviscido.

I dati ricavati dalle simulazioni ai due diversi livelli di fedeltà sono stati quindi utilizzati per costruire modelli surrogati, o *Response Surface Models* (RSM), in ambiente *modeFRONTIER*. Tali modelli consentono di approssimare il legame tra i parametri geometrici e le prestazioni dell'ugello, riducendo il numero di simulazioni necessarie e rendendo più efficiente l'esplorazione dello spazio progettuale. Su questa base è stato inoltre impostato uno studio *multifidelity*, con l'obiettivo di combinare il basso costo computazionale del modello inviscido con la maggiore accuratezza delle simulazioni RANS.

La tesi si colloca quindi tra uno studio parametrico e un problema di ottimizzazione. Da un lato, infatti, si vuole comprendere in che modo le variazioni di L e θ influenzino il coefficiente di spinta e la superficie dell'ugello; dall'altro, si intende valutare l'efficacia di un approccio basato su modelli surrogati e analisi *multifidelity* per individuare configurazioni progettuali vantaggiose in modo più rapido ed efficiente rispetto a un utilizzo esclusivo di simulazioni ad alta fedeltà.

Capitolo 2

Stato dell'arte

2.1 Ugelli convergente-divergenti: prestazioni, geometria e condizioni fuori progetto

La capacità di un sistema propulsivo a razzo di generare spinta mantenendo limitati i consumi dipende dall'analisi degli ugelli convergente-divergenti, ed è per questo che questo tema è centrale nell'ambito aerospaziale. La progettazione del tratto divergente è un problema tutt'altro che banale, nonostante il principio di funzionamento sia ben noto. Questo è dovuto al fatto che vengono coinvolti aspetti fluidodinamici, geometrici e strutturali che spesso entrano in competizione tra loro.[1, 2].

In particolare, un divergente più lungo e meno aperto consente al flusso di espandersi in modo più graduale, favorendo una migliore componente assiale della quantità di moto in uscita. Lo studio della geometria del divergente è reso particolarmente interessante proprio da questo compromesso: non esiste infatti una configurazione ottimale in senso assoluto, ma diverse soluzioni particolari che dipendono dal modo in cui si bilanciano spinta, peso, ingombro e campo operativo del sistema.[1].

L'influenza dell'angolo di divergenza sul coefficiente di spinta è mostrata con chiarezza dalla letteratura classica. In particolare, gli studi sperimentali condotti su ugelli conici convergente-divergenti hanno evidenziato che, in prossimità del rapporto di pressione di progetto, il coefficiente di spinta tende a diminuire al crescere dell'angolo di divergenza. Questo comportamento è fisicamente intuitivo: aumentando l'apertura del divergente, una quota maggiore della quantità di moto in uscita non è più orientata lungo l'asse dell'ugello, e ciò si traduce in una perdita di spinta utile. Gli stessi risultati mostrano inoltre che, a parità di angolo di divergenza, aumenti anche rilevanti della superficie bagnata del divergente non sempre si traducono in incrementi significativi della prestazione. Da ciò si evince che allungare

l'ugello non garantisce automaticamente un beneficio proporzionale in termini di coefficiente di spinta.[1].

Questo aspetto è particolarmente rilevante dal punto di vista progettuale. Se da un lato una geometria più estesa può favorire un'espansione più ordinata del flusso, dall'altro comporta inevitabilmente un aumento della superficie dell'ugello e quindi della quantità di materiale necessaria per realizzarlo. Per questa ragione, nella pratica progettuale il problema assume spesso una natura multi-obiettivo: alla ricerca di una prestazione propulsiva elevata si affianca l'esigenza di contenere peso, ingombro e complessità costruttiva. In questo senso, la scelta della geometria del divergente non può essere guidata da un solo indicatore, ma richiede una valutazione congiunta di grandezze globali differenti.[1].

Un ulteriore elemento di complessità da aggiungere al quadro delineato è legato al fatto che l'ugello non opera sempre nelle condizioni nominali per cui è stato progettato. In molte applicazioni, infatti, il sistema si trova a lavorare anche in condizioni fuori progetto e, in particolare, in regimi di sovraespansione. In questi casi il flusso può subire una ricomprensione interna accompagnata dalla formazione di onde d'urto e, nei casi più critici, da separazione della vena fluida dalle pareti del divergente. La presenza della separazione modifica in modo sostanziale la distribuzione di pressione lungo la parete e, di conseguenza, altera la spinta effettivamente prodotta dall'ugello.[1, 2]. Nella letteratura sulla separazione in ugelli supersonici viene chiarito che il comportamento reale del flusso si discosta sensibilmente dalla rappresentazione inviscida più semplice. In assenza di effetti viscosi, il quadro teorico classico descrive il moto nel divergente come una sequenza composta da espansione supersonica, onda d'urto normale e successiva ricomprensione subsonica. Se però teniamo conto della presenza dello strato limite e della possibile separazione, il campo di moto reale assume una struttura molto più articolata, con onde d'urto oblique, rapide risalite di pressione e un forte legame tra posizione della separazione, tipo di ugello e stato dello strato limite. In questo risiede il motivo per il quale la sola teoria inviscida non sia sufficiente per descrivere in modo accurato il comportamento di un ugello in condizioni operative realistiche.[2].

Nel complesso, gli studi presenti in letteratura mostrano che la progettazione di un ugello convergente-divergente deve essere affrontata come un problema di compromesso. Ridurre l'angolo di divergenza può migliorare la prestazione in prossimità del punto di progetto, ma comporta generalmente un ugello più lungo e più pesante. Aumentare l'angolo rende invece il componente più compatto, ma può introdurre perdite legate al disallineamento del getto e modificare in modo sensibile il comportamento fuori progetto. Ne segue che la geometria del divergente va valutata

tenendo conto non solo della spinta massima ottenibile, ma anche del campo di funzionamento previsto e dei vincoli complessivi del sistema.[1, 2].

2.2 CFD di ugelli convergente-divergenti e ruolo dei modelli di turbolenza

Accanto agli studi teorici e sperimentali, la fluidodinamica computazionale ha assunto un ruolo sempre più importante nell'analisi degli ugelli convergente-divergenti. Questo è dovuto soprattutto al fatto che il flusso all'interno del divergente, in particolare in condizioni supersoniche o fuori progetto, presenta caratteristiche che non possono essere descritte in modo soddisfacente mediante modelli troppo semplificati. La presenza di onde d'urto, l'interazione tra shock e strato limite, la possibile separazione del flusso e la forte variazione delle grandezze termodinamiche lungo l'asse dell'ugello rendono infatti necessario l'impiego di strumenti numerici in grado di ricostruire il campo di moto con un livello di dettaglio più elevato.[3, 4]

In questo contesto, la CFD viene utilizzata non solo per stimare grandezze globali, come la distribuzione di pressione o il numero di Mach, ma anche per analizzare la struttura interna del flusso e il modo in cui questa evolve al variare delle condizioni operative. In particolare, nei lavori dedicati agli ugelli supersonici, l'attenzione è spesso rivolta alla posizione delle onde d'urto, alla configurazione del getto in uscita e al comportamento del flusso in funzione del *nozzle pressure ratio*. Un esempio recente è fornito dal lavoro di Khan et al., in cui un ugello convergente-divergente per $M = 2$ è stato analizzato in ANSYS Fluent mediante una simulazione bidimensionale comprimibile, con solver *density-based implicit*, griglia strutturata e confronto con risultati sperimentali di letteratura. In quel caso, lo studio è stato impiegato per ricostruire il campo di pressione, temperatura, densità e velocità e per evidenziare la formazione del sistema di shock nel condotto.[4]

Se però la CFD rappresenta uno strumento estremamente potente, la qualità dei risultati dipende in modo diretto dalle scelte modellistiche adottate. Nel caso dei flussi comprimibili in ugelli convergente-divergenti, uno degli aspetti più delicati è il trattamento della viscosità e della turbolenza. La teoria inviscida, nonostante possa essere utile per cogliere la tendenza generale dell'espansione, non è tuttavia sufficiente quando l'obiettivo è descrivere in modo realistico la posizione dello shock, la distribuzione di pressione sulla parete o l'eventuale comparsa della separazione. È per questo motivo che nella pratica numerica si ricorre molto spesso a formulazioni viscoso basate sulle equazioni di Navier-Stokes mediate secondo Reynolds, abbinate a un opportuno modello di turbolenza.[3, 5]

La letteratura mostra in modo piuttosto chiaro che la scelta del modello di turbolenza non è un dettaglio secondario; in uno studio dedicato al flusso comprimibile in un ugello convergente-divergente bidimensionale, Balabel et al. hanno confrontato sei diversi modelli di turbolenza RANS, valutandone la capacità di riprodurre la distribuzione di pressione sulla parete, la posizione dello shock e il punto di separazione per diversi valori di NPR . I risultati mostrano che il comportamento del flusso cambia sensibilmente con il rapporto di pressione e che shock e separazione si spostano progressivamente verso valle all'aumentare di NPR . Lo stesso lavoro conclude che il modello SST $k-\omega$ fornisce nel complesso i risultati più convincenti, soprattutto nella predizione della posizione dello shock e del punto di separazione, mentre altri modelli risultano meno accurati oppure più costosi dal punto di vista computazionale.[3]

Un aspetto particolarmente interessante di quello studio è che mette in evidenza la complessità della struttura del flusso quando si instaura la separazione. In tali condizioni, il moto non può più essere interpretato come una semplice successione di espansione e ricompansione, ma assume una configurazione molto più articolata, caratterizzata da onde oblique, *lambda shock*, *shear layer* separati e regioni di ricircolo a valle del punto di distacco. Questa osservazione è importante perché conferma che, in presenza di interazione tra shock e strato limite, la capacità del modello numerico di rappresentare correttamente i fenomeni viscosi diventa essenziale per ottenere risultati attendibili.[3]

Un lavoro più vicino, per impostazione, al caso affrontato nella presente tesi è quello di Najjar et al., nel quale il flusso attraverso un ugello convergente-divergente è stato simulato in Fluent con formulazione bidimensionale assialsimmetrica, confrontando due modelli di turbolenza: il modello standard $k-\epsilon$ e il modello di Spalart-Allmaras. Anche in questo caso emerge con chiarezza che la previsione del comportamento del flusso dipende dalla modellazione scelta. Infatti, dall'analisi dell'andamento del numero di Mach, della pressione statica e della temperatura lungo l'ugello, vengono messe in luce differenze visibili tra i due modelli nella posizione del picco di Mach e nella localizzazione delle variazioni più brusche associate agli effetti di compressibilità. Nonostante la semplicità del lavoro, esso è interessante in quanto ribadisce un punto fondamentale: anche in geometrie apparentemente elementari, la rappresentazione numerica del flusso può cambiare in modo sensibile al variare del modello di turbolenza.[5]

Oltre al modello fisico, c'è un ulteriore aspetto su cui si incentra la letteratura, ovvero la qualità della discretizzazione numerica. Negli studi $C_F D$ sugli ugelli non è infatti sufficiente scegliere un solver appropriato; è altrettanto necessario verificare

che la soluzione non dipenda in maniera significativa dalla mesh utilizzata. Il lavoro di Khan et al. dedica esplicitamente una fase preliminare al *mesh independence study*, mostrando che l'analisi della sensibilità alla griglia rappresenta un passaggio necessario prima di interpretare i risultati fisici della simulazione. Nello stesso studio, la griglia viene costruita in forma strutturata, proprio per migliorare l'affidabilità della soluzione nel tratto convergente-divergente e nelle zone di forte variazione del flusso. Considerazioni analoghe sono presenti anche in Balabel et al., dove la scelta della griglia viene discussa in relazione sia al trattamento near-wall sia alla capacità di catturare correttamente shock e interazione shock-boundary layer.[4, 3]

Quello della validazione, inoltre, è un ulteriore tema ricorrente negli studi $C_F D$ sugli ugelli. La simulazione numerica, per poter acquisire reale significato deve essere confrontata con risultati sperimentali, dati di letteratura o configurazioni di riferimento sufficientemente affidabili. Nel lavoro di Balabel et al. la validazione viene effettuata confrontando la distribuzione di pressione statica sulla parete con misure sperimentali, mentre nel lavoro di Khan et al. il confronto con dati disponibili in letteratura viene utilizzato per verificare la correttezza del campo di flusso ricostruito. Questo aspetto è particolarmente importante in problemi come quello degli ugelli convergente-divergenti, nei quali una piccola differenza nella posizione dello shock o del punto di separazione può tradursi in una variazione non trascurabile delle prestazioni globali.[4, 3]

Nel complesso, la letteratura $C_F D$ sugli ugelli convergente-divergenti mostra due elementi con grande chiarezza. Il primo è che la simulazione numerica rappresenta uno strumento indispensabile per studiare flussi comprimibili caratterizzati da shock, separazione e forti gradienti di pressione. Il secondo è che l'affidabilità dei risultati dipende da una combinazione di fattori quali la scelta del modello di turbolenza, la qualità della mesh, l'impostazione del solver e la procedura di validazione. Per questa ragione, nei problemi di interesse ingegneristico la $C_F D$ non può essere considerata come un semplice passaggio operativo, ma deve essere trattata come una fase metodologica vera e propria, nella quale ogni scelta numerica contribuisce alla qualità finale della previsione.[3, 4, 5]

2.3 Modelli multifidelity per l'analisi $C_F D$

Quando l'analisi di un problema fluidodinamico richiede simulazioni numerose, il costo computazionale del modello più accurato può diventare rapidamente il principale limite allo studio parametrico. Questo aspetto è particolarmente evidente nei casi in cui il livello di descrizione fisica necessario a rappresentare in modo rea-

listico il comportamento del flusso porta a utilizzare modelli viscosi e turbolenti, capaci di restituire una previsione più affidabile, ma molto più onerosi dal punto di vista numerico. In questo contesto si inseriscono i modelli multifidelity, il cui obiettivo è proprio quello di combinare informazioni provenienti da livelli di fedeltà differenti, così da mantenere un buon compromesso tra accuratezza e costo computazionale.[**FernandezGodino2024**, 6]

L'idea di fondo è relativamente semplice. Un modello low-fidelity, meno costoso, viene utilizzato per descrivere l'andamento generale della risposta nel dominio dei parametri, mentre un insieme più limitato di dati high-fidelity viene impiegato per correggere gli scostamenti introdotti dalle semplificazioni del modello più rapido. In questo modo, il livello low-fidelity fornisce copertura dello spazio di progetto, mentre il livello high-fidelity trasferisce al modello finale il contenuto fisico più accurato.[**FernandezGodino2024**, 6].

Tra gli approcci più diffusi in letteratura vi sono i metodi basati sulla discrepanza, nei quali la risposta ad alta fedeltà viene rappresentata come correzione della risposta low-fidelity. In forma generale, tale idea può essere espressa come

$$\hat{y}_H(x) = \rho \hat{y}_L(x) + \hat{\delta}(x), \quad (2.1)$$

dove $\hat{y}_L(x)$ rappresenta il modello low-fidelity, ρ è un coefficiente di scala e $\hat{\delta}(x)$ è una funzione che descrive la differenza residua rispetto al livello high-fidelity. In una forma più semplice, spesso utilizzata quando la correzione è trattata in modo additivo, il modello può essere scritto come[**FernandezGodino2024**, 6]

$$\hat{y}_H(x) = \hat{y}_L(x) + \hat{\delta}(x). \quad (2.2)$$

Accanto a questi approcci, la letteratura propone anche formulazioni di tipo probabilistico, tra cui il co-Kriging, che può essere visto come un'estensione multifidelity del Kriging. In questo caso il livello high-fidelity non viene semplicemente corretto a partire dal low-fidelity, ma viene costruito sfruttando in modo esplicito la correlazione statistica tra i due livelli. Rispetto ai modelli di correzione più semplici, il co-Kriging consente quindi una fusione più strutturata delle informazioni provenienti dai diversi livelli di fedeltà.[**FernandezGodino2024**, 6]

Nel complesso, l'interesse verso il multifidelity è legato soprattutto a problemi in cui il costo delle simulazioni high-fidelity è troppo elevato per consentire una copertura estesa dello spazio di progetto. In questi casi, il ricorso a un modello low-fidelity permette di descrivere in modo economico le tendenze principali della risposta, mentre il contributo high-fidelity consente di recuperare il livello di accuratezza

necessario nelle configurazioni di maggiore interesse. Per questa ragione, i modelli multifidelity risultano particolarmente adatti ai problemi di analisi parametrica e ottimizzazione in ambito fluidodinamico.[**FernandezGodino2024**, 6].

Nel caso del presente lavoro, questa impostazione risulta particolarmente coerente. Il problema è infatti affrontato mediante due livelli di descrizione distinti ma compatibili: un livello low-fidelity, basato su un modello inviscido assialsimmetrico, utile per l'esplorazione rapida del dominio, e un livello high-fidelity, basato su simulazioni RANS, impiegato per tenere conto in modo più realistico degli effetti viscosi e turbolenti. In questo senso, l'approccio multifidelity rappresenta il naturale punto di contatto tra l'esigenza di contenere il costo computazionale e quella di mantenere una descrizione fisicamente affidabile delle prestazioni dell'ugello.

2.4 Collocazione del presente lavoro

Alla luce della letteratura esaminata, emergono con chiarezza alcuni punti centrali. In primo luogo, la geometria del divergente influenza in modo significativo le prestazioni dell'ugello, sia in condizioni di progetto sia in condizioni fuori progetto, nelle quali possono comparire shock interni e separazione della vena fluida. In secondo luogo, la $C_F D$ rappresenta uno strumento essenziale per descrivere questi fenomeni con un livello di dettaglio adeguato, ma la qualità della previsione dipende in modo sensibile dalla scelta del modello di turbolenza, dalla discretizzazione numerica e dalla procedura di validazione. Infine, quando l'obiettivo si sposta dall'analisi di una singola configurazione alla costruzione di uno studio parametrico esteso, il costo delle simulazioni più accurate rende particolarmente interessante il ricorso ad approcci surrogate-based e multifidelity.

Il presente lavoro si colloca in questo quadro. L'attenzione è rivolta allo studio dell'influenza di due parametri geometrici del divergente, la lunghezza caratteristica L e l'angolo di apertura θ , su due grandezze di interesse progettuale, il coefficiente di spinta e la superficie dell'ugello. Il problema viene affrontato mediante una descrizione a due livelli: una fase low-fidelity, utile per esplorare in modo esteso il dominio dei parametri, e una fase high-fidelity, impiegata per ottenere una rappresentazione più realistica del comportamento del flusso. In questo senso, il lavoro si inserisce nel filone degli studi che cercano di coniugare accuratezza fisica ed efficienza computazionale, applicando tali strumenti a un problema di interesse propulsivo con esplicita rilevanza progettuale.

Capitolo 3

Simulazioni low-fidelity: Equazioni di Eulero

3.1 Descrizione del problema computazionale e approccio low-fidelity

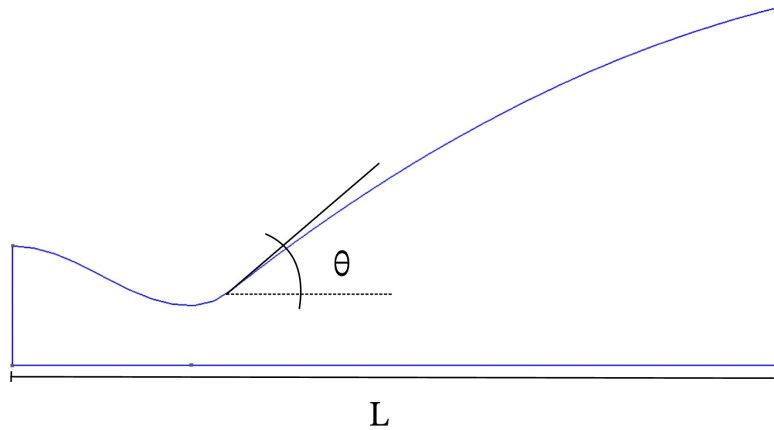
Il presente capitolo descrive il modello matematico e lo strumento numerico sviluppati per l'esecuzione delle simulazioni *low-fidelity*, basate sulle equazioni di Eulero assialsimmetriche. Tale approccio è stato adottato per analizzare in modo rapido un elevato numero di configurazioni geometriche, mantenendo un costo computazionale contenuto.

L'ugello considerato è parametrizzato mediante due variabili geometriche: la lunghezza caratteristica del tratto divergente L e l'angolo di apertura a valle della gola θ . Per ogni coppia di valori (L, θ) viene generata una diversa configurazione dell'ugello, alla quale corrispondono differenti distribuzioni di pressione e differenti prestazioni globali. Per ciascuna configurazione vengono valutate due funzioni obiettivo:

$$\text{Surface}(L, \theta), \quad C_F(L, \theta). \quad (3.1)$$

La prima rappresenta la superficie laterale dell'ugello, ottenuta tramite integrazione assialsimmetrica del profilo della parete, mentre la seconda è il coefficiente di spinta, ricavato a partire dalle grandezze fluidodinamiche alla sezione di uscita.

La risoluzione iterativa delle equazioni di Eulero per le diverse configurazioni geometriche consente quindi di valutare in modo sistematico le funzioni obiettivo nello spazio dei parametri, fornendo la base dati necessaria per la successiva costruzione dei modelli surrogati.

Figura 3.1: Variabili di progetto L, θ

3.2 Le equazioni di Eulero

Le equazioni di Eulero descrivono l'evoluzione di un fluido ideale, inviscido, in cui non vengono considerati i fenomeni dissipativi. Tali equazioni rappresentano la conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia.

In molte applicazioni di natura ingegneristica - come il caso preso in considerazione in questo lavoro - è possibile poi introdurre delle semplificazioni che snelliscono il calcolo, rendendolo più rapido: quando infatti la geometria presenta una simmetria assiale, è possibile sfruttarla per ridurre le dimensioni del problema, ottenendo una formulazione bidimensionale in coordinate cilindriche, mantenendo comunque gli effetti tridimensionali.

3.3 Formulazione tridimensionale

Nel caso tridimensionale, le equazioni di Eulero per un flusso comprimibile assumono la seguente forma differenziale conservativa:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0, \quad (3.2)$$

dove il vettore delle variabili conservative è

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

dove:

- ρ è la densità;
- \mathbf{u} è il vettore velocità, espresso nelle sue componenti tridimensionali (u, v, w) ;
- E è l'energia totale specifica: $E = e + \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2$, in cui e rappresenta l'energia interna specifica.

Il tensore dei flussi convettivi è

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ (\rho E + p) \mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

dove \mathbf{I} è la matrice identità e \otimes rappresenta il prodotto tensoriale.

3.4 Formulazione 2D assialsimmetrica

Come anticipato, è possibile sfruttare l'assialsimmetria del caso in esame per rielaborare le equazioni di Eulero, riducendo così le dimensioni del problema.

Introducendo un sistema di coordinate cilindriche (x, r, θ) e assumendo l'indipendenza dalla coordinata angolare θ , ovvero

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = 0, \quad (3.4)$$

le variabili fluidodinamiche possono infatti essere descritte unicamente in funzione di (x, r) .

Nel caso assialsimmetrico generale è possibile considerare anche una componente tangenziale della velocità u_θ , ma in molti problemi, come nel caso in discussione, si assume l'assenza di swirl:

$$u_\theta = 0. \quad (3.5)$$

Le equazioni di Eulero bidimensionali in coordinate cartesiane (x, y) , in forma conservativa differenziale, si scrivono come:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial y} = \mathbf{0}, \quad (3.6)$$

dove

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho u \\ p + \rho u^2 \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ p + \rho v^2 \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix}.$$

Passando alle coordinate cilindriche, introducendo l'ipotesi di indipendenza dalla coordinata θ , il sistema diventa:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \mathbf{g}) = \mathbf{0}, \quad (3.7)$$

dove si intende $y \equiv r$ e $v \equiv u_r$.

3.4.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di continuità in coordinate cilindriche assialsimmetriche diventa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u_r) = 0. \quad (3.8)$$

In cui si osserva la comparsa del termine $\frac{1}{r}$, che descrive l'effetto puramente geometrico legato alla divergenza calcolata in coordinate cilindriche.

3.4.2 Equazioni della quantità di moto

Le componenti radiale ed assiale dell'equazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial (\rho u_r)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u_r u_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u_r^2) + \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u_r u_x) + \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (3.10)$$

Nel caso generale con *swirl* comparirebbe anche un termine centrifugo $\rho \frac{u_r^2}{r}$ nell'equazione radiale, che tuttavia per questa applicazione viene eliminato.

3.4.3 Equazione dell'energia

L'equazione di conservazione dell'energia totale è:

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [u_x (\rho E + p)] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r u_r (\rho E + p)] = 0. \quad (3.11)$$

Anche in questo caso compare il fattore geometrico $\frac{1}{r}$, che distingue la formulazione assialsimmetrica dalla formulazione bidimensionale cartesiana.

3.4.4 Interpretazione fisica dei termini geometrici

La differenza fondamentale rispetto al caso bidimensionale risiede nella comparsa dei termini geometrici associati alla formulazione in coordinate cilindriche. Tali termini riflettono il fatto che l'elemento di volume infinitesimo dipende dalla coordinata radiale: in coordinate cilindriche infatti tale volume viene espresso nella forma:

$$dV = r dr d\theta dz.$$

La presenza del fattore r è conseguenza del fatto che, a distanza radiale maggiore dall'asse, una variazione angolare $d\theta$ corrisponde a un arco di lunghezza pari a $r d\theta$. Di conseguenza, l'area laterale di un elemento anulare cresce linearmente con r .

Nel caso assialsimmetrico, l'ipotesi di indipendenza dalla coordinata angolare θ consente di eliminare tale variabile dalle equazioni, ma il contributo geometrico associato alla variazione radiale si mantiene all'interno dei termini aggiuntivi nelle equazioni di conservazione. In particolare, la divergenza di un campo vettoriale in coordinate cilindriche introduce contributi proporzionali a $\frac{1}{r}$, che non hanno una corrispondenza diretta nel caso bidimensionale.

Dal punto di vista fisico, questi termini tengono in considerazione la geometria tridimensionale implicita del modello bidimensionale assialsimmetrico, in quanto la variazione della sezione circonferenziale disponibile al flusso varia lungo raggio. Anche in assenza di variazioni delle grandezze fluidodinamiche lungo θ , il fatto che il dominio dipenda dal raggio introduce un contributo addizionale alla conservazione di massa, quantità di moto ed energia.

Di conseguenza, la variazione del flusso radiale è influenzata dalla variazione della geometria. Questo aspetto è cruciale nello studio di:

- getti assialsimmetrici,
- implosioni ed esplosioni cilindriche,
- flussi in ugelli assialsimmetrici,
- dinamica di bolle e cavità.

La formulazione assialsimmetrica consente di ridurre significativamente il costo computazionale del problema, mantenendone la corretta descrizione della fisica in presenza di simmetria assiale.

3.5 Costruzione delle griglie nel caso 2D assial-simmetrico

Per risolvere numericamente le equazioni di Eulero è necessario introdurre una discretizzazione spaziale del dominio computazionale, in modo da trattare correttamente la natura iperbolica del sistema e l'eventuale presenza di discontinuità nel campo di moto, come onde d'urto, discontinuità di contatto e ventagli di espansione.

La discretizzazione spaziale delle equazioni di Eulero in formulazione 2D assial-simmetrica richiede particolare attenzione nella costruzione della griglia computazionale. A differenza del caso bidimensionale cartesiano, le coordinate cilindriche implicano la comparsa dei termini geometrici $\frac{1}{r}$ all'interno delle equazioni, imponendo vincoli specifici nella definizione delle celle a causa della singolarità che essi introducono lungo l'asse di simmetria.

La discretizzazione del dominio è stata realizzata mediante una griglia non strutturata nel piano meridiano (r, z) . Le griglie non strutturate permettono di descrivere geometrie complesse con un costo computazionale fortemente ridotto rispetto al caso di griglia strutturata: il principale vantaggio della griglia non strutturata nasce dal fatto che è sempre possibile suddividere il dominio computazionale in elementi triangolari o quadrangolari che si adattino in maniera ottimale alla geometria, rendendo inoltre possibile infittire la griglia solo nelle regioni di maggior interesse.

3.5.1 Generazione della griglia - Gmsh

Il primo passo del processo di esplorazione dei design consiste nella generazione parametrica della geometria e la costruzione della *mesh* non strutturata.

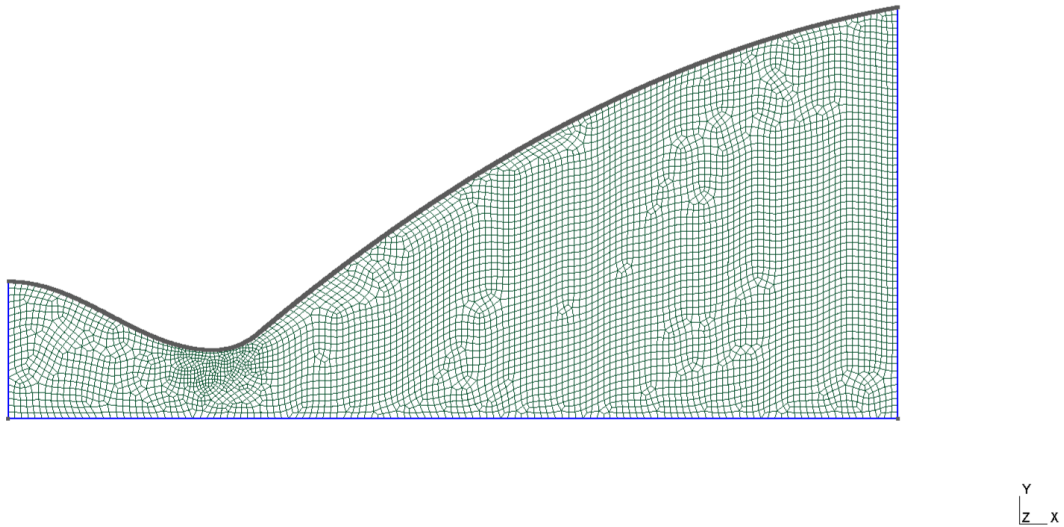
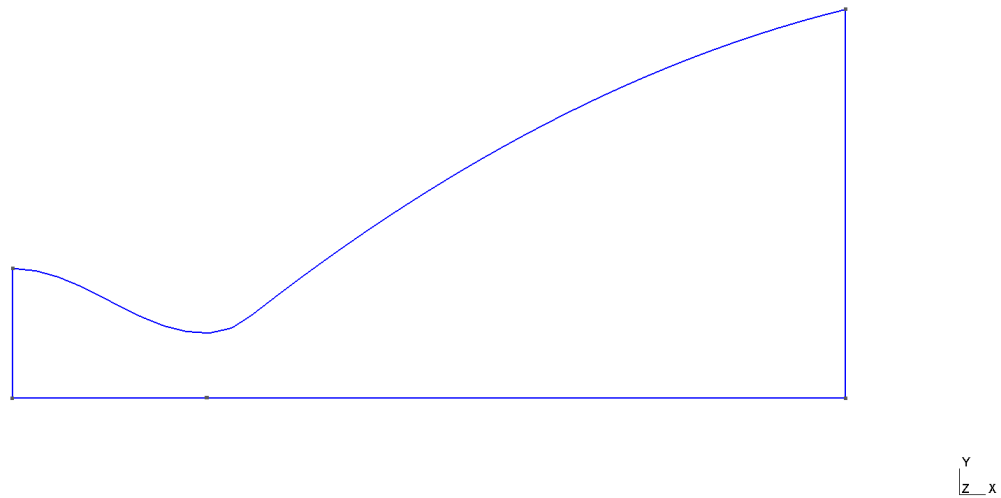


Figura 3.2: Mesh generata con Gmsh

Il processo è automatizzato grazie al software *modeFRONTIER*. Per ogni coppia di parametri (L, θ) , un eseguibile dedicato (*write_points.exe*) genera le coordinate dei punti, descrivendo così l'andamento del profilo dell'ugello. Una volta definita la geometria, *Gmsh* legge le istruzioni da un file *.geo* per costruire volta per volta la *mesh*:

I punti che definiscono la parete dell'ugello sono connessi tramite una curva di tipo *spline*, in modo che questa venga successivamente ricostruita come un'unica curva continua e regolare; Il dominio computazionale nel piano meridiano (x, r) viene poi chiuso mediante tre segmenti rettilinei che collegano le estremità della spline con l'asse di simmetria, delineando così le sezioni di ingresso e uscita dell'ugello. In questo modo si ottiene una superficie piana che rappresenta la sezione bidimensionale del dominio tridimensionale assialsimmetrico.

Figura 3.3: Sezione dell'ugello nel piano (x, r)

La discretizzazione della superficie viene inizialmente realizzata mediante una triangolazione di Delaunay.

Successivamente, tramite il comando *Recombine Surface*, dove possibile gli elementi triangolari vengono ricombinati in quadrilateri. Questa tipologia di celle garantisce infatti una migliore qualità numerica rispetto a una discretizzazione triangolare pura. Gli elementi quadrilateri permettono infatti un miglior controllo dell'allineamento delle celle con la direzione principale del flusso, riducendo la diffusione numerica e migliorando la risoluzione dei gradienti lungo l'asse dell'ugello. La presenza di una struttura il più possibile allineata alla direzione assiale del flusso risulta particolarmente vantaggiosa in un problema dominato da forti accelerazioni e variazioni di numero di Mach.

Un altro aspetto fondamentale per la generazione della mesh riguarda - come anticipato - il controllo della dimensione caratteristica degli elementi: tale controllo è implementato tramite la combinazione di un campo *Attractor* e di un campo *Threshold*. Il primo comando individua un punto di riferimento posto nella gola dell'ugello, mentre il secondo impone una variazione graduale della dimensione degli elementi in funzione della distanza da tale punto. In particolare, la dimensione caratteristica degli elementi varia tra un valore minimo e un valore massimo all'interno di una regione di influenza definita dai parametri *DistMin* e *DistMax*. In questo modo si ottiene un raffinamento locale della *mesh* nella zona della gola dell'ugello. In tale

regione infatti il flusso raggiunge condizioni critiche: il numero di Mach raggiunge il valore unitario e si registrano forti gradienti delle grandezze termodinamiche. Una discretizzazione troppo grossolana in questa zona potrebbe introdurre un'eccessiva diffusione numerica e di conseguenza un'errata previsione delle grandezze integrali: per tale motivo, è stato adottato un raffinamento della mesh nell'intorno della sezione di gola, che consente di catturare con maggiore accuratezza il comportamento transonico del flusso.

Infine, per consentire l'applicazione delle condizioni al contorno nel solutore numerico, i bordi del dominio sono identificati tramite *Physical Groups*: in particolare vengono definiti in maniera distinta l'asse di simmetria, la parete dell'ugello e le sezioni di ingresso e uscita del dominio computazionale.

Dal punto di vista del metodo ai volumi finiti, occorre inoltre ricordare che ciascuna cella bidimensionale nel piano (r, z) rappresenta in realtà un volume tridimensionale ottenuto per rotazione attorno all'asse di simmetria. Il volume della generica cella i è pertanto definito come

$$V_i = \int_{A_i} 2\pi r \, dA, \quad (3.12)$$

dove A_i è l'area della cella nel piano meridiano, mentre r è la coordinata radiale locale. In forma discreta, tale espressione viene approssimata valutando la coordinata radiale nel centro della cella:

$$V_i \approx 2\pi r_i A_i. \quad (3.13)$$

Si osserva quindi che, anche in presenza di celle bidimensionali di area comparabile, il volume tridimensionale associato cresce linearmente con la distanza dall'asse. Questo aspetto riflette la natura intrinsecamente tridimensionale del problema, che viene così incorporata nella formulazione 2D assialsimmetrica.

3.6 Soluzione: Metodo dei volumi finiti

Tra i metodi numerici disponibili, il metodo dei volumi finiti rappresenta una scelta particolarmente adatta per la simulazione di flussi comprimibili, grazie alla sua formulazione conservativa e alla possibilità di essere applicato in modo efficace su *mesh* non strutturate. Esso si basa sulla suddivisione del dominio in un insieme di volumi di controllo, all'interno dei quali vengono integrate le equazioni di conservazione.

Riprendendo la forma conservativa delle equazioni di Eulero,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0 \quad (3.14)$$

dove \mathbf{U} rappresenta il vettore delle variabili conservative e \mathbf{F} il tensore dei flussi convettivi, si procede integrando l'equazione entro ciascun volume di controllo V_i , delimitato dalla superficie ∂V_i . Applicando poi il teorema della divergenza, si ottiene

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i} \mathbf{U} dV + \oint_{\partial V_i} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.15)$$

dove \mathbf{n} indica il versore normale uscente alla superficie del volume di controllo.

Nel metodo dei volumi finiti, la variabile conservativa viene rappresentata tramite il suo valore medio all'interno della cella, indicato come \mathbf{U}_i tale valore medio, e calcolato con:

$$\mathbf{U}_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \mathbf{U} dV \quad (3.16)$$

Adottando questa approssimazione, l'equazione integrale (3.15) può essere quindi rielaborata nella seguente forma discreta:

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} \oint_{\partial V_i} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.17)$$

Nel caso in esame, ogni cella è delimitata da un insieme di tre o quattro segmenti rappresentanti le interfacce tra volumi adiacenti. L'integrale di superficie che fornisce il valore dei flussi alle interfacce può quindi essere approssimato come la somma dei contributi sulle singole interfacce

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = -\frac{1}{A_i} \sum_{j \in \partial i} \mathbf{F}_{ij} L_{ij}, \quad (3.18)$$

dove A_i rappresenta l'area della cella i , L_{ij} la lunghezza dell'interfaccia condivisa con la cella adiacente j , e \mathbf{F}_{ij} il flusso numerico calcolato lungo la normale uscente alla faccia. È da qui che si può notare l'effettivo vantaggio dell'impiego di celle quadrangolari, che presentano un allineamento maggiore tra la normale uscente alle facce e la direzione effettiva del flusso.

Nel presente lavoro si adotta una formulazione *cell-centered*, in cui ogni i -esimo volume di controllo coincide con la cella della griglia computazionale precedentemente definita.

Le variabili conservative vengono così calcolate approssimandone il valore con quello al centro di ciascun elemento della griglia; le interfacce tra gli elementi rappresen-

tano quindi le regioni di spazio in cui avviene lo scambio di flussi tra i volumi di controllo.

Nel caso assialsimmetrico considerato, è bene ricordare che il dominio bidimensionale (x, r) rappresenta la sezione di un volume di rotazione attorno all'asse. Di conseguenza, i contributi di flusso devono essere pesati con il raggio locale dell'interfaccia, tenendo così traccia dell'effettiva superficie tridimensionale associata alla rotazione. Si osserva poi la comparsa di un termine sorgente aggiuntivo nella componente radiale dell'equazione della quantità di moto, derivante dalla forma divergente delle equazioni di Eulero in coordinate cilindriche.

In sintesi, la discretizzazione ai volumi finiti trasforma il sistema continuo delle equazioni di Eulero in un sistema di equazioni differenziali ordinarie nel tempo, espresso in termini di valori medi delle variabili conservative in ciascuna cella della griglia.

Il calcolo del termine di flusso numerico \mathbf{F}_{ij} attraverso le interfacce dipende dalle grandezze definite nelle celle adiacenti: garantendo infatti che tutto ciò che esce dalla cella precedente entri nella successiva, è possibile espandere la conservatività a tutto il dominio computazionale. In questo modo, ci si riduce a calcolare il flusso all'interfaccia una sola volta per entrambe le celle.

Essendo la soluzione in generale discontinua in corrispondenza delle interfacce, il problema viene ricondotto alla soluzione di un problema di Riemann locale.

3.6.1 Problema di Riemann e flussi numerici

Come visto nella sezione precedente, nel metodo dei volumi finiti l'evoluzione temporale delle variabili conservative \mathbf{U}_i all'interno di ciascun volume di controllo V_i viene calcolata a partire dai flussi che attraversano le interfacce tra le celle: la valutazione di tali flussi costituisce quindi uno degli aspetti più importanti dello schema numerico.

Nel caso in esame si è adottata una discretizzazione *cell-centered*, per cui le variabili conservative sono rappresentate dai loro valori medi all'interno delle celle della griglia. Di conseguenza in corrispondenza dell'interfaccia tra due celle consecutive, le grandezze associate al flusso possono essere considerate discontinue: un lato dell'interfaccia è associato allo stato della cella sinistra (indicato con \mathbf{U}_L) mentre l'altro lato allo stato della cella destra, (\mathbf{U}_R).

In questa situazione, quindi, non è possibile calcolare il flusso $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ all'interfaccia: le grandezze a quell'altezza non sono definite in maniera univoca. Per questo motivo, ci si riconduce ad un problema di Riemann locale, ossia ad un problema che allo stato iniziale presenta una discontinuità tra due stati adiacenti costanti.

Nel caso monodimensionale, il problema di Riemann associato alle equazioni di Eulero si scrive nella forma

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0 \quad (3.19)$$

in cui le condizioni iniziali sono:

$$\mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & x < 0 \\ \mathbf{U}_R & x > 0. \end{cases} \quad (3.20)$$

A partire da questa configurazione, il problema di Riemann genera tre linee caratteristiche, che si propagano a partire dalla discontinuità con velocità differenti:

- una linea - nel caso di ingresso subsonico - si propaga verso sinistra, risalendo così il flusso (assunto muoversi da sinistra verso destra);
- una discontinuità di contatto;
- una linea che si propaga verso destra, coerentemente con la direzione del flusso.

Ciascuna di queste linee caratteristiche può manifestarsi come onda d'urto o come ventaglio di espansione, a seconda dello stato iniziale del flusso. La soluzione esatta del problema di Riemann fornisce lo stato del flusso all'interfaccia tra le celle.

Nel metodo ai volumi finiti, il flusso numerico attraverso l'interfaccia tra le celle i e j può essere espresso come

$$\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}(\mathbf{U}^*) \quad (3.21)$$

dove \mathbf{U}^* rappresenta la soluzione del problema di Riemann all'interfaccia.

Per trovare la soluzione del problema di Riemann associato alle equazioni di Eulero, è necessario risolvere in maniera iterativa un sistema lineare, operazione che risulta particolarmente onerosa dal punto di vista numerico. Il problema viene infatti suddiviso in più celle, e deve essere risolto un problema di Riemann per ogni interfaccia ad ogni passo temporale.

Per questo motivo, è comune ricorrere a solutori di Riemann approssimati: questi metodi forniscono una stima del flusso numerico all'interfaccia senza dover calcolare esplicitamente la soluzione esatta del problema di Riemann, riducendo in modo significativo il costo computazionale. Infatti, essendo il problema di Riemann solo una rappresentazione approssimativa della situazione reale, risolverlo in maniera esatta risulterebbe un onere computazionale inutile.

3.6.2 Solutore di Riemann approssimato di Roe

Si è appena visto che il calcolo del flusso all'altezza delle interfacce può essere ricondotto alla soluzione di un problema di Riemann locale tra due stati costanti, corrispondenti a quelli delle celle adiacenti alla faccia considerata. La soluzione esatta di tale problema, sebbene nota per le equazioni di Eulero, comporta la risoluzione iterativa di un sistema non lineare, operazione computazionalmente onerosa se applicata a tutte le interfacce della griglia ad ogni iterazione temporale. Per questo motivo, si ricorre frequentemente a solutori di Riemann approssimati: tra i metodi più diffusi si è scelto di usare il solutore di Roe, che si basa su una linearizzazione locale delle equazioni di Eulero lungo la direzione normale all'interfaccia.

La forma monodimensionale delle equazioni di Eulero si presenta nella forma esatta come:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0, \quad (3.22)$$

è possibile riscrivere il termine convettivo introducendo un'opportuna matrice:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad (3.23)$$

dove è possibile linearizzare il problema introducendo la matrice $\bar{\mathbf{A}}$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \bar{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad (3.24)$$

Questa matrice - a coefficienti costanti - viene costruita in modo da soddisfare le seguenti proprietà:

1. $\bar{\mathbf{A}}$ deve essere diagonalizzabile e presentare autovalori reali: in questo modo sarà in grado di descrivere un problema iperbolico;

2. quando

$$u_j, u_{j+1} \rightarrow u \implies \bar{\mathbf{A}} \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{U}) \quad (3.25)$$

Ossia la matrice reale e quella linearizzata devono coincidere quando gli stati a destra e a sinistra tendono ad un unico valore;

3. Per ogni u_j, u_{j+1} deve essere verificato il requisito di conservatività, ossia:

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}_R) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_L) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L). \quad (3.26)$$

La matrice $\bar{\mathbf{A}}$ viene definita utilizzando uno stato intermedio opportunamente scelto, detto *stato medio di Roe*. Nel caso delle equazioni di Eulero, le variabili medie possono essere espresse come

$$\bar{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \quad (3.27)$$

$$\bar{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad (3.28)$$

$$\bar{H} = \frac{\sqrt{\rho_L} H_L + \sqrt{\rho_R} H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad (3.29)$$

dove H rappresenta l'entalpia totale definita come

$$H = E + \frac{p}{\rho}. \quad (3.30)$$

A partire da queste grandezze è possibile determinare anche la velocità del suono media

$$\bar{a} = \sqrt{(\gamma - 1) \left(\bar{H} - \frac{\bar{u}^2}{2} \right)}. \quad (3.31)$$

Una volta definito lo stato medio, la matrice $\bar{\mathbf{A}}$ può essere diagonalizzata e il salto di stato tra le due celle può essere proiettato lungo gli autovettori del sistema. Nel caso monodimensionale, gli autovalori della matrice linearizzata hanno la stessa forma della matrice $\mathbf{A}(\mathbf{U})$:

$$\lambda_1 = \bar{u} - \bar{a}, \quad \lambda_2 = \bar{u}, \quad \lambda_3 = \bar{u} + \bar{a}. \quad (3.32)$$

Che rappresentano le velocità di propagazione delle linee caratteristiche del sistema.

Per esprimere il salto di stato in una base più adatta all'analisi del problema, si introducono la variabile caratteristica \mathbf{W} , legata alla variabile caratteristica \mathbf{U} tramite la relazione

$$d\mathbf{W} = \mathbf{L}^{-1} d\mathbf{U}, \quad \implies \quad d\mathbf{U} = \mathbf{L} d\mathbf{W}, \quad (3.33)$$

dove \mathbf{L}^{-1} rappresenta la matrice degli autovettori di sinistra. Poiché il problema è stato linearizzato, è possibile estendere tale relazione ai salti finiti tra due celle adiacenti, ottenendo

$$\Delta \mathbf{U}_j = \mathbf{L} \Delta \mathbf{W}_j, \quad (3.34)$$

con

$$\Delta \mathbf{U}_j = \mathbf{U}_{j+1} - \mathbf{U}_j, \quad \Delta \mathbf{W}_j = \mathbf{W}_{j+1} - \mathbf{W}_j. \quad (3.35)$$

Il vettore $\Delta \mathbf{W}_j$ rappresenta quindi il salto delle variabili caratteristiche attraverso l'interfaccia e fornisce un'informazione diretta sull'intensità delle onde generate dal problema di Riemann linearizzato.

Sfruttando ora la proprietà di conservatività del metodo di Roe, il salto di flusso può essere espresso come

$$\Delta \mathbf{F}_j = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_j) = \bar{\mathbf{A}} \Delta \mathbf{U}_j. \quad (3.36)$$

Sostituendo la relazione $\Delta \mathbf{U}_j = \mathbf{L} \Delta \mathbf{W}_j$, si ottiene

$$\Delta \mathbf{F}_j = \bar{\mathbf{A}} \mathbf{L} \Delta \mathbf{W}_j = \mathbf{L} \Lambda \mathbf{L}^{-1} \mathbf{L} \Delta \mathbf{W}_j = \mathbf{L} \Lambda \Delta \mathbf{W}_j. \quad (3.37)$$

In tal modo il salto di flusso viene decomposto lungo le direzioni caratteristiche del sistema. Denotando con \mathbf{r}_k il k -esimo autovettore destro e con α_k la corrispondente ampiezza d'onda, si può scrivere equivalentemente

$$\Delta \mathbf{F}_j = \sum_{k=1}^3 \lambda_k \alpha_k \mathbf{r}_k, \quad \alpha_k = \Delta W_j^k. \quad (3.38)$$

A questo punto è possibile distinguere il contributo associato alle onde che si propagano verso sinistra da quello dovuto alle onde che si propagano verso destra. In particolare, il contributo alla variazione di flusso dovuto alle onde dirette verso sinistra risulta

$$\Delta \mathbf{F}_j^- = \sum_{k=1}^3 \lambda_k^- \alpha_k \mathbf{r}_k, \quad \lambda_k^- = \frac{\lambda_k - |\lambda_k|}{2}. \quad (3.39)$$

La quantità λ_k^- seleziona esclusivamente le onde con velocità negativa: infatti,

$$\lambda_k^- = \begin{cases} 0, & \lambda_k > 0, \\ \lambda_k, & \lambda_k < 0. \end{cases} \quad (3.40)$$

Il flusso numerico all'interfaccia $j + \frac{1}{2}$ può quindi essere scritto, in modo del tutto analogo alla formulazione di Godunov, come

$$\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}(\mathbf{U}_j) + \Delta \mathbf{F}_j^-. \quad (3.41)$$

In forma compatta, il flusso di Roe si può anche esprimere come

$$\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}}^{\text{Roe}} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}(\mathbf{U}_L) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_R)] - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 |\lambda_k| \alpha_k \mathbf{r}_k. \quad (3.42)$$

È opportuno osservare che il metodo di Roe, nella formulazione appena descritta, non è in grado di rappresentare correttamente i ventagli di espansione. A causa della linearizzazione locale, infatti, un fascio di espansione può essere interpretato dal metodo come una discontinuità singola, dando luogo alla comparsa di un urto di espansione. Quest'ultimo costituisce una soluzione matematicamente ammissibile delle relazioni di Rankine–Hugoniot, ma non ha significato fisico poiché comporterebbe una diminuzione di entropia. Per ovviare a tale inconveniente è quindi necessario introdurre una correzione entropica, applicata agli autovalori della matrice $\bar{\mathbf{A}}$.

dove λ_k e \mathbf{r}_k sono rispettivamente gli autovalori e gli autovettori della matrice linearizzata, mentre α_k rappresentano i coefficienti di proiezione del salto di stato sugli autovettori.

Il primo termine della formula rappresenta un flusso centrato tra i due stati, mentre il secondo introduce una dissipazione numerica proporzionale al modulo degli autovalori. Tale termine dissipativo è fondamentale per garantire la stabilità dello schema e per assicurare una corretta propagazione delle onde caratteristiche.

Dal punto di vista numerico, la presenza dei valori assoluti degli autovalori introduce una dipendenza dalla direzione di propagazione dell'informazione nel sistema iperbolico. Lo schema risultante è pertanto di tipo *upwind*, poiché il contributo delle onde viene pesato in funzione della loro velocità di propagazione lungo la direzione normale all'interfaccia.

3.6.3 Integrazione temporale

Una volta determinati i flussi numerici attraverso le interfacce di celle adiacenti, ci si riconduce ad un sistema di equazioni differenziali ordinarie nel tempo per le variabili conservative associate ad ogni cella della griglia. Indicando con \mathbf{U}_i il vettore delle variabili conservative della cella i , il sistema discreto può essere scritto nella forma

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \mathbf{R}_i, \quad (3.43)$$

dove \mathbf{R}_i rappresenta il residuo numerico, ottenuto dalla somma dei flussi convettivi attraverso le interfacce della cella, e dall'eventuale contributo di termini

sorgente.

L'evoluzione temporale del sistema discreto viene calcolata mediante uno schema esplicito di Eulero in avanti, in cui il valore della grandezza conservativa al passo temporale successivo viene aggiornato secondo la relazione

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n + \Delta t \mathbf{R}_i^n. \quad (3.44)$$

Questo schema rappresenta la forma più semplice di integrazione temporale esplicita grazie al suo costo computazionale ridotto per ogni iterazione. Si specifica che nel contesto delle simulazioni realizzate in questo lavoro, l'integrazione temporale è finalizzata alla ricostruzione di una configurazione stazionaria, in cui non si registrano variazioni delle grandezze nel tempo. Sotto questa ipotesi, l'aggiornamento iterativo della soluzione può essere interpretato come un periodo di rilassamento per il sistema discreto, che tenderà progressivamente alla soluzione stazionaria. Questa viene infatti raggiunta quando i residui tendono a zero in tutti i volumi di controllo,

$$\mathbf{R}_i \rightarrow 0 \quad \forall i, \quad (3.45)$$

ossia quando il bilancio dei flussi risulta soddisfatto in ciascun elemento della griglia.

Dopo ogni passo temporale, le grandezze primitive del flusso (ossia pressione, velocità e velocità del suono) vengono ricalcolate a partire dalle variabili conservative, fornendo il punto di partenza per il calcolo dei flussi all'iterazione successiva.

3.6.4 Condizione di stabilità $C_F L$

L'utilizzo di uno schema temporale richiede il rispetto di una condizione di stabilità numerica, che fornisce un limite del valore massimo del passo temporale. Tale vincolo è descritto dalla condizione $C_F L$, formulata nel 1928 da Courant, Friedrichs e Lewy.

La condizione $C_F L$ stabilisce che il dominio di dipendenza fisico del sistema di equazioni differenziali sia contenuto all'interno del dominio di dipendenza numerico introdotto dalla discretizzazione: la scelta del numero di Courant influisce pertanto sulla rapidità con cui i residui numerici decrescono durante l'integrazione. Ciò significa che, durante un passo temporale Δt , l'informazione trasportata dalle linee caratteristiche non deve attraversare più di una cella della griglia.

Nel caso delle equazioni di Eulero, la massima velocità con cui l'informazione può propagarsi dipende dalla somma della velocità del fluido e della velocità del suono. Si calcola così il passo temporale massimo ammissibile per la cella i – *esima*:

$$\Delta t_i = \frac{C_F L l_i}{|u_i| + a_i}, \quad (3.46)$$

dove u_i rappresenta la velocità locale del fluido, a_i la velocità del suono e l_i la lunghezza caratteristica della cella.

Nel caso di griglie non strutturate bidimensionali a prevalenza di elementi quadrilateri, è possibile approssimare la lunghezza caratteristica con la radice dell'area della cella,

$$l_i = \sqrt{A_i}. \quad (3.47)$$

così che il passo temporale locale associato alla cella i risulta

$$\Delta t_i = \frac{C_F L \sqrt{A_i}}{q_i + a_i}. \quad (3.48)$$

Per ciascun elemento della griglia viene quindi stimato un passo temporale locale ammissibile sulla base della condizione $C_F L$. Nel caso bidimensionale, la velocità caratteristica è valutata considerando il modulo della velocità del fluido nel piano, definito come

$$q_i = \sqrt{u_i^2 + v_i^2}, \quad (3.49)$$

Una volta calcolato tale valore per tutte le celle interne del dominio, il passo temporale effettivamente utilizzato nell'integrazione viene scelto come il minimo tra tutti i contributi locali, ossia

$$\Delta t = \min_i (\Delta t_i). \quad (3.50)$$

in modo da garantire il rispetto della condizione di stabilità in tutto il dominio computazionale.

3.7 Struttura del solutore numerico

Il metodo numerico ai volumi finiti appena descritto viene a questo punto implementato tramite un solutore sviluppato in linguaggio Fortran, utilizzato per la simulazione di flussi comprimibili governati dalle equazioni di Eulero in formulazione assialsimmetrica su griglie non strutturate.

Il codice si basa su una discretizzazione ai volumi finiti di tipo *cell-centered*, in cui le variabili conservative sono approssimate con il loro valore al centro della cella. La

soluzione si ottiene attraverso un'iterazione nel tempo, in cui prima vengono calcolati i flussi numerici per ogni interfaccia mediante il solutore di Roe e successivamente vengono aggiornate le variabili di flusso, fino al raggiungimento della configurazione stazionaria.

Il processo di calcolo può essere schematizzato nelle seguenti fasi principali:

1. lettura della griglia non strutturata e inizializzazione delle variabili conservative;
2. individuazione del passo temporale globale nel rispetto della condizione CFL ;
3. calcolo dei flussi numerici attraverso le interfacce della griglia;
4. valutazione dei residui per ciascun volume di controllo;
5. aggiornamento delle variabili conservative mediante integrazione temporale esplicita;
6. verifica della convergenza della soluzione.

Il processo iterativo si ripete fino a quando i residui numerici associati alle variabili conservative (massa, quantità di moto, energia) si riducono al di sotto di una soglia prefissata, indicando il raggiungimento della soluzione stazionaria.

Nel seguito vengono descritte le principali routine che costituiscono il nucleo del solutore, evidenziando la corrispondenza tra le formulazioni teoriche presentate in precedenza e la loro implementazione nel codice, nell'ordine in cui compaiono nel *main*.

3.7.1 Lettura della griglia e inizializzazione

Il primo comando implementato nel codice consiste nella lettura della griglia non strutturata generata da Gmsh e nell'inizializzazione delle variabili conservative all'interno del dominio computazionale.

La mesh è costituita da un insieme di nodi, elementi e interfacce, che rappresentano la discretizzazione del dominio computazionale. Le variabili conservative sono associate ai singoli volumi di controllo, mentre le interfacce tra elementi rappresentano le superfici attraverso cui avviene lo scambio di flussi tra celle adiacenti.

In questa fase vengono lette e memorizzate le informazioni geometriche e topologiche fondamentali della mesh, tra cui le coordinate dei nodi, la connettività degli elementi e le interfacce che mettono in comunicazione i volumi di controllo. Su questa base vengono poi costruite le strutture dati necessarie per il calcolo dei flussi numerici e per l'evoluzione della soluzione.

Il codice procede a questo punto all'inizializzazione del campo di moto. In questa fase, a ciascun elemento della griglia vengono assegnati i valori iniziali delle variabili conservative, definiti a partire dalle condizioni di flusso imposte a monte del dominio. A partire da tali grandezze, vengono poi ricavate pressione, temperatura, velocità e velocità del suono.

Assumendo noto il rapporto dei calori specifici γ , pari a 1.2 per tenere in considerazione l'effetto delle alte temperatura sulla miscela di gas nella camera dell'ugello, vengono ricavate la pressione e la temperatura statiche iniziali tramite le relazioni isentropiche

$$p = \frac{p^\circ}{\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \text{Ma}_{\text{in}}^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}}, \quad (3.51)$$

$$T = \frac{T^\circ}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} \text{Ma}_{\text{in}}^2}. \quad (3.52)$$

A partire da tali grandezze si calcola quindi la velocità del suono,

$$a = \sqrt{\gamma T}, \quad (3.53)$$

e, nota la direzione del flusso, le due componenti della velocità:

$$u = M a \cos \alpha, \quad v = M a \sin \alpha. \quad (3.54)$$

Viene inoltre inizializzata la grandezza entropica S , espressa nella forma

$$S = \gamma \log T - (\gamma - 1) \log p. \quad (3.55)$$

Una volta determinate le variabili primitive, il codice costruisce le corrispondenti variabili conservative. Indicando con ρ la densità, si ha innanzitutto

$$\rho = \frac{p}{T}, \quad (3.56)$$

da cui seguono le componenti della quantità di moto

$$\rho u, \quad \rho v, \quad (3.57)$$

e l'energia totale per unità di volume,

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2). \quad (3.58)$$

Il vettore delle variabili conservative iniziali risulta pertanto

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} E \\ \rho \\ \rho u \\ \rho v \end{bmatrix}. \quad (3.59)$$

Questa configurazione iniziale rappresenta il punto di partenza del processo iterativo di integrazione pseudo-temporale che conduce progressivamente alla soluzione stazionaria del problema.

3.7.2 Calcolo del passo temporale

Si procede poi al calcolo del passo temporale, esplicitato all'interno della routine `compute_dt`. Questa valuta per ogni elemento interno della griglia il corrispondente passo temporale locale a partire dalle grandezze già note e dalla dimensione caratteristica della cella l_i .

In particolare, per ogni volume di controllo viene stimato il valore locale di Δt_i sulla base del modulo della velocità nel piano. Il passo temporale globale che viene utilizzato nell'integrazione viene quindi assunto pari al minimo tra tutti i valori locali calcolati sugli elementi interni del dominio. In questo modo, il vincolo di stabilità risulta automaticamente soddisfatto anche nella regione più restrittiva della griglia, in questo caso coincidente con la regione attorno alla sezione di gola dell'ugello.

La routine inizializza così il passo temporale con un valore inizialmente arbitrariamente elevato, e lo aggiorna progressivamente durante la scansione degli elementi, sostituendolo ogni volta che il valore locale calcolato risulta inferiore a quello corrente.

3.7.3 Calcolo dei flussi numerici e costruzione dei residui

La stima dei flussi numerici attraverso le interfacce di ogni cella rappresenta il nucleo numerico della soluzione. Nel metodo dei volumi finiti, l'evoluzione delle variabili conservative all'interno di ciascuna cella si calcola sulla base del bilancio dei flussi attraverso il suo contorno.

Nel codice, questa operazione è realizzata dalla routine `compute_fluxes`, che costruisce l'approssimazione del termine di divergenza dei flussi presente nelle equazioni di Eulero.

Partendo dalla formulazione integrale delle equazioni di conservazione su un volume di controllo V_i

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i} \mathbf{U} dV + \oint_{\partial V_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{S}_i, \quad (3.60)$$

la discretizzazione ai volumi finiti conduce alla relazione

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = -\frac{1}{A_i} \sum_{j \in \partial i} \mathbf{F}_{ij} L_{ij} + \mathbf{S}_i, \quad (3.61)$$

dove A_i rappresenta l'area dell'elemento i , L_{ij} la lunghezza dell'interfaccia condivisa con l'elemento adiacente j , e \mathbf{F}_{ij} il flusso numerico valutato lungo la normale uscente alla faccia.

La routine quindi, scorrendo tutte le interfacce della griglia, ne individua i due elementi adiacenti, assunti convenzionalmente come elemento sinistro ed elemento destro. A partire dalle variabili conservative associate alle due celle, calcola il flusso numerico attraverso l'interfaccia.

Poiché lo stato del fluido risulta in generale discontinuo tra due celle adiacenti, il problema viene ricondotto alla soluzione di un problema di Riemann locale, calcolando il flusso tramite il solutore approssimato di Roe, descritto nella sezione precedente.

Il flusso di Roe può essere scritto nella forma

$$\mathbf{F}_{Roe} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}(\mathbf{U}_L) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_R)] - \frac{1}{2} \sum_k |\lambda_k| \alpha_k \mathbf{r}_k, \quad (3.62)$$

dove λ_k e \mathbf{r}_k sono rispettivamente gli autovalori e gli autovettori della matrice Jacobiana linearizzata, mentre α_k rappresenta la proiezione del salto delle grandezze conservative sugli autovettori.

A questo punto, calcolato il flusso numerico, viene riportato nei residui delle celle che condividono l'interfaccia. Per costruzione, tale contributo compare con segno opposto nei due volumi di controllo: viene sottratto al residuo dell'elemento sinistro e aggiunto a destro, coerentemente con l'orientazione della normale e con la natura conservativa dello schema.

Se le interfacce appartengono al bordo del dominio, il flusso numerico viene determinato a partire dalle condizioni al contorno, imposte dal file *inlet.txt*. Questo file contiene i valori di Pressione Totale, Temperatura Totale, angolo α relativo all'orientazione della corrente in ingresso e il Mach - in questo caso - pari a 0.1. Il contributo dei flussi viene quindi aggiunto al residuo dell'elemento interno adiacente all'interfaccia. Essendo poi il problema in esame assialsimmetrico, i contributi di flusso vengono poi pesati con il raggio locale dell'interfaccia, in modo da tenere conto del fatto che il dominio bidimensionale rappresenta la sezione di un volume

di rivoluzione. Compare inoltre un termine sorgente addizionale nella componente radiale della quantità di moto, derivante dalla divergenza calcolata in coordinate cilindriche..

Il risultato finale della routine è quindi il vettore dei residui discreti associato a ciascun volume di controllo, che rappresenta il bilancio dei flussi e costituisce il termine utilizzato nell'aggiornamento temporale della soluzione.

3.7.4 Aggiornamento della soluzione

Dopo aver costruito il vettore dei residui per ogni cella della mesh, si procede all'aggiornamento della soluzione sfruttando lo schema esplicito di integrazione temporale. Come illustrato nella sezione dedicata, la derivata delle grandezze conservative nell'*i-esima* cella può essere scritto nella forma

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \mathbf{R}_i, \quad (3.63)$$

dove \mathbf{R}_i rappresenta il residuo numerico associato all'elemento i , ottenuto dalla somma dei contributi di flusso attraverso le interfacce del volume di controllo e dagli eventuali termini sorgente.

L'evoluzione temporale di U_i viene calcolata mediante uno schema esplicito di Eulero *upwind*. L'aggiornamento delle variabili conservative avviene quindi secondo la relazione

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n + \Delta t \mathbf{R}_i^n. \quad (3.64)$$

Operativamente, il codice aggiorna le variabili conservative in tutti gli elementi della griglia utilizzando il passo temporale globale appena calcolato dalla routine `compute_dt`. Questo procedimento viene ripetuto iterativamente, procedendo verso la soluzione stazionaria.

Dopo ciascun aggiornamento, le variabili primitive del flusso, come pressione, velocità e velocità del suono, vengono ricalcolate a partire dalle variabili conservative, in modo da garantire la coerenza termodinamica dello stato e consentire il corretto calcolo dei flussi numerici all'iterazione successiva.

In seguito ad ogni passo temporale, le variabili primitive del flusso, ossia pressione, velocità e velocità del suono, vengono ricalcolate a partire dalle grandezze conservative. Questo passaggio è necessario per permettere il calcolo dei flussi numerici e del passo temporale nell'iterazione successiva.

Il processo prosegue fino a quando i residui numerici si riducono al di sotto della soglia di convergenza prefissata.

3.7.5 Monitoraggio della convergenza

L'obiettivo della simulazione è il raggiungimento della condizione stazionaria per ogni design dell'ugello assialsimmetrico: il processo iterativo si ripete fino a quando i residui numerici delle equazioni di conservazione risultano sufficientemente piccoli.

Al termine di ogni iterazione, il codice valuta l'andamento dei residui: per ciascuna equazione viene calcolata la norma dei residui su tutti gli elementi della griglia. La norma L_2 si scrive nella forma

$$R = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_i^2}, \quad (3.65)$$

dove R_i rappresenta il residuo associato all'elemento i e N il numero totale di celle della griglia.

La soluzione può essere considerata convergente quando i residui risultano ridotti di diversi ordini di grandezza rispetto al valore iniziale, indicando che il bilancio dei flussi all'interno dei volumi di controllo è sostanzialmente soddisfatto. Il ciclo iterativo viene arrestato quando i residui scendono al di sotto di una soglia prefissata oppure quando viene raggiunto un numero massimo di iterazioni.

Il ciclo iterativo si interrompe quando tali quantità scendono al di sotto di una soglia assegnata, oppure quando si raggiunge il numero massimo di iterazioni previsto.

3.7.6 Calcolo delle funzioni obiettivo

Una volta raggiunta la convergenza della soluzione stazionaria, il solutore procede al calcolo delle grandezze di interesse ingegneristico associate alla configurazione dell'ugello. In particolare, nel presente lavoro vengono valutate due funzioni obiettivo fondamentali: l'area caratteristica della geometria e il coefficiente di spinta.

Raggiunta la convergenza della soluzione stazionaria, si procede al calcolo delle funzioni obiettivo: la superficie dell'ugello e il coefficiente di spinta. Queste vengono determinate mediante una routine dedicata del codice.

La determinazione di tali quantità è affidata a una routine dedicata, che utilizza congiuntamente le informazioni geometriche della griglia e il campo di moto ottenuto al termine della simulazione.

L'area viene determinata a partire dalla lunghezza complessiva delle interfacce che rappresentano la parete dell'ugello nella sezione meridiana del dominio assialsimmetrico. Nel contesto della formulazione assialsimmetrica, il dominio bidimensionale rappresenta infatti una sezione di un volume di rivoluzione; di conseguenza, la lun-

ghezza delle interfacce lungo la parete costituisce una misura diretta della superficie sviluppata della geometria.

Si calcola la superficie dell'ugello sommando la lunghezza delle interfacce che rappresentano la parete dell'ugello. Essendo la simulazione condotta in formulazione assialsimmetrica, ogni segmento della parete rappresenta un tratto di una superficie di rivoluzione; di conseguenza, il contributo di ogni interfaccia alla superficie totale è ottenuto moltiplicando la sua lunghezza per la circonferenza media.

Il coefficiente di spinta C_F viene invece valutato integrando il contributo assiale del flusso di quantità di moto e della pressione statica sulla sezione di uscita dell'ugello. In formulazione assialsimmetrica, a ciascuna interfaccia è associata la superficie ottenuta dalla rotazione del relativo segmento attorno all'asse, calcolata sulla base del raggio medio e della lunghezza dell'interfaccia.

$$C_F \propto \int_{A_e} (\rho u^2 + p) dA, \quad (3.66)$$

La spinta è determinata considerando i contributi di pressione esercitati dal flusso sulle superfici solide del dominio.

Dal punto di vista operativo, il codice esamina le interfacce che appartengono alla sezione di uscita dell'ugello e ne valuta, per ciascuna, il contributo locale alla spinta, determinato sulla base del termine di quantità di moto assiale e della pressione statica. In presenza della formulazione assialsimmetrica, tale contributo viene moltiplicato per la superficie di rivoluzione associata all'interfaccia. La somma dei contributi così ottenuti fornisce infine la spinta complessiva lungo la direzione assiale.

Le grandezze così calcolate costituiscono l'output principale della simulazione e vengono poi utilizzate all'interno del workflow di ottimizzazione implementato mediante il software *ModeFrontier*, nel quale i parametri geometrici della configurazione vengono fatti variare al fine di individuare soluzioni che massimizzino le prestazioni dell'ugello.

3.8 ModeFRONTIER: simulazione low-fidelity

Il fine di questo lavoro di tesi è costruire un *workflow* all'interno del software *modeFRONTIER*, in modo da permettere la comunicazione diretta tra diversi strumenti di calcolo, al fine di automatizzare il processo di analisi numerica, organizzare i dati generati dalle simulazioni e gestire le attività di esplorazione dello spazio di progetto e di ottimizzazione. Questa prima parte del lavoro è dedicata all'esplorazione *low-*

fidelity, costruita in modo da permettere l'esplorazione dello spazio delle soluzioni ad un costo computazionale relativamente basso.

Si costruisce il workflow in modo da poter analizzare l'influenza dei parametri geometrici di input sulle prestazioni del sistema. Come anticipato, i parametri di progetto sono la lunghezza caratteristica L e l'angolo θ , mentre le grandezze di risposta sono la superficie dell'ugello e e il coefficiente di spinta C_F .

Il processo di analisi è stato organizzato attraverso una sequenza di operazioni, come illustrato in figura:

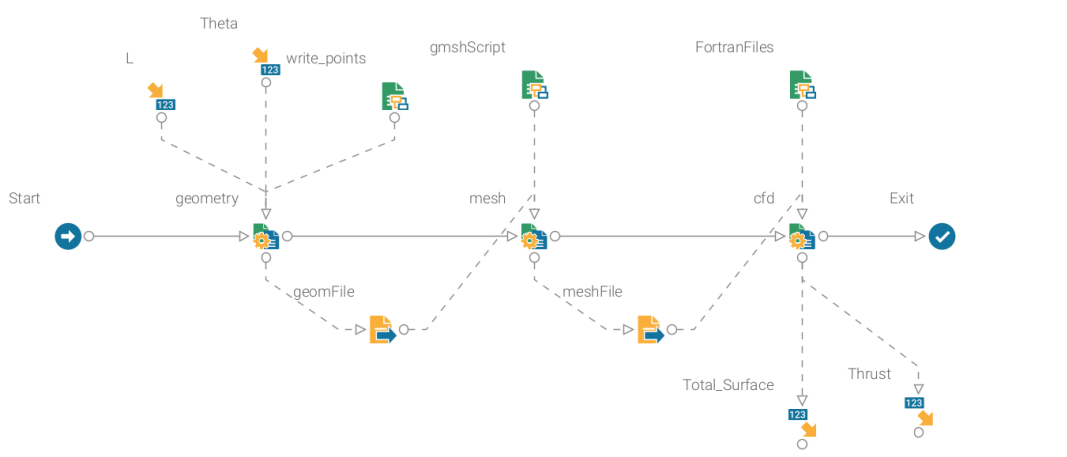


Figura 3.4: Workflow low fidelity

In una prima fase viene definito il dominio delle variabili di progetto e, sulla base di questo, vengono generati 98 design combinando in maniera casuale le grandezze di input, costruendo così il *Design of Experiments* (DOE). Le combinazioni dei parametri L e θ accoppiano punti variabili entro i seguenti intervalli:

- $L \in [9.5, 10.5]$;
- $\theta \in [38^\circ, 42^\circ]$.

Per ogni configurazione considerata, il software richiama tramite il primo nodo *EasyDriver* l'eseguibile dedicato alla generazione dei punti che definiscono il profilo dell'ugello (*writepoints.exe*). Tali punti vengono successivamente forniti come input a *Gmsh*, che provvede alla costruzione della mesh secondo quanto descritto nella sezione dedicata.

Una volta generata la mesh, il *workflow* avvia il solutore C_F D, implementando il codice di calcolo sviluppato in linguaggio Fortran e descritto nei paragrafi precedenti, il quale esegue per ogni design la simulazione del flusso, e restituisce le grandezze di interesse.

I risultati ottenuti vengono raccolti all'interno del database di modeFRONTIER, permettendo di costruire una tabella riassuntiva, contenente le variabili di input e le grandezze di risposta associate:

Tabella 3.1: Dataset dei parametri L , Θ , Surface e Thrust

L	Θ	Surface	Thrust
10.1605	40.4427	310.130	1.792 37
9.891 67	40.6543	301.909	1.786 03
9.909 96	40.0450	300.613	1.786 36
10.0257	38.5958	300.150	1.789 65
10.0761	39.6731	305.002	1.790 45
9.879 44	40.2065	300.124	1.785 75
9.651 94	40.1276	292.583	1.779 67
9.992 18	40.7095	305.408	1.788 82
10.3958	39.5511	315.167	1.798 41
10.0851	40.3549	307.500	1.790 93
10.1919	40.4678	311.236	1.792 80
9.810 92	39.4263	295.627	1.783 13
10.0347	40.6036	306.317	1.789 75
9.665 66	40.6330	294.480	1.780 52
9.970 50	40.3163	303.440	1.787 87
9.989 75	39.7568	302.353	1.787 22
10.0602	40.5105	307.023	1.790 15
9.927 34	39.7132	300.162	1.786 95
9.948 96	40.8753	304.526	1.787 57
10.0980	40.8060	309.348	1.792 00
9.857 66	40.0975	299.109	1.784 13
9.787 44	40.9499	299.387	1.783 79
10.1117	39.4912	305.416	1.790 97
9.937 81	40.8313	304.000	1.786 31
10.0311	40.0275	304.497	1.789 60
10.1479	40.1164	308.743	1.792 20
10.1232	39.3502	305.304	1.791 58
9.775 15	39.3999	294.401	1.783 08
9.916 43	39.7333	299.868	1.786 61
10.1136	40.2857	307.969	1.791 22

L	Θ	Surface	Thrust
9.737 78	41.3589	299.043	1.781 78
10.0183	40.0720	304.295	1.788 97
9.906 51	40.4861	301.903	1.786 14
9.966 34	39.2381	300.007	1.787 70
9.831 79	40.2258	298.659	1.784 97
10.0405	40.1508	305.205	1.789 13
9.955 89	39.9723	301.894	1.786 33
9.803 55	39.7018	296.187	1.782 53
10.1191	40.4110	308.694	1.791 78
10.1671	40.7748	311.573	1.794 71
10.2611	39.8410	311.476	1.795 16
9.711 92	40.0113	294.150	1.781 04
10.0017	39.2661	301.186	1.788 40
10.3505	39.6605	313.871	1.798 06
10.3078	39.9447	313.477	1.796 45
9.971 64	39.1966	300.080	1.786 66
9.852 32	41.0828	301.941	1.785 17
10.1346	41.1607	311.544	1.792 63
9.900 03	38.4498	295.634	1.786 43
10.0781	40.9306	309.075	1.791 68
9.706 82	40.6859	295.985	1.781 22
9.555 06	40.7462	291.258	1.777 13
10.2021	41.6733	315.731	1.796 81
9.962 00	39.6357	301.080	1.786 40
9.762 82	40.3302	296.725	1.782 52
9.894 20	40.0609	300.155	1.785 77
10.1033	39.8950	306.383	1.790 99
10.0246	39.5925	302.803	1.789 11
9.941 48	39.8693	301.100	1.787 74
10.1456	39.8641	307.901	1.791 12
9.751 53	39.2881	293.365	1.782 15
10.0701	39.9207	305.462	1.789 97
9.951 73	38.8126	298.297	1.786 84
10.2286	38.9043	307.463	1.793 13
10.2477	41.2644	315.999	1.797 33
9.869 67	39.9965	299.196	1.785 53

L	Θ	Surface	Thrust
9.861 61	40.3689	300.059	1.785 68
9.818 26	40.2557	298.295	1.783 64
9.885 25	40.1728	300.197	1.785 88
10.0531	39.5169	303.560	1.789 76
10.1338	40.1668	308.242	1.791 88
10.3246	40.3882	315.347	1.798 18
10.0096	39.7649	303.002	1.788 88
10.0137	39.0112	300.727	1.788 08
10.0051	40.5168	305.395	1.788 47
9.784 69	39.6076	295.321	1.783 30
9.980 03	39.8032	302.151	1.787 86
10.1522	40.5659	310.227	1.793 03
10.0920	40.5404	308.120	1.791 36
9.999 00	38.7119	299.492	1.788 54
9.920 20	39.1058	298.158	1.787 02
10.2210	41.1210	314.477	1.795 78
9.934 91	39.9040	300.997	1.787 31
10.2368	39.7959	310.680	1.794 97
10.2792	39.1282	309.821	1.795 28
9.823 94	39.8252	297.208	1.784 05
10.0644	39.5543	303.977	1.789 02
9.873 27	39.1839	296.870	1.785 30
10.1810	39.0652	306.376	1.793 14
10.0497	41.0175	308.364	1.790 68
9.840 40	38.9577	295.198	1.784 62
10.1761	39.6196	308.116	1.792 64
10.2050	40.3055	311.036	1.792 91
9.844 15	39.4668	296.792	1.784 49
10.0567	39.3781	303.453	1.790 04
9.986 22	40.1909	303.557	1.787 96
9.978 84	39.4600	301.083	1.788 10
10.0424	39.9609	304.605	1.788 79

Sulla base dei dati ottenuti, si sfruttano modelli matematici approssimati, detti *surrogate models*, per individuare il comportamento del sistema senza richiedere ulteriori simulazioni numeriche. Ciò consente di ridurre sensibilmente il costo

computazionale e di rendere più efficiente l'esplorazione dello spazio di progetto.

L'obiettivo finale del lavoro è infatti la costruzione di un modello surrogato di *Response Surface Methodology* (RSM), nel quale vengono sfruttati i dati ricavati da simulazioni a diverso grado di fedeltà. A tal fine, sono stati costruiti database *low-fidelity* e *high-fidelity*, utilizzati nell'ambito di un approccio *multifidelity*, descritto nel capitolo successivo.

Come primo risultato dell'esplorazione low-fidelity, si mostrano gli andamenti di Superficie e Coefficiente di spinta in funzione dei parametri di input, prima che questi dati vengano elaborati e generate le superfici di risposta:

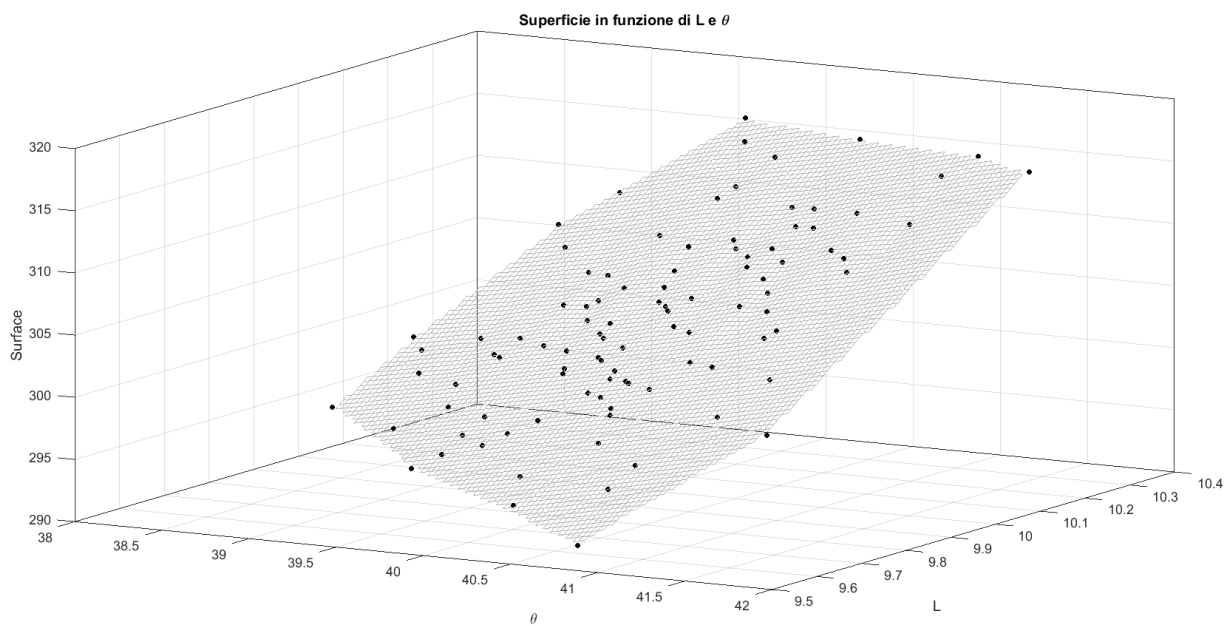


Figura 3.5: Superficie in funzione di L e θ

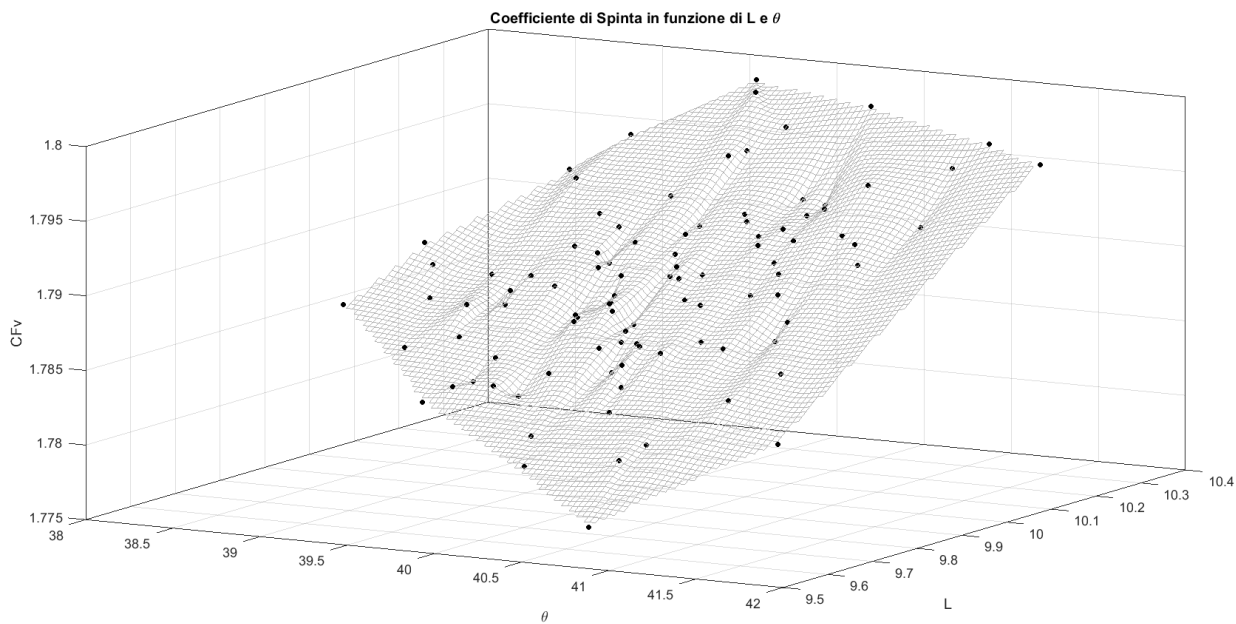


Figura 3.6: Coefficiente di Spinta in funzione di L e θ

Ciò che si osserva da una prima analisi dei dati grezzi, è una dipendenza di entrambe le grandezze di risposta più marcata rispetto alla lunghezza dell'ugello L piuttosto che dall'angolo θ .

3.9 Response Surface Methodology

La *Response Surface Methodology* (RSM) rappresenta un insieme di tecniche statistiche e matematiche utilizzate per modellare e analizzare sistemi in cui una o più variabili di risposta dipendono da diversi parametri di ingresso. L'obiettivo principale di tale metodologia è quello di costruire un modello approssimato in grado di descrivere la relazione tra le variabili indipendenti del problema e la risposta del sistema, consentendo al contempo di analizzare il comportamento del sistema e individuare eventuali condizioni operative ottimali [Reji2022RSM, Khuri2010RSM].

La *Response Surface Methodology* (RSM) comprende un insieme di modelli statistici e matematici, con lo scopo di modellare e analizzare sistemi in cui una o più variabili di risposta dipendono da diversi *input* tra di loro indipendenti. L'obiettivo di questa metodologia è costruire un modello approssimato del sistema stesso, capace di descrivere la relazione tra le variabili indipendenti e la risposta del sistema: in questo modo, è possibile al tempo stesso studiarne il comportamento e individuare eventuali condizioni operative ottimali.

In generale, si assume che la risposta del sistema possa essere espressa nella seguente forma:

$$Y = f(x_1, x_2, \dots, x_k) + \varepsilon \quad (3.67)$$

dove x_1, x_2, \dots, x_k rappresentano le variabili indipendenti del problema (nel nostro caso L e θ), f è la funzione di output che descrive il comportamento del sistema e ε rappresenta l'errore statistico associato alle misurazioni o alle simulazioni. Poiché nella maggior parte dei casi la forma analitica della funzione f non è nota, questa viene approssimata tramite modelli empirici costruiti attraverso tecniche di regressione sui dati disponibili.

Per descrivere il comportamento della risposta nello spazio delle variabili di progetto, si ricorre frequentemente a modelli polinomiali di basso ordine: in particolare, i più comuni sono i modelli di primo e secondo ordine, consentendo di approssimare in modo efficace la funzione f all'interno di una regione limitata dello spazio dei parametri.

Nel caso di due variabili indipendenti, la forma più semplice della superficie di risposta è rappresentata da un modello di primo ordine, che può essere scritto come

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 \quad (3.68)$$

dove i coefficienti β_i rappresentano i parametri della regressione e descrivono l'influenza delle variabili indipendenti sulla risposta del sistema.

Questo tipo di formulazione può risultare tuttavia non sufficiente nel momento in cui sono presenti effetti di interazione tra le variabili indipendenti, o la risposta non presenta un andamento lineare. In queste situazioni, è necessario raffinare la formulazione, introducendo termini di ordine superiore che meglio descrivano i comportamenti elencati. Il modello polinomiale di secondo ordine, ad esempio, assume la forma

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 \quad (3.69)$$

Un modello di questo tipo consente di rappresentare superfici quadratiche nello spazio delle soluzioni, rendendo così possibile descrivere in maniera più accurata i punti di massimo, minimo o di sella della funzione risposta.

Una volta ricavati i coefficienti del modello dai dati disponibili, la superficie di risposta ottenuta può essere impiegata per stimare il comportamento del sistema anche in punti dello spazio di progetto non ancora analizzati. Questo consente non solo di valutare l'influenza dei parametri di progetto, ma anche di rappresentare

in modo immediato l'andamento della risposta attraverso grafici tridimensionali e mappe di contorno, utili per l'interpretazione dei risultati e per le successive attività di ottimizzazione.

3.9.1 Stepwise Regression

La *Stepwise Regression* rappresenta una tecnica di modellazione basata sulla regressione polinomiale appena descritta. La costruzione dei modelli surrogati si basa su una combinazione lineare delle variabili di progetto. Nel caso generale, un polinomio in d variabili di grado massimo k può essere espresso nella forma

$$p_k(x) = \sum_{|\alpha| \leq k} a_\alpha x^\alpha, \quad (3.70)$$

dove i coefficienti a_α costituiscono i parametri del modello. Il numero totale di termini polinomiali dipende dal numero di variabili. Il grado del polinomio, ed è dato da

$$p = \binom{d+k}{d}. \quad (3.71)$$

Al crescere del numero di variabili di progetto o dell'ordine del polinomio, aumenta rapidamente anche il numero dei termini presenti nel modello: per questo, risulta necessario disporre di un numero di dati di training sufficientemente elevato, in modo da poter stimare correttamente tutti i coefficienti. Dato un dataset di training costituito da n design

$$f(x_i) = y_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.72)$$

Il modello deve dunque determinare in modo efficace quali siano i coefficienti del polinomio che meglio approssimano i dati disponibili. In forma matriciale il modello può essere scritto come

$$y = Xa + \varepsilon, \quad (3.73)$$

dove X rappresenta la *design matrix*, costruita a partire dai termini polinomiali valutati nei punti di training, a è il vettore dei coefficienti incogniti del modello e ε raccoglie gli errori associati all'approssimazione. I coefficienti vengono in genere stimati mediante il metodo dei minimi quadrati, che cerca la soluzione in grado di minimizzare la norma dell'errore residuo.

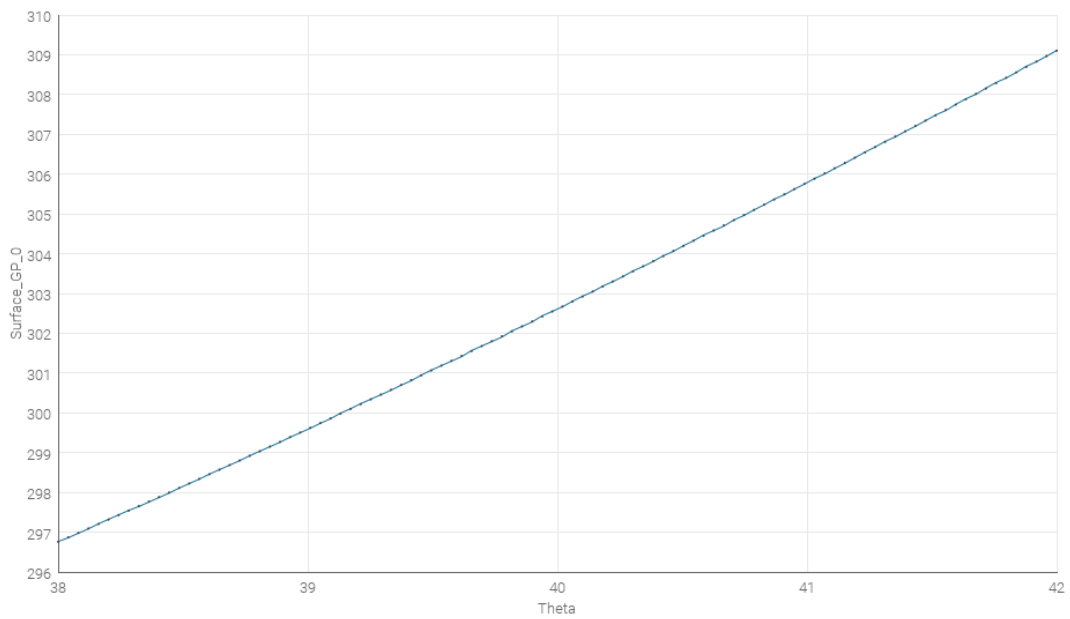
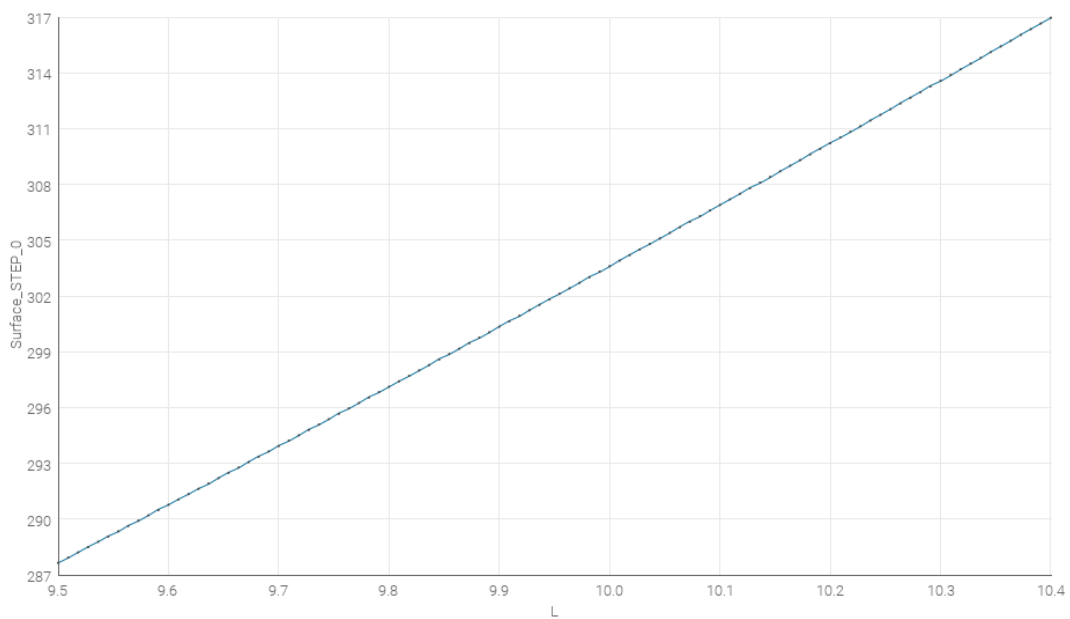
La natura del modello è direttamente connessa ad uno dei suoi principali limiti: a causa della rapida crescita del numero di termini, è possibile incappare in problemi di *overfitting*: per questo motivo, è necessario individuare quali siano i termini di *input* effettivamente rilevanti all'interno del problema, in modo da costruire una superficie di risposta calzante.

La *Stepwise Regression* affronta questo problema mediante una procedura iterativa di selezione automatica dei termini polinomiali. In particolare, a partire da un modello iniziale, i diversi termini vengono progressivamente aggiunti o rimossi dal modello in base al miglioramento delle prestazioni secondo uno specifico criterio statistico. Questo processo viene ripetuto fino a quando non è più possibile migliorare il modello secondo il criterio selezionato.

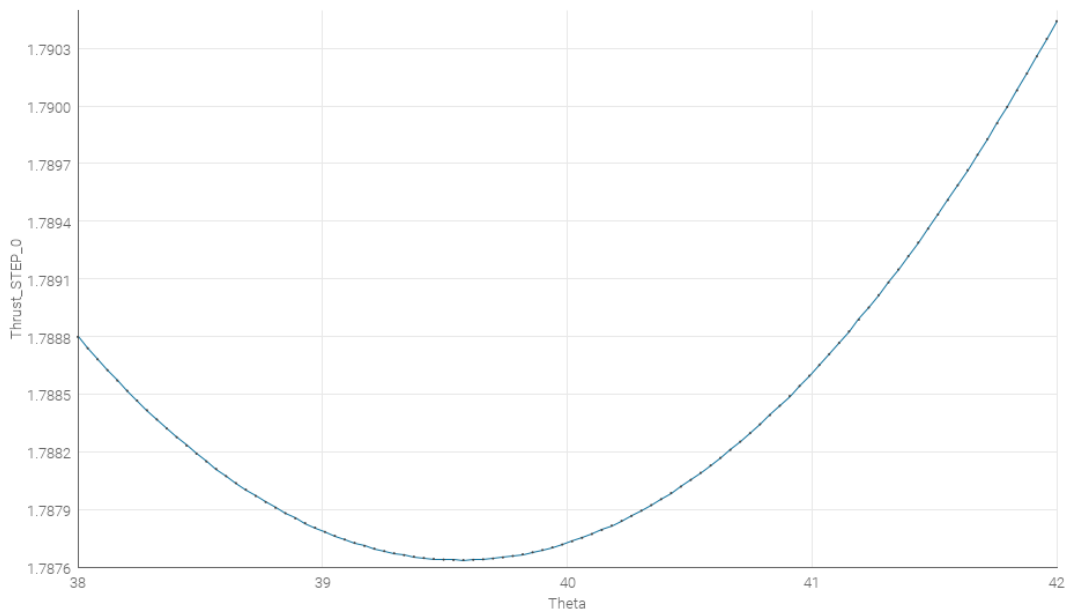
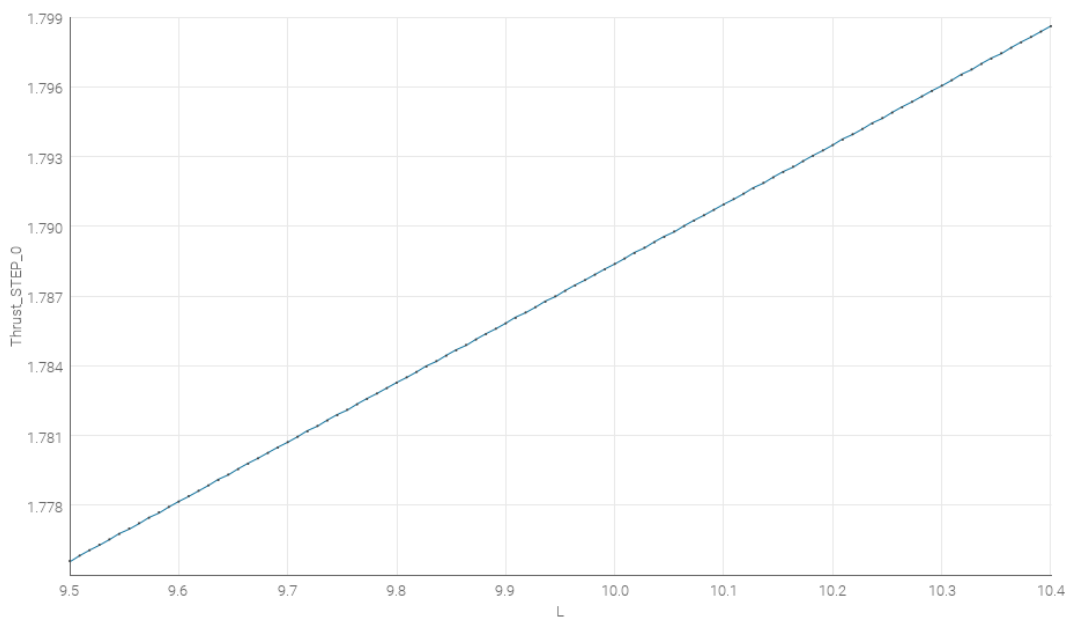
Per rispondere a questo limite, la *Stepwise Regression* implementa una selezione automatica dei termini di *input* più rilevanti per il modello: attraverso una procedura iterativa, i vari termini polinomiali vengono introdotti o eliminati, valutando man mano la qualità del modello, valutata tramite un opportuno criterio statistico. Il processo viene ripetuto fino a quando l'aggiunta o la rimozione di ulteriori termini non produce più un miglioramento significativo del modello.

Un secondo aspetto da considerare nella costruzione del modello è il rispetto del principio di *marginality*: questo prevede che sia possibile includere un termine polinomiale di ordine superiore solo se tutti i termini di ordine inferiore da cui dipende sono già presenti. Questo principio garantisce una maggiore coerenza statistica del modello e ne facilita l'interpretazione.

Si allegano dunque i risultati predittivi del modello *Stepwise Regression* applicato al problema dell'ugello assialsimmetrico:

Figura 3.7: Superficie in funzione di θ - Stepwise RegressionFigura 3.8: Superficie in funzione di L - Stepwise Regression

Ciò che si osserva, grazie proprio alla natura del modello e del basso numero di variabili di design considerate, è un'ottima descrizione del problema: la relazione tra gli *input* e le grandezze di risposta risultano regolari, rendendo questo modello un candidato ottimale per la costruzione delle superfici di risposta.

Figura 3.9: C_F in funzione di θ - Stepwise RegressionFigura 3.10: C_F in funzione di L - Stepwise Regression

3.9.2 Gaussian Process

Il *Gaussian Process* (GP) rappresenta uno dei modelli surrogati più utilizzati nella modellazione di superfici di risposta. Si tratta di un approccio di tipo probabilistico, basato su una formulazione *bayesiana*, che consente di costruire un modello di risposta del sistema a partire da un insieme limitato di dati disponibili.

Dato un insieme di dati di training costituito da n simulazioni:

$$D = \{(x_i, y_i) \mid i = 1, \dots, n\}, \quad (3.74)$$

La differenza rispetto ai modelli polinomiali sta nel fatto che nel *Gaussian Process* la funzione incognita f che approssima il modello, non viene rappresentata da una singola espressione, ma viene descritta in termini probabilistici: ad ogni punto associato ad una simulazione nello spazio delle variabili, il modello fornisce una previsione della risposta, a cui si accosta una misura dell'incertezza associata.

In generale, il modello di regressione può essere espresso nella forma

$$y = f(x) + \varepsilon \quad (3.75)$$

dove ε rappresenta il termine di errore casuale, assunto come variabile gaussiana a media nulla e varianza costante.

Nel contesto dei *Gaussian Processes*, i valori assunti dalla funzione $f(x)$ nei diversi punti dello spazio delle variabili di progetto vengono trattati come variabili aleatorie, distribuiti seguendo una distribuzione gaussiana congiunta. Un processo gaussiano è quindi completamente caratterizzato dalla sua funzione media $m(x)$ e dalla funzione di covarianza $k(x, x')$:

$$f(x) \sim GP(m(x), k(x, x')). \quad (3.76)$$

Nelle applicazioni pratiche, la funzione media viene spesso assunta pari a zero, mentre il comportamento del modello è descritto principalmente dalla funzione di covarianza, comunemente indicata anche come *kernel*. Quest'ultima esprime il grado di correlazione tra i valori assunti dalla funzione in diversi punti dello spazio delle variabili di progetto.

Tra le formulazioni più comuni per la funzione di covarianza vi è il kernel gaussiano, noto anche come *squared exponential*:

$$k(x_i, x_j) = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\ell^2}\right) \quad (3.77)$$

dove σ_f^2 rappresenta la varianza del processo, mentre ℓ è il parametro di lunghezza caratteristica, che regola il livello di correlazione tra punti tra loro vicini nello spazio delle variabili.

Una volta definita la funzione di covarianza, è possibile calcolare la matrice K valutando il kernel per ogni design contenuto nel dataset di training. Dalla matrice,

si può poi ricavare la distribuzione predittiva del modello in un nuovo punto x^* . Più precisamente, il valor medio della predizione si esprime come:

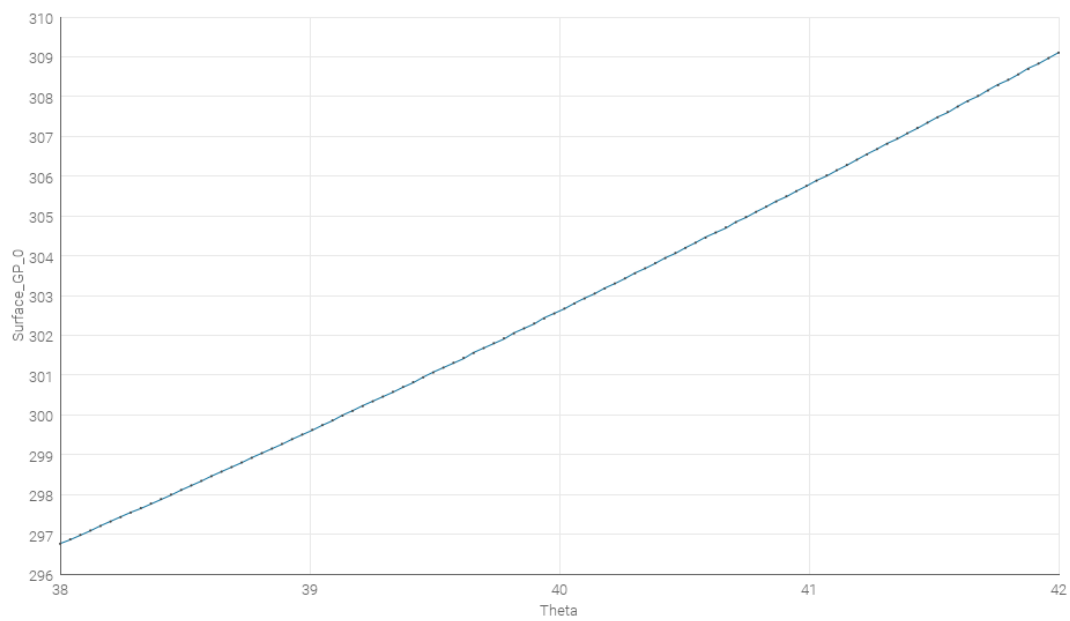
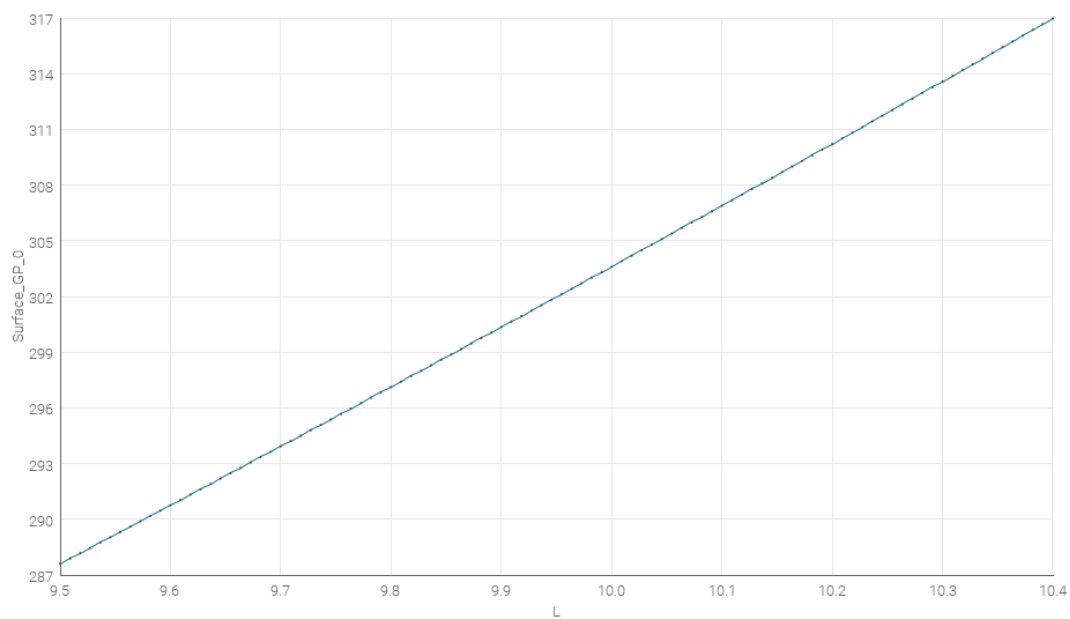
$$E[f(x^*)] = k^{*T}(K + \sigma_n^2 I)^{-1}y \quad (3.78)$$

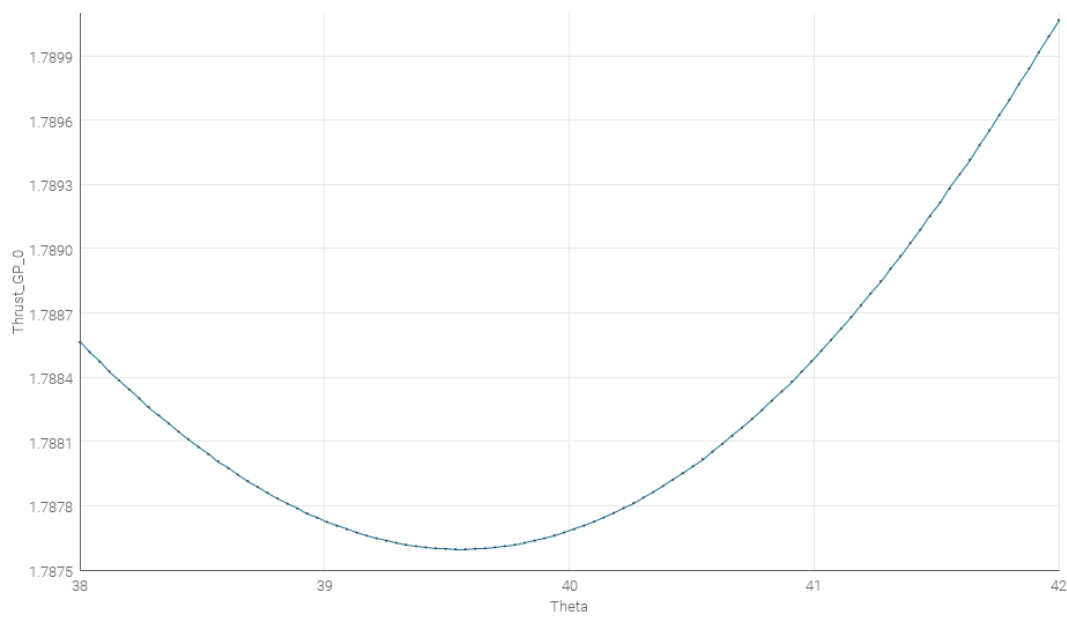
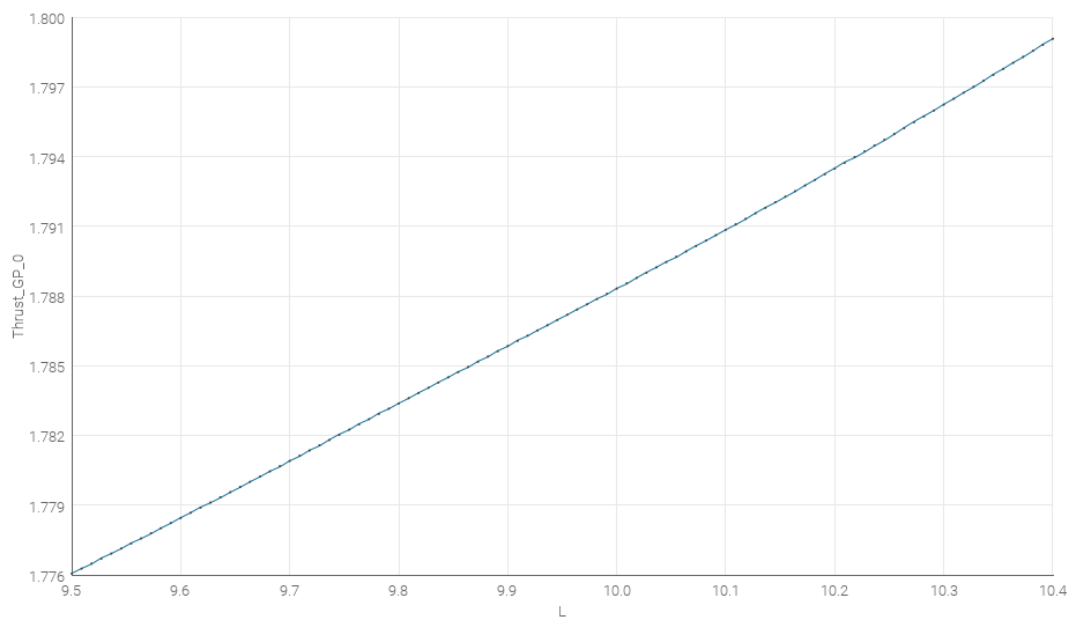
in cui k^* è il vettore che raccoglie le covarianze tra il punto di interesse e i punti del training set, mentre σ_n^2 rappresenta la varianza del rumore associato al modello.

La natura del modello *Gaussian Process* consente di quantificare l'incertezza associata alla predizione del modello, rendendo tale approccio particolarmente utile nei problemi di ottimizzazione e nelle applicazioni di modellazione surrogata. Questo è dovuto al fatto che la previsione non viene espressa come un unico valore deterministico, bensì come una distribuzione probabilistica definita da media e varianza.

Nel software *modeFRONTIER* sono disponibili diverse funzioni di covarianza, tra cui *Gaussian*, *Matérn $\frac{3}{2}$* , *Matérn $\frac{5}{2}$* , *exponential* e *rational quadratic*. I parametri del modello, detti *iperparametri*, vengono determinati mediante la massimizzazione della funzione di verosimiglianza marginale, generalmente tramite procedure di *maximum likelihood estimation*.

Si allegano in seguito i risultati del training ottenuti tramite *Gaussian Process*:

Figura 3.11: Superficie in funzione di θ - Gaussian ProcessFigura 3.12: Superficie in funzione di L - Gaussian Process

Figura 3.13: C_F in funzione di θ - Gaussian ProcessFigura 3.14: C_F in funzione di L - Gaussian Process

Anche in questo caso si osserva un andamento "pulito", ossia risultano regolari e privi di oscillazioni spurie, rendendolo un ottimo candidato per la generazione delle superfici di risposta.

3.9.3 Radial Basis Function

Le *Radial Basis Functions* (RBF) si prestano particolarmente bene per problemi in cui i dataset racchiudono punti sparsi, privi di una disposizione ordinata e regolare. Il metodo è quindi adatto a processi di esplorazione basati sulle tabelle dati generate tramite *Design of Experiments*.

Dato un insieme di n punti di training $\{x_i\}_{i=1}^n$ con valori della funzione associati $f(x_i)$, l'interpolazione RBF assume la forma

$$s(x) = \sum_{j=1}^n c_j \phi \left(\frac{\|x - x_j\|}{\delta} \right), \quad (3.79)$$

dove $\|\cdot\|$ rappresenta la norma euclidea nello spazio delle variabili di progetto, $\phi(r)$ è la funzione radiale scelta e δ è un parametro di scala che ne controlla l'estensione. I coefficienti c_j costituiscono i parametri del modello e sono calcolati imponendo che la funzione interpolante passi esattamente per tutti i punti di training disponibili.

Il modello risultante può essere interpretato come una combinazione lineare di funzioni radiali centrate sui punti del dataset. In questo modo la superficie di risposta costruita risulta esattamente interpolante, ovvero coincide con i valori noti della funzione nei punti di training.

Nel software *modeFRONTIER* sono disponibili diverse tipologie di funzioni radiali, tra cui Gaussiane, *Polyharmonic Splines*, *MultiQuadratics*, *Inverse MultiQuadratics* e funzioni compatte di *Wendland*. La funzione radiale adottata e il valore del parametro di scala hanno un ruolo importante nelle prestazioni del modello: essi impattano pesantemente la qualità dell'interpolazione e la stabilità numerica del problema. Il parametro di scala ottimale viene scelto da *modeFRONTIER* tramite il criterio di *leave-one-out cross validation*. In questo approccio ogni punto del dataset viene temporaneamente escluso dal processo di training, andando poi a valutare l'errore di predizione nel punto escluso. La minimizzazione dell'errore medio ottenuto con questa procedura consente di identificare il valore del parametro di scala che garantisce le migliori prestazioni del modello.

In seguito, si visualizzano le curve rappresentanti i valori delle grandezze obiettivo in funzione dei valori L e θ :

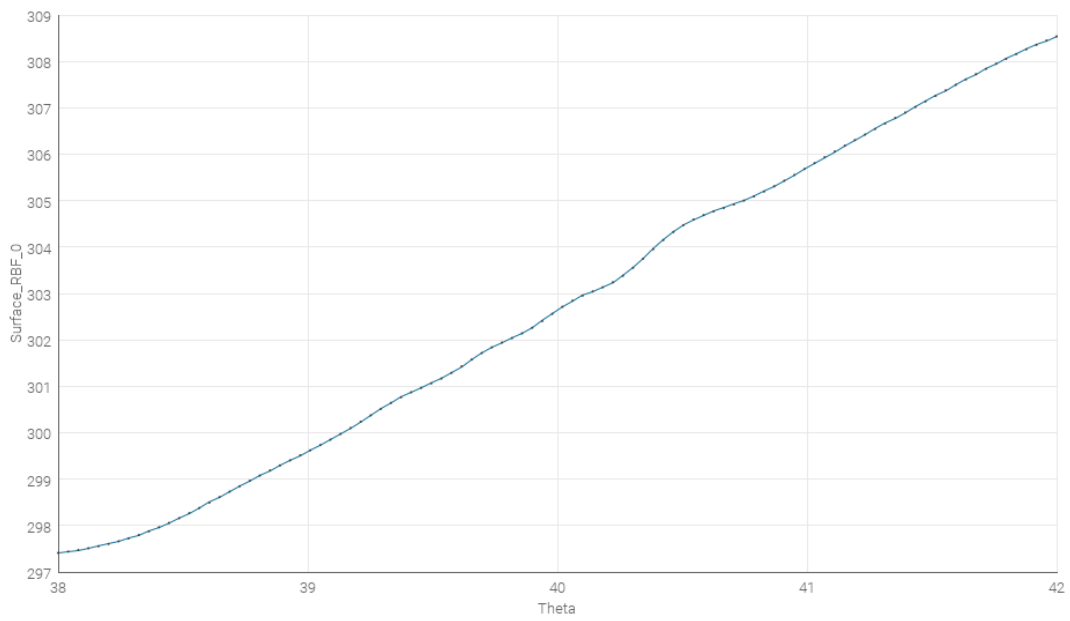


Figura 3.15: Superficie in funzione di θ - Radial Basis Function

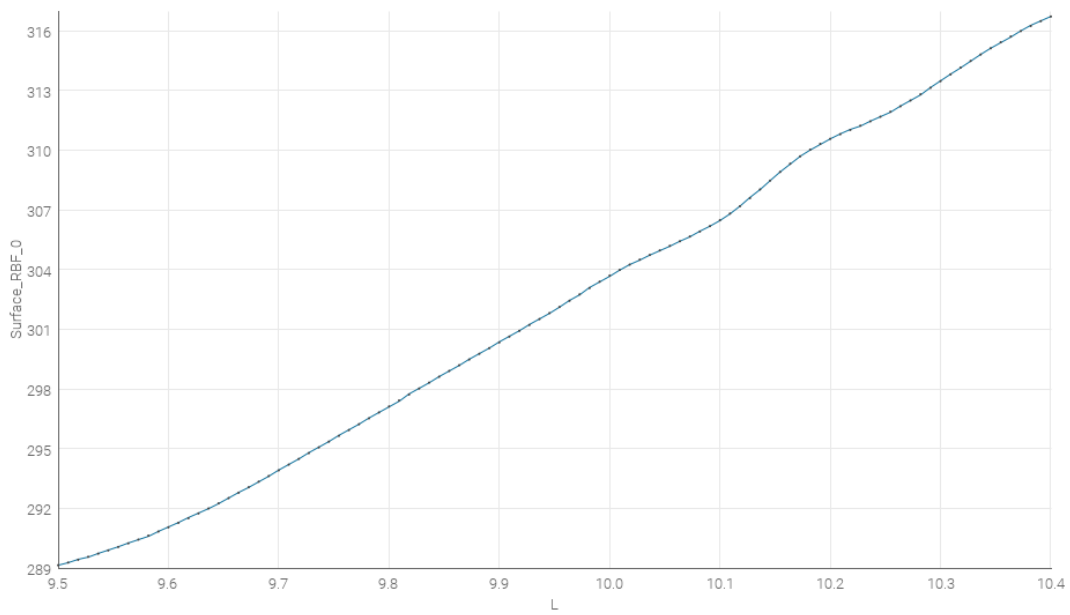
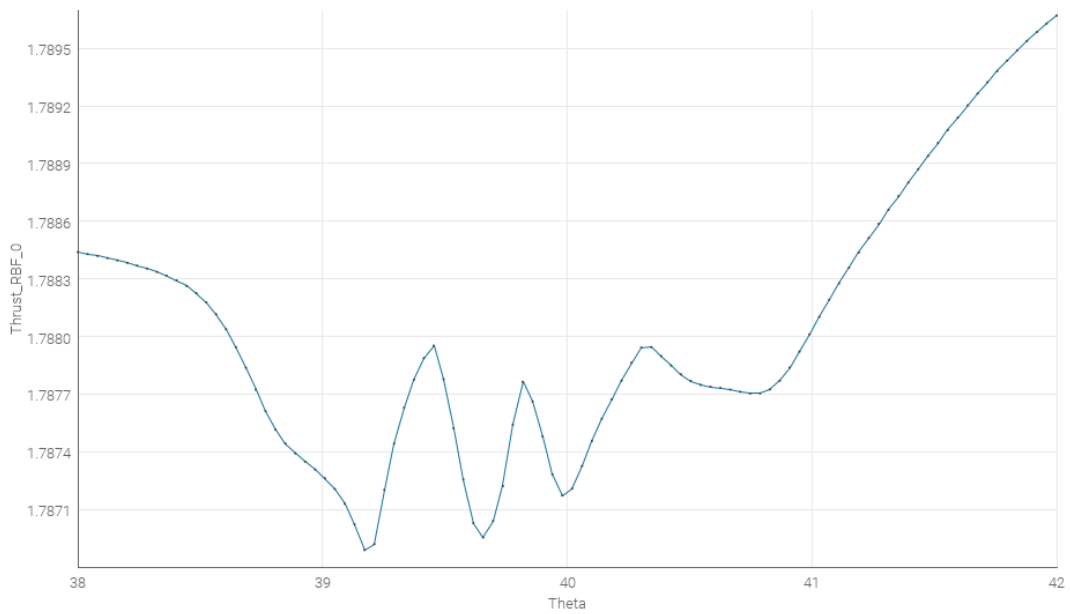
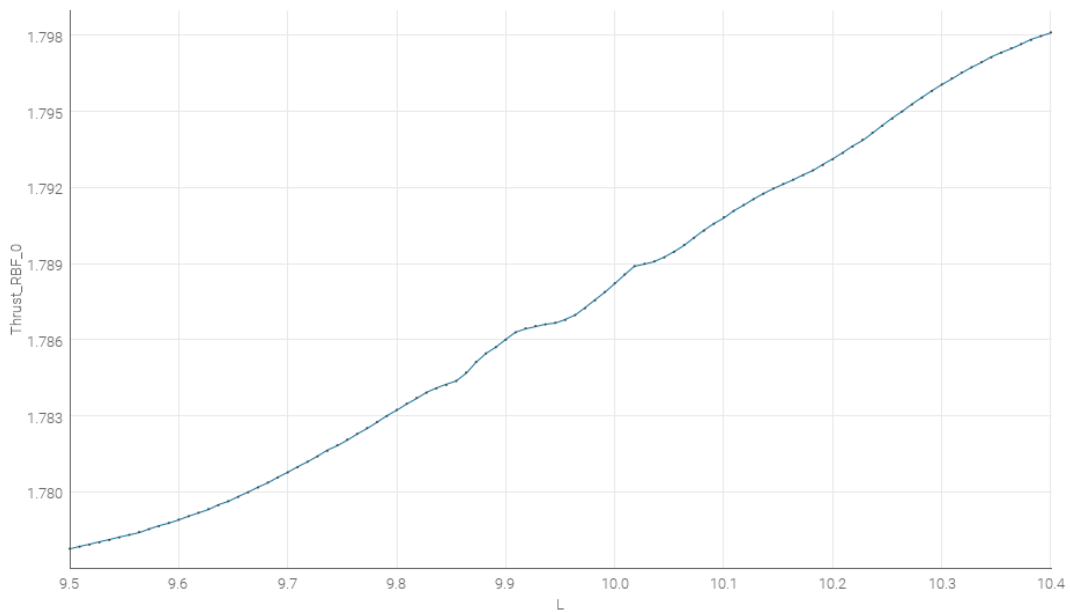


Figura 3.16: Superficie in funzione di L - Radial Basis Function

Figura 3.17: C_F in funzione θ - Radial Basis FunctionFigura 3.18: C_F in funzione L - Radial Basis Function

In questo caso, a differenza dei precedenti, si riscontra la presenza di oscillazioni spurie, specialmente legate alla descrizione delle grandezze di output in funzione di θ . Per questo motivo, analizzando anche gli indici legati all'errore di predizione, si è deciso di scartare questo metodo surrogato per la generazione delle superfici di risposta.

3.9.4 Neural Networks

Le *Neural Networks* (NN) costituiscono una famiglia di modelli di apprendimento statistico che si rifanno concettualmente al funzionamento delle reti neurali biologiche. Questi modelli sono particolarmente adatti per la rappresentazione di relazioni non lineari tra variabili di input e output.

Una rete neurale artificiale è costituita da un insieme di nodi, detti neuroni, collegati tra loro: il comportamento della rete dipende da parametri adattivi che vengono aggiornati durante la fase di addestramento sulla base dei dati disponibili.

In *modeFRONTIER* viene utilizzata una rete neurale *feedforward* con un unico livello nascosto, riconducibile alla famiglia dei *Multi-Layer Perceptrons*. Ciò significa che l'informazione viene elaborata passando dagli input al livello nascosto e successivamente all'output, senza che siano presenti percorsi di ritorno o connessioni cicliche interne. Tutte le variabili di input e output vengono inoltre normalizzate internamente, mentre l'inizializzazione dei pesi è affidata alla tecnica di *Nguyen-Widrow*, utile per rendere più rapido il training. Il dimensionamento della rete può infine essere eseguito automaticamente dal software.

Il *training* avviene tramite un algoritmo di *back-propagation*, che confronta i valori previsti dal modello con quelli reali del dataset fornito, e aggiorna iterativamente i parametri della rete in modo da ridurre l'errore di predizione. In particolare, l'ottimizzazione dei pesi viene effettuata minimizzando l'errore quadratico medio mediante l'algoritmo di *Levenberg-Marquardt*.

Si allegano dunque i risultati predittivi del modello *Stepwise Regression* applicato al problema dell'ugello assialsimmetrico:

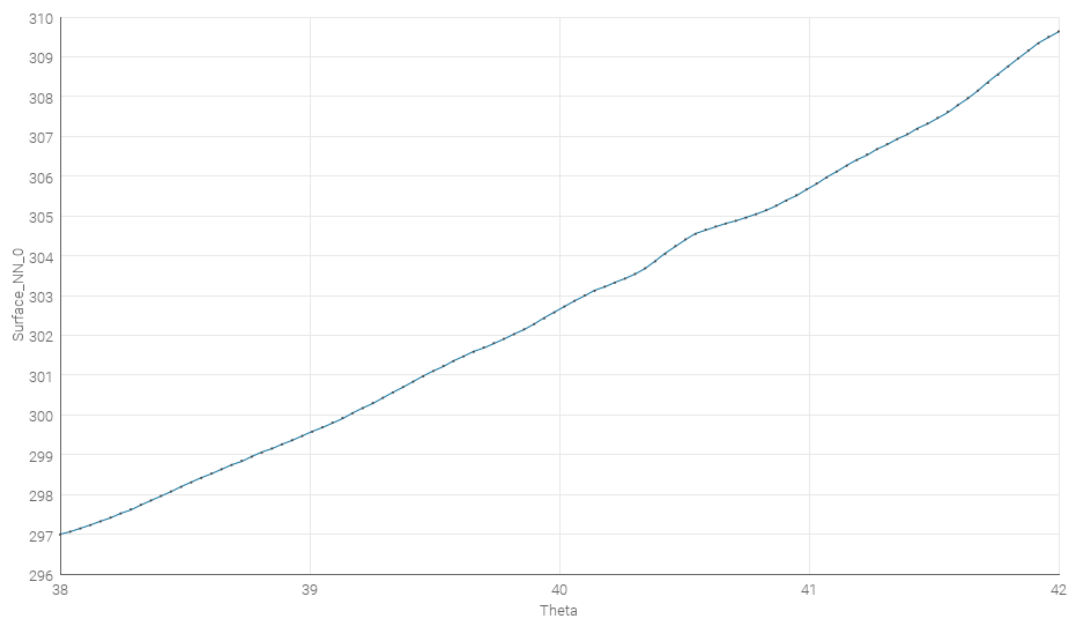


Figura 3.19: Superficie in funzione di θ - Neural Networks

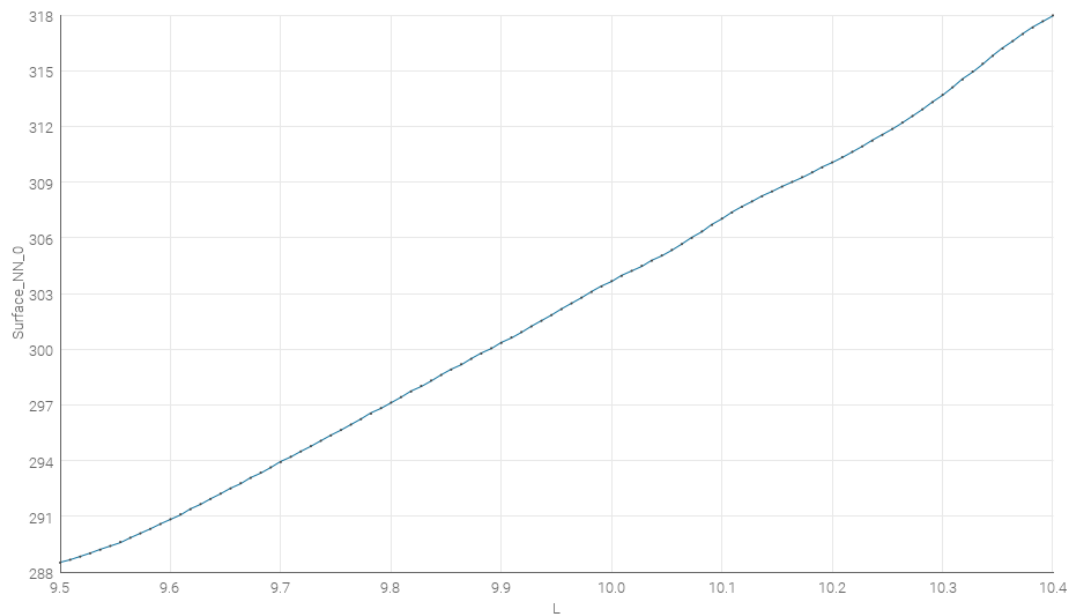
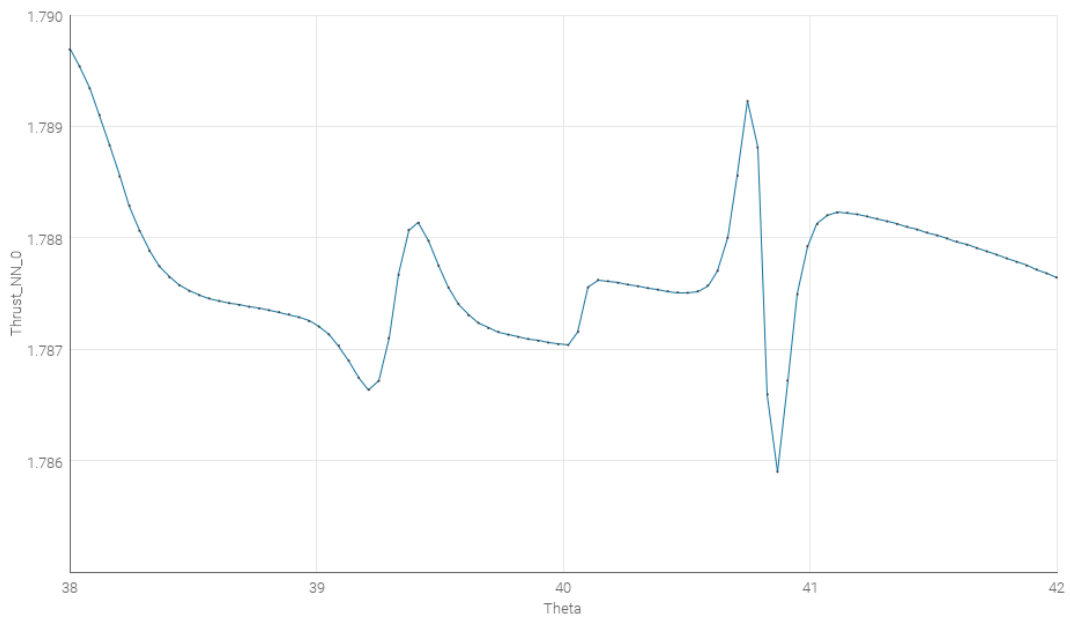
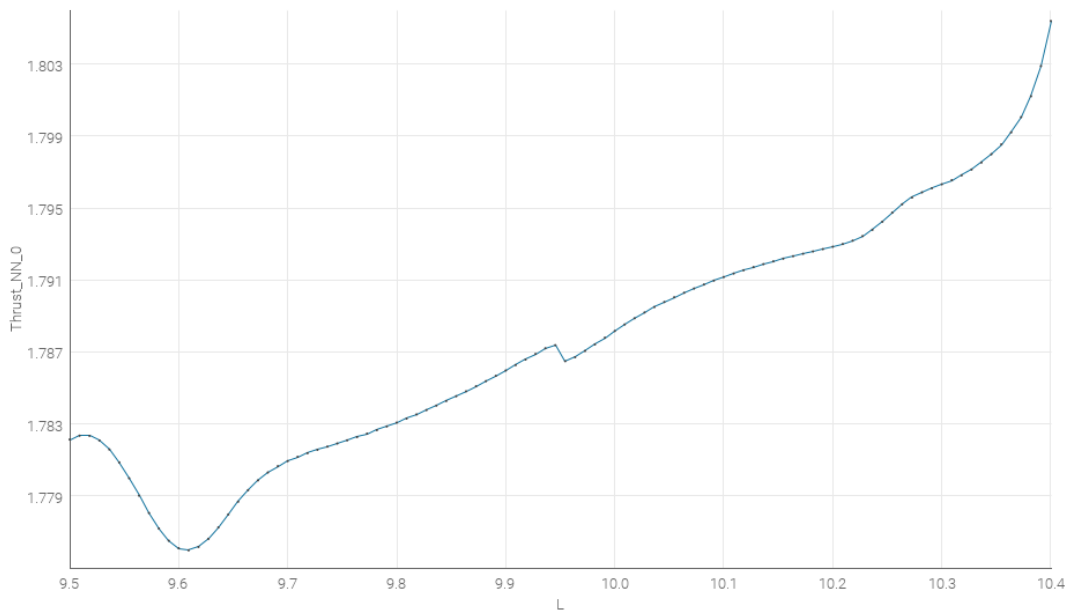


Figura 3.20: Superficie in funzione di L - Neural Networks

Figura 3.21: C_F in funzione di θ - Neural NetworksFigura 3.22: C_F in funzione di L - Neural Networks

Anche in questo caso, come per il modello RBF, l'algoritmo *Neural Networks* non sembra particolarmente adatto all'applicazione nel problema in esame: compaiono forti oscillazioni e non si riesce ad individuare un andamento coerente tra dati di input e di output.

3.9.5 Scelta del modello low fidelity

Dall'*RSM comparison* tra i quattro modelli appena introdotti, si è ottenuto il seguente esito:

Surface								
		Model	Training Progress	Mean Abs. Error	Mean Rel. Error	Mean Norm. Error	R-squared	AIC
1	☆	Surface_GP_0	🟢 Finished	0.0393334	0.000127284	0.00188499	0.999906	55.3886
2	☆	Surface_NN_0	🟢 Finished	0.163636	0.000528200	0.00784202	0.997587	50.9578
3	☆	Surface_RBF_0	🟢 Finished	0.0932426	0.000302676	0.00446850	0.999504	84.9158
4	★	Surface_STEP_0	🟢 Finished	0.0388205	0.000125696	0.00186041	0.999909	-97.3644

Thrust								
		Model	Training Progress	Mean Abs. Error	Mean Rel. Error	Mean Norm. Error	R-squared	AIC
1	★	Thrust_GP_0	🟢 Finished	0.000407738	0.000227692	0.0230851	0.989476	-126.232
2	☆	Thrust_NN_0	🟢 Finished	0.00110762	0.000619220	0.0627108	0.852767	-142.104
3	☆	Thrust_RBF_0	🟢 Finished	0.000532857	0.000297557	0.0301690	0.981216	-117.225
4	☆	Thrust_STEP_0	🟢 Finished	0.000421793	0.000235464	0.0238808	0.987221	-276.543

Figura 3.23: RSM comparison - low-fidelity

Seguono le definizioni degli indici che compaiono in figura, utilizzati per scegliere il miglior modello surrogato tra quelli esplorati:

Mean Absolute Error Il *Mean Absolute Error* misura l'errore medio commesso dal modello, considerando il valore assoluto della differenza tra dato reale e dato predetto. Più questo indice è basso, più il modello risulta accurato.

Mean Relative Error Il *Mean Relative Error* esprime l'errore medio in forma relativa rispetto al valore reale della risposta. Questo permette di valutare meglio il peso dello scostamento rispetto all'ordine di grandezza della variabile considerata.

Mean Normalized Error Il *Mean Normalized Error* è un errore medio normalizzato rispetto al range della variabile di output. Risulta quindi utile quando si vogliono confrontare prestazioni relative a grandezze con scale diverse.

R-Squared Il coefficiente di determinazione R^2 indica quanto bene il modello riesce a descrivere i dati. Valori più vicini a 1 segnalano un ottimo adattamento, mentre valori più bassi indicano una minore capacità di rappresentare la variabilità della risposta.

AIC. L'*Akaike Information Criterion* tiene conto sia della qualità dell'adattamento sia della complessità del modello. In generale, valori più bassi sono preferibili perché indicano un miglior equilibrio tra accuratezza e semplicità.

Per la variabile *Surface*, il modello *Stepwise Regression* è risultato complessivamente il più efficace, poiché presenta gli errori più contenuti, il valore più elevato di R^2 e il miglior valore di AIC tra tutti i modelli esaminati. Il *Gaussian Process* mostra prestazioni molto vicine, sebbene leggermente inferiori con riferimento all'insieme degli indicatori considerati.

Alla luce degli indicatori analizzati, per la variabile *Surface* è stato selezionato il modello *Stepwise Regression*, poiché è risultato il più efficace nel descrivere la risposta considerata. Per la variabile *Thrust*, invece, è stato adottato il *Gaussian Process*, che ha mostrato una maggiore accuratezza predittiva rispetto agli altri modelli esaminati. Si visualizza la sovrapposizione dei vari modelli con i dati di training utilizzati:

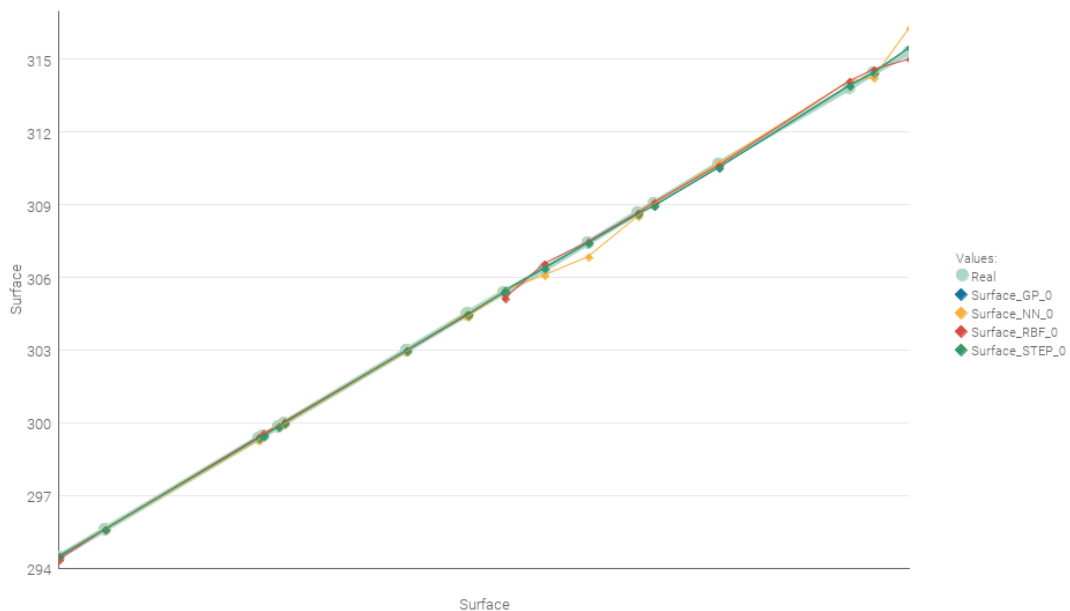


Figura 3.24: RSM comparison - Superficie

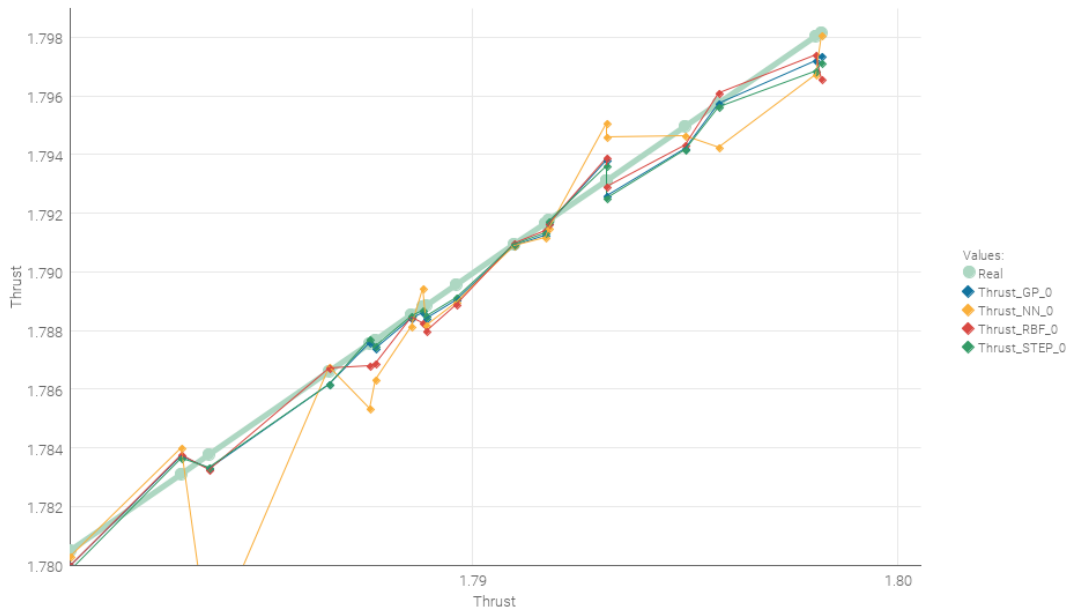


Figura 3.25: RSM comparison - Thrust

Le superfici di risposta ottenute a partire dalle simulazioni low-fidelity sono le seguenti:

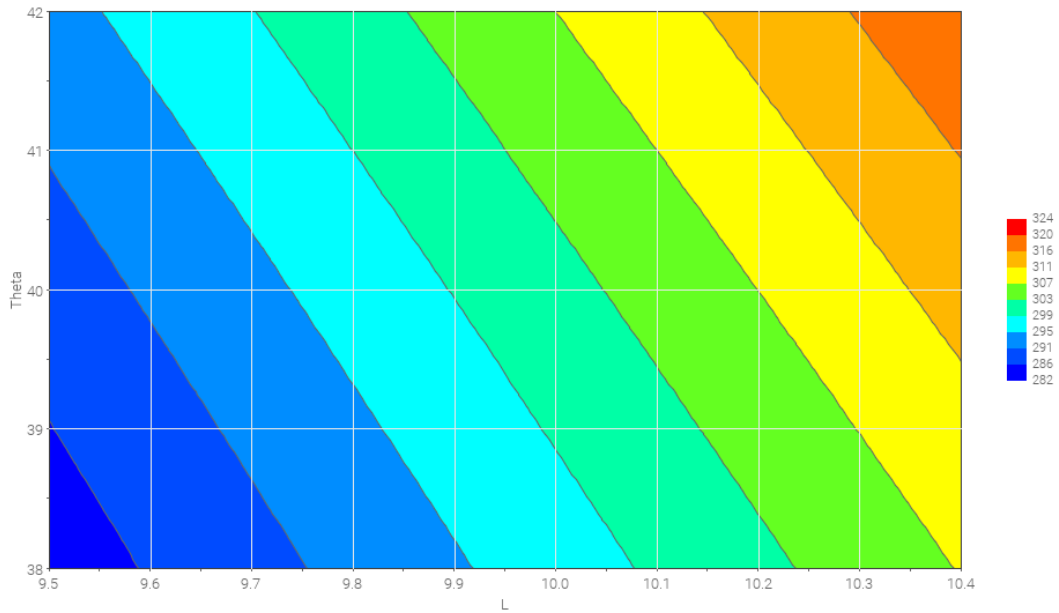


Figura 3.26: Contour Plot - Superficie

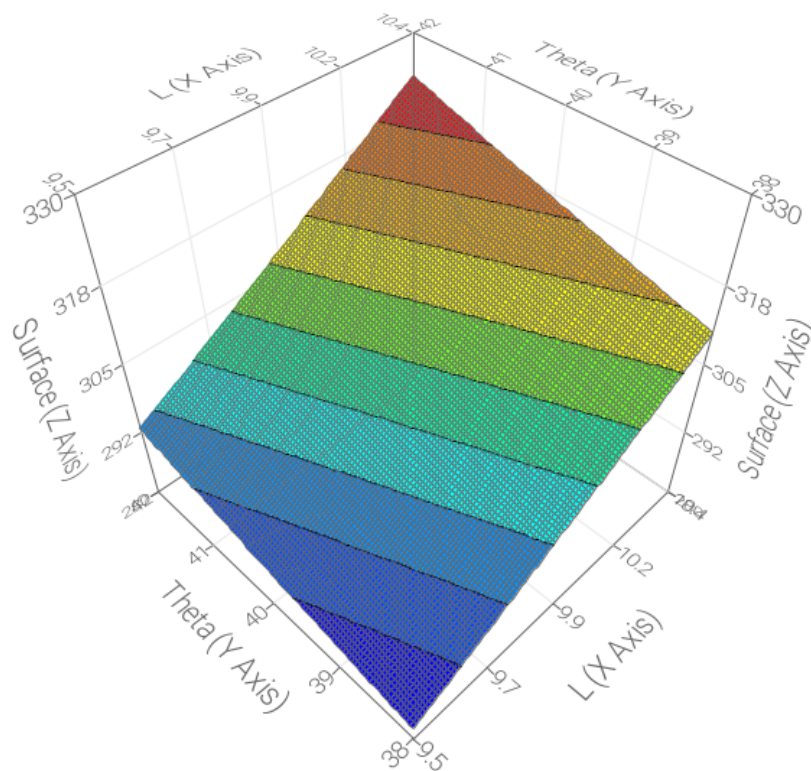


Figura 3.27: Superficie di Risposta - Superficie

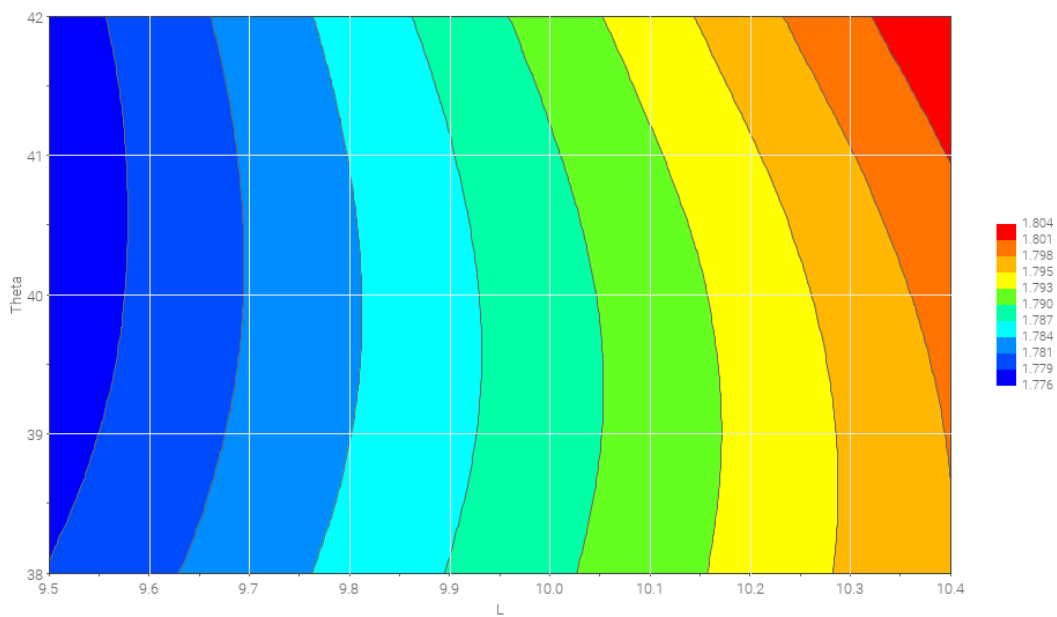


Figura 3.28: Contour Plot - Coefficiente di Spinta

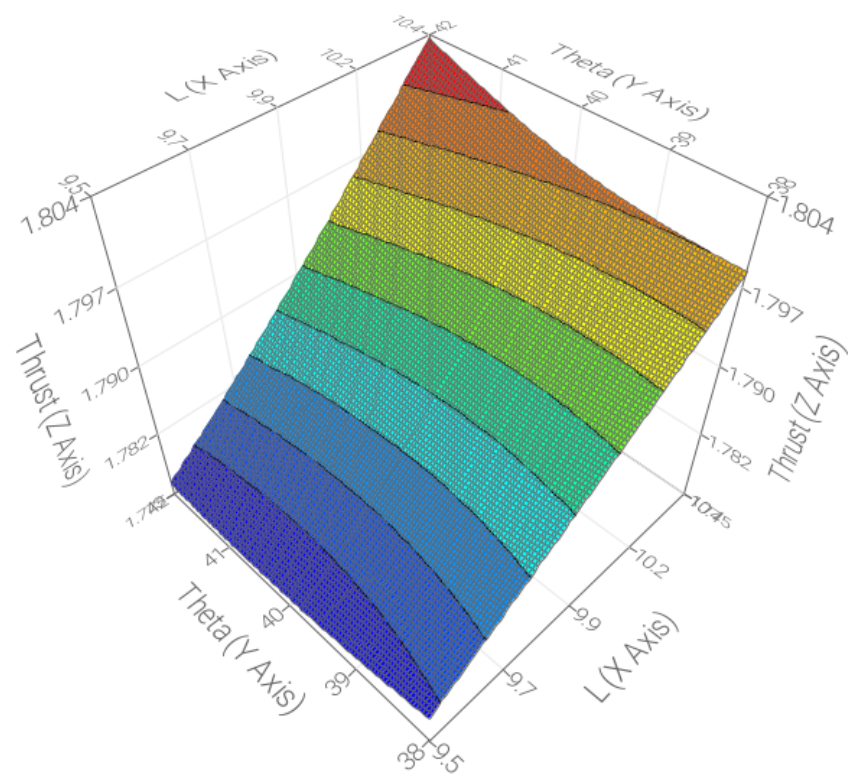


Figura 3.29: Superficie di Risposta - Coefficiente di Spinta

Capitolo 4

Simulazioni High fidelity - Reynolds-Averaged Navier-Stokes

La seconda parte del lavoro di tesi è dedicata allo studio del campo di moto associato all'ugello assialsimmetrico tramite un modello numerico più accurato, basato sulle equazioni *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS). Il modello RANS deriva direttamente dalle equazioni di Navier-Stokes, superando così il limite introdotto dalle equazioni di Eulero, basate su una descrizione inviscida del flusso. In questa nuova formulazione, sfruttata per le simulazioni *high-fidelity*, compaiono anche i contributi legati alla viscosità molecolare, permettendo così di descrivere in maniera più accurata il comportamento del flusso dentro l'ugello.

Quando si descrivono i flussi turbolenti, le grandezze fluidodinamiche variano fortemente nel tempo: risolvere il campo di moto in tutte le scale diventa così uno sforzo estremamente oneroso dal punto di vista computazionale. Per questa ragione si introduce il modello RANS, basato sull'applicazione di un'operazione di media alle equazioni istantanee di Navier-Stokes, che permette di snellire efficacemente il costo delle simulazioni. Tale operazione introduce dei nuovi termini associati agli effetti delle fluttuazioni turbolente di velocità rispetto al moto medio. Questi termini sono detti *Reynolds stresses* e vengono determinati in base al modello di turbolenza che si sceglie di adottare per la chiusura del sistema di equazioni.

Dal punto di vista computazionale, dunque, nonostante le simulazioni RANS risultino più impegnative rispetto al modello inviscido descritto dalle equazioni di Eulero, rappresentano un'ottima alternativa ad approcci più dettagliati come DNS e LES, che consentono una descrizione più completa del moto turbolento, ma richiedono risorse numeriche molto più elevate e risultando poco praticabili in contesti che richiedono un alto numero di simulazioni.

Le equazioni RANS sono state quindi adottate come modello *high-fidelity* del pre-

sente studio. Sono state pertanto eseguite 20 simulazioni numeriche in ambiente *ANSYS Fluent*, non tanto per esplorare in modo estensivo lo spazio dei parametri, quanto piuttosto per disporre di un insieme di soluzioni ad alta accuratezza da integrare con i risultati *low-fidelity* nella successiva analisi *multifidelity*. Nel presente lavoro di tesi, il modello RANS è stato dunque adottato per condurre delle simulazioni *high-fidelity* in ambiente *ANSYS Fluent*, in modo da integrare i risultati relativi al *low-fidelity* al fine di condurre un'analisi *multifidelity* del problema.

4.1 Equazioni di Navier–Stokes per flussi compressibili

Si introducono le equazioni di Navier–Stokes per flussi compressibili, in forma differenziale conservativa. Queste descrivono l'evoluzione nello spazio e nel tempo di massa, quantità di moto ed energia, in cui ora vengono presi in considerazione gli effetti viscosi e i gradienti di temperatura.

4.1.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di continuità in forma differenziale conservativa si esprime nella seguente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) = 0, \quad (4.1)$$

dove ρ è la densità del fluido e \mathbf{q} indica il vettore della velocità (u, v, w) .

4.1.2 Equazione di bilancio della quantità di moto

Nel bilancio della quantità di moto compaiono i termini convettivi derivanti dal trasporto della quantità di moto da parte del fluido in movimento, i termini diffusivi associati alla viscosità del fluido, e i contributi delle forze esterne (suddivisi in forze di superficie e volume). In forma conservativa esso assume la forma:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q} \otimes \mathbf{q}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{l}, \quad (4.2)$$

dove $\boldsymbol{\sigma}$ è il tensore degli sforzi e \mathbf{l} rappresenta le forze di volume per unità di massa. Nel tensore degli sforzi sono rappresentati i contributi della pressione esterna e della viscosità. Si può dunque esprimere il tensore come:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (4.3)$$

dove p è la pressione, \mathbf{I} è il tensore identità e $\boldsymbol{\tau}$ è il tensore degli sforzi viscosi.

4.1.3 Equazione di conservazione dell'energia

Definendo innanzitutto l'energia per unità di massa posseduta da un gas come:

$$E = e + \frac{|\mathbf{q}|^2}{2}, \quad (4.4)$$

in cui e è l'energia interna specifica, l'equazione di conservazione dell'energia può essere scritta come

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{q}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}) + \rho \mathbf{l} \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{q}_h, \quad (4.5)$$

dove \mathbf{q}_h è il flusso di calore.

4.1.4 Chiusura del problema

Sono state introdotte così cinque equazioni di conservazione: due scalari, associate al bilancio di massa ed energia ed una vettoriale, rappresentante la decomposizione del bilancio della quantità di moto su tre direzioni ortogonali. Le sole equazioni di conservazione non sono tuttavia sufficienti a chiudere il sistema, essendo presenti 14 incognite. Si introducono così ulteriori equazioni:

Calcolo del tensore degli sforzi viscosi

Si esplicita il tensore degli sforzi viscosi $\boldsymbol{\tau}$ in funzione del campo di velocità del problema. Nella forma matriciale assume la seguente forma:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}, \quad (4.6)$$

in cui i termini diagonali corrispondono agli sforzi normali, mentre quelli fuori diagonale rappresentano gli sforzi tangenziali. Il generico elemento τ_{ij} può essere calcolato con

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial q_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (4.7)$$

Legge di Fourier

Si può esplicitare il flusso di calore con la legge di Fourier:

$$\mathbf{q}_h = -k\nabla T, \quad (4.8)$$

dove k è la conducibilità termica e T la temperatura.

Legge dei gas perfetti

Per chiudere il legame termodinamico, si assume valida la legge dei gas perfetti

$$p = \rho RT, \quad (4.9)$$

Energia interna

Per un gas caloricamente perfetto,

$$e = c_v T, \quad (4.10)$$

dove R è la costante specifica del gas e c_v il calore specifico a volume costante.

4.1.5 Forma delle equazioni di Navier–Stokes comprimibili

Sostituendo le equazioni appena introdotte si ottiene il sistema delle equazioni di Navier–Stokes comprimibili in forma differenziale conservativa. Separando esplicitamente il contributo di pressione da quello viscoso si ottiene il seguente sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) = 0, \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q} \otimes \mathbf{q} + p \mathbf{I}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{l}, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + p)\mathbf{q}] = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{q}) - \nabla \cdot \mathbf{q}_h + \rho \mathbf{l} \cdot \mathbf{q}. \end{cases} \quad (4.11)$$

È bene ricordare che questo sistema è valido per flussi non reagenti, sia laminari che turbolenti.

Nelle simulazioni svolte in *ANSYS Fluent*, il fluido è stato descritto come gas ideale, assumendo costanti le principali proprietà termofisiche. Sono stati quindi assegnati valori costanti di calore specifico, viscosità dinamica, conducibilità termica e peso molecolare, in modo da rappresentare un gas equivalente caratterizzato da un valore

di γ pari a circa 1.2. Questa scelta rappresenta una semplificazione del problema reale, ma permette di mantenere il modello numerico gestibile e coerente con le ipotesi introdotte nella fase *low-fidelity*.

Quando il regime di moto è turbolento, compaiono una serie di vortici di diverse dimensioni: la turbolenza infatti introduce delle fluttuazioni irregolari nello spazio e nel tempo che richiedono un elevato costo computazionale per la risoluzione del campo. La turbolenza permette infatti un trasferimento di energia cinetica dalle scale più grandi a quelle più piccole, ed il fatto che i vortici rompendosi generino ulteriori vortici più piccoli, rende necessario un estremo raffinamento della mesh computazionale.

La risoluzione del campo di moto può essere affrontata seguendo varie strategie: l'approccio più completo è rappresentato dalla *Direct Numerical Simulation* (DNS), in cui vengono risolte tutte le scale del moto turbolento. Questo metodo risulta eccellente in termini di qualità dei risultati, ma è quello più oneroso a livello computazionale. In alternativa, la *Large Eddy Simulation* (LES) prevede la risoluzione delle scale più grandi, introducendo dei modelli per descrivere quelle più piccole. Per questo lavoro di tesi è stato invece introdotto il metodo RANS, descritto nelle seguenti sezioni.

4.2 Equazioni Reynolds-Averaged Navier–Stokes

Nel caso di flusso turbolento, le grandezze fluidodinamiche presentano fluttuazioni irregolari nel tempo e nello spazio. Una descrizione completa del moto richiederebbe quindi la risoluzione diretta di tutte le scale turbolente, operazione molto costosa dal punto di vista computazionale. Per ridurre il peso dell'operazione di risoluzione, è possibile introdurre una formulazione mediata delle equazioni di governo: in questo modo, è possibile descrivere il comportamento medio del fluido senza dover risolvere esplicitamente tutte le fluttuazioni istantanee. Le equazioni RANS costituiscono proprio questo tipo di formulazione e - a livello computazionale - sono meno onerose delle LES e DNS.

4.2.1 Decomposizione di Reynolds

La scrittura delle equazioni RANS si basa sulla scomposizione di ogni grandezza istantanea in due componenti: una parte media e una parte fluttuante. Questa separazione prende il nome di Decomposizione di Reynolds, che nel caso di una

variabile generica $\phi(\mathbf{x}, t)$, si scrive come

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t), \quad (4.12)$$

dove $\bar{\phi}$ rappresenta il valor medio, mentre ϕ' descrive la fluttuazione. Applicando questa decomposizione alla velocità si ottiene, ad esempio,

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \bar{u}_i(\mathbf{x}, t) + u'_i(\mathbf{x}, t). \quad (4.13)$$

La componente fluttuante rappresenta le oscillazioni delle varie grandezze attorno al valor medio, ed è associata ai meccanismi di trasporto turbolento. Per costruzione, la media della parte fluttuante è pari a zero.

La media di Reynolds viene calcolata come una media statistica, ottenuta da un gran numero di fenomeni turbolenti analoghi a quello in esame. Nella pratica, tuttavia, spesso viene calcolata come media temporale sfruttando un periodo sufficientemente lungo da descrivere le scale caratteristiche della turbolenza. Quest'ultima può essere sfruttata solo se è valida l'ipotesi di ergodicità, in cui le due medie coincidono e, di conseguenza, sono interscambiabili.

4.2.2 Media di Favre nel caso comprimibile

Nel caso dei flussi comprimibili, la media di Reynolds può risultare poco adatta, a causa delle fluttuazioni non trascurabili della densità. Per tenere conto di questo aspetto, si introduce quindi la media di Favre, definita come una media pesata sulla densità. Per una generica variabile ϕ , essa si scrive come

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (4.14)$$

La relativa decomposizione si esprime quindi come

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'', \quad (4.15)$$

dove $\tilde{\phi}$ è la media di Favre della variabile considerata e ϕ'' ne rappresenta la parte fluttuante. Nella trattazione dei flussi compressibili, media di Reynolds e media di Favre vengono usate contemporaneamente per grandezze diverse: la prima viene usata per densità e pressione, mentre la seconda per velocità, temperatura, energia interna ed entalpia. Applicando gli operatori appena introdotti alle equazioni di Navier-Stokes si ottiene un sistema che descrive il moto medio del fluido. A questo punto, la struttura delle equazioni di bilancio di massa, quantità di moto ed ener-

gia rimane analoga alla forma originale, ma compaiono ora i termini associati alla fluttuazione turbolenta.

4.2.3 Stress di Reynolds e problema di chiusura

L'effetto dell'operazione di media è particolarmente rilevante nell'equazione della quantità di moto, dove compaiono i termini associati alle fluttuazioni di velocità. Tali termini sono raccolti nel tensore degli *stress di Reynolds*, che nel caso tridimensionale può essere rappresentato nella forma

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \overline{u'^2} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'^2} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'^2} \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

I termini sulla diagonale del tensore corrispondono agli sforzi normali, mentre quelli fuori diagonale rappresentano gli sforzi tangenziali. Il tensore degli sforzi di Reynolds esprime l'effetto medio che le fluttuazioni turbolente esercitano sul moto medio del fluido. La presenza di questi termini introduce nuove incognite nelle equazioni mediate, che non possono essere ricavate direttamente dalle sole grandezze medie: il sistema in questo modo non risulta più chiuso. Si parla dunque di *problema di chiusura* della turbolenza.

4.2.4 Ipotesi di Boussinesq

Per chiudere il sistema di equazioni mediate si introduce l'ipotesi di Boussinesq, grazie alla quale gli stress di Reynolds vengono messi in relazione con il tensore medio dei tassi di deformazione tramite una viscosità turbolenta. Nel caso comprimibile, tale relazione assume la forma

$$\tau_{ij}^R = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3}\mu_t \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij}, \quad (4.17)$$

dove μ_t è la viscosità turbolenta dinamica, ρ è la densità del fluido, k è l'energia cinetica turbolenta e δ_{ij} è il delta di Kronecker. Il termine

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.18)$$

rappresenta il tensore medio dei tassi di deformazione.

In questa espressione, i termini proporzionali a δ_{ij} costituiscono la parte isotropa del tensore degli stress di Reynolds. Essi tengono conto del contributo associato

all'energia cinetica turbolenta e, nel caso comprimibile, anche dell'effetto della dilatazione media del flusso. La parte anisotropa viene invece modellata assumendola proporzionale al tensore dei tassi di deformazione S_{ij} . In questo modo, l'effetto delle fluttuazioni turbolente sul moto medio viene ricondotto a un contributo diffusivo equivalente, analogo a quello viscoso nel caso laminare. L'ipotesi di Boussinesq costituisce la base dei modelli *eddy-viscosity*, in cui l'effetto della turbolenza sul moto medio viene rappresentato attraverso una viscosità equivalente, da aggiungere alla viscosità molecolare del fluido. Nel presente lavoro, tale viscosità turbolenta viene determinata mediante il modello di Spalart–Allmaras.

4.2.5 Modello di Spalart–Allmaras

Nel presente studio è stato adottato il modello di Spalart–Allmaras come chiusura turbolenta delle equazioni RANS per le simulazioni *high-fidelity* svolte in *ANSYS Fluent*. Il modello appartiene alla famiglia dei modelli a viscosità turbolenta ed è composto da una sola equazione di trasporto. La variabile incognita non è direttamente la viscosità turbolenta ν_t , ma una viscosità turbolenta modificata, indicata con $\tilde{\nu}$. Uno dei principali punti di forza del modello è la sua relativa semplicità rispetto ai modelli a due equazioni. La presenza di una sola equazione di trasporto consente infatti di contenere il costo computazionale, mantenendo al tempo stesso una buona robustezza numerica. D'altra parte, come tutti i modelli basati sull'ipotesi di Boussinesq, il metodo è limitato, perché non ricostruisce direttamente la struttura anisotropa degli stress di Reynolds, ma ne fornisce una descrizione mediata attraverso la viscosità turbolenta. Di conseguenza, può risultare meno accurato nei flussi complessi, soprattutto quando gli effetti anisotropi della turbolenza diventano preponderanti.

Applicando il modello di Spalart–Allmaras alle equazioni di trasporto, la viscosità turbolenta effettiva viene ricavata tramite la relazione

$$\nu_t = \tilde{\nu} f_{v1}, \quad (4.19)$$

dove la funzione correttiva f_{v1} è si può esprimere come

$$f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + c_{v1}^3}, \quad \chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu}, \quad (4.20)$$

essendo ν la viscosità cinematica molecolare. La viscosità dinamica turbolenta si ricava invece come

$$\mu_t = \rho \nu_t. \quad (4.21)$$

Nel modello di Spalart–Allmaras, la viscosità turbolenta che compare nelle equazioni RANS non viene calcolata direttamente: la variabile trasportata dal modello è $\tilde{\nu}$, cioè una viscosità turbolenta modificata. Essa non coincide direttamente con la viscosità turbolenta effettiva impiegata nelle equazioni RANS, ma rappresenta una variabile ausiliaria, da cui è poi possibile estrarre la viscosità turbolenta.

Equazione di trasporto del modello

L'equazione di trasporto del modello di Spalart–Allmaras può essere scritta come

$$\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\nu} \bar{u}_j) = C_{b1} \tilde{S} \tilde{\nu} + \frac{1}{\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right) + C_{b2} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right] - C_{w1} f_w \frac{\tilde{\nu}^2}{d_w^2}. \quad (4.22)$$

In cui si distinguono tre contributi principali:

- un termine di produzione, proporzionale a $\tilde{S} \tilde{\nu}$;
- un termine di diffusione, che contiene sia la diffusione lineare sia un contributo non lineare nei gradienti di $\tilde{\nu}$;
- un termine di distruzione, proporzionale a $\tilde{\nu}^2/d_w^2$.

Dove \tilde{S} è detta *modified vorticity* ottenuta correggendo il modulo della vorticità con un termine che dipende dalla distanza dalla parete d_w e dalla variabile $\tilde{\nu}$.

Significato fisico dei termini

Il primo termine, quello associato alla produzione di viscosità turbolenta, deriva dall'eventuale presenza di forti gradienti e rotazioni entro il campo di moto, indicando così la capacità da parte del moto medio di produrre fluttuazioni turbolente. Il secondo termine, associato alla diffusione, rappresenta la distribuzione spaziale della $\tilde{\nu}$, che viene dunque trasportata e distribuita nelle regioni vicine. Il termine di distruzione assume invece un ruolo particolarmente importante in prossimità delle pareti. Esso infatti dipende da d_w^{-2} e di conseguenza il suo effetto cresce rapidamente quando ci si avvicina alla superficie solida, contribuendo a smorzare la turbolenza nella regione near-wall. Questo comportamento è coerente con la condizione di aderenza del flusso a parete, per cui le fluttuazioni turbolente della velocità devono essere smorzate. Per questo motivo, la discretizzazione in prossimità della parete richiede particolare attenzione.

Funzioni correttive e costanti del modello

Si introducono ora le funzioni correttive $f_{v2}, f_w, g(r)$, la cui funzione è quella di rendere il modello più coerente con il comportamento reale del flusso. In particolare, compaiono nei contributi di produzione e distruzione turbolente. Queste funzioni possono essere espresse come

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{1}{Re} \frac{\chi}{\kappa^2 d^2} f_{v2}, \quad (4.23)$$

con

$$f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}}, \quad (4.24)$$

e

$$f_w = g \left(\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right)^{1/6}, \quad g(r) = r + c_{w2}(r^6 - r). \quad (4.25)$$

I coefficienti del modello vengono invece assunti costanti:

$$c_{b1} = 0.1355, \quad c_{b2} = 0.622, \quad \sigma = \frac{2}{3}, \quad c_{w2} = 0.3, \quad c_{w3} = 2, \quad c_{v1} = 7.1. \quad (4.26)$$

4.2.6 Regione vicino alla parete e parametro y^+

Come anticipato nelle scorse sezioni, la regione prossima alla parete deve essere trattata con particolare attenzione: a causa della condizione di aderenza, infatti, in prossimità della superficie solida si generano forti gradienti di velocità, andando ad alimentare il comportamento viscoso del flusso: è così che si genera lo strato limite, all'interno del quale il fluido si comporta in maniera differente rispetto al resto del dominio. Per descrivere in modo più efficace il flusso in regione near-wall, si introducono alcune grandezze caratteristiche definite a partire dallo sforzo tangenziale a parete. Indicando con τ_w lo sforzo di parete, si definisce la velocità d'attrito

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad (4.27)$$

che rappresenta la scala della velocità caratteristica del moto nell'intorno della parete. Si definisce poi la lunghezza viscosa

$$l_\tau = \frac{\nu}{u_\tau}, \quad (4.28)$$

dove ν è la viscosità cinematica del fluido. Questa grandezza fornisce la scala di riferimento per adimensionalizzare la distanza dalla parete. Tramite le grandezze

appena definite, è possibile a questo punto introdurre i parametri

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau}, \quad y^+ = \frac{y}{l_\tau} = \frac{y u_\tau}{\nu}, \quad (4.29)$$

dove u rappresenta la componente tangenziale della velocità e y indica la distanza normale dalla parete. Il parametro y^+ rappresenta una misura adimensionale della distanza da parete in cui collocare il primo della mesh in cui vengono calcolate le variabili del flusso, ed è fondamentale per valutare la qualità della discretizzazione del dominio nella regione near-wall. Le grandezze adimensionali u^+ e y^+ sono inoltre alla base della cosiddetta (*law of the wall*), che descrive l'andamento del profilo di velocità in funzione della distanza dalla parete. Nel caso di simulazioni RANS integrate fino alla parete, si richiede la costruzione di una mesh tale che al primo nodo corrispondano valori di y^+ prossimi all'unità. Si suddivide quindi la regione intorno alla parete in tre regioni: la prima è il *sottostrato viscoso*, associato a valori molto bassi di y^+ , in cui gli effetti viscosi sono preponderanti e il profilo di velocità può essere approssimato come lineare. In questa regione vale infatti la relazione

$$u^+ = y^+ \quad (4.30)$$

Allontanandosi dalla parete, si incontra una regione intermedia, il *buffer layer* ($5 < y^+ < 30$), nella quale effetti viscosi e turbolenti coesistono ad una pari intensità. Si tratta quindi di una zona di transizione, nella quale il comportamento del flusso è più complesso e non può essere descritto in modo semplice con una legge asintotica.

Più esternamente, a $y^+ > 30$, si trova infine la *zona logaritmica*, nella quale il contributo turbolento diventa predominante e il profilo medio di velocità presenta un andamento logaritmico:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C, \quad (4.31)$$

dove κ è la costante di von Kármán e C è una costante empirica. La formulazione standard della wall function utilizzata in ambito RANS si basa proprio su una relazione a tratti tra u^+ e y^+ , lineare nel sottostrato viscoso e logaritmica nella regione completamente turbolenta. Quando si adotta un approccio *wall-resolved*, il profilo di velocità viene risolto direttamente fino alla parete e il primo nodo della griglia deve trovarsi nel sottostrato viscoso. In questo caso, la letteratura indica come riferimento valori di y^+ prossimi all'unità, così da poter rappresentare correttamente i gradienti di velocità nella regione più vicina alla parete.

In alternativa, quando la griglia non è sufficientemente fine da risolvere lo strato limite fino alla parete, si ricorre alle *wall functions*. In questo approccio il com-

portamento del flusso nella regione near-wall non viene risolto in modo esplicito, ma approssimato mediante relazioni empiriche derivate dalla legge di parete. In tal modo lo sforzo di parete e il gradiente di velocità vengono stimati a partire dalle quantità calcolate nel primo punto interno del dominio. Questo consente di ridurre notevolmente il costo computazionale, ma richiede che il primo nodo sia collocato in una zona coerente con l'intervallo di validità della wall function. Per le formulazioni standard, valori di y^+ compresi indicativamente tra 30 e 100 sono generalmente considerati appropriati.

La scelta tra approccio *wall-resolved* e approccio basato su *wall functions* dipende quindi dal livello di accuratezza desiderato e dalla risoluzione della griglia disponibile. Nel primo caso si ottiene una descrizione più dettagliata della regione di parete, ma a costo di una mesh molto più fitta; nel secondo caso si accetta una modellizzazione semplificata del profilo near-wall, riducendo il numero di celle necessarie e quindi il costo numerico della simulazione.

4.3 Discretizzazione del dominio computazionale

La generazione della mesh è stata effettuata in ambiente *ANSYS Fluent Meshing* e ha rappresentato una fase centrale nell'impostazione del modello numerico. La qualità della discretizzazione influisce infatti in modo diretto sull'affidabilità della soluzione e sulla robustezza del calcolo, soprattutto in un problema come quello in esame, nel quale la corretta risoluzione della regione prossima alla parete assume un ruolo particolarmente importante.

Poiché il problema è stato trattato in forma bidimensionale assialsimmetrica, anche la procedura di meshatura è stata sviluppata in modo coerente con tale impostazione. Dopo l'importazione della geometria *nozzle_hf.step*, sono state identificate le diverse zone del dominio, distinguendo così ingresso, uscita, asse di simmetria e parete dell'ugello, in modo da predisporre correttamente la successiva assegnazione delle condizioni al contorno.

È stata costruita quindi mesh bidimensionale strutturata a elementi quadrilateri, in modo da seguire il profilo dell'ugello e da garantire una rappresentazione regolare della geometria. I principali parametri adottati sono stati un *Gap Factor* pari a 0.2, un *Max Aspect Ratio* pari a 100 e un *Min Aspect Ratio* pari a 0.01. Inoltre, nella fase preliminare di costruzione della mesh sono stati introdotti tre *orthogonal layers*, mentre non sono state attivate le opzioni di merge automatico delle zone geometriche.

Successivamente, il raffinamento è stato concentrato nella regione prossima alla parete dell'ugello, dove si sviluppano i gradienti più intensi del campo di moto. A questo scopo sono stati aggiunti 25 strati di *boundary layer*, adottando una legge di crescita di tipo *smooth-transition*. Nel resto del dominio la discretizzazione è stata mantenuta uniforme, con dimensione minima e massima pari a 0,03 m. In questo modo, la mesh è risultata sufficientemente regolare nell'intero dominio e al tempo stesso abbastanza fitta nelle zone più rilevanti dal punto di vista fluidodinamico.

Particolare attenzione è stata dedicata alla risoluzione della regione *near-wall*. Nelle simulazioni RANS integrate fino alla parete, il parametro adimensionale y^+ dovrebbe assumere valori dell'ordine dell'unità. Il controllo effettuato a convergenza raggiunta ha mostrato valori compresi tra 0 e 1.5161, con un valore medio pari a 0.1649582. Tali risultati indicano che la discretizzazione adottata è sufficientemente fine da consentire una descrizione adeguata dello strato limite fino alla parete, in accordo con l'impiego del modello di turbolenza Spalart–Allmaras. La mesh così

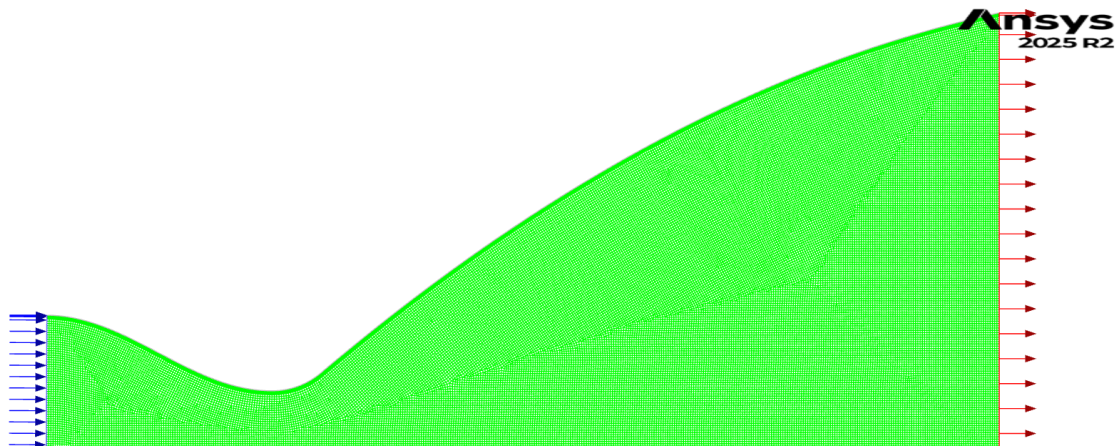


Figura 4.1: Mesh ottenuta da Fluent Meshing

ottenuta è stata infine esportata in un formato compatibile con *ANSYS Fluent* e utilizzata per le simulazioni *high-fidelity*. Nel complesso, la strategia adottata ha permesso di raggiungere un buon equilibrio tra accuratezza della discretizzazione, in particolare nella regione di parete, e costo computazionale delle simulazioni.

4.4 Impostazione del solutore numerico

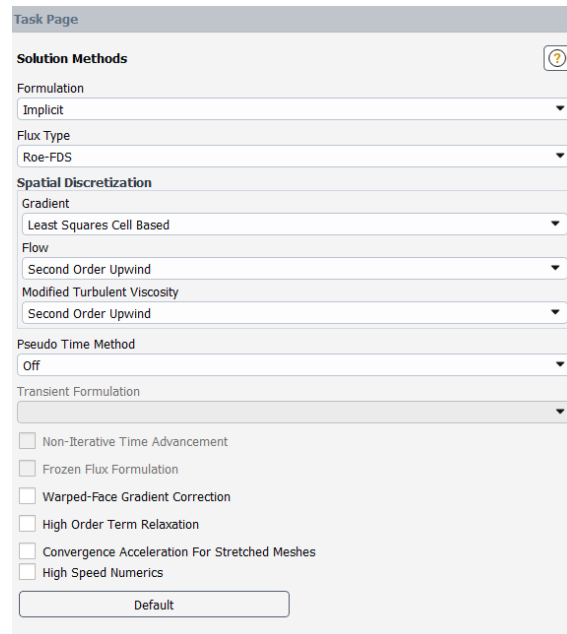


Figura 4.2: Methods - ANSYS Fluent

Le simulazioni sono state eseguite con ANSYS Fluent, usando una formulazione implicita per le equazioni RANS comprimibili. Per il calcolo dei flussi convettivi è stato utilizzato lo schema Roe-FDS. La ricostruzione dei gradienti è stata effettuata con il metodo Least Squares Cell Based.

È stata prestata particolare attenzione alla discretizzazione spaziale delle variabili di flusso, adottando uno schema Second Order Upwind. La stessa scelta è stata fatta per la viscosità turbolenta modificata del modello di Spalart-Allmaras. L'uso di una formulazione del secondo ordine aiuta a ridurre la diffusione numerica associata agli schemi del primo ordine e a ottenere una rappresentazione più accurata dei gradienti del campo di moto. Questo è particolarmente importante per flussi comprimibili con variazioni marcate delle grandezze fluidodinamiche.

La scelta di una discretizzazione del secondo ordine mira a migliorare la qualità della soluzione numerica, mantenendo una buona robustezza del calcolo. In questo modo, è possibile descrivere in maniera più affidabile l'andamento delle variabili all'interno dell'ugello, soprattutto nelle regioni con forti variazioni di pressione, velocità e densità.

L'inizializzazione del calcolo è stata effettuata con procedura Hybrid Initialization. L'avanzamento della soluzione è stato condotto per 1000 iterazioni.

4.4.1 Discretizzazione spaziale del secondo ordine

Per la discretizzazione spaziale è stato utilizzato un metodo del secondo ordine, noto come *Second Order Upwind*. La ragione di questa scelta è duplice: ridurre la diffusione numerica, e ottenere una rappresentazione più precisa dei gradienti del campo di moto. Quando si utilizza un metodo del primo ordine, si presume che all'interno di ogni volume di controllo la soluzione sia costante e uguale al valore medio della grandezza in esame. In questo caso, la ricostruzione della soluzione ha un ordine pari a $p = 0$. Di conseguenza, all'interfaccia tra due celle, la soluzione presenta una discontinuità che viene usata per calcolare i flussi numerici. Per aumentare la precisione spaziale risulta dunque necessario ipotizzare che la soluzione possa variare all'interno della cella. Nel caso specifico del secondo ordine, si adotta una ricostruzione lineare, che corrisponde a $p = 1$. In generale, se l'ordine della ricostruzione è p , l'errore di troncamento risulta dell'ordine $p + 1$. Pertanto:

- per uno schema del primo ordine, l'errore ε è proporzionale a Δx e dimezzando il passo spaziale Δx , anche l'errore si dimezza;
- per uno schema del secondo ordine, l'errore ε è proporzionale a Δx^2 , quindi dimezzando Δx , l'errore si riduce di quattro volte.

Nella pratica, una maggiore accuratezza spaziale consente di raggiungere più velocemente la convergenza della griglia e quindi di ottenere una soluzione più precisa con la stessa discretizzazione.

4.4.2 Ricostruzione lineare del secondo ordine

Per il secondo ordine, si presume che all'interno di ogni cella la soluzione vari in modo lineare intorno al valore medio. Questa ricostruzione può essere espressa come

$$U(\mathbf{x}) = U_j + \nabla U_j \cdot \mathbf{r}_{jp}, \quad (4.32)$$

dove:

- U_j rappresenta il valore medio della soluzione nella cella j ;
- ∇U_j è il gradiente della soluzione nella cella;
- $\mathbf{r}_{jp} = \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_j$ è il vettore che va dal centro della cella j al punto p dove vogliamo ricostruire la soluzione.

La ricostruzione lineare permette di definire uno stato sinistro e uno stato destro quando si calcola il flusso attraverso un'interfaccia tra due celle:

$$U_L = U_j + \nabla U_j \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_j), \quad (4.33)$$

$$U_R = U_{j+1} + \nabla U_{j+1} \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{j+1}), \quad (4.34)$$

dove \mathbf{x}_f è il punto dell'interfaccia dove viene valutato il flusso numerico. Anche nel caso del secondo ordine, permane una discontinuità tra lo stato sinistro e quello destro all'interfaccia. La differenza rispetto al primo ordine è che questa discontinuità è costruita partendo da una ricostruzione lineare all'interno della cella, piuttosto che assumendo semplicemente che la soluzione sia costante.

4.4.3 Barriera di Godunov e necessità dei limitatori

L'aumento dell'ordine di accuratezza non può essere perseguito in modo arbitrario. In particolare, vale la cosiddetta *barriera di Godunov*, secondo cui uno schema lineare monotono, cioè che non introduca nuovi estremi locali nella soluzione, non può avere accuratezza superiore al primo ordine. Questo significa che, se si vuole ottenere una discretizzazione di ordine superiore al primo senza introdurre oscillazioni numeriche spurie, è necessario ricorrere a schemi non lineari. Nel contesto dei volumi finiti, si introducono i *limitatori di pendenza*, che agiscono sul gradiente della soluzione riducendolo localmente quando necessario.

4.4.4 Limitatori di pendenza su griglie non strutturate

Nel caso di griglie non strutturate, il limitatore agisce direttamente sul gradiente della soluzione ricostruita nella cella. La ricostruzione lineare viene scritta nella forma

$$U(\mathbf{x}) = U_j + \nabla U_j \cdot \mathbf{r}_{jp}, \quad (4.35)$$

e viene modificata introducendo un coefficiente limitatore Ψ_j , tale che

$$U(\mathbf{x}) = U_j + \Psi_j \nabla U_j \cdot \mathbf{r}_{jp}, \quad (4.36)$$

con

$$0 \leq \Psi_j \leq 1. \quad (4.37)$$

In questo modo il gradiente può essere ridotto localmente, senza essere necessariamente annullato. Nel limitatore di Barth–Jespersen, il controllo viene effettuato confrontando il valore ricostruito al punto p con i valori massimi e minimi assunti

dalla soluzione nei centri delle celle vicine. Si definiscono quindi

$$U_{\max} = \max_{l=1,\dots,N_f} (U_j, \max(U_l)), \quad (4.38)$$

$$U_{\min} = \min_{l=1,\dots,N_f} (U_j, \min(U_l)), \quad (4.39)$$

e il coefficiente limitatore assume la forma

$$\Psi_j = \min_{l=1,\dots,N_f} \begin{cases} 1, & U_p = U_j, \\ \min\left(1, \frac{U_{\max} - U_j}{U_p - U_j}\right), & U_p > U_j, \\ \min\left(1, \frac{U_{\min} - U_j}{U_p - U_j}\right), & U_p < U_j. \end{cases} \quad (4.40)$$

Questo approccio garantisce che la ricostruzione all'interno della cella non superi mai i limiti fissati dai valori al centro delle celle vicine.

4.4.5 Calcolo dei gradienti

L'impiego di una ricostruzione lineare del secondo ordine richiede il calcolo del gradiente della soluzione in ciascun volume di controllo. A questo scopo possono essere utilizzati diversi approcci.

Metodo dei minimi quadrati pesati

Nel caso di griglie non strutturate, una stima più accurata del gradiente può essere ottenuta mediante il metodo dei minimi quadrati pesati. Si parte dalla relazione lineare tra il centro della cella j e i centri delle celle vicine:

$$U_l - U_j = \nabla U_j \cdot \mathbf{r}_{jl}, \quad l = 1, \dots, N_f, \quad (4.41)$$

dove

$$\mathbf{r}_{jl} = \mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j. \quad (4.42)$$

Nel caso bidimensionale, il gradiente ha due componenti e il sistema risulta in generale sovradeterminato. Si può quindi scrivere

$$A \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (4.43)$$

e risolverlo in senso di minimi quadrati.

Per migliorare la qualità della ricostruzione si introducono dei pesi che attribuiscono maggiore importanza alle celle più vicine. Definendo una matrice diagonale dei pesi W ,

$$W = \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & W_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & W_{N_f} \end{bmatrix}, \quad (4.44)$$

con

$$W_l = \frac{1}{d_{jl}^k}, \quad 1 \leq l \leq N_f, \quad (4.45)$$

si ottiene il sistema pesato

$$W A \mathbf{x} = W \mathbf{b}. \quad (4.46)$$

Indicando con

$$C = W A, \quad (4.47)$$

si arriva quindi al sistema normale

$$C^T C \mathbf{x} = C^T W \mathbf{b}. \quad (4.48)$$

Questo approccio risulta particolarmente adatto alle griglie non strutturate, poiché tiene conto in modo più naturale della diversa disposizione e distanza delle celle vicine.

4.4.6 Calcolo del gradiente all'interfaccia per i termini diffusivi

Nel caso dei termini diffusivi, il calcolo dei flussi all'interfaccia richiede una stima del gradiente della grandezza considerata nel punto di separazione tra due celle adiacenti. Una prima approssimazione consiste nel costruire un gradiente di tentativo come media pesata dei gradienti nei centri cella:

$$\nabla U' = \frac{\frac{1}{d_1} \nabla U_1 + \frac{1}{d_2} \nabla U_2}{\frac{1}{d_1} + \frac{1}{d_2}}, \quad (4.49)$$

dove d_1 e d_2 sono le distanze del punto di interfaccia dai centri delle due celle adiacenti. Tale gradiente di tentativo può essere corretto sostituendo la derivata direzionale lungo la congiungente tra i centri cella con una stima più accurata. Si

ottiene così

$$\nabla U = \nabla U' - (\nabla U' \cdot \hat{\mathbf{t}}) \hat{\mathbf{t}} + \frac{U_2 - U_1}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} \hat{\mathbf{t}}, \quad (4.50)$$

dove $\hat{\mathbf{t}}$ è il versore lungo la direzione che congiunge i centri delle due celle. Questa espressione consente di migliorare la stima del gradiente all'interfaccia tra due celle. Piuttosto che fare affidamento esclusivamente sul gradiente ricostruito, la variazione della soluzione lungo la direzione che unisce i centri delle celle viene stimata a partire dai valori delle grandezze ai centri delle due celle adiacenti. Questo consente di determinare i flussi diffusivi con maggiore precisione.

4.4.7 Condizioni al contorno e proprietà del fluido

Nell'implementazione delle simulazioni high-fidelity nell'ambiente *ANSYS Fluent* sono state riportate le stesse condizioni al contorno della fase low-fidelity. In particolare, alla sezione di ingresso, impostata come una *pressure inlet*, vengono assegnati valori di pressione totale e pressione statica associati ad un Mach pari a 0.1, ossia $P^\circ = 100000Pa$ e $P = 99402Pa$. Per tenere in considerazione gli effetti di combustione all'interno del motore a monte dell'ugello, è stata inoltre impostata una temperatura di ingresso pari a $T = 3000K$.

La sezione d'uscita è invece stata modellata come un *pressure outlet*, in cui il valore di pressione è stato impostato ad un valore molto basso essendo questo irrilevante nel caso di uscita supersonica. L'asse del dominio è stato trattato come asse di simmetria, in accordo con la formulazione assialsimmetrica del problema, mentre la parete dell'ugello è stata modellata come parete solida. In questo modo, anche nella fase *high-fidelity*, le differenze rispetto al modello *low-fidelity* risultano riconducibili principalmente alla presenza degli effetti viscosi e della chiusura turbolenta, piuttosto che a una modifica delle condizioni operative imposte.

Per modellare il gas all'interno dell'ugello, è stata condotta un'indagine sulle proprietà termofisiche medie dei gas di combustione prodotti da un propellente solido all'interno di un razzo di medie dimensioni, e le proprietà del gas sono state modellate in modo da ottenere un flusso con Reynolds pari a $Re = 10^6$. Sulla base di questa valutazione, il fluido è stato rappresentato in *ANSYS Fluent* come gas ideale: questa rappresentazione è una semplificazione del problema fisico reale, ma consente di utilizzare un modello numerico coerente con le ipotesi introdotte nella fase preliminare dello studio e con gli obiettivi dell'analisi comparativa. L'equazione di stato adottata è quindi quella dei gas perfetti,

$$\rho = \frac{p}{RT}, \quad (4.51)$$

dove la costante R del gas è definita come

$$R = \frac{R_u}{M}. \quad (4.52)$$

Assumendo $R_u = 8314 \text{ J}/(\text{kmol K})$ e un peso molecolare efficace pari a $M = 24.5 \text{ kg}/\text{kmol}$, si ottiene

$$R = \frac{8314}{24.5} \approx 339.35 \text{ J}/(\text{kg K}). \quad (4.53)$$

Per la modellazione del flusso è stato inoltre assunto un valore costante del calore specifico a pressione costante pari a

$$c_p = 2034 \text{ J}/(\text{kg K}). \quad (4.54)$$

Una simile scelta risulta compatibile con temperature in camera dell'ordine di 3000 K, tipiche dei motori a propellente solido. A tali temperature, infatti, l'elevata energia termica comporta l'attivazione di ulteriori gradi di libertà molecolari e a fenomeni di dissociazione parziale delle specie, con un conseguente aumento del calore specifico e riduzione del rapporto tra i calori specifici. Nel presente studio si assume per l'appunto un valore medio pari a

$$\gamma \approx 1.2, \quad (4.55)$$

molto inferiore rispetto al valore tipico dell'aria a temperatura ambiente. Su questa ipotesi sono state ricostruite tutte le grandezze termodinamiche del flusso comprimibile all'interno dell'ugello. La velocità del suono, infatti, è espressa da

$$a = \sqrt{\gamma RT}, \quad (4.56)$$

e dipende in modo esplicito dal valore assunto per γ . Di conseguenza, tale parametro influisce sia sulle condizioni critiche in gola sia sulla distribuzione del numero di Mach nel tratto divergente. Sono stati assegnati valori costanti anche alla conducibilità termica ed alla viscosità dinamica:

$$k = 0.32 \text{ W}/(\text{m K}), \quad (4.57)$$

e

$$\mu = 1.1 \times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m s}). \quad (4.58)$$

Tali valori sono stati scelti in modo da descrivere un gas caldo nelle condizioni operative considerate. A partire da queste proprietà, il numero di Prandtl risulta

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k} = \frac{(1.1 \times 10^{-4}) \cdot 2034}{0.32} \approx 0.70. \quad (4.59)$$

4.4.8 Convergenza del calcolo

Il calcolo è stato inizializzato mediante procedura *Hybrid Initialization* e successivamente fatto avanzare per 1000 iterazioni. La convergenza è stata verificata controllando l'andamento dei residui e la stabilizzazione delle grandezze di interesse, in modo da accertare che la soluzione risultasse sufficientemente assestata nelle fasi finali del calcolo. Il campo di moto per ogni simulazione risulta dunque

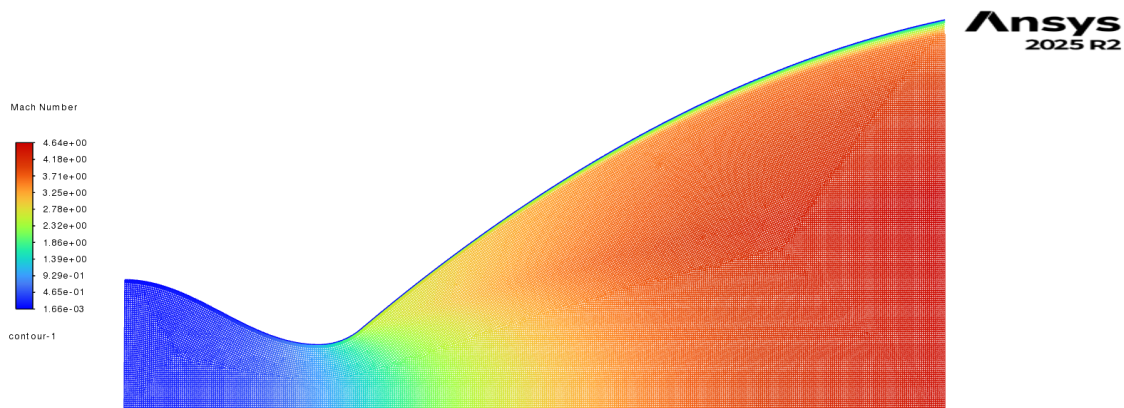


Figura 4.3: Campo di moto - Simulazioni high-fidelity

La distribuzione del numero di Mach evidenzia un'accelerazione progressiva del flusso lungo l'ugello. A monte il moto è subsonico, mentre in corrispondenza della gola si porta in condizioni prossime a quelle soniche. Nel divergente il flusso diventa supersonico e continua ad accelerare fino alla sezione di uscita. Si osserva inoltre che, vicino alla parete, la velocità si riduce per effetto dello strato limite introdotto dalla modellazione viscosa. La sua presenza riduce la quantità di moto disponibile in uscita e rende meno efficiente l'espansione, determinando così un coefficiente di spinta inferiore rispetto a quello previsto dal modello Euleriano.

4.4.9 Grandezze di interesse e post-processing

Una volta completate le simulazioni numeriche, i risultati sono stati post-processati per ricavare le grandezze di interesse del presente studio. In particolare, per ciascuna configurazione geometrica è stato valutato il coefficiente di spinta, mantenendo la

stessa definizione già adottata nella fase *low-fidelity*, così da rendere coerente il confronto tra i due approcci.

La spinta assiale è stata calcolata sulla sezione di uscita dell'ugello, integrando il contributo di quantità di moto e di pressione:

$$F = \int_{A_e} (\rho u^2 + p) dA, \quad (4.60)$$

dove A_e rappresenta l'area di uscita, ρ la densità del fluido, u la componente assiale della velocità e p la pressione sulla sezione terminale. Poiché nelle simulazioni è stata utilizzata la pressione *gauge*, il contributo della pressione ambiente risulta già implicitamente assorbito nella definizione della pressione stessa. A partire dalla forza così ottenuta, il coefficiente di spinta è stato ricavato normalizzando rispetto al prodotto tra la pressione totale a monte p_0 e l'area di gola A_t :

$$C_F = \frac{F}{p_0 A_t}. \quad (4.61)$$

La seconda grandezza di interesse è la superficie dell'ugello, determinata geometricamente a partire dal profilo della parete e già definita nelle sezioni precedenti. In questo modo, anche nel caso *high-fidelity*, per ogni configurazione geometrica sono state ricavate le stesse due funzioni obiettivo considerate nell'intero lavoro: coefficiente di spinta e superficie totale dell'ugello.

4.5 modeFRONTIER: simulazione high-fidelity

Anche nel caso *high-fidelity*, l'attività di simulazione è stata organizzata all'interno di un workflow sviluppato in *modeFRONTIER*, con l'obiettivo di automatizzare la gestione dei diversi passaggi di calcolo e raccogliere in modo ordinato i risultati ottenuti per ciascuna configurazione geometrica. Rispetto al caso *low-fidelity*, tuttavia, questa seconda fase non è stata pensata per un'esplorazione estesa dello spazio delle soluzioni, ma per ottenere un numero più limitato di simulazioni ad alta accuratezza da impiegare nella successiva analisi *multifidelity*.

Come nel caso precedente, i parametri di progetto considerati sono la lunghezza caratteristica L e l'angolo di apertura θ , mentre le grandezze di risposta rimangono il coefficiente di spinta C_F e la superficie dell'ugello. La differenza principale rispetto alla fase *low-fidelity* risiede quindi non tanto nella definizione del problema, quanto nel livello di descrizione fisica e nel costo computazionale associato a ciascuna simulazione. Il workflow *high-fidelity* è stato costruito in modo da mettere in comunicazione *modeFRONTIER* con gli strumenti utilizzati per la generazione della

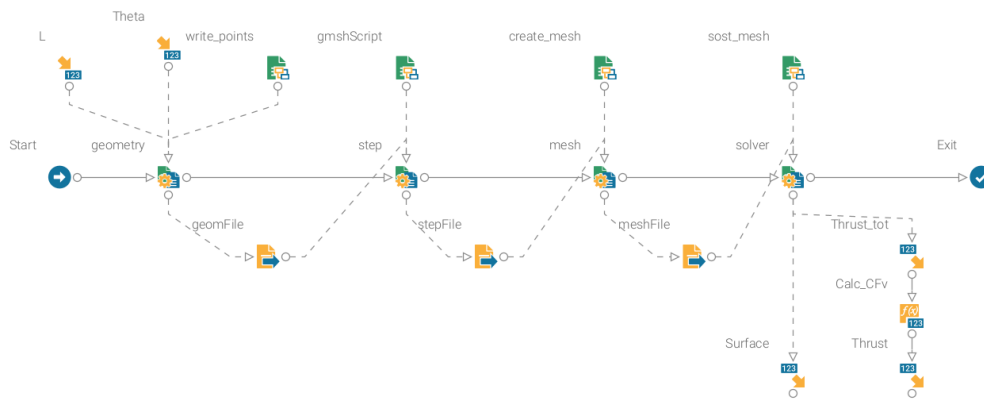


Figura 4.4: Workflow high fidelity

geometria, la meshatura del dominio e la risoluzione del campo di moto in *ANSYS Fluent*. Per ogni configurazione geometrica selezionata, il processo prevede quindi la definizione della geometria dell'ugello, la costruzione della mesh, l'esecuzione della simulazione $C_F D$ e il successivo recupero delle grandezze di interesse.

A differenza della fase preliminare, in cui l'esplorazione dello spazio dei parametri era stata affidata a un insieme più ampio di design, nel caso *high-fidelity* sono state eseguite 20 simulazioni numeriche. Tale scelta è legata al costo computazionale sensibilmente più elevato delle simulazioni RANS rispetto al modello inviscido sviluppato in Fortran. Il numero ridotto di configurazioni è stato comunque ritenuto sufficiente per disporre di un insieme di risultati ad alta fedeltà da integrare con quelli *low-fidelity* nell'ambito della successiva costruzione del modello *multifidelity*.

I risultati di ciascuna simulazione sono stati infine raccolti nel database di *modeFRONTIER*, così da ottenere, anche per il caso *high-fidelity*, una tabella riassuntiva contenente le variabili di input e le corrispondenti grandezze di risposta. In questo modo è stato possibile mantenere una struttura omogenea nell'organizzazione dei dati tra le due fasi del lavoro, pur in presenza di strumenti numerici e costi computazionali differenti. I risultati ottenuti per le 20 configurazioni analizzate sono riportati qui sotto, nella quale sono raccolti i valori delle variabili di input e delle corrispondenti grandezze di risposta.

Tabella 4.1: Risultati delle simulazioni *high-fidelity*.

L	θ	Surface	Thrust
9.65194	40.1276	292.583	1.76711
10.3958	39.5511	315.167	1.78381
10.0347	40.6036	306.317	1.77433
9.73778	41.3589	299.043	1.76655
10.0017	39.2661	301.186	1.77661
10.3078	39.9447	313.477	1.78127
9.85232	41.0828	301.941	1.76941
9.90003	38.4498	295.634	1.77533
9.55506	40.7462	291.258	1.76431
10.2021	41.6733	315.731	1.77437
9.76282	40.3302	296.725	1.76915
10.0246	39.5925	302.803	1.77635
9.75153	39.2881	293.365	1.77090
9.95173	38.8126	298.297	1.77634
10.2477	41.2644	315.999	1.77694
10.3246	40.3882	315.347	1.78061
9.78469	39.6076	295.321	1.77099
9.93491	39.9040	300.997	1.77379
10.1810	39.0652	306.376	1.78063
9.98622	40.1909	303.557	1.77433

Capitolo 5

Analisi multifidelity

Nei capitoli precedenti il problema è stato affrontato secondo due diversi livelli di fedeltà, tra di loro complementari: il modello *low-fidelity*, basato sulle equazioni di Eulero in formulazione assialsimmetrica, ha permesso di esplorare in modo esteso lo spazio di progetto con un costo computazionale ridotto, descrivendo efficacemente l'andamento generale delle grandezze di interesse in funzione delle variabili di input; il modello *high-fidelity*, basato invece sulle simulazioni RANS, ha consentito una rappresentazione più realistica del flusso, grazie alla comparsa della viscosità e della turbolenza, risultando in termini di costo computazionale decisamente più elevato. Da qui, l'approccio *multifidelity* combina i dati provenienti da entrambi i tipi di simulazioni generando un unico modello surrogato, combinando così l'efficienza e la quantità di dati derivanti dal *low-fidelity* e l'accuratezza delle *high-fidelity*. Nel presente lavoro, l'intero processo è stato sviluppato in ambiente `modeFRONTIER`, già utilizzato per l'automazione delle simulazioni *low-fidelity* e *high-fidelity*. I parametri di progetto considerati rimangono la lunghezza caratteristica del divergente L e l'angolo di apertura θ , mentre le funzioni obiettivo sono il coefficiente di spinta C_F e la superficie dell'ugello S . La coerenza tra input e output nei due livelli di simulazione è fondamentale per costruire il modello multifidelity, perché permette di confrontare direttamente, a parità di configurazione geometrica, la risposta ottenuta con il modello Euleriano e quella ottenuta con il modello RANS.

I un modelli multifidelity costruiscono i modelli surrogati supponendo che i dati ottenuti dalle simulazioni *low-fidelity* possano essere corretti sulla base delle informazioni derivanti dall'*high-fidelity*, mediante un termine aggiuntivo costruito a partire dai dati più accurati. La differenza tra soluzione Euleriana e soluzione RANS, basata sull'assenza della descrizione del comportamento viscoso e turbolento del fluido, può quindi essere interpretata, come l'effetto complessivo di questi fenomeni, assenti nel modello a bassa fedeltà. Il modello multifidelity si propone allora di apprendere tale

discrepanza e di incorporarla nella previsione finale. Questa correzione può essere espressa come

$$\hat{y}_{HF}(\mathbf{x}) = \rho \hat{y}_{LF}(\mathbf{x}) + \hat{\delta}(\mathbf{x}), \quad (5.1)$$

dove \mathbf{x} indica il vettore delle variabili di progetto, $\hat{y}_{LF}(\mathbf{x})$ è la previsione del modello a bassa fedeltà, ρ è un coefficiente di scala e $\hat{\delta}(\mathbf{x})$ rappresenta la differenza residua tra i due livelli di modellazione. Quando il contributo correttivo risulta principalmente additivo, l'espressione precedente può essere scritta in forma semplificata come

$$\hat{y}_{HF}(\mathbf{x}) = \hat{y}_{LF}(\mathbf{x}) + \hat{\delta}(\mathbf{x}). \quad (5.2)$$

5.1 Impostazione del problema multifidelity

Nel presente lavoro, l'approccio multifidelity viene adottato con l'obiettivo di ridurre il numero di simulazioni RANS necessarie a descrivere il problema. L'idea è quella di sfruttare il modello *low-fidelity* per rappresentare l'andamento generale della risposta nello spazio dei parametri, riservando invece ai dati *high-fidelity* il compito di correggere e calibrare tale informazione. In questo modo si ottiene un modello surrogato capace di approssimare la risposta RANS con un costo computazionale molto inferiore rispetto a un approccio interamente *single-fidelity*. Dal punto di vista operativo, `modeFRONTIER` permette di costruire il modello multifidelity combinando una tabella di dati *high-fidelity* con una sorgente *low-fidelity* compatibile, costituita sia da un dataset sia da un modello RSM già disponibile. Nel caso in esame, questa possibilità è particolarmente utile, poiché il livello *low-fidelity* è già stato studiato in modo approfondito nei capitoli precedenti e ha già portato alla costruzione di modelli surrogati per le grandezze di interesse.

5.2 Correction-Based Multi-Fidelity Model

Il primo metodo considerato è il *Correction-Based Multi-Fidelity Model* (CBMF), che rappresenta la forma più diretta di integrazione tra due livelli di fedeltà. L'idea di base è semplice: si costruisce innanzitutto un modello surrogato low-fidelity, addestrato sull'insieme più ampio di dati Euleriani; successivamente si valuta quanto tale modello si discosti dalla risposta high-fidelity nei punti in cui sono disponibili anche le simulazioni RANS; infine si costruisce un secondo modello, detto modello di correzione, che approssima proprio questo scarto. Il CBMF può essere espresso nella forma

$$\hat{y}_{HF}(\mathbf{x}) = \rho \hat{y}_{LF}(\mathbf{x}) + \hat{\delta}(\mathbf{x}), \quad (5.3)$$

dove \hat{y}_{LF} è il metamodello low-fidelity, ρ è un fattore di scala e $\hat{\delta}$ è il metamodello della discrepanza. In molti casi pratici, specialmente quando il livello low-fidelity e quello high-fidelity risultano già confrontabili in termini di ordine di grandezza, si può adottare la forma additiva

$$\hat{y}_{HF}(\mathbf{x}) = \hat{y}_{LF}(\mathbf{x}) + \hat{\delta}(\mathbf{x}). \quad (5.4)$$

Il modello di correzione $\hat{\delta}(\mathbf{x})$ ha il compito di apprendere come l'errore introdotto dalle simulazioni *low-fidelity* vari nello spazio di progetto. Il metamodello corregge localmente i dati *low-fidelity* sulla base dell'informazione high-fidelity disponibile. Il procedimento può essere schematizzato in quattro passaggi:

1. costruzione del modello surrogato low-fidelity $\hat{y}_{LF}(\mathbf{x})$ a partire dal database Euleriano;
2. valutazione del modello low-fidelity nei punti del database high-fidelity;
3. calcolo, in tali punti, della discrepanza tra risposta RANS e risposta low-fidelity;
4. addestramento di un secondo a partire dalla discrepanza e combinazione dei due contributi

Il metodo CMBF è particolarmente semplice da interpretare: il termine correttivo rappresenta - in questo caso - la risultante di tutti gli effetti che non sono descritti dal modello inviscido, quali viscosità, turbolenza ed insorgenza dello strato limite in prossimità delle pareti. Quando questo scarto varia in maniera sufficientemente regolare, il metodo può risultare adeguato per la generazione di un modello surrogato. In più, il metodo risulta ottimale nei casi in cui sia già disponibile un metamodello *low-fidelity*, come nel problema affrontato in questo lavoro: il modello a bassa fedeltà non deve essere ricostruito, ma può essere riutilizzato come base del modello multifidelity, che assume quindi il passo successivo per il raffinamento della previsione. Per questo motivo, sono stati utilizzati i modelli predittivi *Sepwise Regression* per la superficie e *Gaussian Process* per il coefficiente di spinta. Il principale limite del CMBF è sempre legato alla rappresentazione della discrepanza tra i due gradi di fedeltà: se il legame tra soluzione Euleriana e soluzione RANS risulta fortemente non lineare, oppure cambia in modo significativo in diverse regioni dello spazio di progetto, il metodo non è più sufficiente a descriverne tutta la complessità. In situazioni di questo tipo può quindi essere preferibile ricorrere a formulazioni statistiche più ricche, come ad esempio il co-Kriging. Questo modello, alla luce degli indici di

comparazione descritti precedentemente, risulta essere il migliore per descrivere la dipendenza del coefficiente di spinta dalle variabili di progetto. Si inseriscono qui le curve ottenute tramite il modello CBMF per superficie e coefficiente di spinta:

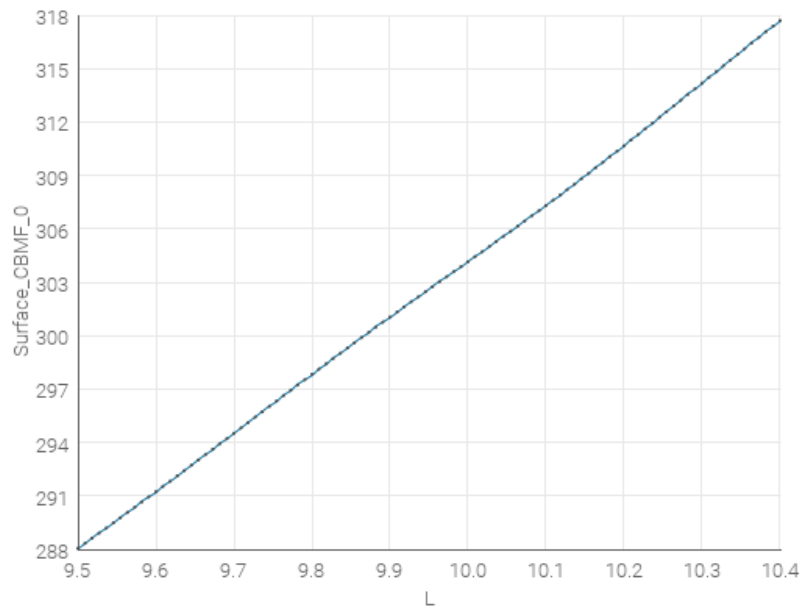


Figura 5.1: Superficie in funzione della lunghezza - CBMF

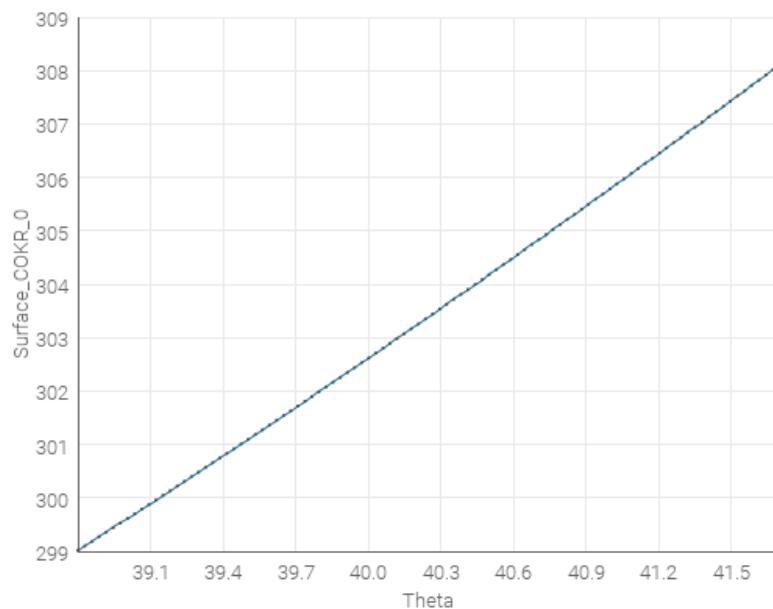
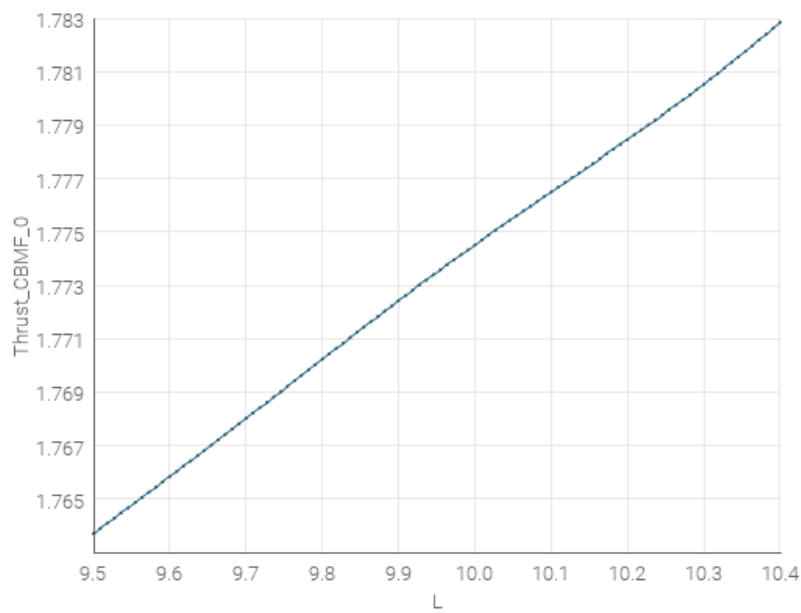
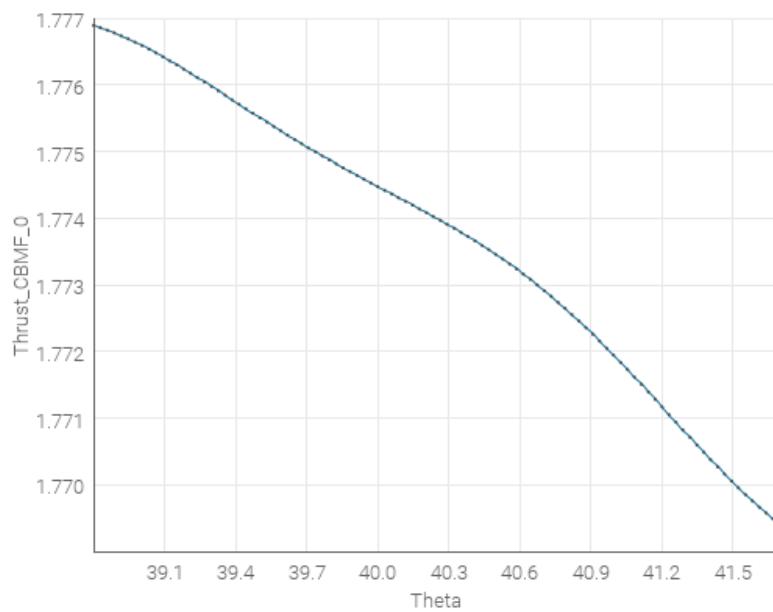


Figura 5.2: Superficie in funzione di θ - CBMF

Figura 5.3: C_F in funzione della lunghezza - CBMFFigura 5.4: C_F in funzione di θ - CBMF

5.3 Co-Kriging

Un metodo alternativo utilizzato per l'analisi multifidelity è il *co-Kriging multifidelity model*, più complesso del metodo CBFM. Il modello Co-Kriging infatti è fondato su processi gaussiani, descrivendo in maniera congiunta entrambi i livelli

di fedeltà disponibili. Anche in questo caso, la ricostruzione si basa sul fatto che i dati *high-fidelity* possono essere interpretati come una correzione del database *low-fidelity*: la ricostruzione *multi-fidelity* deriva quindi dall'uso simultaneo di tutte le informazioni derivanti dal *low-fidelity* e dall'*high-fidelity*, e dalla correlazione statistica che lega i due livelli di fedeltà. La relazione tra i diversi gradi di fedeltà può essere quindi descritta dalla relazione

$$Y_{HF}(\mathbf{x}) = \rho Y_{LF}(\mathbf{x}) + Z_d(\mathbf{x}), \quad (5.5)$$

dove $Y_{LF}(\mathbf{x})$ è un modello gaussiano che rappresenta il livello *low-fidelity*, $Z_d(\mathbf{x})$ è un secondo modello gaussiano che descrive la discrepanza tra i due livelli. Infine ρ è un coefficiente di regressione che misura il grado di correlazione lineare tra i diversi gradi di fedeltà. Il metodo co-Kriging è quindi in grado di fornire una stima sia della risposta media che dell'incertezza della previsione: di conseguenza, le regioni dello spazio di progetto che presentano meno campionamenti *high-fidelity* sono associate ad un'impresione maggiore rispetto alle zone più dense di dati. Dal punto di vista teorico, il metodo può essere interpretato come un'estensione del modello *discrepancy-based*. A differenza del CBMF, in cui la correzione tra livello *low-fidelity* e livello *high-fidelity* viene esplicitamente rappresentata dalla funzione $\hat{\delta}(\mathbf{x})$, nel co-Kriging l'errore viene incorporato in un modello stocastico modellato direttamente a partire dai dati disponibili. Per questo motivo, il metodo risulta più flessibile e adatto alla rappresentazione di relazioni meno lineari tra i diversi gradi di fedeltà. Da qui si può notare l'utilità del metodo se applicato nel problema dell'ugello assialsimmetrico: la differenza tra i risultati delle simulazioni condotte con le equazioni di Eulero e le RANS, infatti, non è necessariamente uniforme in tutto il dominio. In alcune regioni dello spazio (L, θ) l'errore può variare linearmente con i dati, in altre invece può risultare più complesso da esprimere, alla luce della natura viscosa e turbolenta del flusso descritto. Il prezzo da pagare per questa maggiore flessibilità è una maggiore complessità del modello. D'altra parte, il modello co-Kriging richiede una stima di un numero maggiore di iperparametri, appesantendo il costo computazionale del metodo, e la qualità della previsione dipende fortemente dalla distribuzione dei dati *high-fidelity* all'interno dello spazio dei parametri. Si inseriscono in seguito le curve delle grandezze di progetto in funzione degli input, ricostruite tramite il metodo co-Kriging

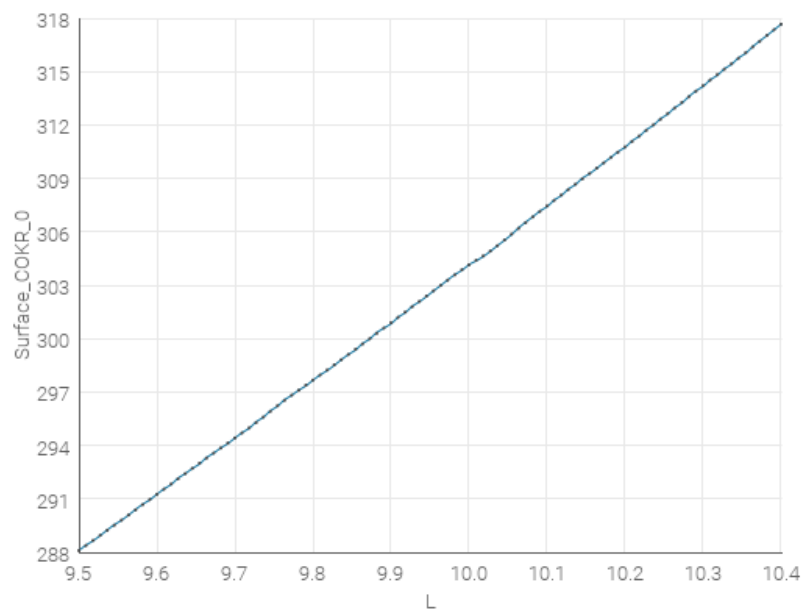
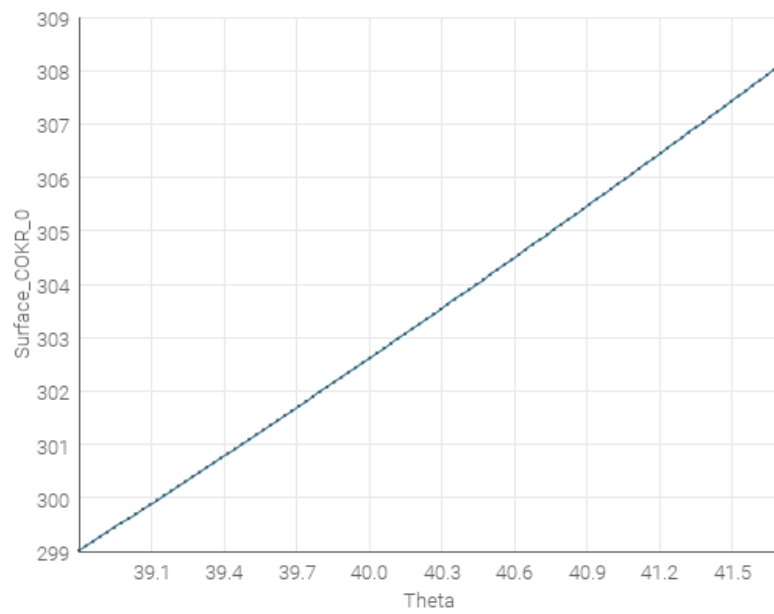
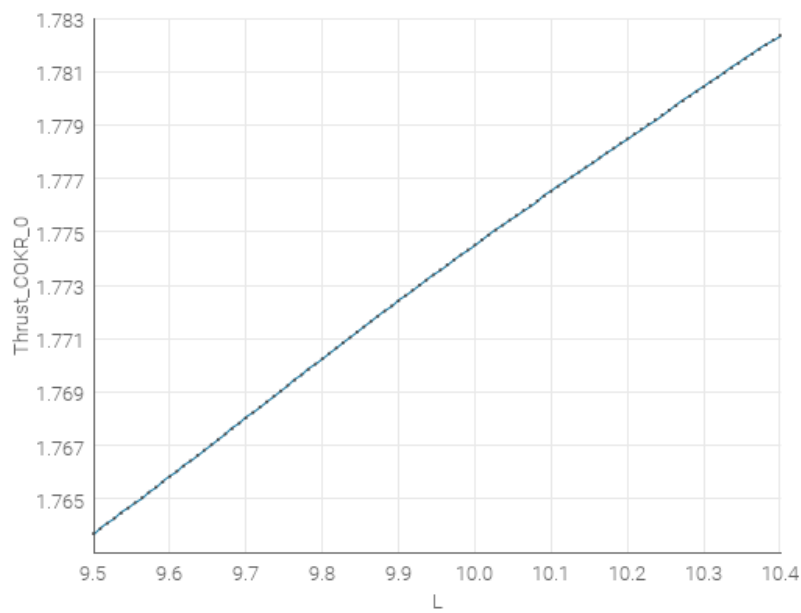
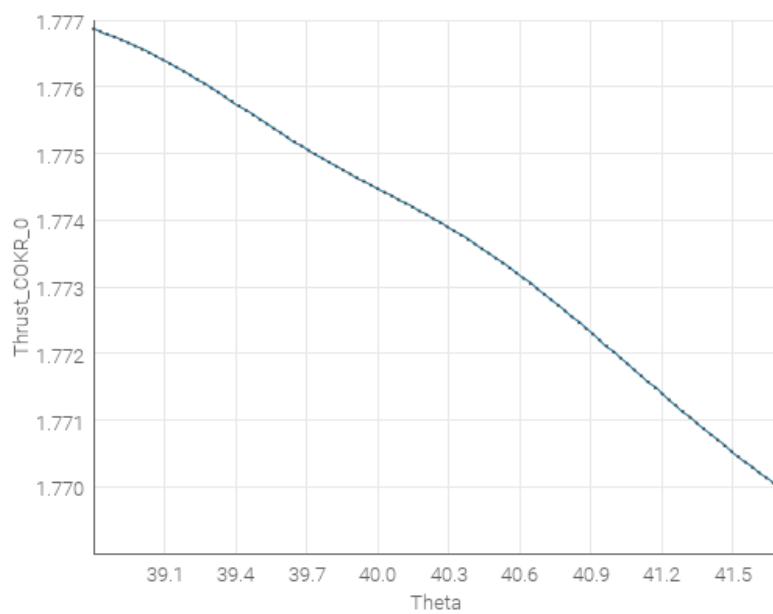


Figura 5.5: Superficie in funzione della lunghezza - COKR

Figura 5.6: Superficie in funzione di θ - COKR

Figura 5.7: C_F in funzione della lunghezza - COKRFigura 5.8: C_F in funzione di θ - COKR

5.4 Confronto tra CBMF e co-Kriging

Sono stati introdotti due metodi per la ricostruzione *multi-fidelity* basati sullo stesso insieme di dati, con il fine di fornire una predizione il più accurata possibile sulla dipendenza delle grandezze di progetto dalle variabili geometriche. Il modello

Correction Based Multifidelity (CBMF) adotta una via più diretta, più semplice da implementare e da interpretare. La risposta *low-fidelity* viene assunta come base del modello, mentre il contributo *high-fidelity* viene sfruttato per correggere l'errore. Questo modello, grazie alla stretta relazione tra il termine correttivo e la differente natura delle equazioni sfruttate dai due livelli di fedeltà, risulta facile da interpretare. Invece nel modello *co-Kriging*, i due livelli di fedeltà vengono trattati in contemporanea all'interno di un unico modello probabilistico. In questo caso, il legame tra i dati derivanti dall'analisi Euleriana e quella RANS non è descritto tramite una semplice correzione esplicita, ma viene ricostruito tramite l'individuazione della relazione statistica tra i due livelli di fedeltà. Questo rende il metodo più flessibile, soprattutto quando la discrepanza tra *low-fidelity* e *high-fidelity* non varia in modo uniforme nello spazio di progetto. Nel contesto di questa tesi, il confronto tra i due approcci riveste quindi un ruolo non soltanto metodologico, ma anche fisico. Nel caso in cui la differenza tra soluzione Euleriana e soluzione RANS si mantenga regolare al variare dei parametri geometrici, un metodo correttivo come il CBMF può essere considerato adeguato; viceversa se tale differenza mostra un andamento più complesso, il *co-Kriging* può garantire una descrizione più accurata della risposta *high-fidelity*. Il confronto è stato effettuato sulla base degli indici di accuratezza calcolati da `modeFRONTIER`, ossia errore assoluto medio, errore relativo medio, errore normalizzato medio, coefficiente di determinazione R^2 e criterio di Akaike (AIC), già descritti negli scorsi capitoli.

Surface								
		Model	Training Progress	Mean Abs. Error	Mean Rel. Error	Mean Norm. Error	R-squared	AIC
1	☆	Surface_CBMF_0	Finished	0.179071	0.000582066	0.00879329	0.999640	-13.4945
2	★	Surface_COKR_0	Finished	0.0836533	0.000267104	0.00410779	0.999872	-17.6362
Thrust								
		Model	Training Progress	Mean Abs. Error	Mean Rel. Error	Mean Norm. Error	R-squared	AIC
1	★	Thrust_CBMF_0	Finished	0.000197163	0.000110997	0.0172038	0.996798	-66.8730
2	☆	Thrust_COKR_0	Finished	0.000246253	0.000138690	0.0214872	0.994884	-64.9984

Figura 5.9: Confronto tra i modelli CBMF e co-Kriging

Per la superficie dell'ugello, il modello **COKR** è risultato complessivamente il più accurato, mostrando errori inferiori, un valore di R^2 leggermente più elevato e un AIC più basso rispetto al modello **CBMF**. Per questa grandezza, il modello selezionato è stato quindi il **COKR**.

Viceversa per il coefficiente di spinta il modello **CBMF** ha fornito i risultati migliori, con errori più contenuti, un coefficiente R^2 più alto e un valore di AIC inferiore. Per la stima di questa funzione obiettivo è stato pertanto adottato il modello **CBMF**. La scelta del modello multifidelity più appropriato dipende quindi dalla specifica funzione obiettivo che si intende rappresentare. Si inseriscono dunque i risultati derivanti dall'analisi *multi-fidelity*

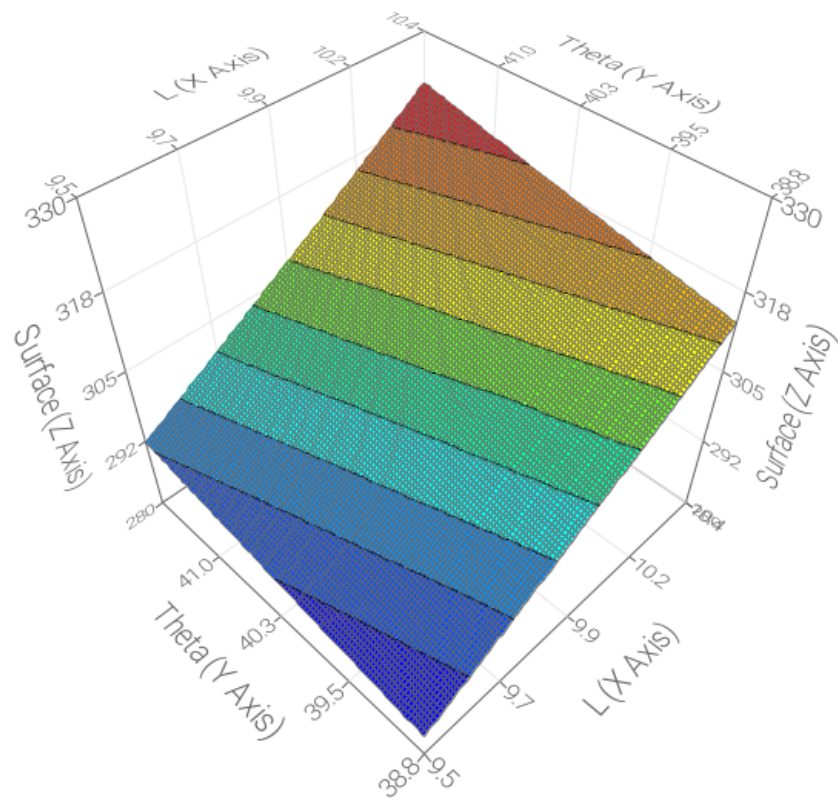


Figura 5.10: Superficie di risposta - Superficie

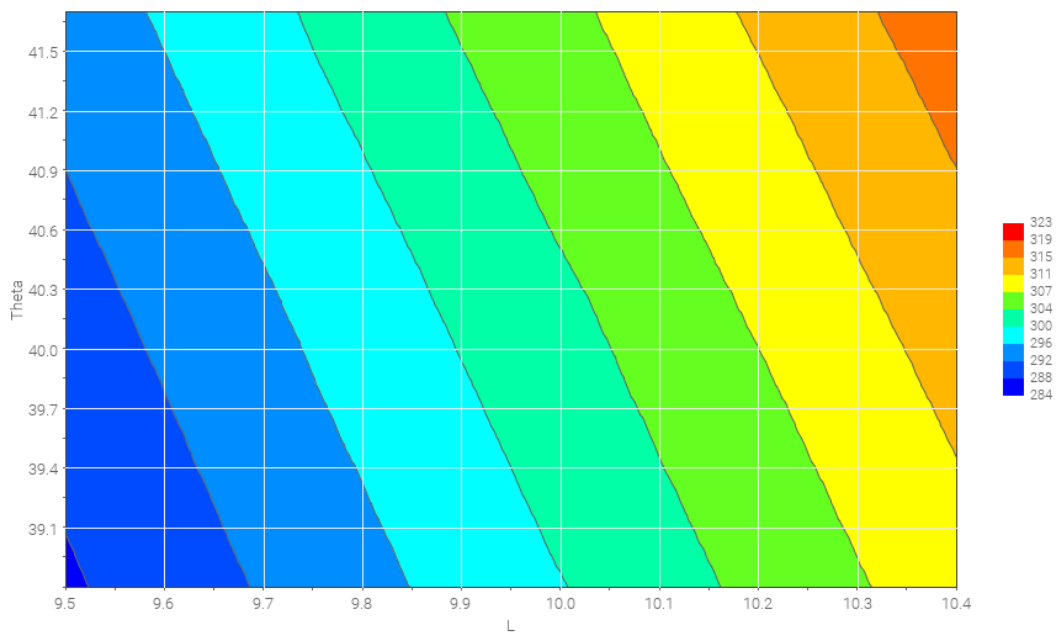


Figura 5.11: Contour plot - Superficie

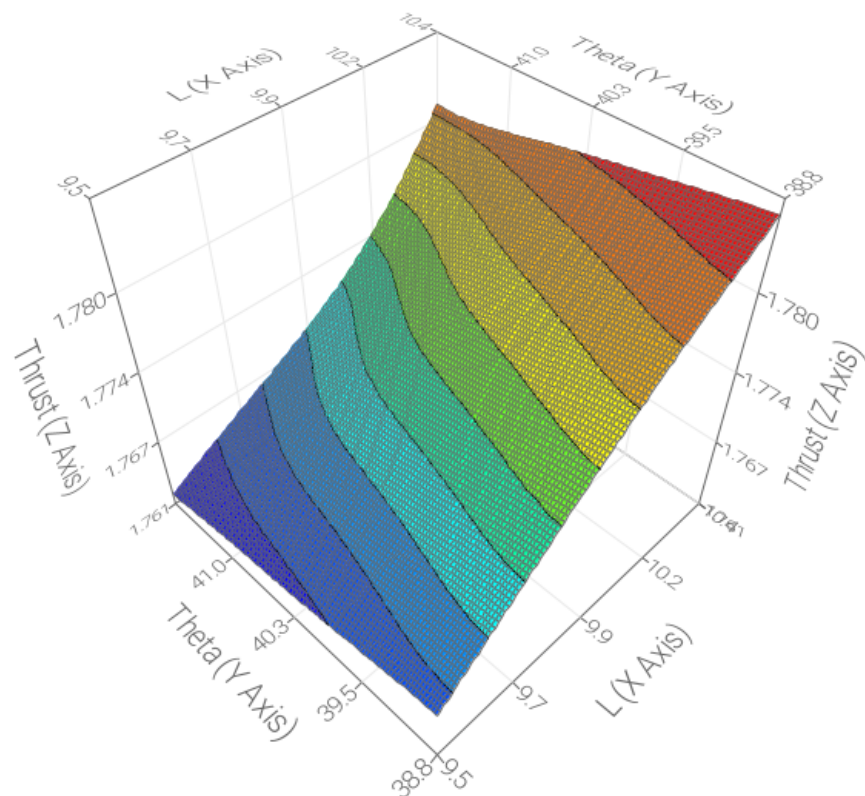


Figura 5.12: Superficie di risposta - Coefficiente di spinta

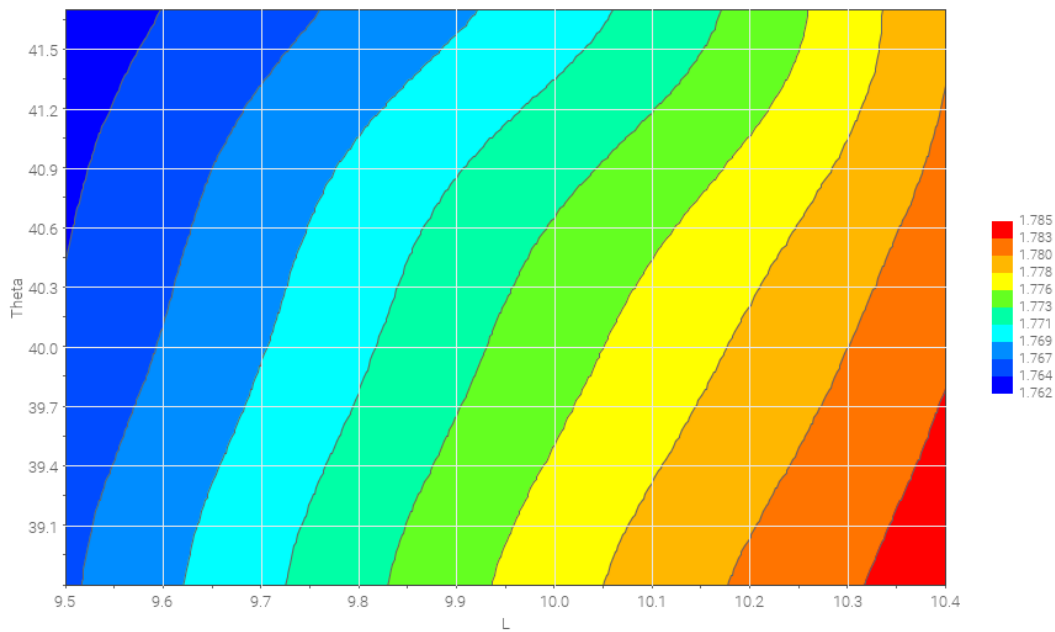


Figura 5.13: Contour plot - Coefficiente di spinta

Le superfici di risposta ottenute con l'approccio multifidelity mostrano andamenti regolari e fisicamente coerenti nel dominio di progetto (L, θ) . In particolare, la superficie dell'ugello cresce al crescere sia di L sia di θ , mentre il coefficiente di spinta aumenta con L e diminuisce all'aumentare di θ . Questi risultati mettono in evidenza un compromesso progettuale ben definito: da un lato, un aumento della lunghezza del divergente migliora la prestazione in termini di spinta, ma comporta anche un incremento della superficie; dall'altro, valori più contenuti dell'angolo di apertura risultano vantaggiosi sia per limitare la superficie sia per mantenere più elevato il coefficiente di spinta. Le superfici multifidelity consentono quindi di descrivere in modo chiaro le tendenze principali del problema e di supportare efficacemente le successive valutazioni progettuali.

Capitolo 6

Ottimizzazione di forma

6.1 Impostazione del problema di ottimizzazione

Dopo aver validato i modelli multi fidelity, sono stati sfruttati per affrontare il problema in termini di ottimizzazione di forma, con l'obiettivo di individuare le migliori configurazioni geometriche che rappresentino il miglior compromesso tra la massimizzazione del coefficiente di spinta C_F e la minimizzazione della superficie dell'ugello. Le variabili di progetto considerate sono, come sempre, la lunghezza dell'ugello L e l'angolo θ . Entrambe influenzano il comportamento del flusso e, di conseguenza, le prestazioni complessive del sistema: l'aumento della lunghezza dell'ugello può favorire l'espansione del gas all'interno dell'ugello, ma ne comporta anche un aumento della superficie laterale dell'ugello. L'angolo θ influenza sia la forma del divergente sia l'allineamento del flusso in uscita, con effetti su entrambe le funzioni obiettivo. Il problema quindi non conduce a un'unica soluzione ottimale, ma ad un insieme di configurazioni geometriche.

6.2 Setup dell'ottimizzazione in modeFRONTIER

Anche in questo caso, l'ottimizzazione è stata implementata in ambiente *modeFRONTIER*, a partire dai modelli surrogati generati con l'approccio multi fidelity sviluppato in precedenza. Per il coefficiente di spinta C_F è stato impiegato il modello *CBMR*, mentre per la superficie è stato adottato il modello *COKR*, alla luce degli indici di accuratezza descritti nei capitoli precedenti, in modo che ogni funzione obiettivo venga descritta nella maniera più accurata possibile. In questo modo, per ogni configurazione geometrica proposta dall'algoritmo di ottimizzazione, il workflow restituisce direttamente la stima delle due funzioni obiettivo senza dover eseguire una nuova simulazione numerica ad alta fedeltà. Questa scelta ha

permesso di esplorare lo spazio di progetto in modo molto più efficiente dal punto di vista computazionale, garantendo un livello di accuratezza elevato: è stato infatti possibile individuare la soluzione in 1000 punti appartenenti allo spazio delle variabili geometriche. L'algoritmo selezionato per la ricerca delle soluzioni è *pilOPT*, in grado di integrare strategie di esplorazione globale con tecniche di raffinamento locale. È stato così costruito un workflow molto più semplice dei precedenti, indicando gli stessi input e gli stessi output, ma facendo processare la relazione tra questi attraverso i modelli multifidelity scelti.

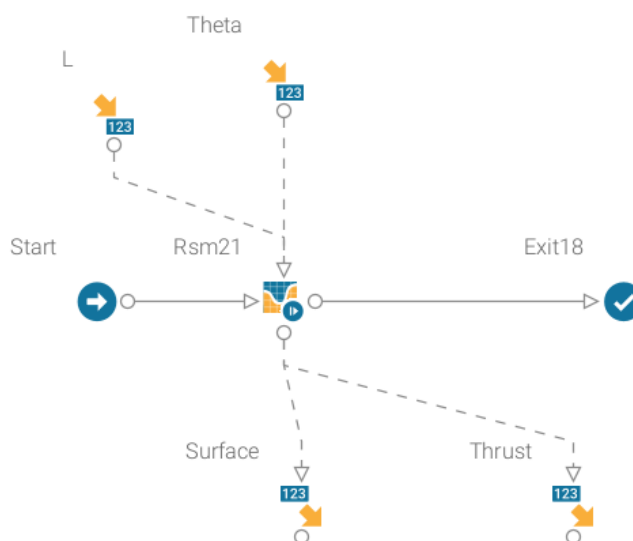


Figura 6.1: Workflow per l'ottimizzazione di forma

6.3 Risultati dell'ottimizzazione

Essendo formulato come problema multiobiettivo, il processo di ottimizzazione ricostruisce un insieme di soluzioni non dominate che definiscono il fronte di Pareto nello spazio delle funzioni obiettivo. Ciascun punto del fronte rappresenta una configurazione per la quale non è possibile migliorare una delle due grandezze senza peggiorare l'altra: l'analisi del fronte di Pareto permette di visualizzare il compromesso tra incremento del coefficiente di spinta e riduzione della superficie dell'ugello. Le rappresentazioni grafiche fornite da *modeFRONTIER*, in particolare lo *scatter chart* e il *parallel coordinates chart*, permettono di visualizzare l'andamento del fronte di Pareto e di mettere in relazione le prestazioni previste con le corrispondenti scelte geometriche. Per validare l'effettivo andamento delle funzioni obiettivo sono state implementate 100 simulazioni *high-fidelity*, rappresentate in seguito: Si nota

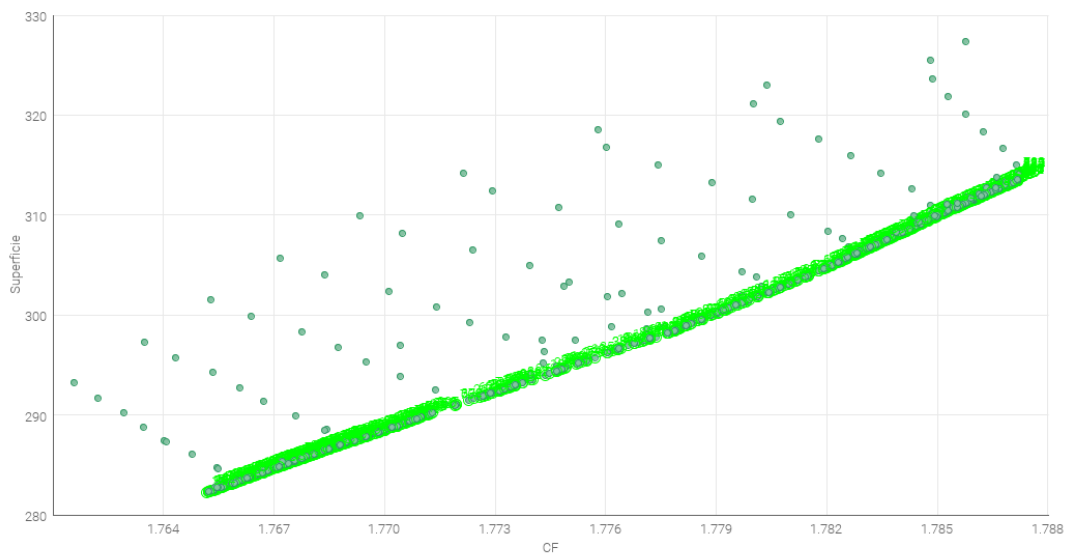


Figura 6.2: Fronte di Pareto - scatter chart

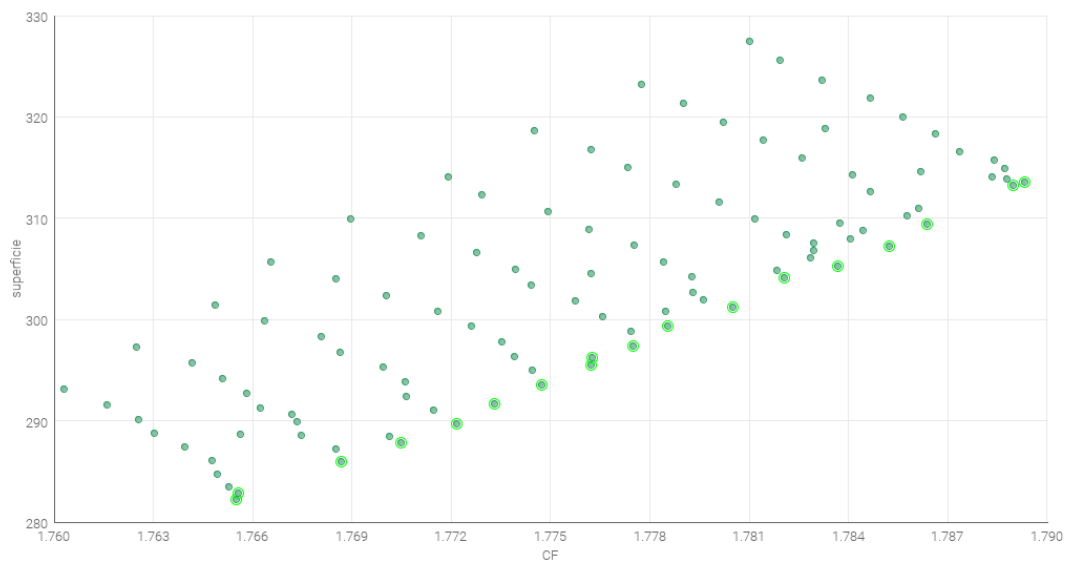


Figura 6.3: Fronte di Pareto - high-fidelity

un'evidente sovrapposizione delle soluzioni: questo valida ulteriormente la capacità predittiva dei modelli multi-fidelity, e rende significative le 900 soluzioni derivanti interamente dai modelli surrogati.

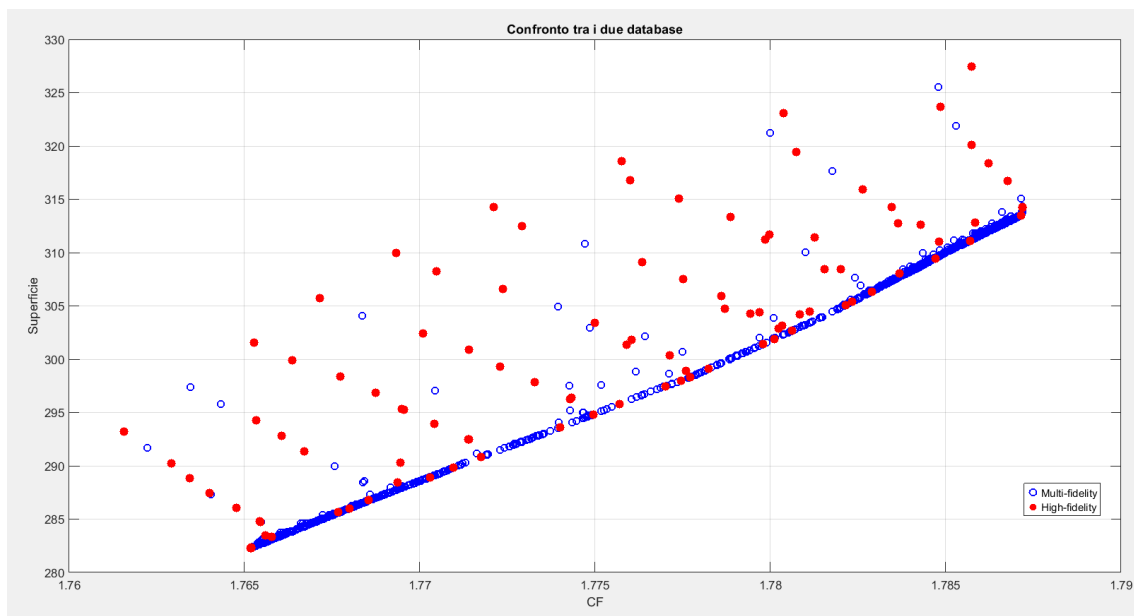


Figura 6.4: Sovrapposizione delle soluzioni multi-fidelity e high-fidelity

Capitolo 7

Conclusioni

Nel presente lavoro di tesi è stato impostato e sviluppato lo studio del campo di moto all'interno di un ugello convergente-divergente assialsimmetrico, con il fine di analizzare l'influenza di due parametri geometrici - L, θ - sulle due grandezze di interesse, ossia il coefficiente di spinta C_F e la superficie. L'analisi è stata sviluppata attraverso due diversi livelli di fedeltà: in una prima fase, è stata impostata la simulazione *low-fidelity*, basandola sulle equazioni di Eulero assialsimmetriche, in modo da esplorare rapidamente lo spazio dei parametri e valutare l'andamento generale del problema fisico associato; successivamente, lo studio è stato approfondito mediante le simulazioni *high-fidelity* basate sulle RANS, più onerose dal punto di vista computazionale, ma più aderenti alla realtà, essendo queste in grado di racchiudere anche la natura viscosa e turbolenta del flusso.

Su queste basi è stato sviluppato uno studio *multifidelity* in ambiente `modeFRONTIER`, con l'obiettivo di combinare la rapidità dell'esplorazione *low-fidelity* con la maggiore accuratezza delle simulazioni RANS. Le superfici di risposta ottenute evidenziano la necessità di individuare un compromesso tra l'efficienza propulsiva e il peso dell'ugello, che vanno in contraddizione l'una con l'altra: l'aumento della lunghezza del divergente tende a migliorare il coefficiente di spinta, ma comporta al tempo stesso un incremento della superficie dell'ugello. Nella parte finale del lavoro, il problema è stato affrontato in termini di ottimizzazione di forma mediante l'algoritmo `piLOPT`, assumendo come riferimento il modello *high-fidelity*: questo ha consentito di individuare un insieme di configurazioni ottimali, sempre alla luce della natura contraddittoria delle due funzioni obiettivo. Nel complesso, il lavoro svolto ha mostrato come l'integrazione tra simulazioni C_{FD} , modelli surrogati e approcci *multifidelity* rappresenti uno strumento efficace per affrontare problemi di progettazione e ottimizzazione in ambito propulsivo. La metodologia adottata ha infatti permesso di coniugare efficienza computazionale e affidabilità fisica, offrendo al tempo stes-

so una lettura chiara del problema e delle principali criticità progettuali ad esso associate. Come possibile sviluppo futuro del lavoro, si propone di inserire all'interno delle simulazioni anche l'aspetto termico, andando ad esempio a valutare quale materiale utilizzare per la realizzazione dell'ugello. Un ulteriore spunto potrebbe essere introdurre una descrizione più accurata del flusso, ad esempio abbandonando l'ipotesi di gas ideale per valutare l'effetto della temperatura sulle prestazioni del gas. Infine, risulterebbe interessante andare a studiare le prestazioni dell'ugello in differenti condizioni operative, in modo da scegliere in maniera più matura la giusta combinazione geometrica (L, θ) .

Bibliografia

- [1] Fred W. Steffen, H. George Krull e Ralph F. Schmiedlin. *Effect of Divergence Angle on the Internal Performance Characteristics of Several Conical Convergent-divergent Nozzles*. Rapp. tecn. 1954.
- [2] E. Leon Morrisette e Theodore J. Goldberg. *Turbulent-flow Separation Criteria for Overexpanded Supersonic Nozzles*. Rapp. tecn. 1978.
- [3] A. Balabel et al. «Assessment of Turbulence Modeling for Gas Flow in Two-dimensional Convergent–Divergent Rocket Nozzle». In: *Applied Mathematical Modelling* 35.7 (2011), pp. 3408–3422.
- [4] Sher Afghan Khan, Omar Mohamed Ibrahim e Abdul Aabid. «CFD Analysis of Compressible Flows in a Convergent-divergent Nozzle». In: *Materials Today: Proceedings* 46 (2021), pp. 2835–2842.
- [5] Nadeem Akbar Najar, D. Dandotiya e Farooq Ahmad Najar. «Comparative Analysis of $k-\epsilon$ and Spalart-Allmaras Turbulence Models for Compressible Flow through a Convergent-divergent Nozzle». In: *The International Journal of Engineering and Science* 2.8 (2013), pp. 8–17.
- [6] Chanyoung Park, Raphael T. Haftka e Nam H. Kim. «Remarks on Multifidelity Surrogates». In: *Structural and Multidisciplinary Optimization* 55.3 (2017), pp. 1029–1050.
- [7] K. P. S. S. Narayana e K. Sadhashiva Reddy. «Simulation of Convergent Divergent Rocket Nozzle Using CFD Analysis». In: *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering* 13.4 (2016), pp. 58–65.
- [8] John D. Anderson. *Modern Compressible Flow*. 3^a ed. McGraw-Hill, 2003.
- [9] A. H. Shapiro. *The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow*. 1953.
- [10] H. W. Liepmann e A. Roshko. *Elements of Gasdynamics*. 1957.
- [11] Philip Hill e Carl Peterson. *Mechanics and Thermodynamics of Propulsion*. 1992.

- [12] Charles Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. 2007.
- [13] David Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. 2006.
- [14] Philip L. Roe. «Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes». In: *Journal of Computational Physics* 43.2 (1981), pp. 357–372.
- [15] P. L. Roe. «Upwind Schemes Using Various Formulations of the Euler Equations». In: *Numerical Methods for the Euler Equations of Fluid Dynamics*. 1985, pp. 14–31.
- [16] Yanbo Hu e Fengyan Li. *On a Degenerate Hyperbolic Problem for the 3-D Steady Full Euler Equations with Axial-symmetry*. Preprint, 18 October 2020. 2020.
- [17] L. Paul Chew. «Constrained Delaunay Triangulations». In: *Proceedings of the Third Annual Symposium on Computational Geometry*. 1987, pp. 215–222.
- [18] Eleuterio F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Springer, 2013.
- [19] Lilik Hasanah et al. «Development of Software for Making Contour Plot Using MATLAB to Be Used for Teaching Purpose». In: *Applied Physics Research* 5.1 (2013), p. 78.
- [20] Meega Reji e Rupak Kumar. «Response Surface Methodology (RSM): An Overview to Analyze Multivariate Data». In: *Indian Journal of Microbiology Research* 9.4 (2022), pp. 241–248.
- [21] André I. Khuri e Siuli Mukhopadhyay. «Response Surface Methodology». In: *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics* 2.2 (2010), pp. 128–149.
- [22] Yong Zhao et al. «Polynomial Response Surface Based on Basis Function Selection by Multitask Optimization and Ensemble Modeling». In: *Complex & Intelligent Systems* 8.2 (2022), pp. 1015–1034.
- [23] Atharv Bhosekar e Marianthi Ierapetritou. «Advances in Surrogate Based Modeling, Feasibility Analysis, and Optimization: A Review». In: *Computers & Chemical Engineering* 108 (2018), pp. 250–267.
- [24] Enrico Rigoni. *Radial Basis Functions Response Surfaces*. Rapp. tecn. 4. modeFRONTIER, 2007, p. 3.
- [25] Enrico Rigoni. *Stepwise Regression RSM*. Rapp. tecn. 2014-003. Documentazione tecnica consultata localmente. ESTECO, 2014.

- [26] Enrico Rigoni e Simone Silveti. *New Gaussian Processes in modeFRONTIER 2017R4*. Rapp. tecn. 2017-001. Revisione del 8 giugno 2022 a cura di Elisabetta Sergi e Mauro Munerato. Documentazione tecnica consultata localmente. ESTECO, 2017.
- [27] ESTECO. *Glossary*. modeFRONTIER Documentation, documentazione software consultata localmente. n.d.
- [28] ESTECO. *Multi-fidelity Models*. In: modeFRONTIER Documentation, Design Space. Documentazione software consultata localmente. n.d.
- [29] Martin T. Hagan e Mohammad B. Menhaj. «Training Feedforward Networks with the Marquardt Algorithm». In: *IEEE Transactions on Neural Networks* 5.6 (1994), pp. 989–993.
- [30] Bruno Chaouat. «The State of the Art of Hybrid RANS/LES Modeling for the Simulation of Turbulent Flows». In: *Flow, Turbulence and Combustion* 99.2 (2017), pp. 279–327.
- [31] W. Rodi. «Comparison of LES and RANS Calculations of the Flow around Bluff Bodies». In: *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 69 (1997), pp. 55–75.
- [32] Amine Ben Haj Ali e Azzeddine Soulaïmani. «An Unstructured Finite Elements Method for Solving the Compressible RANS Equations and the Spalart-Allmaras Turbulence Model». In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.33–36 (2010), pp. 2261–2272.
- [33] M. Giselle Fernández-Godino. *Review of Multi-fidelity Models*. arXiv preprint arXiv:1609.07196. 2016.

Ringraziamenti

Ringrazio il relatore prof. Andrea Ferrero ed ESTECO per aver messo a disposizione la licenza di modeFRONTIER, in particolare Federico Carlini e Chiara La Guardia per il generoso supporto e per avermi permesso di estendere le mie competenze tecniche e pratiche, di cui sicuramente farò tesoro nel mio futuro professionale.

Ringrazio la mia famiglia per aver dimostrato di avere fiducia in me sempre e indipendentemente da tutto e per sapersi commuovere per ogni mio piccolo successo e per avermi insegnato che posso farcela con le mie gambe, sempre.

Ringrazio Bianca perché ogni giorno mi dà l'onore scegliermi come esempio, e questa sarà per sempre la mia più grande fortuna e il mio più grande orgoglio.

Ringrazio Federico perché ha sempre creduto in me più di quanto ci credessi io, perché mi insegna quotidianamente che l'amore sano è una scelta attiva da prendere ogni giorno e che la sua mano tesa verso di me in ogni situazione mi sta aiutando a crescere e a guarire con una forza e una fame che non avrei mai pensato di avere. Sei la mia più grande fortuna. Grazie per essere l'altra metà dell'unico neurone che entrambi possediamo, oggi se possibile servirebbe a me per discutere questa tesi.

Ringrazio Silvia e Teresa, la mia prima famiglia a Torino, che mi hanno mostrato come sia semplice costruire un'amicizia che sa di casa, indipendentemente dai chilometri che ci separano.

Ringrazio Anna, Emma e Martina per essere il mio porto sicuro, il mio punto di partenza, le fondamenta su cui si basa la mia persona. Grazie per essere state il mio esempio e grazie per essere le donne che sono così fiera di chiamare ogni giorno mie amiche.

Ringrazio Lucrezia e Valeria, perché ogni giorno trovano un modo nuovo di meravigliarmi con la loro delicatezza, le loro intuizioni e la loro presenza confortante e nutriente. Grazie per scegliermi come vostra amica ogni giorno, grazie per vedere in me una luce che io spesso non riesco a vedere, conserverò sempre con cura il dolce ricordo della nostra disperata gioventù.

Grazie a tutti gli amici di Torino e chi a Torino non c'è più, Maria, Pietro e Matteo, per essere l'esempio sano di amicizia che mi porterò sempre nel cuore.

Un grazie speciale va infine agli ospedali di questa città, al personale medico, all'adenomiosi, alla depressione, alla tiroide pigra, ai negozi di tinte per capelli, ai mercati rionali, a ciò che rimane della mia bicicletta, al calesse e alla danza. Senza di voi non sarei io e sicuramente non avrei tutte queste storie divertenti da raccontare.