



**Politecnico
di Torino**

Politecnico di Torino

Ingegneria Aerospaziale Magistrale

A.A. 2020/2021

Sessione di Laurea Dicembre 2021

Analisi dei flussi rarefatti tramite utilizzo del codice SPARTA

Relatori:

Andrea Ferrero

Domenic D'Ambrosio

Candidato:

Piergaspare Spinelli

Abstract

Questo elaborato si propone di studiare come un flusso rarefatto interagisce con un corpo. Lo studio è compiuto con l'utilizzo del codice SPARTA (acronimo che sta per Stochastic Parallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer, <http://sparta.sandia.gov>). SPARTA è un codice DSMC per la simulazione di gas a bassa densità sia in configurazioni 2D che 3D sviluppato presso i Sandia National Laboratories; funziona su processori singoli o in parallelo in modo da poter analizzare problemi sia di piccole che di grandi dimensioni e può facilmente gestire geometrie complesse mediante tecniche di tipo immersed boundary. Si sono svolte delle simulazioni 2D assialsimmetriche riferite a corpi immersi in flussi fortemente rarefatti. Si è effettuato uno studio parametrico per identificare l'influenza di alcuni parametri caratteristici dell'algorithmo DSMC. I risultati sono stati valutati confrontando il coefficiente di resistenza e la distribuzione del coefficiente di pressione a parete con dei dati disponibili in letteratura.

Abstract

The goal of this work is the study of the rarefied flow around a body. The study was computed by means of the code SPARTA (Stochastic Parallel Rarefied-gas Time accurate Analyzer, <http://sparta.sandia.gov>). SPARTA is a DSMC code developed at Sandia National Laboratories for the simulation of rarefied flows in both 2D and 3D configurations. It can work on a single core or in parallel in order to manage large scale problems. Furthermore, it can easily manage complex geometries by means of an immersed boundary approach. In this work, several 2D axisymmetric simulations of the rarefied flow around solid bodies were computed. A parametric study was performed in order to identify the influence of some peculiar parameters of the DSMC method on the predictions. The accuracy of the results was evaluated by comparing the drag coefficient and the wall pressure coefficient distribution with data available in the literature.

Indice

Abstract	2
Capitolo 1: Introduzione	5
Capitolo 2: Direct Simulation Monte Carlo	10
2.1 Il flusso rarefatto	10
2.2 Il metodo DSMC.....	15
Capitolo 3: Validazione del metodo	24
3.1 Sparta.....	24
3.2 Visualizzazione dei risultati	28
3.3 Confronto dei dati	34
3.4 Griglia dinamica	38
Capitolo 4: Conclusioni	41
Riferimenti bibliografici	42
Script	44
Ringraziamenti	50

1. Introduzione

L'atmosfera è un involucro gassoso che ricopre interamente la terra, le cui molecole sono trattenute dalla forza di gravità del pianeta. Essa è caratterizzata da alcune proprietà fisiche, come pressione e densità, e da una certa composizione chimica, che comprende principalmente Azoto (N) e Ossigeno (O). Queste caratteristiche, però, non sono costanti tanto che l'atmosfera terrestre viene suddivisa in vari strati. Le proprietà dell'atmosfera variano in maniera significativa con l'aumentare della quota, con la pressione e la densità che diminuiscono e la variazione delle concentrazioni dei vari gas; vediamo ad esempio come nella esosfera vi è prevalenza di Elio (He) ed Idrogeno (H); questo succede perché allontanandoci dal centro della terra diminuisce anche la forza di gravità che agisce sulle molecole.

Ad alte quote, si inizia a definire l'aria come rarefatta, cioè quando ci troviamo in condizioni di bassa densità. In un gas molto rarefatto le sue molecole sono indipendenti le une dalle altre e quindi le forze intermolecolari tra di esse sono trascurabili.

In campo aerodinamico esiste un parametro adimensionale attraverso il quale si può capire in che condizioni si trova il gas in esame, ovvero il numero di Knudsen. Provando a definirlo sommariamente si può distinguere tra due tipi di

flussi, andando a vedere se questo parametro è minore o maggiore rispetto a un valore limite: nel caso esso sia minore si parla di flusso continuo, viceversa il flusso è chiamato rarefatto (andando a studiare il numero di Knudsen più nel dettaglio si possono distinguere più intervalli e regimi di flusso differenti). Per quanto riguarda il flusso continuo esiste un sistema di equazioni che permettono di risolverlo in modo relativamente semplice, ovvero le equazioni di Navier-Stokes, che tramite appropriati input ci forniscono densità, quantità di moto ed energia del flusso in esame.

Quando si passa allo studio di un flusso rarefatto, le equazioni di Navier-Stokes perdono di validità e nasce per cui il bisogno di un nuovo metodo per poter risolvere il problema; ed è qui che entra in gioco il metodo DSMC (Direct Simulation Monte Carlo). Questo metodo utilizza un algoritmo stocastico basato su particelle per risolvere l'equazione di Boltzmann attraverso l'approssimazione della funzione di distribuzione della velocità molecolare del continuo con un insieme discreto di molecole computazionali.

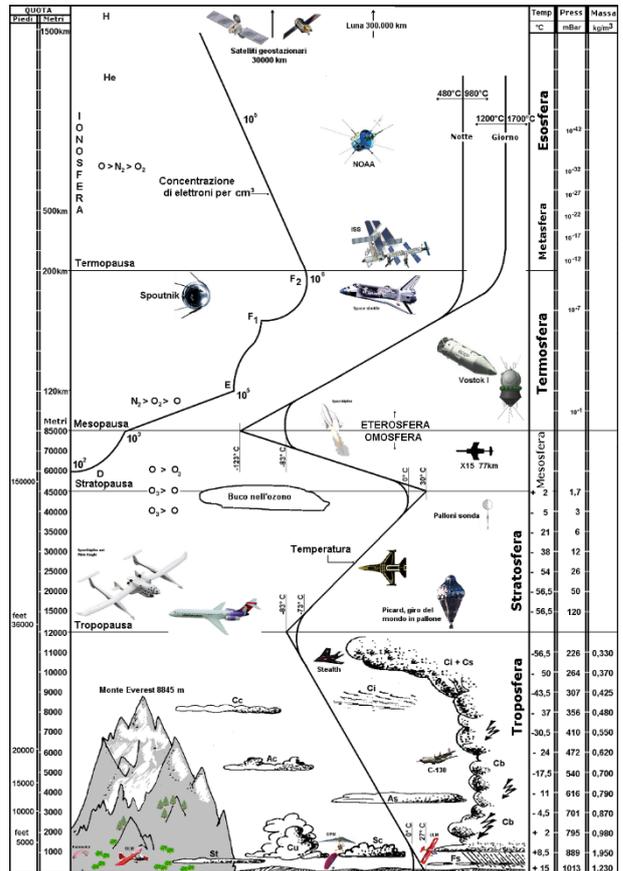


Figura 1. Influenza della quota sui vari parametri [Wikipedia].

Questa analisi risulta essere rilevante per studiare vari fenomeni che si presentano quando ci si trova in situazioni con bassa densità. Un esempio sono i satelliti che una volta in orbita si vengono a trovare in un ambiente rarefatto dove avranno un comportamento diverso rispetto a quello che avrebbero al suolo. Sono stati compiuti molti studi sulle forze che si creano quando un satellite si trova in orbita LEO (Low Earth Orbit). Nell'articolo [3] c'è una breve descrizione di queste tematiche che vengono studiate da una sezione della NASA, la Living With a Star (LWS). Questa sezione ha come obiettivi:

- Valutare lo stato della ricerca sul fenomeno della resistenza atmosferica con i relativi problemi per le operazioni dei satelliti;
- Identificare e capire quali sono le difficoltà nella stima del calcolo della resistenza;
- Fornire raccomandazioni per future analisi di questo parametro.

Questo articolo permette di capire come la resistenza del satellite sia somma di vari contributi: resistenza atmosferica (contributo maggiore), pressione della radiazione solare, resistenza del plasma; inoltre si tiene conto dei possibili errori sulla determinazione della posizione del satellite e della stima sul suo stato che possono influenzare la valutazione complessiva della resistenza. Si osserva, anche, di come questa forza aerodinamica influenzi i vari compiti del satellite come il mantenimento dell'orbita o l'analisi della fase di rientro.

Il seguente diagramma sintetizza il problema:

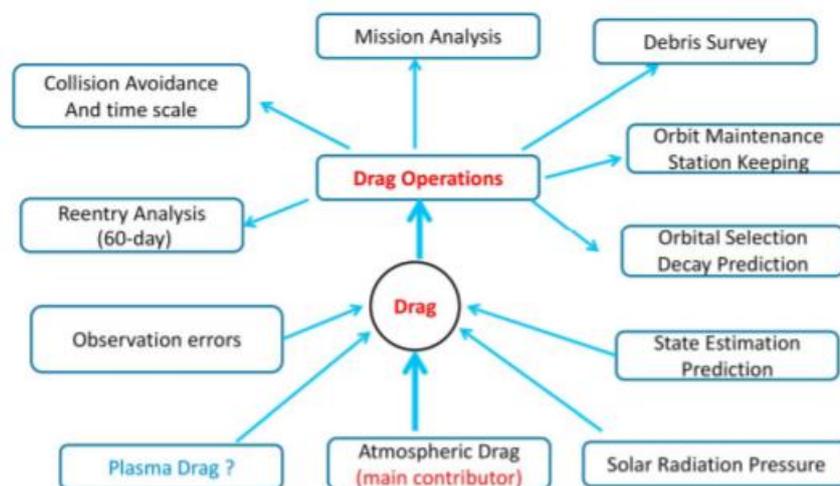


Figura 2. Schematizzazione delle sorgenti e delle applicazioni dovute alla resistenza [3].

Lo studio della resistenza può essere visto sotto vari aspetti. Quelli visti nel paragrafo sopra li possiamo raggruppare in due insiemi più grandi, il *Precision Orbit Determination* e il *Weighing of Satellites*, che sono definiti *time-critical* in quanto i loro risultati devono essere disponibili in poco tempo; altro aspetto è quello a cui ci si appropria per condurre un'indagine sui fenomeni geofisici,

come può essere la comprensione della termosfera e il monitoraggio del prossimo ciclo solare [4]; una panoramica più generale è mostrata dalla tabella seguente:

Table 1. Uses of Drag Models	
<u>Precision Orbit Determination (Time-Critical)</u>	
	Catalog Maintenance
	SOI
	Prediction/Forecasting
	ASAT Targeting/Threat Analysis
	Data Screening and Calibration
	Collision Avoidance
	Navigation Satellites (eg, Transit)
<u>Weighing of Satellites (Time-Critical)</u>	
	SOI
	Damage Assessment
	Decoying of Space Assets
	Space Debris Characterization
<u>Geophysical Investigations</u>	
	Atmospheric Physics
	Model Development
	Calibration of Other Thermosphere Sensors
	Synthesis with Other Data
	Other Investigations
	Polar Motion and Earth Rotation
	Scientific Satellites Precision Orbits (eg, MAGSAT, SEASAT, GEOSAT, TOPEX, ERS)

Tabella 1. Usi dei modelli di resistenza [4].

Gli studi sono stati condotti tracciando dei satelliti in orbita a varie altitudini, e si è osservato che i modelli con i quali si è portata avanti l'analisi sono risultati meno efficaci con l'aumentare della quota.

Quando ci si trova in una regione molto rarefatta nasce anche un altro problema che vede come protagonisti i propulsori a razzo oppure i thruster di assetto di un satellite. Nel vuoto spaziale (condizione assimilabile a una regione con un alto grado di rarefazione) i gas di scarico che fuoriescono dall'ugello formano un getto libero che può andare a impattare le superfici vicine oppure alcune particelle possono addirittura seguire traiettorie che le portano a raggiungere zone a monte dell'ugello a causa della densità estremamente bassa dell'ambiente. Questo fa sì che ci sia una diffusione illimitata del gas che genera delle forze di disturbo e dei carichi termici indesiderati che possono ridurre la vita del razzo o causare dei danni. La soluzione è studiare il flusso sia quando è ancora dentro l'ugello che quando si sta espandendo al di fuori di esso, così da poter valutare le forze e il trasferimento di calore generate da questo fenomeno indesiderato. Sono già stati svolti vari studi sia teorici che sperimentali su questo problema utilizzando anche il metodo DSMC [5-6].

Esistono alcuni studi dove viene utilizzato un approccio ibrido utilizzando le equazioni di Navier-Stokes e il metodo DSMC dove con il primo metodo si simula il flusso interno all'ugello e dopo si usano i parametri di uscita come condizioni iniziali per il secondo [7-8]. In particolare nel primo report viene usata questa combinazione per simulare un flusso multifase in diversi tipi di regime e

si focalizzano nella zona vicino al labbro dell'ugello, dove appunto dovrebbe avvenire l'inversione di moto di alcune particelle. Questo studio ha fatto emergere che le forze presenti sono insufficienti per far cambiare completamente il moto alle molecole di tale flusso e quindi solo una minima parte invertono la loro direzione, e viene supposto che il riflusso sia composto anche da particelle provenienti dalla distruzione del rivestimento del labbro dell'ugello. È stato anche studiato più nel dettaglio il flusso di espansione che si ha a fine ugello utilizzando il modello della lamina piana: a causa degli effetti viscosi il flusso è molto lontano dalla soluzione di Prandtl-Meyer per angoli di deflessione elevati (vedi Figura 3), infatti si osserva che per grandi angoli di deflessione il Mach e la temperatura hanno un comportamento inverso (ovvero il primo diminuisce e il secondo aumenta). Da questi risultati si possono analizzare i limiti di applicabilità di Navier-Stokes per un flusso molto rarefatto.

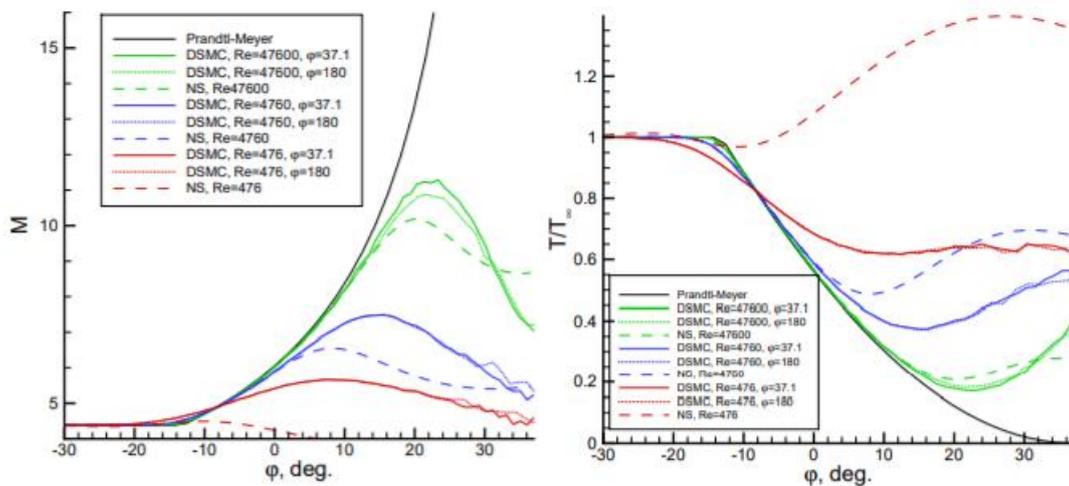


Figura 3. Andamento del Mach e della temperatura in funzione dell'angolo di deflessione dell'ugello [7].

In base alla superficie che colpiscono le particelle di riflusso si possono creare vari guasti:

- queste molecole si possono depositare sui pannelli solari o su le superfici di controllo termico, portando ad una diminuzione della produzione di energia e all'aumento della temperatura nel veicolo spaziale;
- su superfici ottiche dei telescopi andando ad intaccare la qualità dell'immagine.

Sono già state svolte molte indagini su questa questione; una di queste è quella con i thrusters a propulsione chimica per riuscire a determinare lo sviluppo del flusso in uscita dall'ugello e l'intensità della forza e del trasferimento di calore che genera [9].

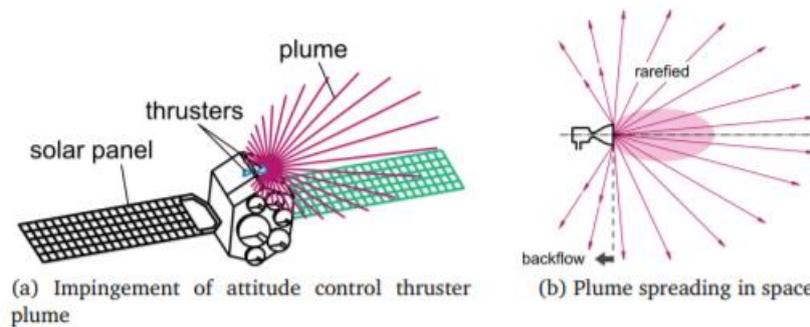


Figura 4. Diffusione del flusso in uscita da un ugello [9].

Da un altro studio su questa tematica è emerso che per un propulsore ibrido il grado di contaminazione è legato al rapporto di miscela. È stato osservato che quando il motore presenta una combustione stechiometrica, gli effetti della contaminazione sono piccoli, ma si fanno sempre più grandi con il diminuire del rapporto ossidante-combustibile e all'allontanarsi dalla condizione stechiometrica [10].

Ricapitolando questa incontrollata diffusione del flusso in uscita dall'ugello può generare forze di disturbo, carichi termici non previsti, contaminazione ed erosione di superfici. Ormai sono già stati svolti vari studi per porvi rimedio e sono presenti molti modelli di analisi per arginare questi problemi. Tuttavia il loro studio non si è ancora concluso perché si stanno sviluppando nuovi tipi di propulsione, come quella elettrica; nuovi tipi di ugelli che hanno una diversa espansione dei flussi di scarico. Si avrà anche un comportamento diverso nel caso in cui siamo presenti più propulsori raggruppati per fornire un livello di spinta maggiore, in questo caso le varie interazioni possono causare degli urti che non avvengono nel caso di un singolo motore.

Da quanto detto lo sviluppo di modelli per lo studio di questo fenomeno deve andare di pari passo con l'evoluzione e l'aggiornamento dei sistemi di propulsione così da rilevare potenziali problemi nel più breve tempo possibile.

2. Direct Simulation Monte Carlo

Le equazioni di Navier-Stokes e di Eulero descrivono i fluidi newtoniani che si trovano sotto vari tipi di condizioni, sia in forma gassosa che liquida. Sebbene siano molto utili, hanno dei limiti in quanto descrivono solo il campo del continuo di un fluido, infatti per analizzare un gas rarefatto sono stati sviluppati vari metodi, tra cui il *Direct Simulation Monte Carlo* (DSMC), sviluppato da Bird negli anni 60. Questo si basa, come si deduce dal nome, sul metodo *Monte Carlo* il quale serve per una vasta varietà di problemi matematici basati sulla generazione di numeri casuali da parte di un computer. Nel seguente elaborato questo metodo viene applicato per la simulazione di un flusso di gas rarefatto a livello molecolare, e per ora è il procedimento numerico a base della teoria cinetica dei gas e della dinamica dei gas rarefatti.

2.1 Il flusso rarefatto

L'aria rarefatta si distingue da quella classica per una minor densità e dal fatto che si riducono le interazioni tra le molecole. La conseguenza di questa minore densità è che gli elementi dell'aria sono presenti con concentrazioni minori; un esempio pratico e, se si vuole, anche banale è la montagna: infatti gli alpinisti, quando si trovano a camminare ad alte quote, si portano spesso dietro delle bombole di ossigeno perché si ha una concentrazione di ossigeno minore che causa difficoltà respiratorie.

La caratteristica di rarefazione di un gas si può definire tramite un numero denominato "numero di Knudsen" che è un parametro adimensionale. Questo parametro è definibile tramite un semplice rapporto:

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

questo rappresenta la relazione tra il *mean free path* (libero cammino medio) e la lunghezza caratteristica del corpo dove il numeratore corrisponde alla distanza media tra due collisioni successive che per l'aria, in condizioni standard, assume il valore di $\lambda = 6.35 \cdot 10^{-5} \text{mm}$. In generale esiste una formula per il calcolo di questo termine che è la seguente:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n}$$

dove abbiamo:

- d : diametro della molecola, in caso di una miscela (come l'aria) si considera la molecola con il raggio molecolare minore;
- n : number density (o densità volumetrica), ci fornisce un'indicazione su quante molecole sono presenti in un volume di un m^3 . Questo parametro sarà importante in seguito perché rappresenta l'input di SPARTA attraverso il quale possiamo definire il numero di Knudsen.

Tornando al numero di Knudsen, questo sintetizza il concetto di fluido continuo, il quale è legato al confronto tra una condizione locale e una globale: il primo caso riguarda gli urti successivi mentre il secondo il comportamento del moto baricentrale dell'insieme di molecole che devono percorrere la lunghezza caratteristica del corpo immerso nella corrente. A livello più pratico, con pressioni ordinarie, le distanze intermolecolari sono molto inferiori alle dimensioni del corpo quindi il gas può essere considerato un corpo continuo; ma con l'abbassamento della pressione diminuisce anche il valore della densità, in questo modo le molecole saranno più distanti e il valore del libero cammino medio diventa comparabile con le dimensioni dell'oggetto in esame. A questo punto capiamo che è conveniente suddividere il campo della dinamica dei gas rarefatti in vari regimi, che dipendono dall'intensità della rarefazione del gas [11]:

- **Continuum flow** $Kn < 0.01$: è lo stato della normale dinamica dei gas, le collisioni intermolecolari dominano il campo del flusso e il fluido adiacente alla superficie assume sia la velocità che la temperatura della superficie stessa.
- **Slip flow regime** (debolmente rarefatto) $0.01 < Kn < 0.1$: abbiamo un flusso quasi continuo con un numero di Knudsen piccolo ma non trascurabile. In questo caso il gas aderente alla superficie ha una velocità tangenziale, ovvero scivola sulla superficie, e la temperatura è diversa da quella del corpo, quindi si crea un salto termico. La velocità superficiale e gli effetti della differenza di temperatura sono correlati al *mean free path*. Vengono introdotti due coefficienti che descrivono l'interazione tra la molecola statistica e la superficie; questi sono chiamati *accomodation coefficients* e *reflection coefficients*. Il primo coefficiente citato è una grandezza fisica che tiene conto del comportamento che hanno le particelle di gas o di vapore durante la collisione con una superficie solida o liquida, ovvero indica la percentuale di quante particelle avranno una traiettoria diffusiva dopo il contatto; il suo valore dipende dalla composizione e della pressione della miscela di gas e dalla natura e dallo stato della superficie di contatto.
- **Transition regime** (moderatamente rarefatto) $0.1 < Kn < 10$: è caratterizzato da una condizione in cui le collisioni intermolecolari e quelle tra molecole del gas e la superficie hanno più o meno la stessa importanza.
- **Free molecular flow** (altamente rarefatto) $Kn > 10$: per densità estremamente piccole il libero cammino medio è molto più grande rispetto alle grandezze caratteristiche che un

corpo può avere. In questi casi dopo che la particella ha avuto l'urto con il corpo solido la probabilità che abbia un'ulteriore interazione con un'altra particella aumenta con l'aumentare della distanza dal corpo precedentemente colpito. Le collisioni intermolecolari hanno un effetto trascurabile e il flusso vicino alla superficie è caratterizzato dall'interazione tra molecole libere e la superficie stessa.

Fino a qui si è visto che è possibile quantificare il grado di rarefazione attraverso il numero di Knudsen; esistono però altri due parametri adimensionali attraverso cui possiamo indicare il grado di rarefazione di un gas, questi sono il numero di Reynolds e il numero di Mach:

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu}$$

$$Ma = \frac{U}{a}$$

Dove ρ è la densità, U la velocità macroscopica, μ la viscosità dinamica e a la velocità del suono riferiti al flusso di gas in esame; mentre L è la grandezza caratteristica del corpo.

Analizzando le equazioni di queste tre grandezze si nota che possiamo trovare un legame Re-Ma-Kn.

Approfondiamo le caratteristiche dei numeri di Reynolds e di Mach:

- Il Reynolds lo possiamo vedere come il prodotto tra un rapporto di velocità e un rapporto di lunghezze andando ad esplicitare la viscosità dinamica $\mu = \frac{1}{2} \rho \bar{v} \lambda$:

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} = 2 \cdot \frac{U}{\bar{v}} \cdot \frac{L}{\lambda}$$

Dove \bar{v} è la velocità di agitazione termica e λ il libero cammino medio.

- Il Mach, invece, è il rapporto tra la velocità del flusso e la velocità del suono. In questo caso possiamo manipolare la sua equazione per far ricomparire il rapporto di velocità visto nel numero di Reynolds, sapendo che esiste un legame tra la velocità del suono e quella di agitazione termica:

$$\frac{\bar{v}}{a} = \sqrt{\frac{8/\pi}{\gamma}}$$

$$Ma = \frac{U}{a} = \frac{U}{\sqrt{\gamma \frac{\pi}{8} \bar{v}^2}} = \frac{U}{\bar{v}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{\gamma \pi}{8}}}$$

Date queste definizioni e andando a riprendere la definizione del numero di Knudsen, vediamo come quest'ultimo lo possiamo esprimere anche in funzione del Mach e del Reynolds:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} = 2 \sqrt{\frac{\gamma \pi}{8}} \cdot \frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{\gamma \pi}{2}} \cdot \frac{Ma}{Re}$$

Se si considera un gas bi-atomico ($\gamma = 1.4$) come l'aria l'espressione si semplifica:

$$Kn = 1.48 \frac{Ma}{Re}$$

Per un flusso di strato limite la dimensione caratteristica di maggior importanza è lo spessore di strato limite δ . Per un flusso di strato limite laminare, si trova un legame tra δ e Reynolds:

$$\frac{\delta}{L} \sim \frac{1}{\sqrt{Re}}$$

Quindi il numero di Knudsen lo possiamo vedere come:

$$Kn = \frac{\lambda}{\delta} \sim \frac{Ma}{\sqrt{Re}}$$

Tramite le precedenti osservazioni è possibile creare un grafico in cui si possono osservare i vari regimi di flusso:

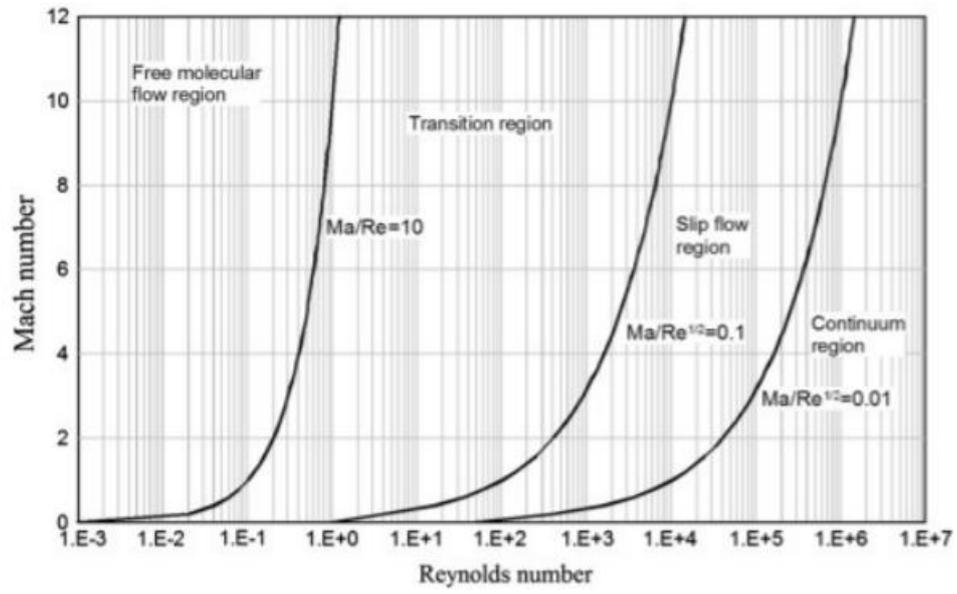


Figura 5. Suddivisione del campo di moto in funzione del numero di Knudsen [11].

2.2 Il metodo DSMC

Il metodo DSMC può essere visto come una dinamica molecolare semplificata per risolvere l'equazione di Boltzmann non lineare dipendente dal tempo, la quale descrive l'evoluzione di un gas rarefatto in funzione della distribuzione della singola particella. Risulta inoltre essere una soluzione molto più veloce poiché mentre la dinamica molecolare calcola esattamente le collisioni, il metodo DSMC genera delle collisioni in modo stocastico con tassi di dispersione e distribuzione della velocità post-collisione calcolati tramite la teoria cinetica per un gas rarefatto. Le simulazioni di questo tipo, però, risultano poco accurate quando si lavora con dimensioni prossime ai valori dei diametri atomici, mentre sono corrette quando abbiamo misure comparabili con il libero cammino medio. Di questo modello di risoluzione ne parla ampiamente G. A. Bird in un suo libro [12].

I flussi sono caratterizzati da molteplici variabili, tra queste la più importante prevista da questo metodo è il numero di Knudsen, infatti per valori di $Kn > 1/10$ una descrizione continua del flusso inizia già ad essere inaccurata [13]. Un criterio più generale che indica l'interruzione del continuo è l'apparizione degli effetti di pressione anisotropa, che possiamo quantificare andando a definire un numero di Knudsen locale:

$$Kn_l = \lambda \frac{|\nabla n|}{n}$$

Dove n corrisponde alla number density. Tramite questa equazione è possibile definire un margine più appropriato tra continuo e rarefatto, che corrisponde a:

$$Kn_l > 0.05$$

Altro approccio per quantificare quanto un gas sia diluito è analizzare il parametro di densità ε , che deve essere molto piccolo:

$$\varepsilon = nd^3 \ll 1$$

Dove d è il diametro delle molecole di gas.

In altri termini questa formula ci dice che per un gas rarefatto la dimensione delle molecole è molto più piccola rispetto alla distanza media tra esse: $l = \frac{1}{n^3} = \frac{d}{\varepsilon^3} \Rightarrow d \ll l$; questo ci permette

di dire che il più delle volte ogni particella si muove senza avere nessuna interazione con le altre, e quando avviene un'interazione questa è vista come un cambiamento istantaneo delle loro velocità. Possiamo così definire la probabilità di collisione tra N molecole di gas P_N e abbiamo che $P_{N+1}/P_N \propto \varepsilon$, da cui siamo in grado di dedurre che sono importanti solo le collisioni binarie tra le particelle di gas.

Per quanto detto finora, risulta utile definire un'altra variabile, ovvero la frequenza di collisione ν , che indica il numero medio di collisioni di una molecola nell'unità di tempo:

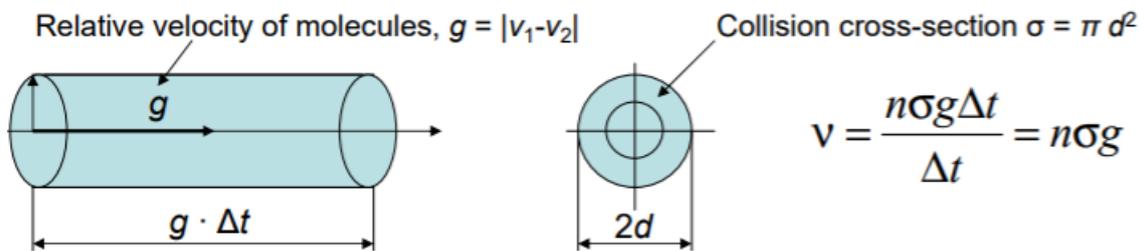


Figura 6. Frequenza di collisione [12].

Si vede ora come effettuare un approccio di base al metodo DSMC.

Il gas è rappresentato da un set di N molecole di simulazione, ognuna delle quali è caratterizzata da una velocità V_i e una coordinata r_i , che sono variabili casuali poiché, come detto prima, questo metodo è di tipo probabilistico.

$$X(t) = (r_1(t), V_1(t), \dots, r_N(t), V_n(t))$$

Il flusso di gas è simulato come un cambiamento $X(t)$ nel tempo, che ha diverse cause:

- Movimento libero o sotto l'effetto di forze esterne delle molecole;
- Collisioni tra particelle di gas;
- Interazioni delle molecole con superfici di corpi, ostacoli, pareti di condotti, etc.

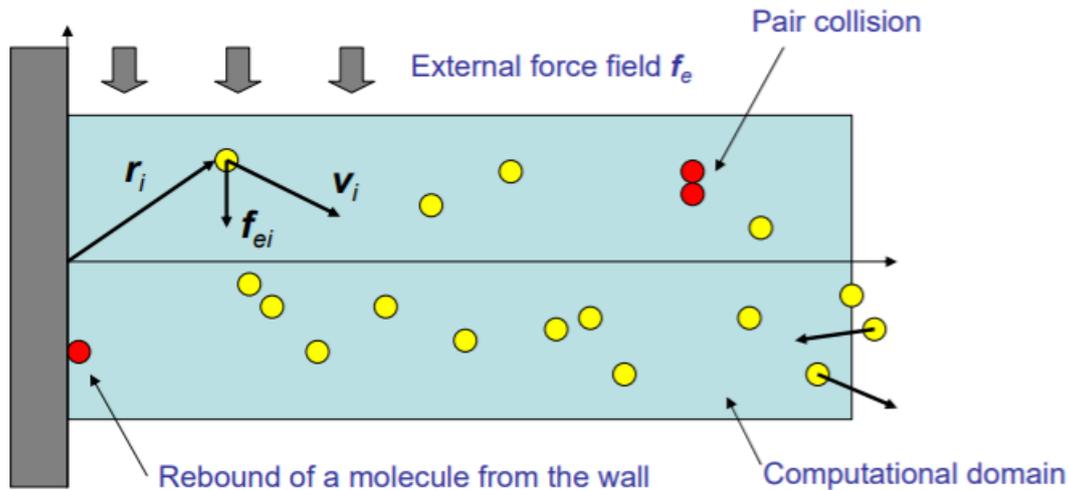


Figura 7. Schematizzazione del dominio computazionale [12].

Riprendiamo la frequenza di collisione che avevamo definito in precedenza: se consideriamo per le molecole la stessa velocità, si osserva che il numero di interazioni dipende da n e σ ($\nu = n\sigma v$). Tenendo presenti due diversi flussi, si può affermare che avremo lo stesso numero di collisioni se $n_1\sigma_1 = n_2\sigma_2$, ovvero un flusso con particelle più piccole e numerose può avere lo stesso numero di interazioni di uno con una minore densità ma con sezione d'urto maggiore. Si deve, inoltre, considerare che il numero di molecole di simulazione non è uguale al numero di molecole nel flusso reale; ogni molecola di simulazione in DSMC rappresenta un numero W di particelle del gas reale, dove $W = n/n_{sim}$ è il peso statistico. Per rendere il flusso di simulazione comparabile con quello reale, dovremo calcolare la sezione d'urto delle particelle di simulazione nel seguente modo:

$$\sigma_{sim} = \sigma \frac{n}{n_{sim}} = \sigma W$$

Fatte queste considerazioni iniziali si può andare a discutere più nel dettaglio le caratteristiche dell'algoritmo DSMC (in particolare di come si articola dopo che è stato modificato da Bird).

Tutti i processi sono divisi in intervalli di tempo brevi, con time-step Δt ; si esamina, quindi, due stati consecutivi:

- $X^n = X(t^n)$, stato delle molecole di simulazione al tempo t^n ;
- $X^{n+1} = X(t^{n+1})$, stato delle molecole al tempo $t^{n+1} = t^n + \Delta t$.

A ogni passo temporale, il passaggio da X^n a X^{n+1} è suddiviso in una sequenza di tre punti:

1) Moto di collisione delle molecole

$$X^n = (r_1^n, V_1^n, \dots, r_N^n, V_N^n)$$

$$X^n \rightarrow X^*$$

Per un determinato intervallo di tempo vengono risolte le equazioni del moto per ogni particella:

$$\frac{dr_i}{dt} = V_i, \quad m_i \frac{dV_i}{dt} = f_{ei}, \quad \text{con } i = 1, \dots, N$$

$$r_i(t^n) = r_i^n, \quad V_i(t^n) = V_i^n,$$

dove m_i è la massa reale della molecola.

Nel caso di moto libero, il problema si semplifica in quanto $f_{ei} = 0$:

$$X^* = (r_1^*, V_1^n, \dots, r_N^*, V_N^n)$$

$$r_i^* = r_i^n + \Delta t V_i^n$$

Ci può essere il caso in cui sia presente un campo di forze esterne, allora le equazioni del moto devono essere risolte numericamente, ad esempio con il metodo di Runge-Kutta:

$$X^* = (r_1^*, V_1^*, \dots, r_N^*, V_N^*)$$

$$r_i = r_i^n + \frac{\Delta t}{2} V_i^n, \quad V_i = V_i^n + \frac{\Delta t}{2} f_{ei}(r_i^n)$$

$$r_i^* = r_i^n + \Delta t V_i, \quad V_i^* = V_i^n + \Delta t f_{ei}(r_i)$$

2) Campionamento delle collisioni

$$X^* = (r_1^*, V_1^*, \dots, r_N^*, V_N^*)$$

$$X^* \rightarrow X^{**}$$

Il primo passo di questo step è suddividere il dominio computazionale in celle, così da avere regioni più piccole. Si assume che le molecole presenti in queste regioni siano distribuite omogeneamente.

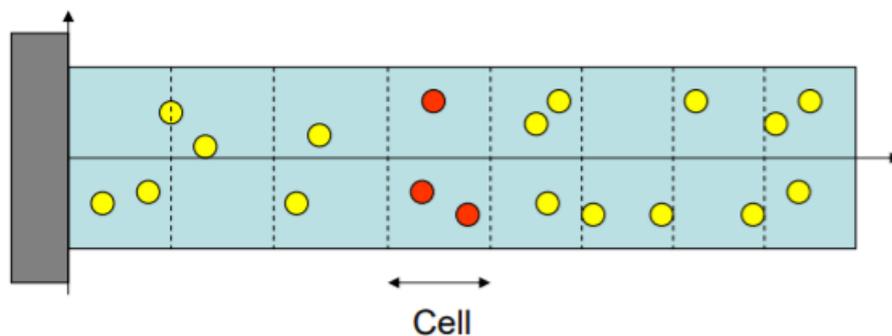


Figura 8. Suddivisione in celle del dominio di calcolo [12].

Creata la griglia si attribuisce ad ogni particella un indice che si riferisce alla cella a cui appartiene, in questo modo, ad ogni passo temporale, vengono considerate le collisioni tra sole molecole appartenenti allo stesso blocco. Ogni interazione avvenuta viene vista come un evento casuale che si verifica con una frequenza data dalla probabilità di collisione.

Il campionamento di collisioni avviene in ogni cellula, coppie di molecole che interagiscono tra loro vengono considerate in maniera casuale, e per ognuna di queste viene assegnata una velocità di post-collisione, che va appunto a sostituire quella precedente a tale evento.

Per quanto detto di questa fase, non rimane che definire la probabilità di collisione e la velocità post-urto.

Per quanto riguarda il primo parametro citato sopra, esso è esprimibile nel seguente modo:

- Si definisce la velocità relativa tra due molecole i e j : $g_{ij} = |v_j - v_i|$;
- Nell'intervallo di tempo considerato, la probabilità di una interazione casuale è definita come:

$$P_{ij} = \frac{\sigma_{ij(sim)} g_{ij} \Delta t}{V_{cell}}$$

Dove V_{cell} è il volume della cella presa in considerazione.

Per la velocità delle particelle dopo la collisione c'è invece necessità di impostare un sistema di tre equazioni che rappresentano le leggi di conservazione del momento, dell'energia e del momento angolare:

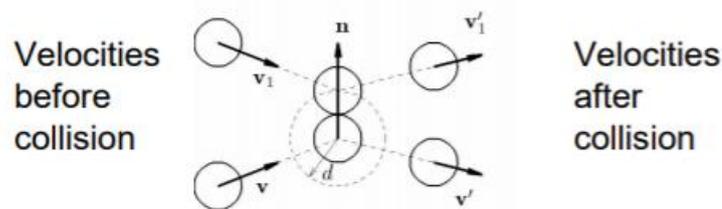


Figura 9. Urto tra due particelle [12].

$$\begin{cases} mv_i + mv_j = mv'_i + mv'_j \\ \frac{mv_i^2}{2} + \frac{mv_j^2}{2} = \frac{mv_i'^2}{2} + \frac{mv_j'^2}{2} \\ r_i \times v_i + r_j \times v_j = r_i \times v'_i + r_j \times v'_j \end{cases}$$

Risolviendo questo sistema si trovano le due equazioni che permettono di calcolare le velocità delle molecole:

$$\begin{cases} v'_i = v_i + [(v_j - v_i) \cdot n]n \\ v'_j = v_j - [(v_j - v_i) \cdot n]n \end{cases}$$

Dove n è un vettore casuale isotropico, esprimibile nel seguente modo:

$$\begin{aligned} n_x &= \cos \theta, & n_y &= \sin \theta \cos(2\pi\alpha_2), & n_z &= \sin \theta \sin(2\pi\alpha_2) \\ \cos \theta &= 1 - 2\alpha_1, & \sin \theta &= \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \end{aligned}$$

Dove α_i è un numero casuale che può assumere un numero da 0 a 1 con la stessa probabilità.

Questo algoritmo è il cuore di ogni codice DSMC, perché, come si vedrà successivamente, serve a descrivere le interazioni tra particelle sotto vari aspetti. Risulta essere anche una delle più grosse differenze rispetto alla dinamica molecolare, dove le collisioni vengono descritte tramite le equazioni del moto.

Questi calcoli devono essere effettuati per ogni coppia di molecole della cella, ponendo però attenzione alle velocità post-urto tra particelle; queste infatti vanno calcolate solo quando avviene la collisione e ciò non è detto che sempre avvenga poiché c'è in gioco il valore che assume la probabilità P_{ij} . Per ogni passo temporale si avrà, quindi, molecole che continuano il loro moto indisturbate mentre altre vedranno cambiare la loro velocità e direzione. Questi procedimenti devono essere effettuati per tutte le celle in cui, inizialmente, si è suddiviso il dominio computazionale.

3) Implementazione delle condizioni al contorno

$$\begin{aligned} X^{**} &= (r_1^{**}, V_1^{**}, \dots, r_N^{**}, V_N^{**}) \\ X^{**} &\rightarrow X^{n+1} \end{aligned}$$

Questa parte è correlata alle caratteristiche del problema preso in esame e risulta essere la parte più specifica. Esistono due differenti tipi di condizioni al contorno che si andrà ad analizzare: contorno impermeabile o permeabile.

- **Contorno impermeabile:** in questo caso il contorno è rappresentato da una superficie solida: le molecole rimbalzano su di esso come su un muro. L'obiettivo, in questo caso, è quello di calcolare la velocità della molecola riflessa partendo dalle caratteristiche della molecola incidente e della parete, $V_r = V_r(V_i, n_w, T_w, \dots)$.

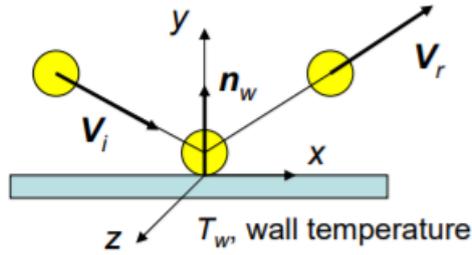


Figura 10. Interazione particella-superficie solida [12].

Durante le simulazioni, per molecole che rimbalzano su pareti solide, vengono applicati i modelli di Maxwell; in particolare ne esistono due che differiscono dal tipo di dispersione che si ha:

- *Modello di Maxwell di dispersione speculare*: la molecola si riflette dalla parete come una palla da biliardo.

$$V_{rx} = V_{ix}, \quad V_{ry} = -V_{iy}, \quad V_{rz} = V_{iz}$$

$$V_r = V_i - 2(V_i \cdot n_w)n_w$$

Lo svantaggio di questo modello è che non tiene conto del flusso di calore e della resistenza al taglio del muro, considerandoli pari a zero, infatti è capace di valutare solo lo sforzo normale.

- *Modello di Maxwell di dispersione diffusiva*: in questo caso si considera una funzione di distribuzione della velocità delle particelle di tipo Maxwelliana:

$$f(V_r) = \frac{n_r}{(2\pi \frac{k}{m} T_w)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{mV_r^2}{2kT_w}\right)$$

La velocità casuale della molecola che rimbalza sulla parete può essere calcolata con l'aiuto dei numeri casuali α_i , di cui si è parlato in precedenza:

$$V_{rx} = \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_w \log \alpha_1 \cos(2\pi\alpha_2)}$$

$$V_{ry} = \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_w \log \alpha_3}$$

$$V_{rz} = \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_w \log \alpha_1 \sin(2\pi\alpha_2)}$$

- **Contorno permeabile:** solitamente è il confine tra il dominio computazionale e quello che c'è all'esterno (che possiamo definire serbatoio); questo contorno permette il libero passaggio simulando l'afflusso/deflusso delle molecole.

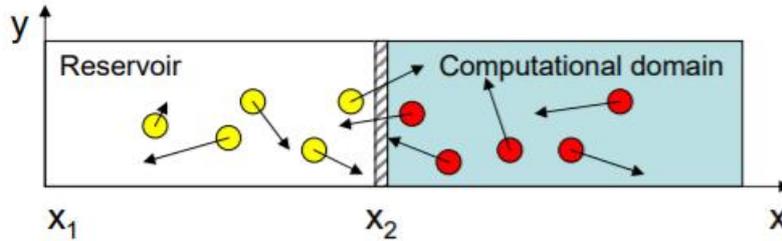


Figura 11. Distinzione tra dominio computazionale e serbatoio delle molecole [12]

Ad ogni time step della simulazione si fanno le seguenti considerazioni:

- 1) Le molecole che escono dal dominio non vengono più considerate per le simulazioni successive.
- 2) Il serbatoio è riempito da un numero di particelle pari a $N_\infty = n_\infty V$, dove V rappresenta il suo volume. Alle molecole vengono assegnate sia delle coordinate in maniera casuale:

$$\begin{cases} x = x_1 + (x_2 - x_1)\alpha_1 \\ y = y_1 + (y_2 - y_1)\alpha_2 \\ z = z_1 + (z_2 - z_1)\alpha_3 \end{cases}$$

che una velocità secondo la distribuzione Maxwelliana:

$$f(V) = \frac{n_\infty}{(2\pi \frac{k}{m} T_\infty)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{m(V - U_\infty)^2}{2kT_\infty}\right)$$

Dove n_∞ è la concentrazione, T_∞ la temperatura e U_∞ la velocità del gas.

$$\begin{cases} V_x = U_{\infty x} + \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_\infty \log \alpha_1 \cos(2\pi \alpha_2)} \\ V_y = U_{\infty y} + \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_\infty \log \alpha_3 \cos(2\pi \alpha_4)} \\ V_z = U_{\infty z} + \sqrt{-2 \frac{k}{m} T_\infty \log \alpha_5 \cos(2\pi \alpha_6)} \end{cases}$$

- 3) Le molecole all'esterno sono tutte in movimento e la loro posizione e velocità cambia seguendo le leggi del moto.
- 4) Le uniche particelle che vengono incluse nella simulazione sono quelle che entrano nel dominio computazionale mentre le altre che restano all'esterno non vengono prese in considerazione.

3. Validazione del metodo

Prima di discutere del lavoro fatto con gli script di SPARTA e del loro confronto con altri risultati in bibliografia si andrà ad analizzare la struttura dei codici forniti da questa libreria.

3.1 SPARTA

Come detto all'inizio di questo studio SPARTA (Stochastic PARallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer) [1] consiste in codici DSMC che permettono di effettuare le simulazioni di gas con una bassa densità, ovvero di gas rarefatti. Le possibili impostazioni del programma permettono di compiere non solo simulazioni sia 2D che 3D, ma anche di lanciare simulazioni su processori singoli, o in parallelo, così da permettere di studiare problemi sia di piccole che grandi dimensioni. Dà la possibilità di impostare varie condizioni iniziali, studiare varie geometrie e impostare diversi calcoli per avere output di vario genere.

La libreria SPARTA è stata sviluppata da Steve Plimptone Micheal Gallis presso i Sandia National Laboratories, istituto che fa parte del dipartimento dell'energia degli Stati Uniti (DOE). Per un utilizzo più fluido di questi codici è stato adoperato il sistema operativo Unix, con il quale la visualizzazione e la modifica dei vari script risulta essere più semplice e immediata.

Una volta scaricata la libreria è possibile accedere ai vari codici messi a disposizione, in particolare sono presenti gli script di esempi semplici (come il flusso attorno a un cilindro sia esso completo che il caso in cui è assial-simmetrico, ma anche esempi per studiare le interazioni tra particelle in un condotto); questo permette di prendere familiarità più velocemente con il programma. Al suo interno ci sono, però, anche i risultati di simulazione più complesse, ad esempio il caso in cui viene preso in esame come corpo solido uno space-shuttle.

Grazie a questi codici sono già stati svolti molti studi, ad esempio una analisi aerodinamica su un satellite [14], che sono stati presi ad esempio per comprendere meglio il funzionamento degli script di SPARTA.

Si inizia con l'analizzare la struttura di un codice SPARTA così da comprendere in maniera più approfondita il suo funzionamento (verranno citati anche i comandi usati che sono tutti spiegati nel dettaglio nel manuale di SPARTA [1]):

- È possibile impostare vari tipi di sistemi di unità di misura tramite il comando *"units"*, anche se, nel caso in esame, è sempre stato usato il sistema internazionale per tutte le simulazioni.

- Come detto in apertura del capitolo, con SPARTA si possono fare simulazioni sia 2D che 3D e questo è possibile tramite l'input *"dimension"*, specificando appunto la dimensione del problema. Anche se viene affrontato uno studio 2D, la terza dimensione non viene del tutto eliminata ma viene considerata di lunghezza unitaria.
- È possibile gestire il box di simulazione nella maniera più appropriata, la sua grandezza infatti è modificabile in base alle esigenze di risultati e al corpo in esame (se presente), con il comando *"create_box"*. Inoltre la gestione della griglia è molto flessibile: dopo aver impostato una macro-suddivisione in celle del box, il codice permette anche una gestione a livelli, permettendo una densità sempre maggiore di celle con l'aumentare di esso. Questo è un passaggio importante in quanto maggiore è il numero di celle (*"create_grid"*), più preciso sarà il valore assunto dai parametri chiesti come output. È possibile gestire nella maniera più consona la regione in cui si vuole un'accuratezza maggiore dei calcoli; tramite il comando *"region"* si possono definire geometrie da semplici a complesse in cui richiedere una griglia con maggior densità. In alternativa si può usare come input *"read_grid"*, in questo caso lo script andrà a leggere un file che si trova nella stessa cartella dove è definita la griglia. Si può richiedere al programma anche una gestione dinamica della griglia, infatti definita una struttura iniziale di essa è possibile farla modificare durante la simulazione in base a diversi criteri possibili, ad esempio si può definire un numero massimo o minimo di particelle in ogni cella; in questo modo se saranno presenti troppe molecole avremo una suddivisione in sotto-celle, al contrario, se ce ne fossero troppe poche, più celle verrebbero compattate in una sola. Questi passaggi sono importanti in quanto una buona gestione del box e della griglia permette di trovare un compromesso tra accuratezza e pesantezza della simulazione. Altra caratteristica che è possibile impostare riguarda la tipologia di bordo del box di simulazione, applicabile in ogni direzione, con comando *"boundary"*.
- Per definire le proprietà globali del sistema si usa il comando *"global"*, con il quale è possibile definire vari parametri e caratteristiche della simulazione. Nel caso in esame verrà usato per definire sia la number density che il rapporto tra particelle reali e di simulazione. Il primo in particolare assume un significato molto importante, in quanto è il parametro che indica il grado di rarefazione del gas, esiste infatti un legame tra la number density e il numero di Knudsen, che passa attraverso il libero cammino medio; quest'ultima grandezza è esprimibile come:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n}$$

di cui si è parlato nel capitolo relativo ai flussi rarefatti.

Si può inoltre esprimere la densità del gas, grandezza che sarà utile nei calcoli di post-processing:

$$\rho = n \frac{M}{N_A}$$

dove M è la massa molare del gas e al denominatore abbiamo il numero di Avogadro $N_A = 6,0221 \cdot 10^{23}$.

Il secondo parametro, invece, permette di impostare quante particelle di simulazione desideriamo mediamente in una cella della griglia:

$$N = \frac{nV_c}{F_{num}}$$

dove n è la number density, V_c il volume della cella e F_{num} il rapporto prima definito.

- Nei codici si possono usare anche vari tipi di gas che però devono essere definiti attraverso un file esterno. Con il comando "*species*" si va a richiamare uno script esterno dentro il quale ci sono le molecole utili per la simulazione con le loro caratteristiche fisiche. Questo processo può essere usato più volte per aggiungere particelle diverse al calcolo. Per definire, invece, la miscela e le sue proprietà si usa "*mixture*"; alle molecole definite precedentemente con "*species*" è possibile assegnare un rapporto che indica quanto è presente quella specie nella miscela. Si possono inoltre definire le grandezze dell'intero composto, come velocità e temperatura. Solitamente, in questi tipi di problemi, si ha come dato il numero di Mach, quindi torna utile sapere il legame tra questa grandezza e la velocità che possiamo ricavare utilizzando la seguente formula:

$$M = \frac{V_\infty}{\sqrt{\gamma \frac{R}{M} T_\infty}}$$

dove le grandezze con pedice ∞ indicano le proprietà del flusso a monte, γ è il rapporto tra calori specifici e R è la costante universale dei gas.

È possibile, inoltre, definire il modello collisionale particella-particella, ovvero come avviene il contatto, quante particelle considerare per una collisione e anche se da uno scontro nascono nuove molecole.

- Definite le caratteristiche del flusso rimane da caratterizzare il corpo immerso in questa corrente, se presente. Anche qui bisogna richiamare da un file esterno la geometria utilizzando "*read_surf*", comando che può anche modificare alcune caratteristiche come la posizione all'interno del box di simulazione o scalare le dimensioni lungo le tre direzioni x , y e z . Con altri input è possibile poi definire la temperatura del corpo, il tipo di interazione con le particelle e altre proprietà ("*surf_collide*" e "*surf_modify*").

- Durante la creazione del codice sono richiesti anche dettagli temporali, ovvero quanto deve durare la simulazione. Questa proprietà si può esplicitare definendo il numero di step da compiere e quanto dura ognuno di esso, rispettivamente con i comandi *"run"* e *"timestep"*.
- Tutti i comandi di cui abbiamo parlato fino ad adesso servono per definire il problema da simulare, rimane adesso da vedere come ricavare da SPARTA gli output desiderati. Per tutti i calcoli si usa il comando *"compute"*, che risulta essere molto duttile in quanto può avere come vari argomenti: si può concentrare lo studio sulla griglia così da determinare i parametri della corrente all'interno del box di simulazione, come la velocità e la densità oppure si possono richiedere i calcoli sulla superficie del corpo, come la forza che il flusso esercita sulla geometria in direzione parallela alla velocità così da poter calcolare la resistenza. Se non richiesto, vengono forniti i valori delle grandezze per ogni cella o elemento di superficie, quindi si avrà una grandezza vettoriale che, però, può essere ridotta ad una scalare così da esplicitare un altro termine, come può essere la media, la somma o il massimo/minimo di una determinata grandezza. Fatti i calcoli, tramite il comando *"dump"*, è possibile stampare i valori delle grandezze in file.
- Sempre con il comando *"dump"* è concessa l'opzione di stampare immagini della simulazione in corso; avendo la possibilità di visualizzare vari elementi come il corpo, la griglia e le particelle che si muovono attraverso il box. Per quanto riguarda la visualizzazione dei risultati in immagini verrà usato anche un altro software: Paraview [15]; in particolare per poter analizzare il comportamento dei vari parametri in prossimità del corpo solido.
- Altro output che è possibile richiedere consiste in un file che salva lo stato della simulazione (comando *"restart"*). Questo è utile in quanto la simulazione verrà suddivisa in due parti. Nella prima il corpo si troverà improvvisamente investito da una corrente, quindi si vedranno le proprietà intorno ad esso cambiare continuamente, questo costituirà il transitorio che continuerà fino a che le grandezze non convergeranno fino ad un valore statisticamente stazionario. È proprio in questo codice che si inserisce il comando citato prima così da salvare lo stato del box giunto in condizioni statisticamente stazionarie. Il file ricevuto come output fungerà da input per la seconda parte, che consisterà in un nuovo script dove la nuova condizione iniziale sarà il salvataggio fatto in quella precedente (letta con il comando *"read_restart"*); in questo nuovo codice è possibile omettere varie informazioni perché salvate nel file di partenza, come, ad esempio, la griglia e il corpo usati.

3.2 Visualizzazione dei risultati

In questo capitolo si analizzeranno prima le impostazioni iniziali del problema e dopo i suoi risultati.

La simulazione verte sullo studio di una sfera 3D posta in una corrente rarefatta; questa analisi si può compiere con un calcolo 3D, ma in questo caso si è sfruttato la soluzione assial-simmetrica per rendere il costo di calcolo più leggero e con una durata di simulazione minore ma con soluzioni altrettanto accurate.

Per quanto riguarda la dimensione della sfera, si è lasciato invariato il file di descrizione dell'oggetto, assicurando però che la sua origine sia centrata nel dominio di calcolo. Come caratteristiche del corpo vengono esplicitate la temperatura e l'accommodation coefficient, ovvero un coefficiente compreso tra 0 e 1 che imposta la percentuale di collisioni diffuse che avvengono sulla superficie, mentre le restanti risultano speculari.

Le dimensioni del box sono una conseguenza diretta della dimensione del corpo in esame, in quanto il box dovrà risultare essere abbastanza grande per permettere di visualizzare ottimamente tutti i fenomeni che avvengono attorno al cilindro mentre, al contrario, le celle sono state create in modo che risultino abbastanza piccole così che possano fornire informazioni accettabili sui vari parametri. Si è anche specificata una regione del box in cui si è stato creato un sottolivello così da poter suddividere la cella iniziale in più sotto-celle, ovvero in 4 (2x2); questa zona ha lo stesso tipo di geometria del box grande ma con dimensioni minori (il centro di questa regione coinciderà con il centro del cilindro).

Nella seguente tabella sono indicate le varie grandezze geometriche e anche l'immagine risultante della griglia usata per discretizzare il dominio di calcolo:

	Dimensione
Raggio del cilindro	6 m
Box	36 m x 18 m
Griglia	180 x 90
Regione di infittimento	12 m x 6 m

Tabella 2. Grandezze geometriche del dominio computazionale.

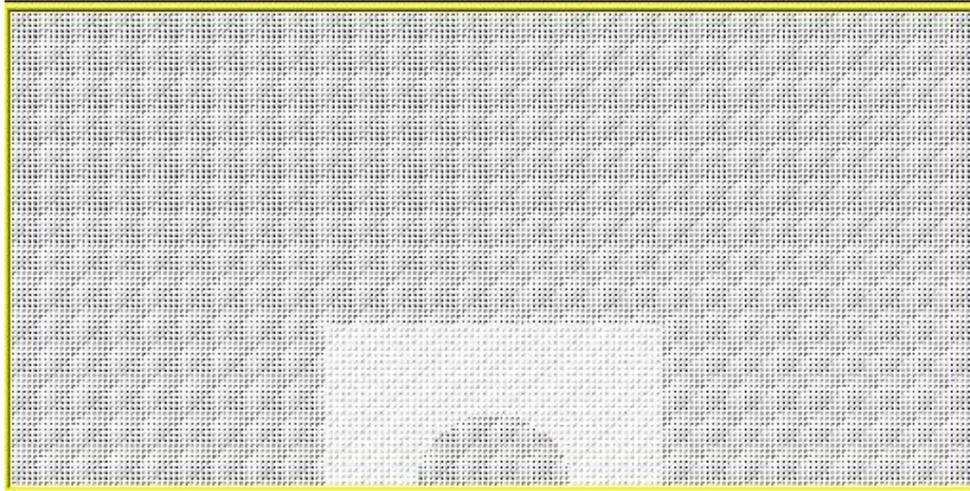


Figura 12. Suddivisione del box di simulazione in celle.

Una volta definite queste grandezze geometriche, il passo successivo è stato quello di esplicitare le caratteristiche del gas che utilizziamo nella simulazione. La scelta per la miscela è ricaduta sull'aria, in modo da rappresentare situazioni che possiamo trovare ad elevate altitudine nell'atmosfera terrestre. Per completare la configurazione del flusso si è avuto bisogno di associare una temperatura e una velocità; quest'ultima sarà da calcolare in quanto come condizione del problema si utilizza il Mach, variabile adimensionata, imposto pari a $M=3$, con direzione parallela all'ascisse. È stato anche possibile definire il tipo di reazioni chimiche che avvengono nel caso di urto particella-particella; si è scelto di utilizzare il modello TCE (Total Collision Energy) di Bird, che usa la teoria cinetica per definire la probabilità di reazione basandosi su velocità di reazioni note e misurate [12].

Per quanto riguarda il grado di rarefazione è stato scelto $Kn=1000$ perché risulta essere un valore per il quale le simulazioni non risultano essere troppo pesanti e si trovano anche esempi in bibliografia con cui fare un confronto. Tramite le equazioni mostrate in precedenza da questo numero adimensionato si è passati alla number density che è l'input da inserire nel codice.

Una volta determinate la number density e la griglia, in particolare il volume delle celle, si può pensare di poter calcolare il rapporto tra molecole reali e quelle di simulazione. Per poter decidere il valore che deve assumere tale variabile si deve stimare quante particelle di simulazioni si vuole avere in media in ogni cella. Ci sono molte teorie su questo aspetto del modello DSMC, la più usata prevede che ci siano in media tra 20-30 molecole per ogni cella [16]. Questo calcolo è stato fatto considerando il volume delle celle vicino al corpo, ovvero quelle più piccole, e imponendo il valore medio delle particelle di simulazione pari a 20; in questo modo nelle zone vicino all'oggetto si cerca di garantire il numero minimo di molecole, dove i calcoli devono essere più precisi.

Di seguito si riassumono le condizioni iniziali del problema:

Variabile	Dimensione
Number density	$2,14 \times 10^{14} \text{ 1/m}^3$
F_{num}	$1,07 \times 10^{11}$
V_{∞}	495 m/s
T_{∞}	68 K
T_w	300 K
Accommodation coefficient	0,61

Tabella 3. Parametri di input della simulazione

Dato un valore a tutti i parametri che caratterizzano il problema si può procedere alla parte di simulazione. L'intero calcolo è suddiviso in due parti, come fatto già in altri lavori [17]:

- Il primo descrive il transitorio, ovvero parte dalla condizione di vuoto intorno al corpo e finisce quando le grandezze hanno raggiunto una condizione statisticamente stazionaria. In particolare si è fatto riferimento alla temperatura media di tutta la simulazione, e si è seguito il suo andamento finché non ha assunto un valore costante;
- Il secondo considera il periodo di campionamento, verranno prese in considerazione le grandezze a fine di questa simulazione.

Adesso si passa all'analisi dei risultati; da SPARTA si è ottenuto come output dei file di testo, che per avere una lettura più rapida e una comprensione dei dati migliore sono stati trasformati in immagini tramite il software Paraview [15].

Si mostreranno degli screenshot e si farà un'analisi delle seguenti grandezze fisiche: temperatura, densità, pressione e la velocità parallela all'ascisse.

Si inizia dalla temperatura, che è anche la variabile che ha permesso di dividere in periodi l'intera simulazione:

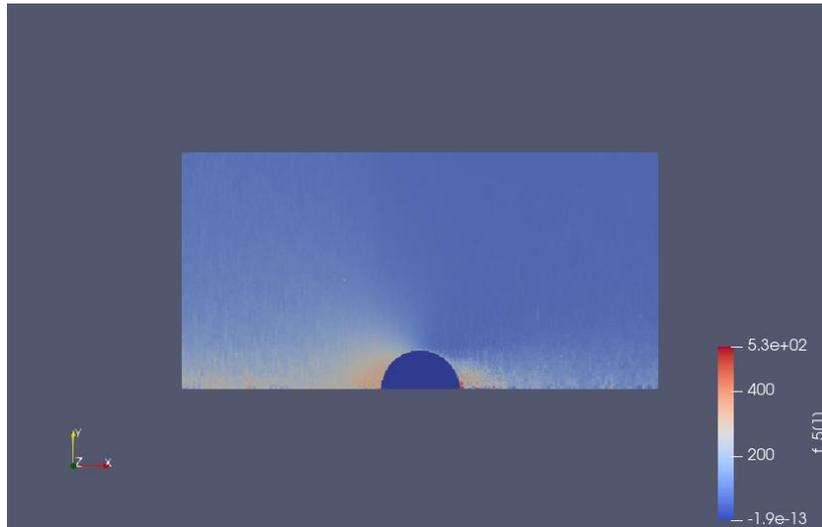


Figura 13. Campo di temperatura intorno alla sfera.

A fine simulazione si è raggiunta una temperatura media dell'intero box pari a $T_m \cong 118 \text{ K}$. Questi dati prendono in considerazione solo i valori della griglia escludendo il corpo. Si può osservare però come questo abbia riscaldato l'ambiente circostante; in particolare se si analizzasse la zona in prossimità di esso, se questo fosse stato solo un corpo rigido senza scambio termico, la temperatura sarebbe stata prossima a quella totale o di arresto:

$$T^\circ = T_\infty \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \cong 190 \text{ K}$$

Visto che, però, il corpo possiede una sua temperatura si ha un ulteriore riscaldamento delle molecole. L'effetto combinato dell'arresto della corrente con lo scambio di calore avvenuto da corpo e flusso ha fatto in modo che il gas vicino alla sfera arrivasse a temperature prossime anche ai 500 K.

Passando alla densità, si è prima calcolato il suo valore per la corrente indisturbata utilizzando la number density e sapendo che il gas che si sta trattando è aria:

$$\rho = n \frac{M}{N_A} = 1,028 \cdot 10^{-11} \text{ Kg/m}^3$$

Come condizione finale avremo:



Figura 14. Campo di densità attorno alla sfera.

Si osserva come a monte del corpo si ha un aumento di densità dovuto alle particelle che colpiscono il corpo e vedono la loro direzione cambiare mentre a valle si ha una zona di vuoto a causa della bassa densità del flusso. Per questo parametro è interessante osservare un'immagine dove sono mostrate le particelle, in particolare quelle usate per la simulazione che sono comunque legate a quelle reali tramite il rapporto F_{num} :

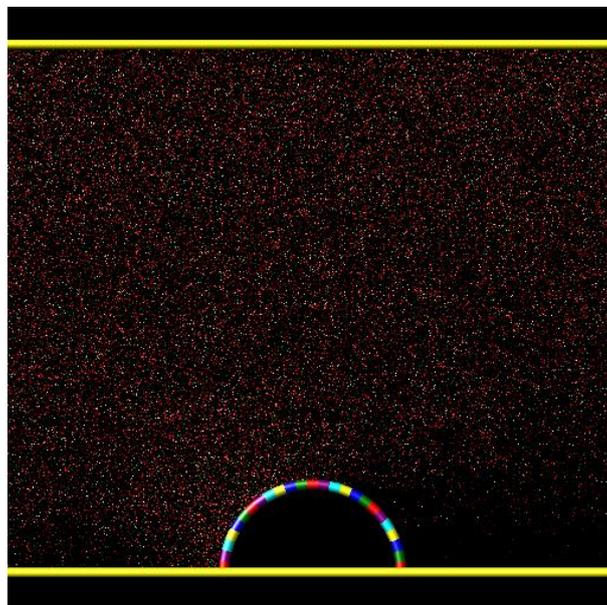


Figura 15. Distribuzione delle particelle intorno alla sfera.

L'immagine proviene da SPARTA e si può osservare molto bene come dietro il corpo non siano presenti particelle. Questa peculiarità sarà più evidente con la pressione, più nel dettaglio per

quanto riguarda il coefficiente di pressione che avrà i valori relativi a quella zona prossimi allo zero.

Andiamo a vedere l'istantanea finale che riguarda la pressione:

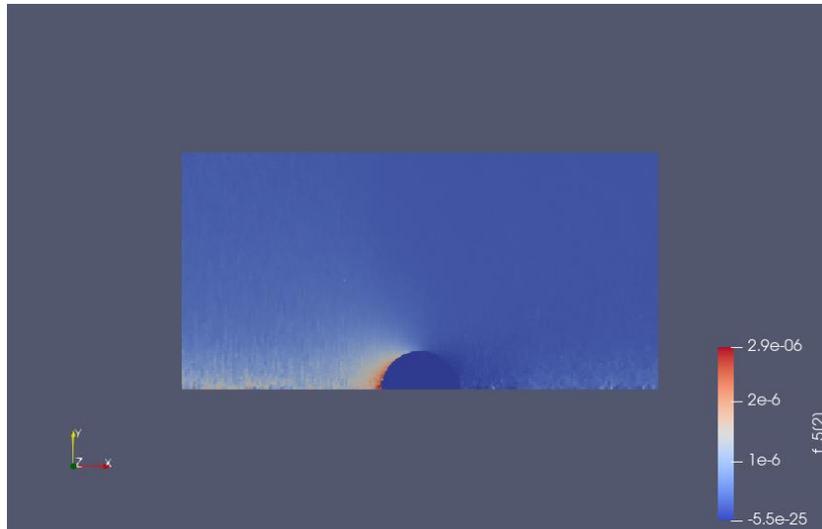


Figura 16. Campo di pressione intorno alla sfera.

La situazione risulta analoga a quella densità.

L'ultima diapositiva riguarda la velocità, per la quale si è considerato solo la componente orizzontale, ovvero quella parallela alla corrente indisturbata. Il contributo verticale risulta minimo e quindi trascurato.

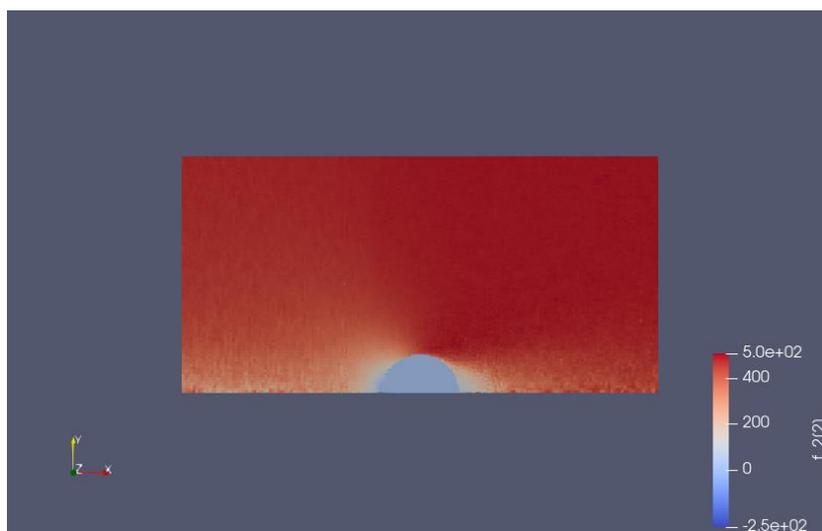


Figura 17. Campo di velocità intorno alla sfera.

Dalla velocità si osserva in maniera più chiara l'effetto indotto dal corpo, infatti si vede un brusco decremento della sua intensità che dopo arriva fino ad essere nulla in prossimità della superficie. A valori più bassi del numero di Knudsen questi effetti verrebbero associati al fenomeno dell'urto, ma visti i valori di tale parametro a cui sono svolte le simulazioni, tale discontinuità può essere quantificata in funzione del libero cammino medio.

3.3 Confronto dei dati

Si passa ora al calcolo di due parametri adimensionali che permettono di capire il comportamento che assume il corpo investito dalla corrente:

- Il coefficiente di resistenza C_D ,
- Il coefficiente di pressione C_p .

Per quanto riguarda il primo, da SPARTA si è richiesto il calcolo della somma di tutti i contributi della forza in direzione parallela al flusso, che corrisponde alla resistenza. Ottenuti i risultati, è stato ricavato il coefficiente di resistenza della sfera dalla sua formula classica, utilizzando i dati a disposizione:

$$C_D = \frac{D}{\frac{1}{2} \rho_{\infty} V_{\infty}^2 \pi R^2} = 2,91$$

Per il coefficiente di pressione, dalla simulazione si è ottenuto la distribuzione della pressione in direzione normale alla superficie; si è calcolato il valore di tale variabile su tutto il dorso del corpo tramite le seguenti formule:

$$C_p = \frac{p - p_{\infty}}{\frac{1}{2} \rho_{\infty} V_{\infty}^2}$$

Dove per trovare la pressione di monte si è usato la legge dei gas perfetti:

$$p_{\infty} = \rho_{\infty} \frac{R}{MM} T_{\infty} = 2,01 \cdot 10^{-7} Pa$$

In questo modo è stato ottenuto il grafico con l'andamento di tale variabile:

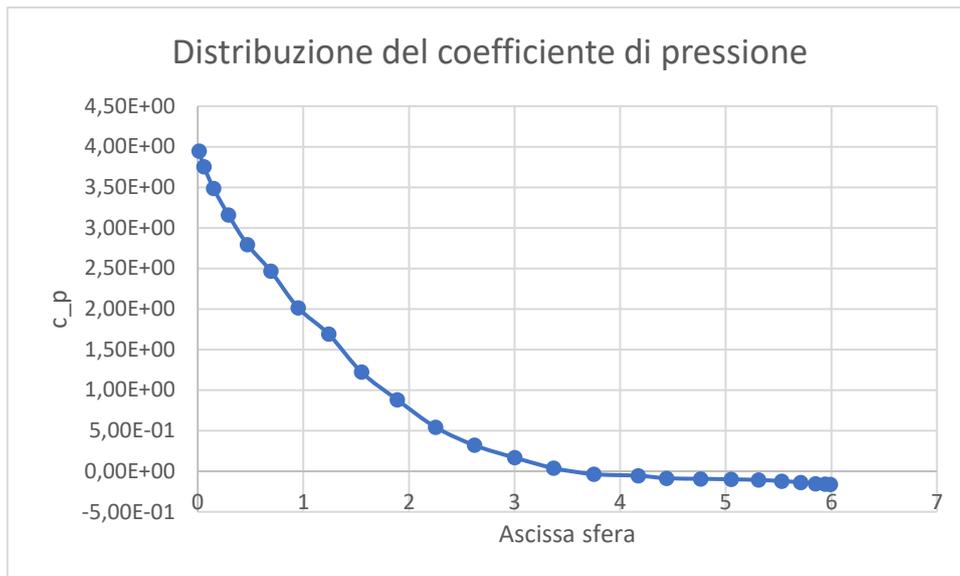


Figura 18. Variazione del coefficiente di pressione sul dorso della sfera.

Rimane da paragonare i risultati ottenuti da queste simulazioni con altre fonti. Il primo confronto è stato eseguito con un programma interattivo sviluppato G. Bird [18]. In questo semplice eseguibile è possibile simulare un flusso a vari gradi di rarefazione attorno a geometrie semplici, avendo anche l'opzione di variare alcuni parametri. Di seguito si mostrano le variabili modificate rispetto alle impostazioni standard per l'analisi di una sfera, in modo da poterlo paragonare con il problema in esame:

Mach	3
Knudsen	1000
$(T_w - T)/(T_0 - T)$	0,85
% specular reflection	40
Body size	0,2
Body location	0,5

Tabella 4. Dati di input dell'eseguibile di Bird.

Il programma fornisce a video immediatamente vari output della simulazione, quelli più di interesse sono i due coefficienti di cui si è parlato precedentemente che assumo il seguente valore, per quello di resistenza, e andamento, per quando riguarda quello di pressione:

$$C_D = 2,78$$

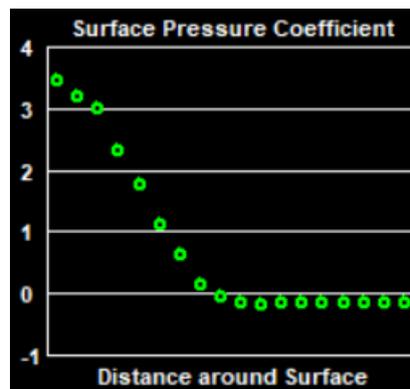


Figura 19. Distribuzione del coefficiente di pressione secondo l'eseguibile di Bird [18].

Per il coefficiente di resistenza si osserva che è leggermente più basso rispetto a quello trovato con SPARTA, questa differenza può essere data dal fatto che sull'eseguibile non è stato specificato nessun tipo di gas ed inoltre utilizza una griglia di calcolo relativamente rada e non è fornita la possibilità di infittirla.

Osservando il C_p , invece, si nota che hanno lo stesso andamento e che verso la metà della sfera questo diventa così piccolo da essere quasi nullo.

La differenza più grande, quindi, si nota nel C_D per il quale si può andare ad analizzare altri lavori presenti in bibliografia. Ad esempio il seguente studio [19] analizza interamente il caso di una sfera immersa in un flusso rarefatto e mette a confronto il proprio metodo con altri già validati per calcolare il coefficiente di resistenza. Il risultato di questa ricerca ha prodotto il seguente grafico che mostra il variare del parametro di interesse in funzione del Reynolds e del Knudsen, per vari valori del Mach:

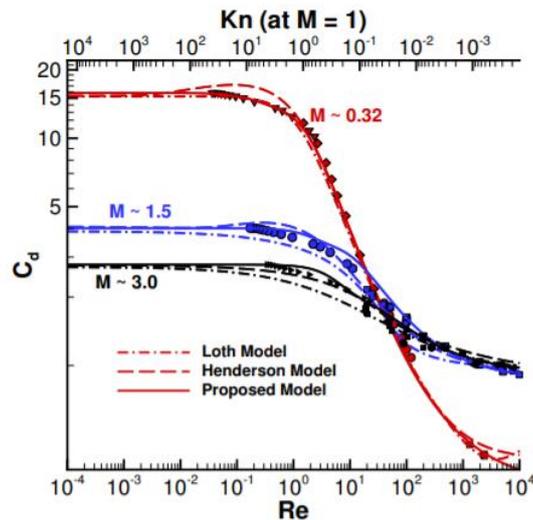


Figura 20. Variazione del coefficiente di resistenza in funzione del Reynolds e del Knudsen [19].

Per il caso preso in esame a $M=3$ e $Kn=1000$ osserviamo che il valore del coefficiente è compreso tra:

$$C_D = 2,8 \div 2,9$$

Questi valori appaiono in linea con i risultati ottenuti, se si tiene conto l'incertezza sulla condizione al contorno a parete e in particolare sull'accommodation coefficient.

Il problema preso in esame si basa su molte variabili, e non è sempre facile trovare lavori in cui tutti siano stati espressi. Ad esempio l'accommodation coefficient ha una grande influenza, per fare un esempio si può andare a modificarlo sul programma di Bird, dove si imposta la percentuale di riflessioni speculari che desideriamo. Andando ad impostare una volta il valore massimo e poi quello minimo si ottengono i seguenti risultati:

Accommodation coefficient	%Specular reflection	C_D
1	0	3,06
0	100	2,36

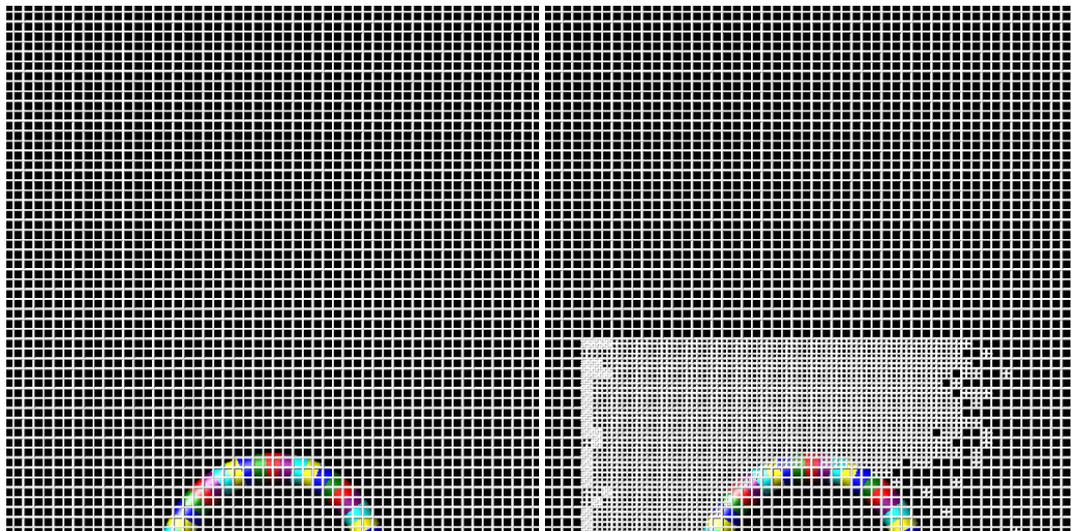
Tabella 5. Variazione del coefficiente di resistenza in funzione dell'accommodation coefficient

Si osserva un grande range di valori che il coefficiente di resistenza può assumere al variare dell'accommodation coefficient, che si ricorda indica la percentuale di riflessioni che avvengono in maniera diffusiva. Questo è un parametro non facilmente identificabile, infatti dipende da varie caratteristiche e per un solito gas può assumere più valori in base alle altre condizioni del problema [20], ad esempio questo coefficiente può essere funzione delle temperature del corpo, delle particelle indisturbate e di quelle che hanno interagito con il corpo per le quali si hanno variazioni di temperature dovute al fenomeno di scambio termico.

3.4 Griglia dinamica

Le simulazioni svolte nei capitoli precedenti si basavano su una griglia che manteneva la sua struttura costante per tutta la durata della prova. Tramite il codice SPARTA è, però, possibile creare una griglia dinamica tramite opportuni comandi. Definita una discretizzazione di partenza, questa può modificarsi autonomamente in base a vari criteri, andando a suddividere una cella, chiamata madre, in più sotto-celle oppure eseguire il processo inverso raggruppando più celle in una sola. Queste modifiche vengono compiute dal programma a seconda del valore assunto da una determinata variabile, come può essere il numero di particelle o il valore di una grandezza fisica all'interno di una singola cella, o ancora si possono andare a modificare solo le celle che contengono uno o più elementi della superficie solida.

In questo caso si è optato per il conteggio delle particelle contenute in ogni cella; infatti come detto precedentemente è importante avere un numero compreso tra 20 e 30 particelle per ottenere dei buoni risultati con il metodo DSMC; ciò vuol dire che se il conteggio supera il valore di 30, la cella madre viene suddivisa in due mentre se si dovesse scendere al di sotto di 20 ne verrebbe creata una da due o più celle. Andando nel particolare, la griglia iniziale è leggermente meno densa del primo caso ed inoltre risulta essere tutta omogenea, senza una zona più fitta; si sono però mantenute le grandezze geometriche di tale zona per creare il gruppo di celle che si potranno modificare dinamicamente con l'avanzare della simulazione. Nelle immagini seguenti si può osservare l'evoluzione della griglia:



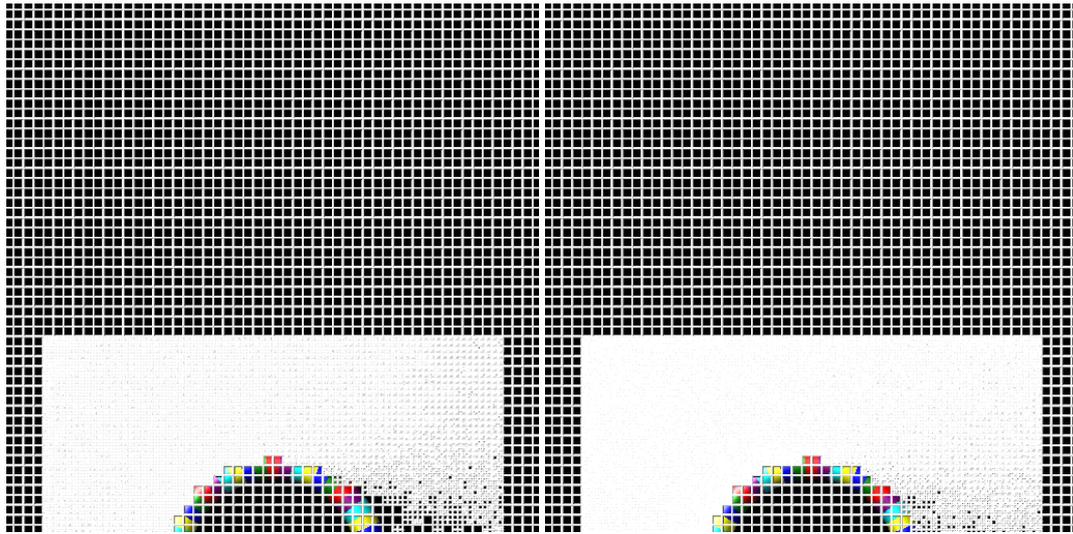


Figura 21. Evoluzione della griglia nel tempo.

Per quanto riguarda gli altri parametri di input, sono rimasti gli stessi definiti nei capitoli precedenti, così da poter ottenere un confronto diretto tra le due soluzioni. Altra differenza, oltre alla griglia, rispetto allo script precedente è che non si è stato richiesto la creazione dei file di “restart”, in quanto richiedevano troppo spazio di memoria per essere creati e non permettevano lo svolgersi della simulazione.

Si analizzano ora i risultati ottenuti per quanto riguarda il coefficiente di resistenza e di pressione:

$$C_D = 2,92$$

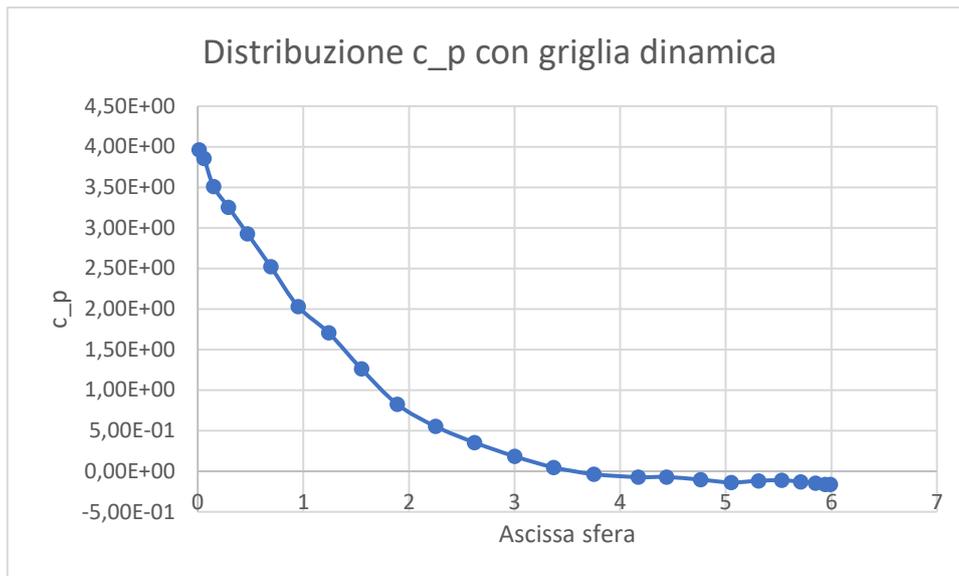


Figura 22. Distribuzione del coefficiente di pressione con griglia dinamica

Non si notano differenze sostanziali tra le due simulazioni con tipi di griglia differenti ($C_D = 2,91$ e vedi Figura 18 per il c_p nel caso di griglia statica), per quanto riguarda il coefficiente di resistenza si possono considerare simili e anche quello di pressione mostra lo stesso andamento con dei valori iniziali e finali similari. Per questo secondo parametro è possibile fare un appunto sui valori assunti dalla pressione sulla schiena della sfera (osservando il grafico i valori più a destra): nel caso di griglia fissa era risultato nullo solo il valore nell'ultima stazione mentre per la griglia dinamica assume un valore pari a zero nelle ultime due stazioni; ciò significa che in questo caso la zona che rimane a pressione nulla a causa della presenza del corpo solido è maggiore.

Analizzati i risultati si può concludere che i due metodi risultano analoghi per ottenere dei risultati attendibili, però risulta conveniente usare il codice con la griglia fissa poiché richiede un tempo di calcolo inferiore. Queste osservazioni valgono perché abbiamo deciso di lasciare invariati i parametri iniziali del problema, la griglia dinamica può assumere una valenza superiore a numeri di Knudsen più bassi, dove la number density risulta più elevata e nel dominio computazionale sono presenti più particelle da seguire; oppure a parità di problema può far ottenere lo stesso tipo di risultati andando ad aumentare il rapporto tra molecole reale e quelle di simulazione (parametro F_{num}) andando, quindi, a diminuire la complessità del calcolo (i risultati sarebbero forniti da un numero minore di molecole di simulazione), infatti a parità di questa variabile la densità di celle finale è risultata essere maggiore nel caso di griglia dinamica (confronta Figura 12 con 21).

4 Conclusioni

Il codice SPARTA risulta essere molto efficace per eseguire simulazioni su flussi rarefatti in quanto unisce la capacità di descrivere geometrie molto complesse con un'elevata libertà nello scegliere le proprietà del gas. In questo elaborato lo studio si è soffermato su una geometria sferica che risulta essere la base di partenza per studiare corpi da geometrie più complesse come può essere una capsula che rientra in atmosfera. La possibilità di discretizzare il corpo in un insieme di punti e linee che fornisce SPARTA permette di ricavare superfici più complesse, ad esempio quella di un razzo o un satellite che possono trovarsi ad operare in ambiente rarefatto durante la loro missione. Altra futura applicazione possibile è lo studio di viaggi interplanetari e atterraggi su altri pianeti, infatti conoscendo la composizione dell'atmosfera di un altro pianeta, come può essere Marte (pianeta che presenta un'atmosfera estremamente rarefatta) sul quale si stanno concentrando gli sforzi in questi anni, è possibile compiere gli studi sui vari parametri che influiscono l'atterraggio in modo da assicurare la maggior sicurezza possibile.

Bibliografia

- [1] Direct Simulation Monte Carlo on petaflop supercomputers and beyond, S. J. Plimpton, S. G. Moore, A. Borner, A. K. Stagg, T. P. Koehler, J. R. Torczynski, M. A. Gallis, *Physics of Fluids*, 31, 086101 (2019).
- [2] Risorse di calcolo fornite hpc@polito, progetto di Academic Computing del Dipartimento di Automatica e Informatica presso il Politecnico di Torino (<http://www.hpc.polito.it>).
- [3] Zhang, Y., Paxton, L. J., & Jones, J. C. (2018). Introduction to NASA Living With a Star Institute special section on low Earth orbit satellite drag: Science and operational impact. *Space Weather*, 16, 9
- [4] E. M. Gaposchkin and A.J. Coster. Analysis of Satellite Drag. *The Lincoln Laboratory Journal*, Volume 1, Number 2 (1988)
- [5] George Dettleff, Plume flow and plume impingement in space technology, *Progress in Aerospace Sciences*, Volume 28, Issue 1, 1991, Pages 1-71, ISSN 0376-0421, [https://doi.org/10.1016/0376-0421\(91\)90008-R](https://doi.org/10.1016/0376-0421(91)90008-R).
- [6] T.C. Lilly¹, C. Ngalande¹, S.F. Gimelshein², A.D. Ketsdever² and A.A. Alexeenko². Nozzle Plume Impingement on Spacecraft Surfaces: Effects of Surface Roughness.
¹University of Southern California, Dept. of Aerospace and Mechanical Eng. Los Angeles, CA 90089 USA
²US Air Force Academy, Dept. of Astronautics, Colorado Springs, CO 80840 USA
- [7] Ivanov, Mikhail & Khotyanovsky, Dmitry & Kudryavtsev, Alexey & Vashchenkov, Pavel & Markelov, Gennady & Schmidt, Alexander. (2004). Numerical Study of Backflow for Nozzle Plumes Expanding into Vacuum. 37th AIAA Thermophysics Conference. 10.2514/6.2004-2687.
- [8] He Bijiao, Zhang Jianhua, Cai Guobiao. Research on vacuum plume and its effects. School of Astronautics, Beihang University, Beijing 100191, China.
- [9] Georg Dettleff, Martin Grabe. Basics of Plume Impingement Analysis for Small Chemical and Cold Gas Thrusters. DLR Göttingen, Institute of Aerodynamics and Flow Technology, Spacecraft Section, 37073 Göttingen, Germany.
- [10] Brewer, David A., "Plume Contamination Measurements of an Additively-Printed GOX/ABS Hybrid Thruster" (2018). All Graduate Theses and Dissertations. 7072. <https://digitalcommons.usu.edu/etd/7072>

- [11] Bengt Sundén, Juan Fu, Chapter 4 - Low-Density Heat Transfer: Rarefied Gas Heat Transfer, Editor(s): Bengt Sundén, Juan Fu, Heat Transfer in Aerospace Applications, Academic Press, 2017, Pages 45-70, ISBN 9780128097601, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809760-1.00004-1>.
- [12] G.A. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Clarendon, Oxford, 1994.
- [13] Francis J. Alexander and Alejandro L. Garcia. The Direct Simulation Monte Carlo Method. Computers in Physics, Vol. 11, No. 6, Nov/Dec 1997.
- [14] Runco, John J., "Computational Aerothermodynamic Analysis of Satellite Trans-Atmospheric Skip Entry Survivability" (2019). Theses and Dissertations. 2230.
- [15] Ahrens, James, Geveci, Berk, Law, Charles, *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*, Visualization Handbook, Elsevier, 2005, ISBN-13: 978-0123875822
- [16] Rodrigo Cassineli Palharini, Atmospheric Reentry Modelling Using an Open-Source DSMC Code. University of Strathclyde Department of Mechanical & Aerospace Engineering.
- [17] A. G. Klothakis, I. K. Nikolos, T. P. Koehler, M. A. Gallis, S. J. Plimpton. Validation Simulations of the DSMC Code SPARTA. Technical University of Crete, School of Production Engineering and Management. SAND2016-6635C.
- [18] DSMC resources from Graeme Bird. <http://www.gab.com.au>
- [19] Narendra Singh¹, Michael Kroells², Chenxi Li³, Eric Ching¹, Matthias Ihme¹, Christopher J. Hogan³, and Thomas Schwartzentruber². A General Drag Coefficient for Flow over a Sphere. ¹Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford, CA 94305, USA. ²Department of Aerospace Engineering and Mechanics, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455, USA. ³Department of Mechanical Engineering, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455, USA.
- [20] S. Song and M. M. Yovanovich. Correlation of thermal accommodation coefficient for engineering surfaces. Thermal Engineering Group, Department of Mechanical Engineering, University of Waterloo, Ontario, Canada.

Script

Cilindro 2D assial-simmetrico

```
units                si

seed                12345
dimension           2
global              gridcut 0.0 comm/sort yes

boundary            o ar p

create_box          -18 18 0 18 -0.5 0.5
region             a1 block -6 6 0 6 -0.5 0.5 side in
region             a2 cylinder z 0 0 3 -0.5 0.5 side out
region             a3 intersect 2 a1 a2
create_grid         180 90 1 levels 2 region 2 a3 2 2 1

balance_grid        rcb cell

global              nrho 2.14e14 fnum 1.07e11 weight cell radius

species             air.species N2 O2 N O NO NO+ e
mixture            air N2 O2 N O NO NO+ e vstream 495.0 0 0 &
                  temp 68.0
mixture            air N2 frac 0.79
mixture            air O2 frac 0.21
mixture            air NO+ e group SELF
mixture            air N2 O2 N O NO group neutrals

mixture            air_ambi N2 O2 N O NO NO+ vstream 495.0 0 0 &
                  temp 68.0
mixture            air_ambi N2 frac 0.79
mixture            air_ambi O2 frac 0.21

fix                in emit/face air_ambi xlo twopass
collide            vss air air.vss
collide_modify     vibrate smooth ambipolar yes

fix                ambi ambipolar e NO+
react              tce air.tce

read_surf          data.circle origin 5 5 0 &
                  trans -5 -5 0 clip

surf_collide       1 diffuse 300.0 0.61
surf_modify        all collide 1
surf_react         surf_ch prob air.surf
```

```

timestep                8.0e-5

compute                 2 grid all all massrho u v
fix                     2 ave/grid all 1 10 100 c_2[*] ave one
dump                    2 grid all 100 tmp_flow.* id xc yc f_2[*]

compute                 5 thermal/grid all all temp press
fix                     5 ave/grid all 1 10 100 c_5[*] ave one
dump                    5 grid all 100 tmp_temp.* id f_5[*]

compute                 55 reduce ave f_5[1]

compute                 3 surf all all press fx fy ke erot evib etot
fix                     3 ave/surf all 1 10 100 c_3[*] ave one
dump                    3 surf all 100 tmp_surf.* id f_3[*]

compute                 33 reduce sum f_3[2]
compute                 333 reduce ave f_3[1]

compute                 4 eflux/grid all air heatx heaty
fix                     4 ave/grid all 1 10 100 c_4[*] ave one
dump                    4 grid all 100 tmp_heat.* id f_4[*]

restart                 1000 axi.restart

dump                    6 image all 1000 image.*.ppm type type pdiam
0.02 &
                        size 512 512 particle yes &
                        gline yes 0.01 &
                        surf proc 0.05 zoom 2.0

dump_modify             6 pad 4

stats                   200
stats_style              step cpu np nscoll nscheck c_55 c_33 c_333

run                      12000

```

Re-start per cilindro 2D assial-simmetrico

```
read_restart      axi.restart.10000 gridcut -1.0

seed              12345
global            gridcut 0.0 comm/sort yes

balance_grid     rcb cell

global            nrho 2.14e14 fnum 1.07e11 weight cell radius

mixture          air N2 O2 N O NO NO+ e vstream 495.0 0 0 &
temp 68.0
mixture          air N2 frac 0.79
mixture          air O2 frac 0.21
mixture          air NO+ e group SELF
mixture          air N2 O2 N O NO group neutrals

mixture          air_ambi N2 O2 N O NO NO+ vstream 495.0 0 0 &
temp 68.0
mixture          air_ambi N2 frac 0.79
mixture          air_ambi O2 frac 0.21

fix              in emit/face air_ambi xlo twopass
collide          vss air air.vss
collide_modify   vibrate smooth ambipolar yes

fix              ambi ambipolar e NO+
react            tce air.tce

surf_collide     1 diffuse 300.0 0.61
surf_modify      all collide 1
surf_react       surf_ch prob air.surf

timestep         2.0e-4

compute          2 grid all all massrho u v
fix              2 ave/grid all 1 10 100 c_2[*] ave one
dump             2 grid all 100 tmp_flow.* id xc yc f_2[*]

compute          5 thermal/grid all all temp press
fix              5 ave/grid all 1 10 100 c_5[*] ave one
dump             5 grid all 100 tmp_temp.* id f_5[*]

compute          55 reduce ave f_5[1]

compute          3 surf all all press fx fy ke erot evib etot
fix              3 ave/surf all 1 10 100 c_3[*] ave one
dump             3 surf all 100 tmp_surf.* id f_3[*]

compute          33 reduce sum f_3[2]

compute          4 eflux/grid all air heatx heaty
fix              4 ave/grid all 1 10 100 c_4[*] ave one
dump             4 grid all 100 tmp_heat.* id f_4[*]
```

```
dump          6 image all 1000 image.*.ppm type type pdiam 0.002 &
              size 512 512 particle yes &
              gline no 0.01 &
              surf proc 0.02 zoom 3.5
dump_modify  6 pad 4
stats        200
stats_style  step cpu np nscoll nscheck c_55 c_33
run          10000
```

Cilindro 2D assial-simmetrico con griglia dinamica

```
units                si

seed                 12345
dimension            2
global               gridcut 0.0 comm/sort yes

boundary             o ar p

create_box           -18 18 0 18 -0.5 0.5
region               a1 block -6 6 0 6 -0.5 0.5 side in
region               a2 cylinder z 0 0 3 -0.5 0.5 side out
region               a3 intersect 2 a1 a2
create_grid          120 60 1

balance_grid         rcb cell

group                mesh grid region a3 all

global               nrho 2.14e14 fnum 1.07e11 weight cell radius

species              air.species N2 O2 N O NO NO+ e
mixture              air N2 O2 N O NO NO+ e vstream 495.0 0 0 &
                    temp 68.0
mixture              air N2 frac 0.79
mixture              air O2 frac 0.21
mixture              air NO+ e group SELF
mixture              air N2 O2 N O NO group neutrals

mixture              air_ambi N2 O2 N O NO NO+ vstream 495.0 0 0 &
                    temp 68.0
mixture              air_ambi N2 frac 0.79
mixture              air_ambi O2 frac 0.21

fix                  in emit/face air_ambi xlo twopass
collide              vss air air.vss
collide_modify       vibrate smooth ambipolar yes

fix                  ambi ambipolar e NO+
react                tce air.tce

read_surf            data.circle origin 5 5 0 &
                    trans -5 -5 0 clip

surf_collide         1 diffuse 300.0 0.61
surf_modify          all collide 1
surf_react           surf_ch prob air.surf

timestep             8.0e-5
```

```

compute          2 grid all all massrho u v
fix              2 ave/grid all 1 10 100 c_2[*] ave one
dump            2 grid all 100 tmp_flow.* id xc yc f_2[*]

compute          5 thermal/grid all all temp press
fix              5 ave/grid all 1 10 100 c_5[*] ave one
dump            5 grid all 100 tmp_temp.* id f_5[*]

compute          55 reduce ave f_5[1]

compute          3 surf all all press fx fy ke erot evib etot
fix              3 ave/surf all 1 10 100 c_3[*] ave one
dump            3 surf all 100 tmp_surf.* id f_3[*]

compute          33 reduce sum f_3[2]

compute          4 eflux/grid all air heatx heaty
fix              4 ave/grid all 1 10 100 c_4[*] ave one
dump            4 grid all 100 tmp_heat.* id f_4[*]

dump            7 image all 1000 zoom.*.ppm type type pdiam 0.02 &
                size 512 512 particle no &
                gline yes 0.01 &
                surf proc 0.05 zoom 4.0

dump_modify     7 pad 4

fix              griglia adapt 200 mesh refine coarsen particle
20 30

stats           200
stats_style     step cpu np nscoll nscheck c_55 c_33

run             10000

```

Ringraziamenti

Vorrei dedicare qualche riga a tutti coloro che mi sono stati vicini in questo percorso. Un sentito grazie ai miei due relatori Andrea Ferrero e Domenic D'Ambrosio per avermi dato la possibilità di svolgere questo tipo di tesi, per l'enorme disponibilità che hanno avuto aiutandomi a superare le difficoltà incontrate e per avermi fornito ogni materiale utile alla stesura dell'elaborato. Senza il supporto morale dei miei genitori, Serena e Giansenio, e dei loro compagni, Pasquale e Diana, non sarei potuto arrivare qui. Grazie per esserci sempre stati soprattutto nei momenti di sconforto. Ringrazio la mia ragazza Barbara che in questi ultimi due anni mi è stata vicino nel momento del bisogno. Grazie ai miei compagni di corso, in particolare Elia ed Emanuele, con i quali ho affrontato praticamente tutti gli esami di questo percorso magistrale ed hanno reso questo viaggio più interessante e divertente. Infine ringrazio i miei compagni di squadra del CUS Torino Rugby che mi hanno permesso di fare e pensare ad altro in questi anni, in particolare Giovanni, e alla società che mi ha supportato dandomi la possibilità di usufruire della borsa di studio AGON.

Grazie a tutti, senza di voi non ce l'avrei mai fatta.