

Università degli Studi di Bergamo
Dipartimento di Ingegneria Industriale



Dottorato in Tecnologie per l'Energia e l'Ambiente
XX Ciclo

UN CODICE AGLI ELEMENTI FINITI DISCONTINUI PER FLUSSI DI MISCELE GASSOSE

Claudio Ferrandi

Supervisore
Prof. Marco Savini

ABSTRACT

Scopo della presente tesi è lo studio del comportamento del metodo numerico degli elementi finiti discontinui applicato a problemi di fluidodinamica multicomponente. Dato l'incremento delle prestazioni dei moderni calcolatori, le simulazioni numeriche sono diventate uno strumento potente e, ormai, irrinunciabile nello studio e nella progettazione di problemi di valore ingegneristico; tra questi una grande sfida è rappresentata dalla combustione, in cui due sono gli ingredienti essenziali: simulare come le diverse specie chimiche si mescolino tra loro e successivamente come quest'ultime possano bruciare. In questo lavoro si è posta l'attenzione sul primo aspetto, cercando di affrontarlo numericamente con una tecnica innovativa, rappresentata dall'utilizzo di elementi finiti, in cui la soluzione nel dominio di calcolo venga approssimata da funzioni a tratti, continue all'interno del singolo elemento spaziale, in generale di carattere polinomiale, ma in cui non sia richiesta la continuità globale; di conseguenza la soluzione risulta discontinua all'interfaccia tra gli elementi. La mancanza di costrizione sulla continuità globale della soluzione garantisce una grande flessibilità, e, di fatto, la principale ragione per cui il metodo venga studiato con grande interesse e per cui lo si stia cercando di estendere ad un numero maggiore di applicazioni. La seguente ricerca ha permesso di porre le basi per confermarne la validità anche in situazioni in cui diverse specie chimiche possano miscelarsi tra loro, sia in griglie strutturate che in quelle non strutturate, per geometrie bidimensionali sia piane che assialsimmetriche. In più il metodo, caratterizzato da formule di discretizzazione spaziali molto compatte, è stato valorizzato, soprattutto, con uno schema di avanzamento temporale di tipo implicito, in cui notevoli sono stati i vantaggi computazionali.

In questo testo sono presenti utili basi e riferimenti per successive attività di ricerca nel settore, eventualmente mirabili, in particolar modo, all'estensione del metodo numerico a situazioni di fluidodinamica reattiva.

RINGRAZIAMENTI

Innanzitutto desidero ringraziare il Professor Savini, per avermi fatto da supervisore durante il lavoro di tesi e per avermi dato la possibilità di collaborare all'attività didattica, e il Professor Bassi, per le sue spiegazioni e i suoi utili consigli nel prosieguo della ricerca.

Ringrazio la mia famiglia, senza il cui aiuto economico non avrei potuto continuare a mantenermi a causa dell'esiguità dei sussidi statali, e Silvia, la mia ragazza, il cui stimolo è stato senz'altro maggiore di qualunque risultato scientifico.

Infine vorrei ringraziare i miei colleghi di dottorato, la cui compagnia ha reso piacevoli questi anni di ricerca.

INDICE

1. INTRODUZIONE.....	1
1.1. Sommaro	2
1.2. Equazioni di bilancio.....	3
1.2.1. Equazioni per flussi multicomponente reattivi.....	3
1.2.2. Modellizzazione dei termini di trasporto.....	4
1.2.3. Formulazioni più usate dei coefficienti	5
1.2.4. Flusso termico radiativo	7
1.2.5. Modelli chimici	8
2. EQUAZIONI DI NAVIER-STOKES MEDIATE ALLA REYNOLDS	10
2.1. Introduzione	10
2.2. Equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds accoppiate al modello di turbolenza $k-\omega$	10
2.2.1. La media di Reynolds.....	11
2.2.2. Equazioni di Reynolds-Favre	13
2.2.3. Modello $k-\omega$	17
2.2.4. Condizione di realizzabilità.....	21
3. ELEMENTI FINITI DISCONTINUI	23
3.1. Introduzione	23
3.2. Discretizzazione spaziale (DG) delle RANS.....	24
3.3. Integrazione temporale	27
3.4. Condizioni sui contorni del dominio.....	32
3.5. Adimensionalizzazione del codice monocomponente	37
4. CODICE MULTICOMPONENTE.....	39
4.1. Introduzione	39
4.2. Modello fisico	39
4.2.1. Modellizzazione dei termini di trasporto.....	40
4.3. Formulazione dei coefficienti.....	41
4.4. Modello fisico accoppiato al modello di turbolenza $k-\omega$	44
4.4.1. Modello per flussi bidimensionali assialsimmetrici.....	53
4.4.2. Condizione di validità del modello multicomponente	56

4.5.	Discretizzazione spaziale (DG)	58
4.6.	Integrazione temporale	61
4.7.	Condizioni sui contorni del dominio	63
4.8.	Adimensionalizzazione del codice multicomponente	65
5.	ANALISI NUMERICA	67
5.1.	Introduzione.....	67
5.2.	Simulazioni monodimensionali	67
5.2.1.	Problema di Sod	68
5.2.2.	Problema monodimensionale a gas diversi	71
5.3.	Simulazioni bidimensionali con gas uguali: comparazioni con il codice monocomponente	73
5.3.1.	Profilo alare non viscoso	73
5.3.2.	Profilo alare viscoso	76
5.3.3.	Lastra piana turbolenta	78
5.3.4.	Tubo cilindrico turbolento	82
5.4.	Simulazioni bidimensionali con gas diversi.....	85
5.4.1.	Simulazioni di flussi paralleli di aria-propano	86
5.4.2.	Simulazione di getti coassiali aria-propano.....	91
6.	CONCLUSIONI.....	109

APPENDICE: FORMULE JACOBIANI

BIBLIOGRAFIA

1. INTRODUZIONE

Il numero di sistemi che coinvolgono processi di combustione, usati sia nella produzione di energia che nei trasporti, è in continua espansione. Questo fa sì che i problemi legati alla gestione delle risorse dei combustibili ed al controllo dell'inquinamento e dell'impatto ambientale siano dei fattori critici nella nostra società. Lo studio della combustione, finalizzato al miglioramento del suo controllo e della sua efficienza, risulta, perciò, una sfida realmente attuale e stimolante.

La combustione è un fenomeno complesso che coinvolge diverse discipline:

- *la fluidodinamica* del sistema deve essere conosciuta molto attentamente per descrivere come si realizza il miscelamento dei reagenti e dei prodotti di combustione, e di conseguenza, più in generale, come avvengano tutti i fenomeni di trasferimento di calore e di massa.
- *la cinetica chimica* è necessaria per stimare il tasso di consumo del combustibile, la formazione dei prodotti e delle specie inquinanti. La sua conoscenza risulta, quindi, indispensabile per predire l'accensione, la stabilizzazione e l'estinzione della zona reattiva.
- *il flusso di calore radiativo*, generato nella fiamma da alcune specie e dalle particelle carboniose trasportate dal flusso, è un altro aspetto significativo da considerarsi nello studio.

Molti successi sono stati ottenuti nel comprendere queste discipline e nell'accoppiare i vari campi tra loro. Rigorose formulazioni matematiche dei fenomeni di combustione sono presenti in molti testi, specialmente in condizione di moto laminare; la combustione turbolenta richiede, invece, modelli addizionali, che nascono dall'utilizzo di tecniche statistiche per la descrizione del flusso e delle sue fluttuazioni. Tuttavia, molte sono le difficoltà fenomenologiche che sorgono nell'affrontare processi così complessi, riassumibili brevemente in: gran numero di specie chimiche coinvolte, ampio campo di scale temporali, elevati gradienti delle variabili primitive (vettore velocità, temperatura, concentrazioni, ...), regimi turbolenti che determinano effetti tridimensionali e transitori, trasferimento radiativo di calore, cambiamento di fase specialmente nel caso di combustibili solidi o liquidi, formazione di particolato, ecc. Ciascuno di questi fenomeni richiede un'adeguata comprensione fenomenologica ed un'accurata descrizione matematica, ma ciò non di meno anche la compartecipazione dei vari aspetti necessita di una corretta modellizzazione. Modelli di cinetica chimica per i principali combustibili, usati nella pratica industriale, hanno ricevuto molta attenzione dalla comunità scientifica e modelli di reazione molto buoni per gli idrocarburi (come idrogeno, metano, propano, ...) sono oggi disponibili.

Tuttavia, attualmente, una delle principali limitazioni, per progettare sistemi di combustione industriali o, più banalmente, per predire il comportamento di fiamme molto semplici, riguarda la risoluzione stessa delle formule matematiche; soluzioni analitiche, infatti, per la maggior parte dei problemi tecnologici, non sono ottenibili. Dato l'incremento delle prestazioni dei moderni calcolatori, la soluzione numerica delle formulazioni è diventata uno strumento potente negli ultimi decenni e continua, oggi, a nutrire un grande interesse e sviluppo, tanto che la fluidodinamica computazionale (CFD) è ormai un ingrediente irrinunciabile nello studio di strutture aerodinamiche, rappresentandone un punto fisso nella progettazione; si sta lavorando intensamente per cercare di estendere questi validi strumenti anche all'ambito della combustione, e molti sforzi e risorse, tra cui il presente lavoro, si stanno spendendo per raggiungere tale stimolante obiettivo. Per quanto riguarda, in special modo, la combustione sono due gli ingredienti essenziali: primo arrivare a simulare come le diverse specie chimiche si mescolino tra loro (scopo di questa attività di ricerca), secondo simulare come quest'ultime possano bruciare (scopo consigliato per futuri lavori).

1.1. Sommario

Nel prosieguo di questo capitolo la formulazione di base dei flussi gassosi chimicamente reattivi verrà presa in considerazione, focalizzando l'attenzione sulla combustione. Le equazioni di trasporto della massa, dell'energia, della quantità di moto e delle specie chimiche verranno esposte, oltre all'equazione di stato.

Nel secondo e terzo capitolo si cercherà di approfondire la base numerica su cui è fondato il lavoro di dottorato. Come già accennato le potenzialità crescenti dei moderni calcolatori hanno stimolato lo sfruttamento di molte risorse nell'ambito di una ricerca finalizzata alla messa a punto di tecniche numeriche per la simulazione di sistemi fluidodinamici via via più complessi; un numero sempre maggiore di ricercatori si sono, perciò, dedicati all'evoluzione di metodi numerici per permettere di by-passare la risoluzione analitica di complessi sistemi di equazioni differenziali, puntando, piuttosto, ad una discretizzazione più efficiente ed accurata di quest'ultime. In tale ottica lo sviluppo degli elementi finiti ha dato ottimi risultati nella fluidodinamica computazionale, da cui i tentativi di studiarlo, svilupparlo e renderlo più efficiente. Tra i vari aggiornamenti proposti al metodo, c'è l'evoluzione basata su una variante a elementi finiti discontinui (Discontinuous Galerkin), a cui, già da diversi anni, una sezione del Dipartimento di Ingegneria Industriale dell'Università di Bergamo sta lavorando con successo, seppur limitatamente alla sua applicazione ai flussi monocomponente.

Successivamente nel quarto capitolo si cercherà di entrare approfonditamente nel cuore del progetto di tesi, nel quale, partendo da un codice numerico ad elementi finiti discontinui in grado di effettuare simulazioni di fluido monocomponente (liquido e gassoso), elaborato e, da tempo, perfettamente provato dal Prof. Bassi e dal Prof. Savini dell'Università degli Studi di Bergamo, si è cercato di ottenere uno strumento in grado di realizzare anche delle simulazioni per flussi (gassosi) multicomponente, ovvero che prevedano la presenza di un qualsivoglia numero di specie chimiche in grado di miscelarsi tra di loro; il tutto, per il momento, per geometrie bidimensionali sia piane che assialsimetriche ed in condizioni di moto sia laminari che turbolente.

Nell'ultimo capitolo si darà spazio alla validazione dell'attività numerica tramite un opportuno confronto con un codice commercialmente affermato (Fluent), basandoci su un caso test, riguardante il miscelamento di due getti coassiali, ovvero di un getto di propano sparato all'interno di un flusso parallelo di aria. La scelta non è ovviamente casuale ma, pensando ad un codice che abbia una concreta applicazione nella pratica ingegneristica e che, in futuro, possa essere potenziato per poter elaborare casistiche reattive, si è optato per una realtà molto comune, ad esempio nei bruciatori industriali, come quella di due flussi coassiali in evoluzione all'uscita di un condotto assialsimmetrico. Per questo motivo i dati ricavati per le simulazioni a calcolatore sono stati ispirati a quelli ottenibili in laboratorio, facilmente reperibili in letteratura e tra i quali ricordiamo quelli già da tempo catalogati da Schefer e ritrovabili in [9].

Nelle conclusioni alcuni suggerimenti per futuri lavori di ricerca nel settore; nell'ambito più ampio della ricerca dei flussi reattivi si è cercato di porre delle basi che permettessero di fornire uno strumento numerico solido ed innovativo, in grado di garantire risultati attendibili nella fluidodinamica multicomponente. Lo strumento si spera venga presto esteso alla gasdinamica reattiva.

1.2. Equazioni di bilancio

Passeremo ora a considerare la formulazione matematica di base che descrive i flussi gassosi chimicamente reattivi e, concentrando l'attenzione sulla combustione, evidenzieremo le equazioni della massa, della quantità di moto, dell'energia e delle specie chimiche, nonché l'equazione di stato. Le equazioni sono espresse in termini differenziali.

1.2.1. Equazioni per flussi multicomponente reattivi

Le equazioni che governano il comportamento di un flusso multicomponente reattivo possono essere scritte come segue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad [1.1]$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N h_i \mathbf{j}_i \right) + \sum_{i=1}^N \dot{w}_i \Delta h_f = 0 \quad [1.2]$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathbf{I} p) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}) - \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad [1.3]$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_i) = \dot{w}_i \quad i = 1, N-1 \quad [1.4]$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad [1.5]$$

$$p = \rho R T \quad [1.6]$$

dove t è il tempo, ρ è la densità di massa della miscela, \mathbf{u} il vettore velocità, $\boldsymbol{\tau}$ il tensore degli sforzi, H l'entalpia totale ed E l'energia totale della miscela, p la pressione, \mathbf{q} e \mathbf{q}_R sono il flusso termico diffusivo e radiativo, T la temperatura, R la costante della miscela e \mathbf{g} il vettore gravitazionale; \dot{w}_i è la produzione netta della i -esima specie chimica, Y_i la frazione massica i -esima, \mathbf{j}_i il suo flusso diffusivo. Nei paragrafi successivi andremo ad analizzare i termini diffusivi e sorgente delle equazioni sopra citate, mettendone in evidenza le leggi principali con cui vengono modellizzati, chiaramente porgendo attenzione a quelli sfruttati nell'ambito della fluidodinamica numerica, oggetto di questa attività di tesi.

1.2.2. Modellizzazione dei termini di trasporto

Il tensore degli sforzi è in generale valutato prendendo in considerazione la legge di Stokes per i fluidi Newtoniani:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\boldsymbol{\gamma} - \frac{2}{3}(\mu\nabla \cdot \mathbf{u})\boldsymbol{\delta} \quad [1.7]$$

dove μ è la viscosità della miscela, $\boldsymbol{\delta}$ il delta di Kronecker e $\boldsymbol{\gamma}$ il tensore della velocità di deformazione, che può essere espresso come:

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad [1.8]$$

In una miscela di gas multicomponente, il flusso diffusivo della specie i -esima \mathbf{j}_i è, da una rigorosa formulazione basata sulla teoria cinetica dei gas, legata a tre forze di natura meccanica e ad una forza di natura termica. I flussi di massa sono infatti causati: i) dai gradienti delle concentrazioni, $\mathbf{j}_{Y,i}$; ii) dai gradienti di pressione, $\mathbf{j}_{p,i}$; iii) da campi di forze, ad esempio per fluidi sottoposti ad un campo elettrico e tra i quali è presente qualche specie con proprietà magnetiche, $\mathbf{j}_{b,i}$; iv) dai gradienti di temperatura, $\mathbf{j}_{T,i}$. Questi contributi sono spesso chiamati rispettivamente diffusione *ordinaria*, *di pressione*, *di forza* e *termica*. Dal momento che il contributo dei gradienti di pressione, dei campi di forza e dei gradienti di temperatura è, spesso, trascurabile rispetto a quello ordinario, essi non verranno più citati: in questo paragrafo solo quello legato ai gradienti di concentrazione (che corrisponde alla diffusione secondo la legge di Fick) verrà preso in considerazione, nella forma:

$$\mathbf{j}_{y,i} = -\rho D_{im} \nabla Y_i \quad [1.9]$$

dove D_{im} è il coefficiente di diffusività di massa della i -esima specie chimica nella miscela. Avendo trascurato tutti i termini tranne quello legato alle concentrazioni, parlare di $\mathbf{j}_{Y,i}$ o di \mathbf{j}_i risulta indifferente. Quindi per semplicità espositiva useremo solo il termine \mathbf{j}_i .

Infine il flusso termico risulta rappresentato da tre termini, ovvero rispettivamente dal termine conduttivo, dal termine radiativo e dall'energia trasportata dalla diffusione di massa:

$$\nabla \cdot (\mathbf{q}) + \nabla \cdot (\mathbf{q}_R) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N h_i \mathbf{j}_i \right) \quad [1.10]$$

con \mathbf{q} esprimibile con la classica espressione di Fourier:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad [1.11]$$

con λ conducibilità termica della miscela. A \mathbf{q}_R dedicheremo un paragrafo successivo per non appesantire troppo la trattazione.

1.2.3. Formulazioni più usate dei coefficienti

In questo paragrafo una breve presentazione delle più comuni formulazioni dei coefficienti presenti nei flussi diffusivi delle equazioni differenziali verrà mostrata, restringendo, chiaramente, la spiegazione alle miscele di gas ideali che sono gli unici presi in esame in questo lavoro di dottorato, dal momento che,

basandoci sulle alte temperature e sulle modeste pressioni che caratterizzano i processi di combustione, l'ipotesi di gas perfetto, per ogni singola specie, risulta, spesso, perfettamente accettabile.

Per quanto riguarda le miscele di gas ideali la formulazione usata per la viscosità globale risulta essere fondamentalmente unica e data da:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}} \quad [1.12]$$

con ϕ_{ij} scritto come:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right) \right]^{1/2}} \quad [1.13]$$

dove μ_i rappresenta la viscosità della i -esima specie chimica, X_i la sua frazione molare e M_i la sua massa molecolare. La medesima formulazione può essere adottata anche per la conducibilità termica della miscela, nella forma:

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}} \quad [1.14]$$

mantenendo per ϕ_{ij} la stessa legge sopra citata [1.13].

Per i coefficienti D_{im} di diffusione riportiamo tre possibili formulazione, dal più alto al più basso livello di dettaglio:

- dall'equazione di Stefan-Maxwell e, assumendo che una data specie veda il resto muoversi con la stessa velocità media, il coefficiente di diffusione di Fick si può scrivere, con la semplificazione usualmente adottata, come:

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}}} \quad [1.15]$$

in cui le D_{ij} sono i coefficienti di diffusività binari, ovvero quelli della specie i -esima nella specie j -esima,

- considerando un numero di Lewis (Le_i) per ogni specie chimica, allora i coefficienti D_{im} sono valutati partendo da tale valore come:

$$D_{im} = \frac{\lambda}{\rho * Le_i * c_p} \quad [1.16]$$

con c_p calore specifico della miscela; per le principali specie chimiche i numeri di Lewis sono presenti in letteratura, ma, qualora non lo fossero, la prassi scientifica è ottenerli mediando i valori locali ottenuti con simulazioni effettuate con valori approssimati (un'alternativa è ricorrere ad un numero di Schmidt (Sc_i) per ogni specie chimica poiché molto meno dipendente dalla temperatura che quello di Lewis),

- considerando un valore unitario del numero di Lewis per tutte le specie chimiche presenti nel modello chimico, si può ottenere:

$$D_{im} = D_m = \frac{\lambda}{\rho * c_p} \quad [1.17]$$

questo approccio è molto diffuso per simulazioni di combustione basate sul modello flamelet non considerato in questo testo.

1.2.4. Flusso termico radiativo

Nell'equazione dell'energia [1.2] compare anche il termine di flusso termico radiativo, che rappresenta il calore che si trasferisce per irraggiamento; l'equazione del flusso termico radiativo, che può essere ricavata da una semplificazione dell'equazione di Maxwell, trascurando, per esempio, gli effetti di polarizzazione, descrive la variazione dell'intensità della radiazione lungo un cammino in termini del processo fisico di assorbimento, riflessione e diffusione. A livello numerico il flusso termico radiativo viene tipicamente modellato sfruttando l'ipotesi di un trasferimento tra i gas combustibili caldi ed il dominio freddo circostante. Questa assunzione implica che ogni punto irraggiante abbia una visione isotropica del dominio freddo che gli sta intorno, considerato come un corpo nero; ne segue allora che il flusso termico per un'unità di volume sia esprimibile come:

$$\mathbf{q}_R = 4\sigma T^4 \sum_{i=1}^N (p_i \kappa_{p_i}) - 4\sigma T_s^4 \sum_{i=1}^N (p_i \kappa_{l_i}) \quad [1.18]$$

dove σ è la costante di Stefan-Boltzmann, p_i è la pressione parziale della specie i -esima, κ_{P_i} è il coefficiente di assorbimento medio di Planck del componente i -esimo e κ_{i_i} il suo coefficiente di incidenza medio, T_s è la temperatura di parete. La somma dei termini presenti nella parte destra dell'equazione [1.18] tiene conto delle differenti radiazioni delle specie presenti nelle fiamme, che, in quelle ad idrocarburi, sono per ordine di importanza il CO_2 , H_2O , il CH_4 , OH e la CO . Con il modello sopra esposto, l'assorbimento del gas viene ritenuto trascurabile rispetto all'emissione; di conseguenza, poiché il primo termine a destra dell'equazione rappresenta la radiazione emessa mentre il secondo l'assorbimento dell'ambiente circostante, quest'ultimo risulta trascurabile se T_s è bassa.

I coefficienti di assorbimento spettrale possono essere predetti utilizzando un modello a banda ristretta, eventualmente combinato con proprietà tabulate e approssimazioni teoriche, in modo da avere così a disposizione valori per differenti temperature, eventualmente interpolati con curve polinomiali.

1.2.5. Modelli chimici

Tutte le reazioni chimiche, che avvengono durante il processo completo di combustione, si sviluppano secondo una determinata velocità di reazione, che dipende da diversi parametri, ovvero la concentrazione della differenti specie chimiche, la temperatura e la pressione.

Per una data reazione j , scrivibile come:



con $v'_{i,j}$ e $v''_{i,j}$ i coefficienti stechiometrici dalla parte dei reagenti e dei prodotti rispettivamente per la i -esima specie presente nella reazione chimica j -esima del processo combustivo ed S_i il nome della i -esima specie, la velocità di reazione è la misura quantitativa della sua evoluzione, ovvero il numero di moli dei prodotti formati per unità di tempo e di volume. La legge di velocità rappresenta una formulazione empirica dell'evoluzione della reazione, e per la generica j -esima reazione chimica, individuata da [1.19], essa è rappresentabile come:

$$v_j = k_j^f \prod_{i=1}^N [X_i]^{v'_{i,j}} - k_j^b \prod_{i=1}^N [X_i]^{v''_{i,j}} \quad [1.20]$$

dove $[X_i]$ sono le concentrazioni molari e k_j^f e k_j^b le costanti cinetiche di avanzamento e regressione della reazione.

Le costanti di avanzamento sono valutate utilizzando la legge di Arrhenius:

$$k_j^f = A_j^f T^{\beta_j^f} \exp\left(-\frac{E_j^f}{\mathcal{R}T}\right) \quad [1.21]$$

dove A_j^f è un fattore pre-esponenziale, β_j^f è l'esponente della temperatura, E_j^f è l'energia di attivazione ed \mathcal{R} è la costante universale dei gas.

Per quanto riguarda il percorso inverso, dal momento che solo i parametri di avanzamento A_j^f , β_j^f ed E_j^f sono noti in letteratura, le costanti di regressione sono valutate prendendo in considerazione la costante di equilibrio della reazione K_c (espressa in funzione delle concentrazioni) che è calcolata a partire da proprietà termodinamiche. Sfruttando la relazione che lega i parametri sopra citati:

$$K_c = \frac{k_j^f}{k_j^b} \quad [1.22]$$

è possibile ricavare k_j^b .

A questo punto il calcolo della produzione/distruzione netta dell' i -esima specie chimica può essere condotto, considerando che il processo di combustione coinvolge N_r reazioni chimiche differenti, sommando i contributi individuali di ogni singola reazione come:

$$\dot{w}_i = M_i \sum_{j=1}^{N_r} (v_{i,j}'' - v_{i,j}') v_j \quad [1.23]$$

Su queste basi, differenti modelli chimici possono essere considerati, per ciascun tipo di combustione. Per il metano, in seguito all'importanza della sua combustione a livello industriale, potremmo trovare in letteratura diversi modelli; per esempio citiamo il meccanismo chimico completo, quello a chimica ridotta o quello a singoli step non reversibili.

La parte legata alla radiazione e quella della chimica non saranno oggetto di questa ricerca, ma potranno essere il punto di partenza per successive implementazioni reattive.

2. EQUAZIONI DI NAVIER-STOKES MEDIATE ALLA REYNOLDS

2.1. Introduzione

Nel presente capitolo ed in quello successivo verrà illustrato il metodo agli elementi finiti discontinui, il *discontinuous Galerkin Method* (DG), con, in parallelo, la sua applicazione ad un problema fisico, ovvero quello della risoluzione numerica delle *equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds (RANS) per un flusso comprimibile monocomponente*. La descrizione del metodo DG sarà anche l'occasione per discutere circa lo stato dell'arte da cui la seguente attività di ricerca ha preso avvio, ovvero un codice per flussi monocomponente sviluppato al Dipartimento di Ingegneria Industriale dell'Università degli Studi di Bergamo e basato proprio sul metodo numerico in oggetto.

Nei paragrafi seguenti verranno, prima di tutto, considerate le equazione differenziali di Navier-Stokes mediate alla Reynolds ed accoppiate con il *modello di turbolenza $k-\omega$* (il modello fisico con cui è stato costruito il codice fluidodinamico monocomponente sopra menzionato) e, successivamente, si entrerà nello specifico della discretizzazione numerica delle RANS con il metodo agli elementi finiti discontinui, cercando di evidenziarne al meglio le peculiarità.

2.2. Equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds accoppiate al modello di turbolenza $k-\omega$

In questa sezione si cercheranno di fornire alcune informazioni sulla fluidodinamica turbolenta e, partendo da quest'ultime, si arriverà a scrivere in forma completa le RANS accoppiate al modello $k-\omega$; chiaramente non si entrerà nel dettaglio di come esse siano state ricavate, dal momento che una tale digressione richiederebbe la stesura di una spiegazione molto articolata che porterebbe a deviare dalla linea guida del presente lavoro, rendendo la trattazione esageratamente dispersiva; si invita, perciò, alla lettura di testi specializzati ([10]), per un approfondimento delle RANS e delle procedure con cui sono state messe a punto, poiché in questa sede verrà fatto solo un accenno ad alcuni temi significativi.

2.2.1. La media di Reynolds

Dal momento che la turbolenza è per lo più costituita da fluttuazioni casuali delle varie proprietà del fluido, viene comunemente utilizzato un approccio di tipo statistico. Nella procedura introdotta da Reynolds (1895), tutte le grandezze vengono espresse come la somma di una componente media ed una componente fluttuante; in generale essa considera sia forme di tipo integrale che di tipo a sommatoria, ma in ogni caso le forme meglio pertinenti con i flussi turbolenti risultano essere tre: la *media temporale*, la *media spaziale* e la *media d'insieme*. La prima risulta appropriata per flussi turbolenti stazionari, ovvero quelli in cui il flusso in media non varia nel tempo, come ad esempio un fluido in un tubo sottoposto ad una velocità di spinta costante. Per una generica grandezza $f(\mathbf{x}, t)$, funzione del tempo e dello spazio, la sua media temporale si può esprimere come:

$$F_T = \overline{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(\mathbf{x}, t) dt \quad [2.1]$$

La media spaziale viene spesso usata per la turbolenza omogenea, ovvero un flusso uniforme in tutte le direzioni; di conseguenza viene effettuato un integrale di volume lungo ogni coordinata spaziale, secondo la formula:

$$F_V = \overline{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \iiint_V f(\mathbf{x}, t) dV \quad [2.2]$$

La media d'insieme è invece particolarmente adatta per flussi che decadono nel tempo; supponendo di effettuare N_C campionamenti e pensando a $f(\mathbf{x}, t) = f_n(\mathbf{x}, t)$ dell'n-esimo esperimento, otteniamo:

$$F_E = \overline{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N_C \rightarrow \infty} \frac{1}{N_C} \sum_{n=1}^{N_C} f_n(\mathbf{x}, t) \quad [2.3]$$

Per flussi che sono sia omogenei che stazionari possiamo ritenere che le tre medie sopra presentate coincidano: parleremo di *flussi ergodici*.

L'inomogeneità dei problemi ingegneristici e la miglior facilità nelle misure sperimentali spinge ad usare la media temporale, che sarà quella presa in esame in questa sede, per cui le grandezze dei nostri problemi potranno essere scritte come:

$$f(\mathbf{x}, t) = \overline{f}(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x}, t) = F(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x}, t) \quad [2.4]$$

omettendo per brevità il pedice 'T'.

Per concludere ricordiamo alcune proprietà valide quando viene utilizzata la media temporale, verificabili con calcoli molto semplici, in questa sede omessi:

- per una data grandezza $f(\mathbf{x}, t)$, la media della media coincide con la media stessa:

$$\overline{\overline{F}}(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} F(\mathbf{x}) dt = F(\mathbf{x}) \quad [2.5]$$

- per una data grandezza $f(\mathbf{x}, t)$, la media della sua derivata spaziale coincide con la derivata della media:

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{F}}{\partial x_i} \quad [2.6]$$

- per due grandezze assegnate $f(\mathbf{x}, t)$ e $g(\mathbf{x}, t)$, la media di una loro combinazione lineare coincide con la combinazione lineare delle medie:

$$\overline{c_1 f + c_2 g} = c_1 \overline{F} + c_2 \overline{G} \quad [2.7]$$

- per due grandezze assegnate $f(\mathbf{x}, t)$ e $g(\mathbf{x}, t)$, la media del loro prodotto risulta:

$$\overline{fg} = \overline{F} \overline{G} + \overline{f'g'} \quad [2.8]$$

- supponendo che le scale temporali caratterizzanti le fluttuazioni turbolente siano relativamente piccole rispetto a quelle riguardanti il flusso medio, è possibile supporre che la media temporale di una derivata rispetto al tempo di una qualunque grandezza coincida con la derivata della media:

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} \cong \frac{\partial \overline{F}}{\partial t} \quad [2.9]$$

In ultimo riportiamo una variazione della media temporale, definibile come *media temporale massica*, scrivibile come:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t) dt \quad [2.10]$$

legata alla tradizionale media temporale dalla relazione:

$$\overline{\tilde{\rho}f} = \overline{\rho f} \quad [2.11]$$

Sapendo, però, che vale la relazione:

$$f = \tilde{f} + f'' \Rightarrow \overline{\rho f} = \overline{\rho \tilde{f}} + \overline{\rho f''} = \overline{\rho} \tilde{f} + \overline{\rho f''} \quad [2.12]$$

da un semplice confronto con la [2.11], otteniamo un risultato molto utile anche per successive elaborazioni:

$$\overline{\rho f''} = 0 \quad [2.13]$$

Ora questa semplificazione matematica, con le sue relative proprietà, può essere applicata a qualunque sistema di equazioni differenziali comprese quelle di Navier-Stokes, agevolandone, così, la scrittura.

2.2.2. Equazioni di Reynolds-Favre

Riportiamo qui di seguito il sistema di equazioni di Navier-Stokes per fluidi comprimibili monocomponente. Di fatto esse coincidono con il sistema [1.1] - [1.6], presentato al Capitolo 1, con l'omissione dei termini legati alla combustione, ai fluidi multicomponente ed avendo trascurato, come già ribadito, il calore emesso per irraggiamento. Nell'equazione della quantità di moto [1.3] è stato, inoltre, trascurato il termine gravitazionale, perché considerato influente ai fini delle analisi numeriche proposte in questo lavoro e trascurabile per quanto riguarda le applicazioni pratiche qui prese in esame:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad [2.14]$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) = 0 \quad [2.15]$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathbf{I} p) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}) = \mathbf{0} \quad [2.16]$$

$$p = \rho RT \quad [2.17]$$

scrivibili in forma indiciale come:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [2.18]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \left(h + \frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-t_{ij} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (q_j) = 0 \quad [2.19]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-t_{ji}) = 0 \quad [2.20]$$

$$p = \rho RT \quad [2.21]$$

con:

$$t_{ij} = 2\mu \left[s_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad [2.22]$$

Le due possibili scritte verranno usate indifferentemente durante la trattazione, senza che il tutto venga sottolineato costantemente.

A questo punto è possibile decomporre le varie grandezze nella loro componente media e fluttuante

$$\begin{aligned} u_i &= \tilde{u}_i + u_i'' \\ \rho &= \bar{\rho} + \rho' \\ p &= \bar{p} + p' = P + p' \\ h &= \tilde{h} + h'' \\ e &= \tilde{e} + e'' \\ T &= \tilde{T} + T'' \\ q_j &= q_{lj} + q_j' \end{aligned} \quad [2.23]$$

Sostituendo le equazioni [2.23] all'interno del sistema [2.18] - [2.21] ed effettuando una *media temporale*, otteniamo, dopo qualche passaggio algebrico:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [2.24]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \left(\tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \right) + \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_j \left(\tilde{h} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \right) + \tilde{u}_j \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''} \right] = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_i (\bar{t}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-q_{Lj} - \overline{\rho u_j'' h''} + \bar{t}_{ji} \tilde{u}_i - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} \right] \end{aligned} \quad [2.25]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) + \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{t}_{ji} + \overline{\rho u_j'' u_i''}) = 0 \quad [2.26]$$

$$P = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad [2.27]$$

L'equazioni [2.24], [2.26] e [2.27] differiscono dalle loro controparti laminari solo per il termine $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ detto *tensore degli sforzi di Reynolds*:

$$\bar{\rho} \tau_{ij} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \quad [2.28]$$

e che, come intuibile, nasce in seguito alle componenti fluttuanti della velocità. Invece l'equazione dell'energia totale [2.25] presenta numerosi termini addizionali ciascuno riferito ad un ben preciso problema fisico. In particolare si può evidenziare la relazione tra la fluttuazione turbolenta di velocità con se stessa, che risulta spontaneo definire come *energia cinetica turbolenta*, nella forma:

$$\bar{\rho} k = \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i''} \quad [2.29]$$

Successivamente la relazione tra h'' ed u_j'' rappresenta il flusso termico turbolento:

$$q_{Tj} = \overline{\rho u_j'' h''} \quad [2.30]$$

I due termini $\bar{t}_{ji} \tilde{u}_i$, $\overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''}$ corrispondono rispettivamente alla diffusione molecolare ed al trasporto turbolento dell'energia cinetica turbolenta, e rappresentano il trasferimento tra l'energia del moto medio e l'energia cinetica turbolenta.

A questo punto è possibile anche ricavare l'equazione per l'energia cinetica turbolenta; il modo più semplice è prendere l'equazione del momento [2.26] e

moltiplicare tutti i termini per u_j'' ed, infine, mediare alla massa. Dopo alcune elaborazioni algebriche si ottiene:

$$\begin{aligned} & \bar{\rho} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \\ & = \bar{\rho} \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{t_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ji} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} - \overline{p' u_j''} \right] - \overline{u_i''} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} \end{aligned} \quad [2.31]$$

Da notare gli ultimi due termini sul lato destro dell'equazione [2.31], che rappresentano rispettivamente il *lavoro di pressione* (ovvero quello svolto dalla pressione media per le fluttuazioni turbolente di velocità) e le *dilatazioni turbolente di pressione* (causate dalla parte flutuante della pressione); entrambi questi termini spariscono nel caso di fluido incomprimibile. E' possibile inoltre definire una dissipazione per unità di massa dell'energia cinetica turbolenta ε , nella forma:

$$\bar{\rho} \varepsilon = \overline{t_{ji} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} = \frac{1}{2} \overline{t_{ji} \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} = \overline{t_{ji} s_{ij}} \quad [2.32]$$

dove s_{ij}'' è il *tensore flutuante delle velocità di deformazione*.

Possiamo ora riassumere le equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds, dette, anche, equazioni di Favre-Reynolds:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [2.33]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} H \tilde{u}_j) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_i (\bar{t}_{ij} + \bar{\rho} \tau_{ij}) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-q_{Lj} - q_{Tj} + \overline{t_{ji} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} \right] \end{aligned} \quad [2.34]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) + \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{t}_{ji} - \bar{\rho} \tau_{ij}) = 0 \quad [2.35]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) = \\ & = \bar{\rho} \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ji} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} - \overline{p' u_j''} \right] - \overline{u_i''} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} \end{aligned} \quad [2.36]$$

$$P = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad [2.37]$$

dove E ed H sono rispettivamente l'energia e l'entalpia totale, comprensive della componente cinetica del campo turbolento, ovvero:

$$\begin{aligned} E &= \tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i + k \\ H &= \tilde{h} + \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i + k \end{aligned} \quad [2.38]$$

2.2.3. Modello $k-\omega$

Le Equazioni di Navier-Stokes mediate alla Reynolds (RANS), a causa dei termini di fluttuazione che contengono, non solo appaiono irrisolvibili analiticamente, ma sono di difficile trattazione anche da un punto di vista numerico. Risulta, quindi, necessario effettuare delle modellizzazioni dei termini fluttuanti che compaiono nelle equazioni; da qui la letteratura e le ricerche in proposito si sprecano. Numerosi i modelli a riguardo e numerose le sfumature e le correzioni che vengono periodicamente proposte. Tra i più famosi ricordiamo il modello $k-\varepsilon$ e il $k-\omega$, facilmente reperibili e consultabili nella letteratura specializzata. In questa sede verrà presa in considerazione una versione del modello $k-\omega$, elaborata da Wilcox [10], e si cercherà di esporla e di evidenziarne qualche limatura e correzione.

Innanzitutto il metodo ricorre all'utilizzo dell'ipotesi di Boussinesq, per la quale il tensore degli sforzi di Reynolds (τ_{ij}) viene considerato proporzionale al tensore velocità di deformazione del moto medio (S_{ij}), ovvero che gli assi principali del tensore τ_{ij} coincidano con quelli di S_{ij} in tutti i punti del flusso turbolento. Questo è l'analogo postulato di Stokes per i flussi laminari, e perciò facendo un'analogia con quest'ultimi è possibile definire una *viscosità turbolenta*, che rappresenta il coefficiente di proporzionalità nella relazione:

$$\tau_{ij} = 2\mu_T S_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ji} (\mu_T S_{ii} + \bar{\rho} k) \quad [2.39]$$

Di fatto, quindi, si sottolinea l'analogia tra il moto intermolecolare di un gas perfetto ed il movimento delle onde nel moto turbolento e, perciò, come in un gas perfetto vale la relazione:

$$\mu \propto \rho \hat{u} l \quad [2.40]$$

con l libero cammino medio delle molecole e \hat{u} la velocità molecolare media, così si assume:

$$\mu_T \propto \bar{\rho} u_T l_T \quad [2.41]$$

dove ora u_T e l_T sono la velocità e la lunghezza del moto turbolento. E' chiaro che l_T debba essere riferito alla dimensione delle onde turbolente e che l'energia cinetica turbolenta risulti essere la scala di velocità turbolenta più presumibile e che, di fatto, se $u_i'' \cong u_j''$ con i diverso da j , allora valga:

$$\sqrt{k} \propto u_T \quad [2.42]$$

Ricordiamo, comunque, che mentre la viscosità laminare è una proprietà del fluido, quella turbolenta lo è del flusso e dipende da molti dettagli, quali la forma e le caratteristiche (es. rugosità) del recipiente, la storia del flusso, l'intensità di turbolenza, ecc. Inoltre mentre le molecole in un gas perfetto sono tutte uguali, discrete, ben distanziate e caratterizzate da urti elastici, le onde turbolente non sono uguali, sono continue, contigue e traggono energia dal moto medio. Di conseguenza non in tutte le situazioni l'ipotesi di Boussinesq può essere soddisfacente, ma è più che accettabile in tutti quei casi in cui la viscosità turbolenta varia molto più lentamente rispetto alle variazioni del tensore di Reynolds, motivo che ne ha reso appetibile una sua introduzione.

A questo livello, con l'utilizzo dell'ipotesi ora esposta, ed usando al posto del tasso specifico di dissipazione ε , la grandezza ω (pseudovorticità), ad essa direttamente legata dalla relazione:

$$\varepsilon = \beta^* \omega k \quad [2.43]$$

è possibile ricavare il modello completo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [2.44]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho H u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i \hat{\tau}_{ij} - q_j] - \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \beta^* \rho \bar{k} e^{\hat{\omega}} \quad [2.45]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad [2.46]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \bar{k} e^{\hat{\omega}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad [2.47]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{\omega}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \tilde{\omega}) = \\ & = \frac{\alpha}{\bar{k}} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta \rho e^{\tilde{\omega}} + (\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad [2.48]$$

$$p = (\gamma - 1) \rho (E - u_k u_k / 2) \quad [2.49]$$

$$q_j = - \left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_T}{Pr_T} \right) \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad [2.50]$$

$$\tau_{ij} = 2 \bar{\mu}_T \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} \quad [2.51]$$

$$\hat{\tau}_{ij} = 2 \bar{\mu} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \tau_{ij} \quad [2.52]$$

$$\bar{k} = \max(0, k) \quad [2.53]$$

$$\bar{\mu}_T = \alpha^* \rho \bar{k} e^{-\tilde{\omega}} \quad [2.54]$$

dove γ , Pr e Pr_T sono il rapporto tra i calori specifici, i numeri di Prandtl laminari e turbolenti, ritenibili costanti per un gas perfetto. Per quanto riguarda i coefficienti il modello risulta completo con le seguenti espressioni per simulazioni con flussi a basso numero di Reynolds:

$$\alpha = \alpha_t^* \frac{\alpha_0^* R_k + Re_T}{R_k + Re_T}, \quad \alpha = \alpha_t \frac{\alpha_0 R_\omega + Re_T}{R_\omega + Re_T} (\alpha_t^*)^{-1} \quad [2.55]$$

$$\beta^* = \beta_t^* \frac{\beta_0^* R_\beta^4 + Re_T^4}{R_\beta^4 + Re_T^4}, \quad \beta = \beta_t \quad [2.56]$$

$$\alpha_t^* = 1, \quad \alpha_t = 5/9, \quad \beta_t^* = 9/100, \quad \beta_t = 3/40 \quad [2.57]$$

$$\alpha_0^* = 1/40, \quad \alpha_0 = 1/10, \quad \beta_0^* = 5/18 \quad [2.58]$$

$$R_k = 6, \quad R_\omega = 2.7, \quad R_\beta = 2.7 \quad [2.59]$$

$$\sigma^* = \sigma = 1/2 \quad [2.60]$$

e con correzione per flussi ad alto numero di Reynolds:

$$\alpha_t^* = 1, \quad \alpha_t = 1, \quad \beta_t^* = 1, \quad \beta_t = 1 \quad [2.61]$$

$$R_k = 1, \quad R_\omega = 1, \quad R_\beta = 1 \quad [2.62]$$

con Re_T numero di Reynolds turbolento proporzionale al rapporto tra la viscosità turbolenta e quella laminare:

$$Re_T = \frac{\rho \bar{k}}{\mu e^{\bar{\omega}}} \quad [2.63]$$

Dal momento che nel modello non compaiono termini fluttuanti, tutte le grandezze devono essere intese come grandezze medie; di conseguenza si è omessa la sottolineatura per evitare di rendere l'aspetto grafico troppo pesante. Il sistema di equazione sopra esposto è già stato collaudato dal suo ideatore; si rimanda sempre a [10] e ad eventuali lavori facenti capo al modello di Wilcox per approfondimenti e verifiche circa la bontà dello stesso. In questa sede, ovviamente, non si darà ulteriore spazio al problema.

Chiudiamo il paragrafo con alcune considerazioni. Innanzi tutto l'equazione [2.48] è stata scritta rispetto alla nuova variabile:

$$\bar{\omega} = \ln \omega \quad [2.64]$$

L'uso del logaritmo nelle variabile turbolente è stato introdotto da Iliaca e Pelletier nell'ambito del modello di turbolenza $k-\varepsilon$ con funzione di parete, e risulta particolarmente interessante poiché garantisce la positività delle variabili turbolente stesse; inoltre le variabili logaritmiche presentano distribuzioni molto più dolci rispetto a quelle non logaritmiche. Tuttavia, nell'applicare il logaritmo al modello $k-\omega$, si è ritenuto utile applicare lo stesso solo alla variabile ω e non a k ; infatti la condizione a parete di k (cioè $k = 0$) darebbe luogo ad un valore infinito di $\ln(k)$. Allora il problema di assicurare la positività di k è stato ottenuto distinguendo tra una k calcolata dall'equazione [2.47] (lasciata libera di assumere anche valori negativi) e la \bar{k} limitata dall'equazione [2.53] e nei termini sorgente delle equazioni [2.45], [2.47], [2.48] e [2.51]. Da notare che il limite a zero (e non ad un valore arbitrariamente piccolo) risulta essere soddisfatto, poiché nessuna delle equazioni precedenti presenta una divisione per \bar{k} . Utilizzando questo approccio si è notato che valori negativi di k possono comparire durante l'evoluzione pseudo-temporale della soluzione o essere presenti anche in soluzioni stazionarie o in stazionarie periodiche. Tuttavia si è notato essi possano sparire o raffinando la griglia di calcolo e/o aumentando il grado di approssimazione polinomiale della soluzione.

Si noti, infine, che la presenza del termine sorgente nell'equazione [2.45] è dovuto al fatto che l'energia totale E e l'entalpia totale H non contengano i termini legati all'energia cinetica turbolenta.

2.2.4. Condizione di realizzabilità

L'introduzione del logaritmo sulla ω , permette l'ottenimento di una maggiore stabilità ed accuratezza delle quantità turbolente; ma valori piccoli possono, comunque, introdurre dei problemi nel calcolo, soprattutto durante transitori non fisici con un metodo di avanzamento temporale di tipo implicito. A questo punto si può ovviare o riducendo l'avanzamento temporale (con conseguente penalizzazione dei vantaggi computazionali del metodo), oppure ricorrendo ad un rafforzamento tramite una condizione di realizzabilità per gli sforzi turbolenti. Questo semplicemente prevedendo che il modello predica solo sforzi turbolenti positivi e che la disuguaglianza di Schwarz risulti verificata, ovvero:

$$\overline{\rho u_i'^2} \geq 0 \quad [2.65]$$

$$\left(\overline{\rho u_i' u_j'}\right)^2 \leq \overline{\rho u_i'^2} \overline{\rho u_j'^2} \quad [2.66]$$

che in termini di grandezze modellizzate implica:

$$\frac{2}{3} \rho \bar{k} - 2 \bar{\mu}_T \left(S_{ii} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \geq 0, \quad \forall i \quad [2.67]$$

$$\left(-2 \bar{\mu}_T S_{ij} \right)^2 \leq \left[\frac{2}{3} \rho \bar{k} - 2 \bar{\mu}_T \left(S_{ii} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad [2.68]$$

$$\left[\frac{2}{3} \rho \bar{k} - 2 \bar{\mu}_T \left(S_{jj} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad \forall i, j \quad i \neq j$$

Dall'equazioni [2.67] e [2.68], e sfruttando la [2.54], ricaviamo:

$$\frac{e^{\hat{\omega}}}{\alpha^*} - 3 \left(S_{ii} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \geq 0, \quad \forall i \quad [2.69]$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{e^{\tilde{\omega}}}{\alpha^*} \right)^2 - 3 \left(S_{ii} + S_{jj} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \\ +9 & \left[\left(S_{ii} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \left(S_{jj} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) - S_{ij}^2 \right] \geq 0, \quad \forall i, j \quad i \neq j \end{aligned} \quad [2.70]$$

Definendo con a il massimo valore dell'incognita $e^{\tilde{\omega}}/\alpha^*$, allora il valore di $\tilde{\omega}$ che garantisca la realizzabilità sarà:

$$\frac{e^{\tilde{\omega}_0}}{\alpha^*} = a \quad [2.71]$$

Combinando l'equazione [2.71] con l'equazione,

$$\alpha = \alpha_t^* \frac{\alpha_0^* R_k + \text{Re}_T}{R_k + \text{Re}_T} \quad [2.72]$$

ne otteniamo una di secondo grado per l'incognita $e^{\tilde{\omega}_0}$, del tipo:

$$e^{2\tilde{\omega}_0} - \left(\alpha_t^* \alpha_0^* a - \frac{\bar{k} \rho}{R_k \mu} \right) e^{\tilde{\omega}_0} - \alpha_t^* \frac{\bar{k} \rho}{R_k \mu} a = 0 \quad [2.73]$$

con cui si può poi definire la realizzabilità:

$$\tilde{\omega}_r = \max(\tilde{\omega}, \tilde{\omega}_{r_0}) \quad [2.74]$$

3. ELEMENTI FINITI DISCONTINUI

3.1. Introduzione

Gli elementi finiti discontinui costituiscono una tecnica agli elementi finiti in cui la soluzione nel dominio di calcolo viene approssimata da funzioni a tratti, continue all'interno del singolo elemento spaziale ed in generale di carattere polinomiale, ma in cui non è richiesta la continuità globale; di conseguenza la soluzione risulta discontinua all'interfaccia tra gli elementi. La mancanza di costrizione sulla continuità globale della soluzione garantisce una grande flessibilità, e di fatto la principale ragione per cui il metodo DG venga studiato con grande interesse e per cui lo si stia cercando di estendere ad un numero maggiore di applicazioni. Anche schemi di ordine elevato si possono costruire con nessuna difficoltà concettuale sia per griglie strutturate che per quelle non strutturate; anche griglie non conformi possono essere trattate con facilità. Inoltre elementi di accuratezza differente possono coesistere nella stessa griglia in modo tale da aprire facilmente la strada all'implementazione delle strategie di tipo adattativo. In più il metodo permette formule di discretizzazione spaziale molto compatte; tale compattezza rende il tutto appetibile quando lo schema di avanzamento temporale risulta essere di tipo implicito e quando si sfrutta un'ulteriore implementazione con calcolo parallelo.

Per i termini puramente convettivi come quelli presenti nelle equazioni di Eulero, le discontinuità sono trattate tramite l'ausilio di risolutori di Riemann approssimati, perciò il metodo risulta analogo al classico metodo upwind ai volumi finiti centrati (FV) e, di fatto, si riduce esattamente a quest'ultimo nel caso la soluzione venga approssimata da polinomi costanti a tratti. Per approssimazioni di alto ordine, raggiunte con polinomi di grado elevato all'interno delle singole celle di calcolo, però, il DG risulta simile al classico metodo agli elementi finiti continui. Per i termini diffusivi, come quelli dell'equazioni di Navier-Stokes viscosa, si usa invece una soluzione diversa dal classico metodo FV. Nei metodi ai volumi finiti, la soluzione è, infatti, presa discontinua all'interfaccia tra gli elementi nella discretizzazione dei termini convettivi ma globalmente continua per quanto riguarda quelli diffusivi. Nel metodo DG questo non avviene, ma entrambi i termini sono considerati discontinui.

Nei paragrafi successivi si entrerà nel dettaglio e si forniranno maggiori informazioni sull'argomento.

3.2. Discretizzazione spaziale (DG) delle RANS

Prima di procedere conviene scrivere il sistema di equazioni con una forma vettoriale compatta del tipo:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [3.1]$$

dove \mathbf{u} ed \mathbf{s} rappresentano, rispettivamente, il vettore delle variabili conservative e dei termini sorgente (nel nostro caso solo quelli legati alla turbolenza), ed \mathbf{F}_c ed \mathbf{F}_v le matrici dei flussi convettivo e diffusivo; gli spazi di appartenenza sono dati da:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{d+2} \quad \text{e} \quad \mathbf{s} \in \mathbb{R}^{d+2} \\ \mathbf{F}_c \in \mathbb{R}^{d+2} \otimes \mathbb{R}^d \quad \text{e} \quad \mathbf{F}_v \in \mathbb{R}^{d+2} \otimes \mathbb{R}^d \end{aligned} \quad [3.2]$$

con d numero di dimensioni del problema. Gli elementi che costituiscono \mathbf{u} , \mathbf{s} , \mathbf{F}_c ed \mathbf{F}_v possono essere determinati da un confronto con [2.44] - [2.48].

Il nostro problema fino a questo punto è cercare una $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ all'interno di un certo dominio spaziale Ω e ad un dominio temporale $[0, T]$, tale da soddisfare l'equazione [3.1]. Possiamo, però, considerare nel volume Ω uno spazio di Hilbert $H^1(\Omega)$, della forma:

$$H^1(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} |f|^2 d\Omega < +\infty, \int_{\Omega} \left| \frac{\partial}{\partial x_i} f \right|^2 d\Omega < +\infty \right\} \quad [3.3]$$

E' possibile a questo punto moltiplicare tutti i termini dell'equazione [3.1], per una funzione test $\varphi(\mathbf{x})$ appartenente allo spazio di Hilbert, ed effettuare una integrazione di tutti i termini, nel dominio di definizione di φ , ottenendo così la forma debole della [3.1] del tipo:

$$\int_{\Omega} \varphi \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi \in \Omega \quad [3.4]$$

avendo chiamato con \mathbf{F} la somma dei flussi convettivo e viscoso. A questo punto è possibile discretizzare l'equazione [3.4]; la tecnica consiste nel dividere il dominio spaziale Ω attraverso una partizione in celle $\tau_h = \{\Omega_e\}$ e nell'esprimere l'integrale come somma di integrali nelle singole celle di calcolo:

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u}) d\Omega + \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\Omega + \\
& + \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi \in \Omega
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Il passo successivo è limitare la scelta delle \mathbf{u} e della φ a funzioni polinomiali all'interno del singolo elemento, *senza che venga richiesta alcuna continuità all'interfaccia*. Di conseguenza la soluzione del sistema di equazioni diventa ricavare \mathbf{u}_h appartenente a V_h che soddisfi:

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi_h \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u}_h) d\Omega + \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi_h \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \\
& + \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h
\end{aligned} \tag{3.6}$$

con \mathbf{u}_h e φ_h le discretizzazioni, rispettivamente, di \mathbf{u} e φ , da ricercarsi in:

$$\begin{aligned}
V_h &= \{u_h \in L^2(\tau_h)^{d+2} : u_h|_e \in P^k(\Omega_e) \quad \forall \Omega_e \in \tau_h\} \\
W_h &= \{\varphi_h \in L^2(\tau_h) : \varphi_h|_e \in P^k(\Omega_e) \quad \forall \Omega_e \in \tau_h\}
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Se integriamo per parti l'equazione [3.6] e, non ledendo la generalità del discorso, se consideriamo funzioni test nulle all'esterno dell'elemento Ω_e si ricava:

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi_h \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u}_h) d\Omega + \sum_{e \in \tau_h} \oint_{\partial \Omega_e} \varphi_h \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} d\sigma \\
& - \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \nabla \varphi_h \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \sum_{e \in \tau_h} \int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h
\end{aligned} \tag{3.8}$$

e scritta per il singolo elemento:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} \varphi_h \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u}_h) d\Omega + \oint_{\partial \Omega_e} \varphi_h \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} d\sigma + \\
& - \int_{\Omega_e} \nabla \varphi_h \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h
\end{aligned} \tag{3.9}$$

A causa dell'approssimazione funzionale discontinua, la funzione di flusso nell'integrale di contorno dell'equazione [3.9], non è univocamente definita. Per assicurare un accoppiamento tra elementi adiacenti, che altrimenti mancherebbe completamente, il flusso fisico in direzione normale viene sostituito da un flusso numerico che dipende dallo stato interno (\cdot) , dallo stato esterno $(\cdot)^+$ e dal versore normale \mathbf{n} diretto verso l'esterno dell'elemento:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} \quad \rightarrow \quad \mathbf{H}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) \quad [3.10]$$

Il flusso numerico può essere scomposto ora nella sua componente convettiva ed in quella viscosa nella forma:

$$\mathbf{H}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) = \mathbf{H}_C(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) + \mathbf{H}_V(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) \quad [3.11]$$

Componente convettiva: la funzione di flusso numerico per la componente non viscosa \mathbf{H}_C è del tutto analoga a quella comunemente utilizzata in metodi ai volumi finiti di tipo upwind. In questo lavoro è stato utilizzato sia il flusso numerico di Van Leer modificato da Hanel [11] sia il flusso numerico di Godunov basato su un solutore di Riemann esatto, nella versione proposta da Gottlieb e Groth [12]. Le due soluzioni sono opzionalmente disponibili nel codice monocomponente.

Componente viscosa: La valutazione del flusso viscoso \mathbf{H}_V nell'ambito del metodo DG non può essere fatta semplicemente a partire dai gradienti delle variabili all'interno degli elementi, ma deve, in qualche modo, tener conto dell'effetto delle discontinuità di interfaccia sui gradienti stessi. In questo lavoro viene utilizzato lo schema di discretizzazione del flusso viscoso proposto in [15] e [16]. In accordo con tale schema, la dipendenza funzionale del flusso e del termine sorgente dal gradiente delle variabili nell'equazione [3.9] viene sostituita dai gradienti 'modificati', ovvero:

$$\int_{\Omega_e} \varphi_h \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{u}_h) d\Omega + \sum_{e \in \partial \Omega_e} \int_e \varphi_h \mathbf{H}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{r}_e, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+ + \mathbf{r}_e^+, \mathbf{n}) d\sigma + \int_{\Omega_e} \nabla \varphi_h \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{R}_e) d\Omega + \int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{R}_e) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h \quad [3.12]$$

dove le funzioni \mathbf{R}_e ed \mathbf{r}_e sono date da:

$$\int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{R}_e d\Omega = \oint_{\partial\Omega_e} \varphi_h (\mathbf{u}_{h0} - \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [3.13]$$

$$\int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{r}_e d\Omega = \int_e \varphi_h (\mathbf{u}_{h0} - \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} d\Omega \quad \forall e \in \partial\Omega_e \quad [3.14]$$

con:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{h0} = \mathbf{u}_{hb} & \text{se } \partial\Omega_e \cap \partial\Omega \neq 0 \quad (\text{facce sul contorno del dominio}) \\ \mathbf{u}_{h0} = (\mathbf{u}_h + \mathbf{u}_h^+) / 2 & \text{se } \partial\Omega_e \cap \partial\Omega = 0 \quad (\text{facce interne}) \end{cases} \quad [3.15]$$

e \mathbf{u}_{hb} denota il dato di bordo. Si noti che tra le grandezze \mathbf{R}_e ed \mathbf{r}_e vale la relazione:

$$\mathbf{R}_e = \sum_{e \in \partial\Omega_e} \mathbf{r}_e \quad [3.16]$$

Come mostrano le relazioni [3.13] e [3.14], i contributi \mathbf{R}_e ed \mathbf{r}_e ai gradienti interni all'elemento sono nulli quando $\mathbf{u}_{h0} = \mathbf{u}_h$, cioè nel caso in cui non ci siano discontinuità. A questo punto il flusso numerico viscoso è dato dal valor medio all'interfaccia, ovvero:

$$\mathbf{H}_V(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) = \frac{1}{2} [\mathbf{F}_V(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{r}_e) + \mathbf{F}_V(\mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+ + \mathbf{r}_e^+)] \cdot \mathbf{n} \quad [3.17]$$

Lo schema di discretizzazione del flusso viscoso possiede la caratteristica, estremamente interessante, di accoppiare solo le incognite che sono accoppiate con lo schema di discretizzazione del flusso convettivo, indipendentemente dal grado di approssimazione polinomiale della soluzione. Questa caratteristica è molto utile per un'implementazione temporale implicita del metodo.

Da notare, infine, che quando il contorno dell'elemento fa parte del contorno del dominio spaziale, la funzione di flusso numerico che compare nell'equazione [3.12] deve essere scelta in modo consistente con le condizioni al contorno del problema. In pratica questo significa che le grandezze $(\cdot)^+$ sono costruite in modo da tenere conto del dato di bordo.

3.3. Integrazione temporale

Nel paragrafo precedente abbiamo parlato di discretizzazioni sia dell'incognita sia della funzione test, in modo tale che nel singolo elemento esse siano

costituite da funzioni polinomiali. Dall'analisi matematica sappiamo che un qualunque polinomio, avendone fissato il grado N_h , apparterrà ad uno spazio di funzioni polinomiale del medesimo ordine ed in cui, ciascuna funzione, può essere rappresentata come una combinazione lineare di N_h funzione di base, anch'esse di tipo polinomiale. Di conseguenza, avendo scelto il grado N_h dell'approssimazione polinomiale, ogni incognita u_{hi} (in variabili conservative ρ , ρE , ρu , ρv , ρw , ρk , $\rho \omega$) del vettore dell'incognite \mathbf{u}_h può essere scritta sul singolo elemento come una combinazione lineare delle medesime funzioni di base:

$$u_{hi}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{N_h} u_{hij}(t) \phi_j(\mathbf{x}) \quad [3.18]$$

ma lo stesso discorso risulta ugualmente valido per le funzioni test, anch'esse di tipo polinomiale:

$$\varphi_h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_h} \varphi_{hj} \phi_j(\mathbf{x}) \quad [3.19]$$

avendo indicato con u_{hij} e φ_{hj} i coefficienti dei polinomi di grado N_h e con ϕ_j le funzioni di base. Questo comporta la possibilità di riscrivere l'equazione per il singolo elemento come:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \left(\sum_{j=1}^{N_h} \varphi_{hj} \phi_j \right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_{hij} \phi_j \right) d\Omega + \int_{\Omega_e} \left(\sum_{j=1}^{N_h} \varphi_{hj} \phi_j \right) \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \\ + \int_{\Omega_e} \left(\sum_{j=1}^{N_h} \varphi_{hj} \phi_j \right) \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h \end{aligned} \quad [3.20]$$

A questo punto appare chiaro che non sarà più necessario prendere in considerazione tutte le funzioni test dello spazio W_h ma solo le N_h funzioni di base da cui è possibile costruire una qualunque funzione dello stesso:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \phi_k \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_{hij} \phi_j \right) d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi_k \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \\ + \int_{\Omega_e} \phi_k \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \phi_k \quad k=1, N_h \end{aligned} \quad [3.21]$$

Ma sfruttando il fatto che la dipendenza temporale sia tutta sui coefficienti delle incognite e quella spaziale sulle funzioni di base, è possibile riarrangiare i termini sotto derivata temporale in maniera conveniente:

$$\sum_{j=1}^{N_h} \frac{\partial u_{hij}(t)}{\partial t} \int_{\Omega_e} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}) d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi_k \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \int_{\Omega_e} \phi_k \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \phi_k \quad k=1, N_h \quad [3.22]$$

Chiamiamo con m_{kj} l'integrale del prodotto delle funzioni di base e, per comodità di scrittura, raccogliamo gli altri due integrali spaziali in un unico vettore dei residui:

$$\sum_{j=1}^{N_h} m_{kj} \frac{\partial u_{hij}(t)}{\partial t} + \mathbf{R}_{\Omega_e}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) = \mathbf{0} \quad k=1, N_h \quad [3.23]$$

La variazione degli indici k e j tra 1 e la dimensione dello spazio polinomiale N_h porta alla definizione per il singolo elemento di una *matrice di massa* così da risultare:

$$\mathbf{M}_{\Omega_e} \frac{\partial(\mathbf{u}_h(t))}{\partial t} + \mathbf{R}_{\Omega_e}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) = \mathbf{0} \quad [3.24]$$

che sommando su tutti gli elementi conduce alla versione compatta:

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \mathbf{R}(\mathbf{U}) = \mathbf{0} \quad [3.25]$$

con \mathbf{M} , \mathbf{U} ed \mathbf{R} rispettivamente la matrice di massa (diagonale a blocchi per come è stata costruita), il vettore soluzione globale ed il vettore residui. Per quanto riguarda le dimensioni abbiamo che \mathbf{M} può essere considerata come una matrice a blocchi $((nv \times nu) \times ne) \times ((nv \times nu) \times ne)$, dove ne rappresenta il numero di elementi della griglia e dove ciascun blocco è una matrice $((nv \times nu) \times (nv \times nu))$ dove nu è il numero di variabili incognite (in variabili conservative ρ , ρE , ρu , ρv , ρw , ρk , $\rho \omega$) moltiplicato per nv , il numero di gradi di libertà utilizzato per rappresentare ciascuna variabile all'interno dell'elemento. Invece \mathbf{U} ed \mathbf{R} sono dei vettori di dimensione $((nv \times nu \times ne) \times 1)$.

Per l'avanzamento temporale della soluzione dell'equazione [3.25] sono a disposizione due metodi:

metodo esplicito: con questa tecnica il residuo \mathbf{R} viene calcolato utilizzando la soluzione \mathbf{U} al tempo t^n ; noto il residuo si opera l'aggiornamento della soluzione al tempo t^{n+1} . Il metodo prevede la possibilità di un raffinamento, sfruttando un aumento degli stadi per ogni passo temporale, ottenendo così un'accuratezza temporale dello stesso ordine del numero degli stadi. In seguito riportiamo le formule fino al terzo stadio:

1 STADIO:

$$\mathbf{M}(\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) = \mathbf{0} \quad [3.26]$$

2 STADI:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{U}^* - \mathbf{U}^n) + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{M}(\mathbf{U}^{**} - \mathbf{U}^*) + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^*, t^n) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \frac{1}{2}(\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^{**}) \end{aligned} \quad [3.27]$$

3 STADI:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{U}^* - \mathbf{U}^n) + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{M}(\mathbf{U}^{**} - (\frac{3}{4}\mathbf{U}^n + \frac{1}{4}\mathbf{U}^*)) + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^*, t^n) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{M}(\mathbf{U}^{n+1} - (\frac{1}{3}\mathbf{U}^n + \frac{2}{3}\mathbf{U}^{**})) + \frac{2}{3}\Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^{**}, t^n) &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad [3.28]$$

dove Δt , chiaramente, rappresenta il passo temporale scelto.

metodo implicito: per calcoli stazionari e/o con griglie molto addensate i metodi espliciti non sono molto efficienti, ma si preferiscono metodi impliciti. La logica si basa sul calcolo del residuo \mathbf{R} con la soluzione \mathbf{U} calcolata all'istante t^{n+1} ; ma non conoscendo ancora \mathbf{U} all'istante t^{n+1} , risulta necessario effettuare una linearizzazione del residuo che porta a definire una matrice Jacobiana. In questo lavoro si considera lo schema di Runge-Kutta, accurato al secondo ordine, proposto da Iannelli e Baker [13]. Si tratta di uno schema a due passi che può essere scritto come:

$$(\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) = Y_1 \mathbf{K}_1 + Y_2 \mathbf{K}_2 \quad [3.29]$$

$$\left[\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \alpha \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}^n, t^n) \right] \mathbf{K}_1 + \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) = \mathbf{0} \quad [3.30]$$

$$\left[\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \alpha \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}^n, t^n) \right] \mathbf{K}_2 + \mathbf{R}(\mathbf{U}^n + \beta \mathbf{K}_1, t^n) = \mathbf{0} \quad [3.31]$$

I valori delle costanti che danno luogo ad uno schema ottimale, accurato al secondo ordine, sono dati in [13] e valgono:

$$\alpha = \frac{2 - \sqrt{2}}{2}, \quad \beta = 8\alpha \left(\frac{1}{2} - \alpha \right), \quad Y_1 = 1 - \frac{1}{8\alpha}, \quad Y_2 = \frac{1}{8\alpha} \quad [3.32]$$

Si noti che gli schemi ad un passo di Eulero e di Crank-Nicolson si ottengono ponendo $Y_1 = 1$, $Y_2 = 2$ ed $\alpha = 0$ (Eulero) o $\alpha = 1/2$ (Crank-Nicolson). Ognuna delle equazioni [3.30] e [3.31] richiede la risoluzione di un sistema di equazioni lineare della forma $\mathbf{Ax} + \mathbf{b} = \mathbf{0}$. Grazie agli schemi utilizzati per discretizzare il flusso non viscoso e quello viscoso, il numero di blocchi non nulli in una generica riga i della matrice \mathbf{A} è uguale al numero di elementi che circondano l'elemento i più uno. La costruzione degli elementi della matrice \mathbf{A} richiede, come già accennato, di calcolare le matrici Jacobiane del flusso, non viscoso, viscoso e del termine sorgente. Tutte le matrici Jacobiane sono state calcolate analiticamente [14] e tengono conto in modo completo della dipendenza dei flussi e del termine sorgente dall'incognita \mathbf{u} , dal suo gradiente e dalle funzioni \mathbf{R}_e ed \mathbf{r}_e . Quest'ultima proprietà è necessaria per effettuare calcoli instazionari accurati, con schema delle equazioni [3.29] - [3.31], e permette di ottenere la convergenza quadratica del metodo di Newton in calcoli instazionari fatti col metodo di Eulero all'indietro e $\Delta t \rightarrow \infty$. Per risolvere il sistema lineare $\mathbf{Ax} + \mathbf{b} = \mathbf{0}$ è stato considerato sia il metodo diretto multifrontale, adatto per matrici sparse non simmetriche, implementato nel pacchetto software UMFPACK, sia il metodo iterativo GMRES con i preconditionatori BD ed ILU, disponibile nella SLATEC Common Mathematical Library. Per ragioni di efficienza computazionale, l'applicazione del metodo diretto è stata fatta sul sistema preconditionato con l'inversa della matrice diagonale a blocchi $\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Ax} + \mathbf{b}) = \mathbf{0}$; così facendo, i blocchi sulla diagonale \mathbf{A} si riducono alla matrice identità. Si osservi che il metodo Runge-Kutta a due passi richiede due soluzioni del sistema $\mathbf{Ax} + \mathbf{b} = \mathbf{0}$ ad ogni passo temporale; tuttavia, essendo la matrice \mathbf{A} la stessa nei due passi, è sufficiente una sola fattorizzazione di \mathbf{A} .

3.4. Condizioni sui contorni del dominio

Questa sezione comprende le equazioni che definiscono le variabili e le loro derivate sull'esterno delle facce di frontiera del dominio di calcolo. Sono attualmente implementate le routine per i seguenti tipi di bordo:

- **far field**: quando le condizioni al contorno sono di questa tipologia vengono assegnati, come dati di input, i valori delle grandezze corrispondenti a quelli desiderati all'infinito. Il calcolo delle grandezze all'esterno delle facce di bordo avviene sulla base di quattro casi differenti di flusso entrante (subsonico o supersonico) e di flusso uscente (subsonico o supersonico).

- Se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è supersonica le variabili sono assegnate se il flusso è entrante mentre sono uguagliate a quelle interne se il flusso è uscente, coerentemente col fatto che le direzioni caratteristiche, associate agli autovalori della matrice Jacobiana del flusso convettivo normale alla frontiera, sono tutte entranti nel dominio nel primo caso e tutte uscenti dal dominio nel secondo caso.

- Se invece q_n è subsonica entrante, tre direzioni caratteristiche entrano nel dominio ed una esce; ne segue che tre condizioni devono essere imposte ed una proviene dall'interno del dominio. La variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n - c$ (si ricordi che la normale sul contorno del dominio è diretta verso l'esterno e che c è la velocità del suono), la direzione del vettore velocità e l'entropia sono grandezze imposte; la variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$ è la grandezza calcolata con le variabili note sull'interno delle facce di frontiera. In formule:

$$\begin{aligned}
 q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma-1} &= R = q + \frac{2c}{\gamma-1} \\
 q_n^+ - \frac{2c^+}{\gamma-1} &= \bar{R} = a\bar{q} - \frac{2\bar{c}}{\gamma-1} \\
 \frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma}} &= \bar{\sigma} \\
 k^+ &= \bar{k} \\
 \tilde{\omega}^+ &= \tilde{\omega}
 \end{aligned}
 \tag{3.33}$$

dove con l'apice + si sono indicate le grandezze all'esterno delle facce (da calcolare), con la sottolineatura quelle assegnate e senza nulla quelle all'interno delle facce di contorno (utilizzando la stessa annotazione già precedentemente impiegata). Con a si è invece indicato il prodotto scalare tra il versore normale n ed il versore del vettore velocità (individuato dai coseni direttori degli angoli):

$$a = (\cos \bar{\alpha})n_x + (\sin \bar{\alpha})n_y \quad [3.34]$$

Se invece la q_n è subsonica uscente tre direzioni caratteristiche escono dal dominio ed una entra; ne segue che tre condizioni provengono dall'interno del dominio ed una deve essere imposta. La variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$, la componente della velocità tangente al contorno e l'entropia sono grandezze calcolate con le variabili note sull'interno delle facce di frontiera; la variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n - c$ è la grandezza imposta. In formule:

$$\begin{aligned} q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma-1} &= R = q_n + \frac{2c}{\gamma-1} \\ q_n^+ - \frac{2c^+}{\gamma-1} &= \bar{R} = a\bar{q} - \frac{2\bar{c}}{\gamma-1} \\ \frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma}} &= \sigma \\ k^+ &= k \\ \tilde{\omega}^+ &= \tilde{\omega} \end{aligned} \quad [3.35]$$

Le derivate delle variabili sull'esterno delle facce sono semplicemente uguagliate alle derivate calcolate sull'interno, includendo in queste ultime il contributo dovuto alle discontinuità di interfaccia;

- **given**: in tal caso le variabili sono calcolate semplicemente imponendo l'uguaglianza coi valori imposti in input, mentre le derivate sono uguagliate alle derivate calcolate sull'interno, includendo in queste ultime il contributo dovuto alle discontinuità di interfaccia;

- **inflow**: con questa tipologia di contorno vengono assegnati, come dati di input, i valori delle grandezze corrispondenti a quelli che si desidera siano presenti all'esterno del dominio, in una condizione di flusso entrante.

- Se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è supersonica, le variabili sono tutte assegnate, coerentemente al fatto che le direzioni caratteristiche, associate agli autovalori della matrice Jacobiana dei flussi convettivi, sono tutte entranti nel dominio.

- Se invece la q_n è supersonica, tre direzioni caratteristiche entrano nel dominio ed una esce; ne segue che tre condizioni devono essere imposte ed una esce dal dominio. L'entalpia totale, l'angolo che individua la direzione del vettore

velocità e l'entropia sono grandezze imposte; la variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$ è la grandezza calcolata con le variabili note sull'interno delle facce della frontiera. In formule:

$$\begin{aligned}
 \frac{(q^+)^2}{2} + \frac{(c^+)^2}{\gamma-1} &= \bar{H} \\
 a^+ q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma-1} &= R = q_n + \frac{2c}{\gamma-1} \\
 \frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma}} &= \bar{\sigma} \\
 k^+ &= \bar{k} \\
 \tilde{\omega}^+ &= \bar{\tilde{\omega}}
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

dove a è sempre esprimibile con l'equazione [3.34].

Per le derivate delle variabili sull'esterno delle facce resta valido il discorso fatto per il *far*;

• **outflow**: con questo caso vengono assegnati, come dati di input, i valori delle grandezze corrispondenti a quelli che si desidera siano presenti all'esterno del dominio, in una situazione di flusso uscente.

- Se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è supersonica, le variabili sono tutte estrapolate dall'interno, coerentemente al fatto che le direzioni caratteristiche, associate agli autovalori della matrice Jacobiana dei flussi convettivi, sono tutte uscenti dal dominio.

- Se invece la q_n è subsonica, tre direzioni caratteristiche escono dal dominio ed una entra; ne segue che tre condizioni provengono dall'interno del dominio ed una viene imposta. La variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$, l'entropia e la componente della velocità tangente al contorno del dominio sono le grandezze calcolate con le variabili note sull'interno delle facce di frontiera; la pressione è la grandezza imposta. In formule si ha:

$$\begin{aligned}
 p^+ &= \bar{p} \\
 q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma-1} &= R = q_n + \frac{2c}{\gamma-1} \\
 \frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma}} &= \sigma \\
 k^+ &= k \\
 \tilde{\omega}^+ &= \tilde{\omega}
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Nuovamente le derivate delle variabili sull'esterno delle facce sono uguagliate alle derivate calcolate sull'interno, includendo in queste ultime il contributo dovuto alle discontinuità di interfaccia;

- **symmetry**: con questa soluzione i valori delle grandezze e delle variabili all'esterno della frontiera sono calcolati attraverso un processo di simmetria delle grandezze presenti all'interno. Per quanto riguarda le variabili abbiamo;

$$\begin{aligned}
 \rho^+ &= \rho \\
 E^+ &= E \\
 u^+ &= u - 2(q_n)n_x \\
 v^+ &= v - 2(q_n)n_y \\
 k^+ &= k \\
 \tilde{\omega}^+ &= \tilde{\omega}
 \end{aligned}
 \tag{3.38}$$

Analogo per le derivate;

- **extrapolated**: variabili e derivate all'esterno della frontiera sono semplicemente uguagliate a quelle all'interno;

- **wall**: con questa opzione si calcolano le variabili sulle facce appartenenti a superficie solide in funzione delle grandezze interne alle facce di bordo ed a quelle assegnate in input.

- Se come dato di input viene imposto il flusso termico allora il calcolo prevede la soluzione di un problema di Riemann alla parete; se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è maggiore di zero, allora verrà riflessa un'espansione che tradotto in formule risulta:

$$\begin{aligned}
 p^+ &= p \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \frac{q_n}{c} \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \\
 c^+ &= c + \frac{\gamma-1}{2} q_n \\
 u^+ &= \alpha [u - q_n n_x] \\
 v^+ &= \alpha [v - q_n n_y] \\
 k^+ &= \alpha^2 k
 \end{aligned}
 \tag{3.39}$$

mentre se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è minore di zero, allora verrà riflesso un urto che tradotto in formule risulta:

$$\begin{aligned}
 p^+ &= p \left[1 + \gamma \left(-\frac{q_n}{c} \right) w \right] \\
 c^+ &= c + \left\{ \left[1 + \gamma \left(-\frac{q_n}{c} \right) w \right] \frac{(\gamma+1) + (\gamma-1) \left[1 + \gamma \left(-\frac{q_n}{c} \right) w \right]}{(\gamma-1) + (\gamma+1) \left[1 + \gamma \left(-\frac{q_n}{c} \right) w \right]} \right\}^{\frac{1}{2}} \\
 u^+ &= \alpha [u - q_n n_x] \\
 v^+ &= \alpha [v - q_n n_y] \\
 k^+ &= \alpha^2 k
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

con α fattore di slip alla parete (frazione del termine cinetico che si desidera considerare; rigorosamente sarà 1 per simulazioni *non viscose* e 0 per quelle *viscose*) e w dato dall'espressione:

$$w = \frac{\gamma+1}{4} \left(-\frac{q_n}{c} \right) - \left[1 + \left(\frac{\gamma+1}{4} \left(-\frac{q_n}{c} \right) \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.41}$$

- Se come dato di input viene imposta la temperature della parete, la logica del ragionamento non cambia e le equazioni risultano, per q_n minore di zero:

$$\begin{aligned}
 p^+ &= p \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \frac{q_n}{c} \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \\
 T^+ &= \bar{T} \\
 u^+ &= \alpha [u - q_n n_x] \\
 v^+ &= \alpha [v - q_n n_y] \\
 k^+ &= \alpha^2 k
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

e per q_n maggiore di zero:

$$\begin{aligned}
p^+ &= p \left[1 + \gamma \left(-\frac{q_n}{c} \right) w \right] \\
T^+ &= \bar{T} \\
u^+ &= \alpha [u - q_n n_x] \\
v^+ &= \alpha [v - q_n n_y] \\
k^+ &= \alpha^2 k
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Per quanto riguarda il calcolo della ω è stato usato il metodo detto di *rough-wall* proposto da Wilcox [10]. In questo metodo sia le pareti rugose che quelle lisce possono essere simulate prescrivendo adeguati valori per la rugosità superficiale e calcolando ω alla parete con la correzione:

$$\tilde{\omega} = \ln \left(S_R \frac{u_\tau^2}{\nu} \right) \tag{3.44}$$

dove $u_\tau = (\tau_w/\rho)^{0.5}$ è la velocità di attrito, ν è la viscosità cinematica e la funzione S_R è correlata alla rugosità superficiale adimensionale $k_R^+ = u_\tau k_R / \nu$ dalla relazione:

$$S_R = \begin{cases} (50/k_R^+)^2 & \text{se } k_R^+ < 25 \\ 100/k_R^+ & \text{se } k_R^+ \geq 25 \end{cases} \tag{3.45}$$

Le derivate sono uguagliate alle derivate calcolate sull'interno delle facce, includendo in queste ultime il contributo dovuto alle discontinuità d'interfaccia. La condizione di flusso termico assegnato viene soddisfatta sottraendo il contributo di derivata della temperatura in direzione normale e sommando il valore imposto.

3.5. Adimensionalizzazione del codice monocomponente

In questo paragrafo vengono riportate le adimensionalizzazioni utilizzate nel codice. Chiaramente la motivazione è di tipo numerico, atta ad evitare di dare in pasto al calcolatore numeri di diverso ordine di grandezza. Le grandezze scelte come riferimento principale sono la lunghezza l_r , la densità ρ_r , la pressione p_r e la costante del gas R_r . Il codice è strutturato in modo che i valori numerici propri di una esecuzione siano tutti valori adimensionali (compresi l'input e l'output); il valore dimensionale di ciascuna grandezza si ottiene moltiplicando il valore

adimensionale per la corrispondente grandezza di riferimento. La Tabella 3-1 elenca le espressioni delle grandezze di riferimento in funzione delle grandezze di riferimento principale l_r , ρ_r , p_r e R_r . Tali espressioni si ottengono dalle espressioni dimensionali che legano ogni grandezza di riferimento alle prescelte grandezze di riferimento principali l_r , ρ_r , p_r e R_r attraverso le grandezze fondamentali lunghezza, massa, tempo e temperatura.

Grandezza di riferimento	Simbolo	Valore
Lunghezza	l_r	l_r
Densità	ρ_r	ρ_r
Pressione	p_r	p_r
Costante del gas	R_r	R_r
Tempo	t_r	$l_r \rho_r^{0.5} p_r^{-0.5}$
Velocità	v_r	$\rho_r^{-0.5} p_r^{0.5}$
Energia interna	e_r	$\rho_r^{-1} p_r$
Entalpia	h_r	$\rho_r^{-1} p_r$
Entropia	s_r	R_r
Viscosità dinamica	μ_r	$l_r \rho_r^{0.5} p_r^{0.5}$
Temperatura	T_r	$\rho_r^{-1} p_r R_r^{-1}$
Conducibilità termica	λ_r	$l_r \rho_r^{0.5} p_r^{0.5} R_r$
Calore specifico (p = cost)	$c_{p,r}$	R_r
Calore specifico (v = cost)	$c_{v,r}$	R_r
Energia cinetica turbolenta	k_r	$\rho_r^{-1} p_r$
Pseudovorticità	ω_r	$l_r^{-1} \rho_r^{-0.5} p_r^{0.5}$

Tabella 3-1: Grandezze di riferimento.

4. CODICE MULTICOMPONENTE

4.1. Introduzione

Nel Capitolo 1 si è cercato di porre l'attenzione sul contesto scientifico in cui si colloca il presente lavoro di tesi, ovvero quello della fluidodinamica numerica reattiva. L'obiettivo, come più volte ribadito, è stato quello di riuscire ad utilizzare la tecnica degli elementi finiti discontinui, non solo per problemi di fluidodinamica monocomponente, ma anche per situazioni in cui più specie chimiche possano dar vita ad una miscelazione, all'interno del dominio di calcolo, ed eventualmente innescare un processo di combustione. E' chiaro, però, che, pur avendo come mira questa finalità, in ogni caso tutti gli sviluppi debbano procedere per gradi; una volta acquisiti dei risultati attendibili, sarà possibile introdurre ulteriori novità nel progetto di ricerca. In questa ottica, allora, non è pensabile attuare direttamente simulazioni di flussi reattivi, ma, come primo passo indispensabile, è necessario verificare il comportamento del Discontinuous Galerkin per flussi multicomponente, in cui si abbiano, cioè, diverse specie chimiche in miscelazione all'interno di un prestabilito volume spaziale. Nei paragrafi successivi, allora, verrà presentata la descrizione dei passi che hanno permesso la definizione di un codice capace di effettuare simulazioni di mixing di fluidi all'interno di geometrie bidimensionali sia piane che assialsimmetriche.

4.2. Modello fisico

Qui di seguito riportiamo il sistema di equazioni differenziali che caratterizzano il moto di fluidi in miscelazione, che si è scelto come modello fisico:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad [4.1]$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{q}) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N h_i \mathbf{j}_i \right) = 0 \quad [4.2]$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathbf{I} p) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}) = \mathbf{0} \quad [4.3]$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_i) = 0 \quad i = 1, N-1 \quad [4.4]$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad [4.5]$$

$$p = \rho RT \quad [4.6]$$

Queste equazioni coincidono con quelle esposte al Capitolo 1 ([1.1] - [1.6]), con l'eliminazione dei termini sorgente legati alla combustione e del flusso termico radiativo; per cui si rimanda al capitolo sopra indicato per la spiegazione dei simboli che compaiono nelle equazioni. Da notare che il sistema sopra esposto prevede la risoluzione di $(N-1)$ equazioni per il calcolo di altrettante frazioni massiche e la risoluzione di un'equazione per l'ottenimento della densità globale della miscela. L' N -esima frazione massica si ricava direttamente dalla risoluzione della [4.5]; in tal modo, nonostante gli errori di arrotondamento numerici, risulta sempre assicurata la conservazione della massa e, scegliendo come N -esima specie quella più abbondante (ad esempio l'azoto in un processo di combustione), nonostante si scarichi su di essa la somma degli errori di arrotondamento delle altre specie, la qual cosa risulta, in relativo, di poco conto. Lavorando in vista di una futura introduzione della parte reattiva, poi, si è deciso di sfruttare l'ipotesi di gas perfetto per ciascuna specie chimica presente nel dominio di calcolo, dal momento che i tradizionali processi di combustione, rivestiti di interesse ingegneristico, avvengono a pressione ambiente e ad elevate temperature; quindi condizioni in cui l'ipotesi di miscela di gas perfetti risulta adeguata.

4.2.1. Modellizzazione dei termini di trasporto

Il tensore degli sforzi è stato valutato prendendo in considerazione la legge di Stokes per i fluidi Newtoniani:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\boldsymbol{\gamma} - \frac{2}{3}(\mu\nabla \cdot \mathbf{u})\boldsymbol{\delta} \quad [4.7]$$

dove μ è la viscosità della miscela, $\boldsymbol{\delta}$ il delta di Kronecker e $\boldsymbol{\gamma}$ il tensore delle velocità di deformazione, che può essere espresso come:

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) \quad [4.8]$$

Per quanto riguarda i termini di diffusione della specie i -esima \mathbf{j}_i , avendo trascurato il contributo dei gradienti di pressione (di interesse solo casi a

pressione circa costante), dei campi di forza (non sono stati presi in esame situazioni con campi magnetici, elettrici o gravitazionali) e termico, si è considerato unicamente quello legato ai gradienti delle concentrazioni (ovvero quello *ordinario*), modellizzato, secondo legge di Fick, nella forma semplificata usualmente adottata:

$$\mathbf{j}_{v,i} = -\rho D_{im} \nabla Y_i \quad [4.9]$$

dove D_{im} è il coefficiente di diffusività di massa della i -esima specie chimica nella miscela.

Infine il flusso termico risulta rappresentato dalla conducibilità termica e dall'energia trasportata dalla diffusione di massa:

$$\nabla \cdot (\mathbf{q}) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N h_i \mathbf{j}_i \right) \quad [4.10]$$

con \mathbf{q} esprimibile con la classica espressione di Fourier:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad [4.11]$$

con λ conducibilità termica della miscela.

4.3. Formulazione dei coefficienti

Abbiamo già sottolineato la scelta di ricorrere all'ipotesi di gas perfetto; essa influenzerà la definizione dei parametri termodinamici, anche se, tuttavia, alcuni di essi non verranno presi rigorosamente costanti ma funzioni della temperatura, in modo da garantire un miglior grado di accuratezza.

- Dapprima consideriamo la *costante dei gas della miscela*; chiamando con R_i la costante del gas della i -esima specie, otteniamo:

$$R = \sum_{i=1}^N R_i Y_i \quad [4.12]$$

- Per quanto riguarda la scelta delle espressioni dei *calori specifici a pressione costante*, si è optato, a differenza di un gas 'termicamente' perfetto tradizionale (in cui sono costanti), per l'utilizzo di espressioni di tipo polinomiale in modo da tener conto degli effetti della temperatura sul parametro. Tali espressioni sono facilmente reperibili in letteratura [8] e, se per simulazioni di puro mixing risultano di fatto superflue, nel senso che permettono delle correzioni

trascurabili (avendo valori di temperatura pressoché costanti), nell'ottica dell'estensione a flussi reattivi in cui sono, naturalmente, previste grandi variazioni di temperatura, gli effetti di quest'ultima sui calori specifici, risulta indispensabile per simulazioni caratterizzate da un'accuratezza che ne permetta l'attribuzione di un valore fisico. Ne segue che per ogni specie i è possibile scrivere:

$$c_{p_i} = c_{p_i}(0) + c_{p_i}(1)T + c_{p_i}(2)T^2 + c_{p_i}(3)T^3 + \dots \quad [4.13]$$

mentre per la miscela:

$$c_p = \sum_{i=1}^N c_{p_i} Y_i \quad [4.14]$$

L'espressione del *calore specifico a volume costante* discende facilmente da quella del calore specifico a pressione costante, sia per quanto riguarda quella della singola specie che per quanto riguarda quella della miscela, sotto riportata:

$$c_v = c_p - R \quad [4.15]$$

E' possibile, poi, definire un rapporto *tra i calori specifici*, che indicheremo con γ , e che, in analogia con un gas perfetto, risulta:

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad [4.16]$$

la sola differenza con le miscele di gas 'termicamente' perfetti, in cui i calori specifici sono legati solo alle frazioni massiche (Y_i), è che la γ dipenderà sia dalla temperatura (T) che dalle frazioni massiche (Y_i).

• Anche per l'espressione dell'*entalpia* per la singola specie, deduciamo un'espressione polinomiale:

$$h_i = \int_{T_{ref}}^T c_{p_i} dT = c_{p_i}(0)T + c_{p_i}(1)T^2 + c_{p_i}(2)T^3 + c_{p_i}(3)T^4 + \dots \quad [4.17]$$

dove T_{ref} è la temperatura di riferimento, a cui vengono definite le entalpie standard di formazione delle varie specie chimiche (h_{fi}^0); per simulazioni di puro miscelamento il suo valore è ininfluenza e per comodità preso pari a zero (non sarà così per quelle reattive); quella della miscela:

$$h = \sum_{i=1}^N h_i Y_i \quad [4.18]$$

Analogo dei calori specifici a volume costante è il calcolo dell'*energia interna*:

$$e = h - (p/\rho) \quad [4.19]$$

• Per quanto riguarda la *viscosità della miscela*, si è utilizzato un'espressione che risulta essere fondamentale unica per questi problemi e data da:

$$\mu = \sum_{i=1}^N \frac{X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}} \quad [4.20]$$

con ϕ_{ij} scritto come:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right) \right]^{1/2}} \quad [4.21]$$

dove per μ_i si è sempre ricorso, per motivi di accuratezza nelle simulazioni numeriche, ad espressioni di tipo polinomiale funzioni della temperatura, sempre facilmente reperibili in letteratura [8], nella forma:

$$\mu_i = \mu_i(0) + \mu_i(1)T + \mu_i(2)T^2 + \mu_i(3)T^3 + \dots \quad [4.22]$$

• La medesima formulazione può essere adottata anche per la *conducibilità termica della miscela*, nella forma:

$$\lambda = \sum_{i=1}^N \frac{X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}} \quad [4.23]$$

mantenendo per ϕ_j la legge [4.21] e per λ_i sempre leggi a carattere polinomiale, rintracciabili in archivi scientifici [8]:

$$\lambda_i = \lambda_i(0) + \lambda_i(1)T + \lambda_i(2)T^2 + \lambda_i(3)T^3 + \dots \quad [4.24]$$

• Per i *coefficienti di diffusività di massa* D_{im} si è scelto di utilizzare una formulazione che permettesse il maggior grado di accuratezza, ovvero di rimanere fedeli all'equazione di Stefan-Maxwell, assumendo, cioè, che una data specie veda il resto muoversi con la stessa velocità media; il coefficiente di diffusione di Fick si può scrivere, allora, come:

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}}} \quad [4.25]$$

in cui le D_{ij} sono i coefficienti di diffusività binari, ovvero quelli della specie i -esima nella specie j -esima, scelti, sempre per garantire la maggior precisione possibile in vista di una futura fluidodinamica reattiva, dipendenti sia dalla temperatura che dalla pressione, nella forma:

$$D_{ij} = D_{ij}(0) \frac{T^{D_{ij}(1)}}{p^{D_{ij}(2)}} \quad [4.26]$$

Anche per i coefficienti dell'espressione [4.26] è facile la reperibilità in letteratura.

4.4. Modello fisico accoppiato al modello di turbolenza $k-\omega$

Riscriviamo il sistema di equazioni differenziali [4.1] - [4.6], scelte come modello fisico di fluidodinamica multicomponente, in forma indiciale:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [4.27]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \left(h + \frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} (t_{ij} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (-q_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad [4.28]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (t_{ji}) = 0 \quad [4.29]$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) \quad i = 1, N-1 \quad [4.30]$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad [4.31]$$

$$p = \rho RT \quad [4.32]$$

Applicando la procedura [2.23], analizzata al Capitolo 2, è possibile scomporre le grandezze in una componente media ed in una componente fluttuante; successivamente le grandezze scomposte si possono sostituire nelle equazioni [4.27] - [4.32] che, alla fine, verranno mediate temporalmente. Sfruttando la proprietà [2.7], per la quale la media di una somma coincide con la somma della medie, possiamo concludere che, l'operazione sopra descritta porti alla definizione, per ogni equazione, di una somma di medie; tali termini sono già stati modellizzati e scritti al Paragrafo 2.2.3, dando origine alle RANS accoppiate col modello di turbolenza $k-\omega$, rappresentato dal sistema [2.44] - [2.54]. Quanto ottenuto risulta tuttora valido, con l'eccezione di due termini che compaiono nell'equazioni [4.28] (il termine convettivo e quello rappresentante il calore trasportato in seguito ai flussi di massa legati ai gradienti delle concentrazioni) e dell'intera equazione [4.30] (quella per la concentrazione della i -esima specie chimica). Riportiamo sotto, allora, le equazioni in questione, mettendo in evidenza i termini che necessitano di un modello:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\overline{\rho E}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho H u_j}] = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(t_{ij} u_i)} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(-q_j)} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\sum_{i=1}^N h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}} \right) \quad [4.33]$$

$$\frac{\partial \overline{(\rho Y_i)}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho Y_i u_j)} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}} \right) \quad i = 1, N-1 \quad [4.34]$$

Passiamo in rassegna gli addendi evidenziati, cercando di capire come possano essere modellizzati; la logica si basa sullo sfruttare le proprietà della media ed il legame tra la media alla Favre e la media temporale ([2.5] - [2.13]) per svolgere delle elaborazioni algebriche, e poi ricorrere a modelli per eliminare le espressioni in cui compaiono i termini fluttuanti.

Iniziamo con l'equazione [4.34]:

→ il primo termine che consideriamo è la derivata temporale della concentrazione i-esima; la sua modellazione risulta estremamente semplice, dal momento che la sola elaborazione matematica permette un'espressione priva di termini fluttuanti:

$$\frac{\partial(\overline{\rho Y_i})}{\partial t} = \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{Y}_i})}{\partial t} \quad [4.35]$$

→ il secondo è la media del flusso convettivo della i-esima concentrazione; per questo termine un calcolo matematico elementare porta a sviluppare:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho Y_i u_j)} &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho \tilde{Y}_i \tilde{u}_j)} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho \tilde{Y}_i'' \tilde{u}_j)} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho \tilde{Y}_i' u_j'')} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho Y_i'' u_j'')} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{Y}_i \tilde{u}_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho Y_i'' u_j'')} \end{aligned} \quad [4.36]$$

ne segue che abbiamo scomposto il termine nella somma di altri due di cui, uno, costituito da sole grandezze medie (quindi non ulteriormente manipolabile), e l'altro, dal prodotto della componente fluttuante della frazione massica con la componente fluttuante della velocità; quest'ultimo, quindi, rappresenta il trasporto di massa dovuto al fatto che la componente fluttuante della i-esima concentrazione venga spostata per effetto del moto fluttuante. E' possibile allora ricorrere ad una analogia col flusso termico, e, ricordandoci che il termine di flusso termico turbolento è stato trattato introducendo un numero di Prandtl turbolento (ovvero una conducibilità termica turbolenta) nella forma:

$$q_{T_j} = \overline{\rho h'' u_j} = - \frac{\mu_T}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \quad [4.37]$$

per similitudine risulta sensato definire una *diffusività di massa turbolenta*, rappresentata da un numero di *Schmidt turbolento*, ed una *viscosità turbolenta inesima* per ogni specie chimica i :

$$Sc_{i_T} = \frac{\mu_{i_T}}{\rho_i D_{im_T}} \quad [4.38]$$

$$\mu_{i_T} = \bar{\rho}_i \alpha^* \bar{k} e^{-\bar{\omega}} = \tilde{Y}_i \bar{\rho} \alpha^* \bar{k} e^{-\bar{\omega}} = \tilde{Y}_i \mu_T$$

che permettono di ottenere:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(\rho Y_i'' u_j'')} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\bar{\rho} D_{im_T} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\mu_{i_T}}{Sc_{i_T} \tilde{Y}_i} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\mu_T}{Sc_{i_T}} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad [4.39]$$

Nella pratica si riscontra come il numero di Schmidt vari ben poco da specie a specie e si attesti all'incirca su valori unitari, per cui risulta comodo riferirsi genericamente ad un unico numero, valido qualunque sia il componente ($Sc_{T_i} = Sc_T = 1$).

→ Per quanto riguarda il termine sul lato destro dell'equazione [4.34], l'elaborazione risulta pressoché immediata, ovvero:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right)} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{im} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) \quad [4.40]$$

Concentriamoci, ora, sull'equazione dell'energia [4.33]:

→ iniziamo con il termine sul lato destro dell'equazione [4.33], svolgendolo con i tradizionali passaggi algebrici:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \rho D_{im} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \cancel{h_i'' \rho D_{im}} \frac{\partial \cancel{\tilde{Y}_i}}{\partial x_j} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \cancel{\tilde{h}_i \rho D_{im}} \frac{\partial \cancel{\tilde{Y}_i''}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i'' \rho D_{im} \frac{\partial Y_i''}{\partial x_j} \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \rho D_{im} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i'' \rho D_{im} \frac{\partial Y_i''}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \tag{4.41}$$

nuovamente si osserva che da un termine se ne sono prodotti due; il primo è, pressoché, immediato:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \rho D_{im} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \bar{\rho} D_{im} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) \tag{4.42}$$

mentre il secondo termine può essere riscritto facendo alcune ipotesi; partiamo dal definire una velocità di diffusione, ovvero quella con cui la specie i-esima diffonde nella miscela a seguito dei suoi gradienti di concentrazione:

$$\rho_i u_{diff_j} = -\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \tag{4.43}$$

ragionando per analogia possiamo pensare di definire una *velocità di diffusione fluttuante* legata ai gradienti della componente fluttuante della i-esima frazione massica:

$$-\rho D_{im} \frac{\partial Y_j''}{\partial x_j} = \rho_i u_{diff_j}'' = \rho_i \frac{u_{diff_j}''}{u_j''} u_j'' = \rho_i \frac{D_{imr}}{v_{ir}} u_j'' \tag{4.44}$$

dove nei passaggi, sopra proposti, si è moltiplicato e diviso per la componente fluttuante di velocità e si è concepito il rapporto tra la velocità fluttuante diffusiva e la velocità fluttuante come quello tra la diffusività di massa turbolenta e la viscosità cinematica turbolenta del componente i-esimo. A questo punto quello che resta sono solo passaggi algebrici, ovvero:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\sum_{i=1}^N h_i'' \rho D_{im} \frac{\partial Y_i''}{\partial x_j}} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{-\sum_{i=1}^N h_i'' \rho_i \frac{D_{imr}}{v_{ir}} u_j''} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\sum_{i=1}^N \frac{D_{imr}}{v_{ir}} \left(\overline{\rho \tilde{Y}_i h_i'' u_j''} + \overline{\rho Y_i'' h_i'' u_j''} \right) \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\sum_{i=1}^N \frac{D_{imr}}{v_{ir}} \left(\overline{\rho \tilde{Y}_i h_i'' u_j''} \right) \right)
\end{aligned} \tag{4.45}$$

in cui si è trascurato la presenza di un triplo prodotto di fluttuazioni (in quanto di ordine superiore); ora risulta spontaneo riferirsi allo stesso modello del flusso termico turbolento:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\sum_{i=1}^N \frac{D_{imr}}{v_{ir}} \left(\overline{\rho \tilde{Y}_i h_i'' u_j''} \right) \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \frac{D_{imr} \lambda_{ir}}{v_{ir}} \tilde{Y}_i \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_{p_i} \mu_{ir}}{Sc_{i_r} Pr_{i_r}} \tilde{Y}_i \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \tag{4.46}$$

La pratica mostra che non solo sia possibile ritenere il numero di Schmidt turbolento costante ed uguale per ogni specie chimica, ma che lo stesso discorso valga anche per il numero di Prandtl turbolento; per cui, nelle simulazioni, un valore di 0.9 risulta, pressoché, accettabile per tutte le specie chimiche ($Pr_{Ti} = Pr_T = 0.9$). La scrittura finale risulta, quindi, data da:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_{p_i} \mu_{ir}}{Sc_{i_r} Pr_{i_r}} \tilde{Y}_i \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_{p_i} \mu_T}{Sc_T Pr_T} (\tilde{Y}_i)^2 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (\tilde{Y}_i)^2 \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Notiamo che essendo proporzionale al gradiente della temperature media, in simulazioni di puro miscelamento, in cui i valori di temperatura sono all'incirca costanti, il termine sviluppato dall'equazione [4.47] è fondamentalmente trascurabile; il suo contributo si dovrebbe, però, risentire in problemi di fluidodinamica reattiva.

→ ad ultimo il termine convettivo; consideriamo unicamente l'entalpia statica che è l'unico che necessita di una elaborazione:

$$\begin{aligned} \overline{\rho h u_j} &= \sum_{i=1}^N \overline{\rho h_i Y_i u_j} = \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i \tilde{u}_j} + \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i \tilde{u}_j} + \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i \tilde{u}_j} + \overline{\rho h_i Y_i u_j} \right) \\ &\quad + \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i u_j} + \overline{\rho h_i \tilde{Y}_i u_j} + \overline{\rho \tilde{h}_i Y_i u_j} + \overline{\rho h_i Y_i u_j} \end{aligned} \quad [4.48]$$

a questo punto si ottiene:

$$\sum_{i=1}^N \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i \tilde{u}_j} = \sum_{i=1}^N \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i \tilde{u}_j} = \overline{\rho \tilde{h} \tilde{u}_j} \quad [4.49]$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{\rho \tilde{h}_i \tilde{Y}_i u_j} = \sum_{i=1}^N \tilde{Y}_i \overline{\rho \tilde{h}_i u_j} = \sum_{i=1}^N \tilde{Y}_i \left(-\lambda_{i_T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) = -\lambda_T \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad [4.50]$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{\rho \tilde{h}_i Y_i u_j} = \sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \overline{\rho Y_i u_j} = \sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \left(-\frac{\mu_T}{Sc_{i_T}} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) = \sum_{i=1}^N \tilde{h}_i \left(-\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) \quad [4.51]$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{\rho h_i Y_i u_j} = \text{Si trascura perchè di terzo ordine} \quad [4.52]$$

mentre per quanto riguarda l'ultimo termine mancante, la prassi scientifica è postulare che sia trascurabile; la qual cosa per simulazioni di puro miscelamento risulta certamente ininfluenza, ma in quelle con fenomeni di combustione andrebbe analizzato con maggiore dettaglio.

A questo punto non resta che mostrare le equazioni [4.33] - [4.34] complete:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho H u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (-t_{ij} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (q_j) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad [4.53]$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) \quad i = 1, N-1 \quad [4.54]$$

Le grandezze che compaiono nelle equazioni sono, ovviamente, grandezze medie; non sono state soprasssegnate per evitare un appesantimento della scrittura, coerentemente con quanto fatto già nel Capitolo 2.

Ed ecco, infine, il modello completo utilizzato in questo lavoro:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad [4.55]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho H u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i \hat{\tau}_{ij} - q_j] + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \bar{k} e^{\tilde{\omega}} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad [4.56]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad [4.57]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \bar{k} e^{\tilde{\omega}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad [4.58]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\omega}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \tilde{\omega} u_j) = \\ & = \frac{\alpha}{k} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta \rho e^{\tilde{\omega}} + (\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad [4.59]$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) \quad i = 1, N-1 \quad [4.60]$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad [4.61]$$

$$p = \rho RT \quad [4.62]$$

$$q_j = - \left(\lambda + \frac{\bar{\mu}_T}{Pr_T} \right) \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad [4.63]$$

$$\tau_{ij} = 2 \bar{\mu}_T \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} \quad [4.64]$$

$$\hat{\tau}_{ij} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \tau_{ij} \quad [4.65]$$

$$\bar{k} = \max(0, k) \quad [4.66]$$

$$\bar{\mu}_T = \alpha^* \rho \bar{k} e^{-\bar{\omega}} \quad [4.67]$$

Per quanto riguarda i coefficienti il modello risulta completo con le seguenti espressioni per simulazioni con flussi a basso numero di Reynolds:

$$\alpha = \alpha_t^* \frac{\alpha_0^* R_k + \text{Re}_T}{R_k + \text{Re}_T}, \quad \alpha = \alpha_t \frac{\alpha_0 R_\omega + \text{Re}_T}{R_\omega + \text{Re}_T} (\alpha_t^*)^{-1} \quad [4.68]$$

$$\beta^* = \beta_t^* \frac{\beta_0^* R_\beta^4 + \text{Re}_T^4}{R_\beta^4 + \text{Re}_T^4}, \quad \beta = \beta_t \quad [4.69]$$

$$\alpha_t^* = 1, \quad \alpha_t = 5/9, \quad \beta_t^* = 9/100, \quad \beta_t = 3/40 \quad [4.70]$$

$$\alpha_0^* = 1/40, \quad \alpha_0 = 1/10, \quad \beta_0^* = 5/18 \quad [4.71]$$

$$R_k = 6, \quad R_\omega = 2.7, \quad R_\beta = 2.7 \quad [4.72]$$

$$\sigma^* = \sigma = 1/2 \quad [4.73]$$

e con correzione per flussi ad alto numero di Reynolds:

$$\alpha_t^* = 1, \quad \alpha_t = 1, \quad \beta_t^* = 1, \quad \beta_t = 1 \quad [4.74]$$

$$R_k = 1, \quad R_\omega = 1, \quad R_\beta = 1 \quad [4.75]$$

con Re_T numero di Reynolds turbolento proporzionale al rapporto tra la viscosità turbolenta e quella laminare:

$$\text{Re}_T = \frac{\rho \bar{k}}{\mu e^{\bar{\omega}}} \quad [4.76]$$

Dal momento che nel modello non compaiono termini fluttuanti, tutte le grandezze devono essere intese come grandezze medie; di conseguenza si è omessa la sottolineatura per evitare di rendere l'aspetto grafico troppo pesante.

Per simulazioni su getti assialsimmetrici si è, inoltre, utilizzata la correzione proposta da Wilcox [10] per questo genere di prove, data da:

$$\beta^* = \beta_t \frac{\beta_0^* R_\beta^4 + \text{Re}_T^4}{R_\beta^4 + \text{Re}_T^4} f_{\beta^*}$$

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & X_k \leq 0 \\ \frac{1+680X_k^2}{1+400X_k^2} & X_k > 0 \end{cases} \quad [4.77]$$

$$X_k = \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}$$

e:

$$\beta = \beta_t f_\beta$$

$$f_\beta = \begin{cases} 1 & X_\omega \leq 0 \\ \frac{1+70X_\omega}{1+80X_\omega} & X_\omega > 0 \end{cases} \quad [4.78]$$

$$X_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}{(\beta_t^* \omega)^3} \right|$$

avendo indicato con Ω_{ij} e S_{ij} :

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{e} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad [4.79]$$

Continua ad essere valida la condizione di realizzabilità, nella forma esposta al Paragrafo 2.2.4.

4.4.1. Modello per flussi bidimensionali assialsimmetrici

Per completezza dedichiamo questo paragrafo alla stesura delle equazioni valide nel caso in cui i flussi, oggetto di studio, avvengano su geometrie bidimensionali assialsimmetriche; in queste condizioni risulta conveniente ricorrere alle coordinate cilindriche che indicheremo con x ed r . Il sistema di equazioni esposto al paragrafo precedente risulta quindi nella forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho v)}{\partial r} = 0 \quad [4.80]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho H u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho H v) = \beta^* \rho \bar{k} e^{\tilde{\omega}} + A + B + C + D_1 + D_2 \quad [4.81]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho u v) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial(\hat{\tau}_{xx})}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \hat{\tau}_{xr})}{\partial r} \quad [4.82]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v^2) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial(\hat{\tau}_{xr})}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \hat{\tau}_{rr})}{\partial r} \quad [4.83]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho k u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho k v) = \\ & -\beta^* \rho \bar{k} e^{\tilde{\omega}} - C + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r (\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad [4.84]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\omega}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \tilde{\omega} u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho \tilde{\omega} v) - (\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial r} \right)^2 \right] = \\ & = -\frac{\alpha}{k} C - \beta \rho e^{\tilde{\omega}} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r (\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad [4.85]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho Y_i u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho Y_i v) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) \quad i = 1, N-1 \end{aligned} \quad [4.86]$$

dove per motivi grafici abbiamo indicato con A , B , C , D_1 e D_2 i termini:

$$A = \frac{\partial}{\partial x}(\hat{\tau}_{xx} u + \hat{\tau}_{xr} v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \hat{\tau}_{xr} u + r \hat{\tau}_{rr} v) \quad [4.87]$$

$$B = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial(r q_r)}{\partial r} \quad [4.88]$$

$$-C = 2\bar{\mu}_T \left\{ \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 \right\} \quad [4.89]$$

$$-\frac{2}{3} \bar{\mu}_T (\nabla \cdot \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \rho \bar{k} (\nabla \cdot \mathbf{u})$$

$$D_1 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) \quad [4.90]$$

$$D_2 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad [4.91]$$

in cui il tensore degli sforzi turbolento è costituito dalle seguenti componenti:

$$\tau_{xx} = 2\bar{\mu}_T \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \quad [4.92]$$

$$\tau_{rr} = 2\bar{\mu}_T \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \quad [4.93]$$

$$\tau_{xr} = \bar{\mu}_T \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad [4.94]$$

ed il legame tra il tensore degli sforzi completo (laminare più turbolento) e quello turbolento risulta sempre essere:

$$\hat{\tau}_{ij} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \tau_{ij} \quad [4.95]$$

ricordando che l'operatore divergenza in coordinate cilindriche diventa:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rv)}{\partial r} \quad [4.96]$$

I coefficienti del modello restano, naturalmente, quelli già proposto al paragrafo precedente ed indicate dalle equazioni [4.68] -[4.78].

4.4.2. Condizione di validità del modello multicomponente

Nel ricavare il modello multicomponente, la viscosità e la conducibilità termica della *i*-esima specie chimica e la diffusività di massa della specie *i*-esima con quella *j*-esima *non* sono state scomposte in una componente fluttuante ed in una componente media, *ma sono state approssimate direttamente alla componente media*. La qual cosa si è resa necessaria poiché la presenza dei termini fluttuanti, nei parametri sopra citati, avrebbe comportato l'insorgere di ulteriori addendi che avrebbero richiesto una modellazione, a causa della presenza di grandezze oscillanti da eliminare. Dal momento che, lo scopo principale della ricerca resta l'analisi del comportamento del metodo numerico degli elementi finiti discontinui ad un problema di fluidodinamica multicomponente, ulteriori modelli più raffinati esulano dall'obbiettivo della ricerca e potranno essere proposti ed elaborati con studi successivi. Tuttavia, la semplificazione adottata risulta relativamente di poco conto nel momento in cui sia possibile ritenere trascurabili le fluttuazioni rispetto ai valor medi dei parametri in esame; in formule questo si traduce col fatto che, chiamata con $f(T)$ la generica grandezza funzione della temperatura, una sua variazione a seguito di una variazione della temperatura all'interno di un passo temporale, sia trascurabile, ovvero che:

$$\frac{\delta f}{f} = \frac{\delta T}{T} \frac{T}{f} \frac{\partial f}{\partial T} \ll 1 \quad [4.97]$$

la qual cosa per simulazioni di flussi in miscelazione in cui i valori di temperatura restano, pressoché, costanti è del tutto accettabile. A conferma riportiamo di seguito dei grafici che rappresentano, in percentuale, gli andamenti del parametro $\delta f/f$ per viscosità e conducibilità dell'aria e del propano (C_3H_8) e della diffusività di massa aria-propano in funzione della temperatura T , per valori fissati di δT pari a $10^\circ C$ (valore scelto piuttosto alto per ragioni di sicurezza!). I grafici sono stati costruiti utilizzando i dati dei coefficienti riportati in [8] e avendo scelto, a puro scopo esemplificativo, le specie sopra citate, poiché il ragionamento sarebbe risultato valido anche per qualunque altra specie chimica; la scelta è, inoltre, stata motivata dal fatto che tali gas sono stati, poi, utilizzati per condurre i test che verranno descritti nel capitolo successivo.

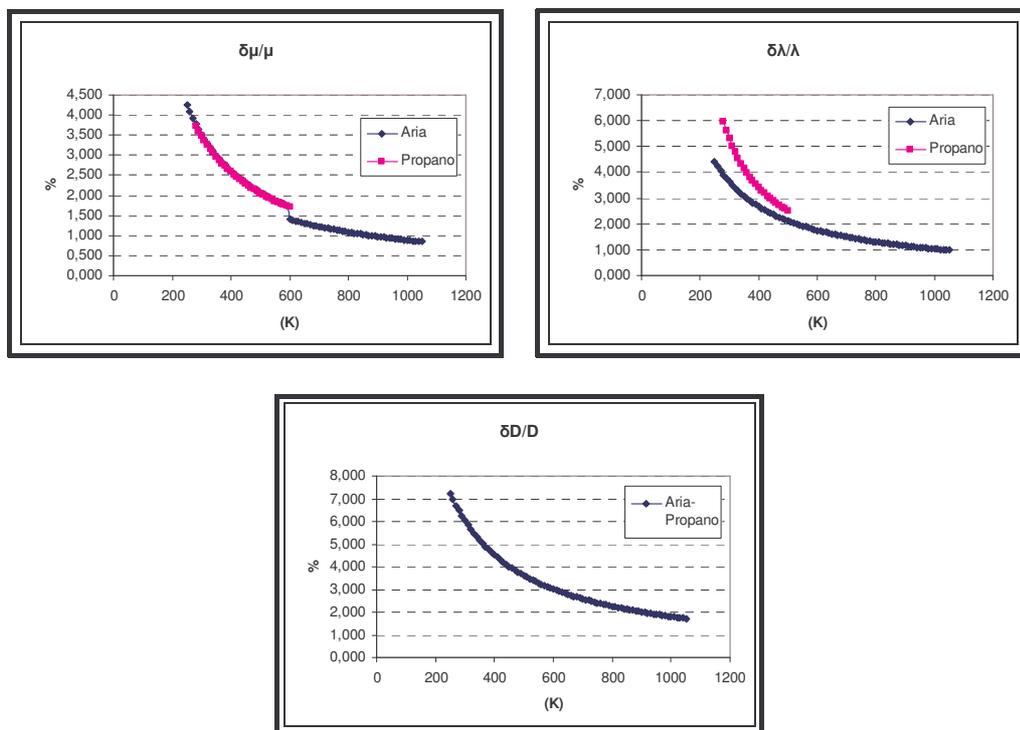
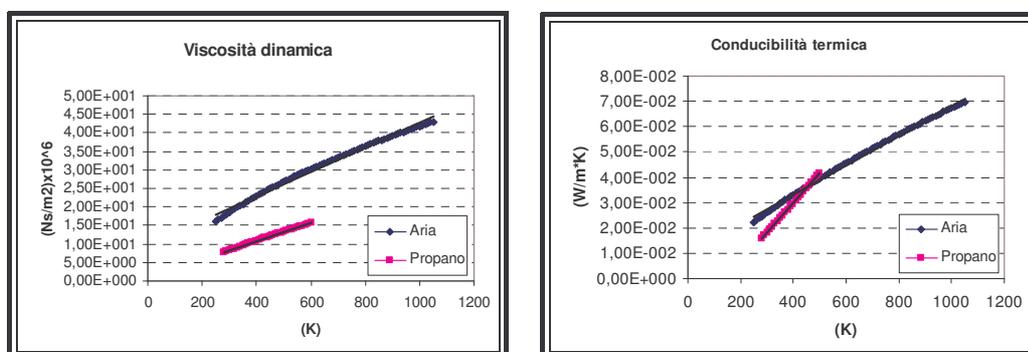


Figura 1: Andamento percentuale $\delta f/f$ con T , per un valore imposto di δT pari a 10°C .

Osserviamo come gli errori restino dell'ordine di qualche per cento. Una seconda considerazione riguarda il fatto che, i valori medi della viscosità, della conducibilità termica e della diffusività, sono stati calcolati utilizzando unicamente il valor medio della temperatura e non il valor medio più quello fluttuante come sarebbe, in realtà, corretto; ugualmente questa semplificazione risulta di poco conto, nel momento in cui l'andamento dei parametri risulti circa lineare con T , nell'intorno del valore della temperatura desiderato. I grafici sotto riportati mostrano come la qual cosa non sia vera solo in un intorno di T , ma per tutto il range di valori di temperatura in cui le formule termodinamiche riportante in [8] hanno validità.



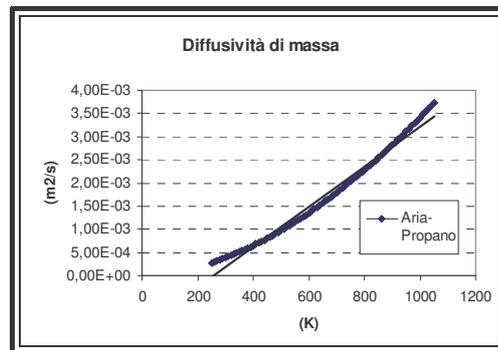


Figura 2: Andamento della viscosità, della conducibilità termica e della diffusività di massa con la temperatura; gli andamenti poco si discostano dalla linearità.

I discorsi sopra riportati, come già accennato, sono fondati solo per variazioni modeste di temperatura ad ogni step temporale; per simulazioni in cui compaiono reazioni chimiche ed in cui, cioè, si hanno forti variazioni di temperatura da uno step temporale all'altro o in prossimità di fiamme e fenomeni reattivi, tale approssimazione potrebbe essere lacunosa; di conseguenza un modello di combustione turbolenta, in futuri lavori, dovrebbe tenere conto anche di questa problematica.

Un'ultima osservazione: da una rigorosa formulazione matematica, l'equazione [4.62] non è perfettamente corretta, in quanto la sua stesura completa risulterebbe essere:

$$P = \bar{\rho} R \tilde{T} + \bar{\rho} \sum_{i=1}^N R_i \overline{T^n Y_i^n} \quad [4.98]$$

Seguendo la comune prassi scientifica, però, il secondo termine sul lato destro dell'equazione [4.98] è stato postulato essere trascurabile; la qual cosa per simulazioni di puro miscelamento risulta certamente ininfluenza, ma, come già precedentemente sottolineato, in quelle con fenomeni di combustione andrebbe analizzato con maggiore dettaglio.

4.5. Discretizzazione spaziale (DG)

In questo paragrafo eviteremo di riproporre tutta la trattazione esposta ai Paragrafi 3.2 e 3.3, dal momento che i passaggi algebrici sono i medesimi, semplicemente applicati al sistema di equazioni [4.55] - [4.67]. Ci limiteremo ad evidenziare solo le novità, rispetto a quanto già esposto, legate naturalmente alle modifiche fatte alle RANS accoppiate al modello $k-\omega$ ed esposte al paragrafo precedente, affinché il tutto possa essere adattato ai flussi multicomponente.

Partiamo dallo scrivere le equazioni del sistema [4.55] - [4.67] nella forma compatta:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_m(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [4.99]$$

Essa coincide con quella esposta al Capitolo 2, con l'eccezione dell'aggiunta di $(N-1)$ righe ai flussi convettivi, diffusivi 'viscoso', diffusivi 'di massa' e al termine sorgente pari, cioè, al numero delle frazioni massiche per cui viene risolto il problema (matematicamente la differenza tra \mathbf{F}_v e \mathbf{F}_m non sussiste, poiché si parla sempre di flussi diffusivi; si è, però, deciso di separare i due termini per poterli meglio discutere durante il resto della trattazione). L' N -esima specie viene ricavata con l'equazione [4.61]; di fatto, però, tra quelli aggiunti, solo i termini presenti nel flusso convettivo non risultano nulli, facilmente ricavabili da un confronto con la [4.60]:

$$\mathbf{F}_c = \begin{bmatrix} \dots & \dots \\ \rho Y_{iu} & \rho Y_{iv} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_v = \begin{bmatrix} \dots & \dots \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} \dots & \dots \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad i=1, N-1 \quad [4.100]$$

in più notiamo la presenza di un addendo extra, che tiene conto dei flussi che compaiono nel momento in cui si considera una miscela anziché un flusso monocomponente e che da un confronto con [4.53] e [4.54], si riassumono in

$$\mathbf{F}_m = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \left(-\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + & \left(-\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + \\ + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right) & + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ \left(-\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) & \left(-\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) \end{bmatrix} \quad [4.101]$$

A questo punto, procedendo per successive elaborazioni di discretizzazione spaziale si giunge alla seguente forma:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \varphi_h \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{u}_h) d\Omega + \oint_{\partial\Omega_e} \varphi_h \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{n} d\sigma + \\ & - \int_{\Omega_e} \nabla \varphi_h \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega + \int_{\Omega_e} \varphi_h \mathbf{s}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h) d\Omega = \mathbf{0} \quad \forall \varphi_h \in W_h \end{aligned} \quad [4.102]$$

avendo indicato con \mathbf{F} la somma del flusso convettivo, diffusivo ‘viscoso’ e diffusivo ‘di massa’.

Il flusso numerico può essere scomposto ora nella sua componente convettiva, viscosa e di massa, nella forma:

$$\begin{aligned} & \mathbf{H}(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) = \\ & \mathbf{H}_C(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) + \mathbf{H}_V(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) + \mathbf{H}_m(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) \end{aligned} \quad [4.103]$$

La *componente convettiva* \mathbf{H}_C è del tutto analoga a quella comunemente utilizzata in metodi ai volumi finiti di tipo upwind. In questo lavoro è stato utilizzato sia il flusso numerico di Van Leer modificato da Hanel [11] sia il flusso numerico di Godunov basato su un solutore di Riemann esatto, nella versione proposta da Gottlieb e Groth per miscele di fluidi [12]. Le due soluzioni sono opzionalmente disponibili nel codice multicomponente.

Le *componenti viscosa e di massa* \mathbf{H}_V e \mathbf{H}_m nell’ambito del metodo DG non possono essere calcolate semplicemente a partire dai gradienti delle variabili all’interno degli elementi, ma devono, in qualche modo, tener conto dell’effetto

delle discontinuità di interfaccia sui gradienti stessi. In questo lavoro viene utilizzato lo schema di discretizzazione del flusso viscoso proposto in [15] e [16], per cui come già descritto al Paragrafo 3.2, otteniamo:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_v(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) &= \\ &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{F}_v(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{r}_e) + \mathbf{F}_v(\mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+ + \mathbf{r}_e^+) \right] \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad [4.104]$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_m(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+, \mathbf{n}) &= \\ &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{F}_m(\mathbf{u}_h, \nabla \mathbf{u}_h + \mathbf{r}_e) + \mathbf{F}_m(\mathbf{u}_h^+, \nabla \mathbf{u}_h^+ + \mathbf{r}_e^+) \right] \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad [4.105]$$

ovvero i flussi sono dati dal valor medio all'interfaccia.

4.6. Integrazione temporale

Nonostante il sistema di equazioni alle derivate parziali scelto per i flussi multicomponente e descritto in questo capitolo, presenti alcuni termini aggiuntivi rispetto alle RANS accoppiate al modello di turbolenza $k-\omega$, è sempre possibile scrivere il sistema, discretizzato nello spazio, in una forma matriciale compatta.

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \mathbf{R}(\mathbf{U}) = \mathbf{0} \quad [4.106]$$

si noti che questa forma risulta identica a [3.25].

Il codice per flussi monocomponente è scritto in variabili conservative, ovvero ρ , ρE , ρu , ρv , ρk , $\rho \omega$. Tale scelta non risulta particolarmente adeguata per un codice multicomponente che vuole sfruttare il modello fisico descritto al Paragrafo 4.4. Infatti ad ogni step temporale risulta necessario il calcolo delle proprietà termodinamiche; in particolare, i calori specifici e l'entalpia, in quanto funzioni polinomiali della temperatura, richiedono l'utilizzo di questa grandezza. L'utilizzo di variabili conservative richiederebbe, quindi, il calcolo della temperatura dalla variabile ρE ; bisognerebbe allora dividere la variabile per la densità e sottrarre al risultato ottenuto la metà della somma delle velocità al quadrato. Così facendo si otterrebbe l'energia interna e , dalla quale, però, non sarebbe facile ottenere la temperatura, essendo:

$$e = \sum_{i=1}^N e_i Y_i = \sum_{i=1}^N \left(\int_0^T c_{v_i}(T) dt \right) Y_i \quad [4.107]$$

Bisognerebbe, perciò, aggiungere un calcolo iterativo per calcolare la temperatura; la qual cosa, oltre che più pesante dal punto di vista computazionale, risulta meno accurata a livello di precisione dei risultati. Ne segue come sia preferibile ricorrere all'utilizzo di variabili primitive. La scelta è ricaduta su $\rho, T, u, v, k, \omega, Y_i$, contrariamente alle scelte abituali in cui come prima variabile viene privilegiata la pressione. Infatti nei problemi di combustione di natura ingegneristica la pressione risulta, spesso, pressoché costante su tutto il dominio. Ben più significativo, allora, pensando ad una futura estensione alla fluidodinamica reattiva, il monitoraggio diretto di una variabile, come la temperatura, soggetta a grandi variazioni all'interno del dominio di calcolo. Con brevi passaggi algebrici è possibile allora elaborare l'equazione [4.106]:

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{W}}{d\mathbf{W}} \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \mathbf{R}(\mathbf{W}) = \mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{d\mathbf{W}} \frac{d\mathbf{W}}{dt} + \mathbf{R}(\mathbf{W}) = \mathbf{M}\mathbf{Q} \frac{d\mathbf{W}}{dt} + \mathbf{R}(\mathbf{W}) = \mathbf{0} \quad [4.108]$$

con \mathbf{W} vettore delle incognite primitive di dimensione $((nv \times nu \times ne) \times 1)$ e \mathbf{Q} matrice di trasformazione, data dalle derivate delle variabili conservative rispetto a quelle primitive di dimensione $((nu \times nu) \times ne) \times ((nu \times nu) \times ne)$. Per ogni elemento il blocco \mathbf{Q}_e , $((nu \times nu) \times (nu \times nu))$, della matrice \mathbf{Q} è dato da:

$$\mathbf{Q}_e = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ E & \rho c_v & \rho u & \rho v & 0 & 0 & \rho(e_i - e_N) \\ u & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ k & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ \tilde{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 \\ Y_i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho \end{bmatrix}, \quad i=1, N-1 \quad [4.109]$$

Fatta questa premessa, poi, tutti i discorsi sugli schemi di avanzamento di tipo esplicito e di tipo implicito proposti al Paragrafo 3.3, sono tuttora validi. La presenza della matrice \mathbf{Q} non influenza certamente ne gli schemi di tipo esplicito ne quelli di tipo implicito con cui il codice è stato implementato; l'unica osservazione riguarda il fatto che, quest'ultima, sia nell'integrazione temporale di tipo esplicito sia in quella di tipo implicito, viene calcolata sempre in riferimento all'istante t^n . Quindi, ad esempio, per un metodo esplicito a tre stadi avremo:

$$\begin{aligned}
\mathbf{MQ}(\mathbf{U}^n, t^n)(\mathbf{U}^* - \mathbf{U}^n) + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) &= \mathbf{0} \\
\mathbf{MQ}(\mathbf{U}^*, t^n)(\mathbf{U}^{**} - (\frac{3}{4}\mathbf{U}^n + \frac{1}{4}\mathbf{U}^*)) + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^*, t^n) &= \mathbf{0} \quad [4.110] \\
\mathbf{MQ}(\mathbf{U}^{**}, t^n)(\mathbf{U}^{n+1} - (\frac{1}{3}\mathbf{U}^n + \frac{2}{3}\mathbf{U}^{**})) + \frac{2}{3}\Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^{**}, t^n) &= \mathbf{0}
\end{aligned}$$

con Δt , chiaramente, il passo temporale scelto, mentre per il metodo implicito si avrà:

$$(\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) = Y_1 \mathbf{K}_1 + Y_2 \mathbf{K}_2 \quad [4.111]$$

$$\left[\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \alpha \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}^n, t^n) \right] \mathbf{Q}(\mathbf{U}^n, t^n) \mathbf{K}_1 + \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, t^n) = \mathbf{0} \quad [4.112]$$

$$\left[\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \alpha \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}^n, t^n) \right] \mathbf{Q}(\mathbf{U}^n, t^n) \mathbf{K}_2 + \mathbf{R}(\mathbf{U}^n + \beta \mathbf{K}_1, t^n) = \mathbf{0} \quad [4.113]$$

Nuovamente, evitiamo di riportare le considerazioni già proposte al Paragrafo 3.3, ma ci limitiamo a dire che tutte le matrici Jacobiane sono state calcolate analiticamente (tranne lo Jacobiano del flusso convettivo di Godunov calcolato numericamente) e per un consulto si invita a riferirsi all'Appendice del presente testo.

4.7. Condizioni sui contorni del dominio

Questa sezione comprende le equazioni che definiscono le variabili e le loro derivate sull'esterno delle facce di frontiera del dominio di calcolo.

Siccome le tipologie di bordo, attualmente implementate, coincidono con quelle preesistenti nel codice monocomponente, la trattazione sarebbe di fatto, pressoché, coincidente con quella esposta al Paragrafo 3.4. Tuttavia, è bene porre l'attenzione su due aspetti: il primo è che, mentre per un gas a calori specifici costanti il rapporto tra i calori specifici γ è costante (e, quindi, invariato in qualunque punto all'interno del dominio e sul bordo), per una miscela di gas, in cui i calori specifici sono stati scelti funzione della temperatura, in ogni punto del campo di moto e del contorno la γ della miscela sarà funzione sia della concentrazione che della temperatura; di questo occorre tener in considerazione nelle equazioni per il calcolo delle variabili di bordo a partire dalle grandezze imposte. In secondo luogo abbiamo la necessità di introdurre un numero $(N-1)$ di condizioni ulteriori rispetto ad un caso monocomponente, a causa della presenza delle nuove variabili rappresentate dalle frazioni massiche i -esime; quest'ultime

verranno imposte o estrapolate a seconda del segno di q_n ; in caso di flusso entrante le Y_i verranno imposte, altrimenti estrapolate dall'interno del dominio. Evitiamo, quindi, di riportare il set completo di equazioni già scritte ma a titolo esemplificativo ci limitiamo a presentare le equazioni per un bordo di tipo *far*, in cui se la componente q_n di velocità normale alla frontiera è supersonica le variabili sono assegnate se il flusso è entrante mentre sono uguagliate a quelle interne se il flusso è uscente, coerentemente col fatto che le direzioni caratteristiche, associate agli autovalori della matrice Jacobiana del flusso convettivo normale alla frontiera, sono tutte entranti nel dominio nel primo caso e tutte uscenti dal dominio nel secondo caso. Se, invece, q_n è subsonica entrante, tre direzioni caratteristiche entrano nel dominio ed una esce; ne segue che tre condizioni devono essere imposte ed una proviene dall'interno del dominio. La variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n - c$, la direzione del vettore velocità e l'entropia sono grandezze imposte; la variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$ è la grandezza calcolata con le variabili note sull'interno delle facce di frontiera. In formule:

$$\begin{aligned}
 q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma^+ - 1} &= R = q + \frac{2c}{\gamma - 1} \\
 q_n^+ - \frac{2c^+}{\gamma^+ - 1} &= \bar{R} = a\bar{q} - \frac{2\bar{c}}{\bar{\gamma} - 1} \\
 \frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma^+}} &= \bar{\sigma} \\
 k^+ &= \bar{k} \\
 \tilde{\omega}^+ &= \bar{\omega} \\
 Y_i^+ &= \bar{Y}_i
 \end{aligned}
 \tag{4.114}$$

con a prodotto scalare tra il versore normale \mathbf{n} ed il versore del vettore velocità (individuato dai coseni direttori degli angoli) rappresentato dall'equazione [3.34]. Se invece la q_n è subsonica uscente tre direzioni caratteristiche escono dal dominio ed una entra; ne segue che tre condizioni provengono dall'interno del dominio ed una deve essere imposta. La variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n + c$, la componente della velocità tangente al contorno e l'entropia sono grandezze calcolate con le variabili note sull'interno delle facce di frontiera; la variabile di Riemann associata alla caratteristica $q_n - c$ è la grandezza imposta. In formule:

$$\begin{aligned}
q_n^+ + \frac{2c^+}{\gamma^+ - 1} &= R = q + \frac{2c}{\gamma - 1} \\
q_n^+ - \frac{2c^+}{\gamma^+ - 1} &= \bar{R} = a\bar{q} - \frac{2\bar{c}}{\bar{\gamma} - 1} \\
\frac{p^+}{(\rho^+)^{\gamma^+}} &= \sigma \quad [4.115] \\
k^+ &= k \\
\tilde{\omega}^+ &= \tilde{\omega} \\
Y_i^+ &= Y_i
\end{aligned}$$

Per quanto riguarda le derivate e tutte le altre tipologie di condizioni al contorno si rimanda alle considerazioni già proposte al Paragrafo 3.4; le equazioni lì presentate restano tuttora valide previe modifiche apportabili secondo la logica appena esposta.

4.8. Adimensionalizzazione del codice multicomponente

Anche per il codice multicomponente si è mantenuta una adimensionalizzazione, chiaramente con lo scopo numerico di dare in pasto al calcolatore numeri dello stesso ordine di grandezza. Le grandezze scelte come riferimento principale sono sempre la lunghezza l_r , la densità ρ_r , la pressione p_r e la costante del gas R_r . Il codice è strutturato in modo che i valori numerici propri di una esecuzione siano tutti valori adimensionali (compresi l'input e l'output); il valore dimensionale di ciascuna grandezza si ottiene moltiplicando il valore adimensionale per la corrispondente grandezza di riferimento. Per quanto riguarda le espressioni delle grandezze di riferimento in funzione delle grandezze di riferimento principale l_r , ρ_r , p_r e R_r si rimanda alla Tabella 3-1. Tali espressioni si ottengono dalle espressioni dimensionali che legano ogni grandezza di riferimento alle prescelte grandezze di riferimento principali l_r , ρ_r , p_r e R_r attraverso le grandezze fondamentali lunghezza, massa, tempo e temperatura. L'unica aggiunta a quanto già esposto, è l'adimensionalizzazione del coefficiente di diffusività di massa, dato dall'espressione: $l_r \rho_r^{0.5} p_r^{0.5}$.

Nel corso del prossimo capitolo verranno presentati i risultati numerici delle simulazioni effettuate in questo lavoro di ricerca; tali dati saranno proposti in forma adimensionale sia per non appesantire la trattazione con le unità di misura sia per il fatto che, più che i valori assoluti, sono significativi gli andamenti delle variabili in una fissata geometria spaziale. Per i test, inoltre, si è deciso di

utilizzare sempre lo stesso set di valori delle grandezze di riferimento, riportati nella tabella seguente:

ρ_r	p_r	R_r	l_r
1.201 kg/m ³	101325 Pa	287.04 J/kg*K	1 m

Tabella 4-1: Valori di riferimento per i test numerici.

Ovviamente la loro definizioni è arbitraria e sarebbe potuta anche essere differente, senza chiaramente influenzare i risultati finali.

5. ANALISI NUMERICA

5.1. Introduzione

In questa sezione verranno descritti i test numerici che sono stati realizzati utilizzando il codice multicomponente descritto al Capitolo 4. Innanzitutto verranno presentati alcuni casi monodimensionali, resi necessari per poter effettuare il collaudo del solutore dei flussi convettivi. Successivamente verrà dato spazio a simulazioni basate sull'utilizzo di gas chimicamente uguali prima su geometrie piane (profilo alare e lastra piana), poi su geometrie assialsimmetriche (condotto cilindrico), con lo scopo di studiare il comportamento numerico di un mixing di specie chimiche avente le stesse proprietà, ma in condizioni fluidodinamiche e geometriche differenti. In conclusione si prenderanno in esame dei test riguardanti getti coassiali di aria-propano in miscelazione non viscosa, laminare e turbolenta.

5.2. Simulazioni monodimensionali

Per garantire la correttezza nel calcolo del flusso numerico convettivo è stato messo a punto un codice monodimensionale; il codice è stato costruito partendo dal set di equazioni [4.55] - [4.67] con l'esclusione della seconda componente della velocità (v). L'obiettivo di questa serie di test è verificare il comportamento regolare dei risultati nel calcolo del flusso convettivo, la cui forma è stata presentata al Paragrafo 4.5. Di conseguenza sono state eseguite delle simulazioni di tipo *non viscoso* in cui, cioè, l'unico termine di flusso è rappresentato proprio da quello di convezione, nella forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [5.1]$$

La bontà dei risultati è stata garantita da un confronto con la soluzione esatta, rappresentata da una soluzione numerica, ottenuta tramite un solutore di Riemann esatto ed una griglia fittissima, per poter, così, riprodurre, nei vari problemi, il rispettivo andamento analitico; di seguito le due tipologie di prove eseguite.

5.2.1. Problema di Sod

Nel primo test si è deciso di optare per un problema tipico nell'analisi dei flussi convettivi, ovvero il test di Sod. Dal momento che il codice è predisposto per la scelta di un qualsivoglia numero di specie chimiche si è deciso di realizzare un caso che prevedesse la presenza di due specie chimiche identiche dal punto di vista delle proprietà. In tal modo non solo si è potuta registrare la risposta al problema di Sod ma anche il comportamento del codice in presenza di due specie chimiche, seppur perfettamente identiche; c'è comunque da sottolineare il fatto che il codice multicomponente non è in grado di 'discernere' l'uguaglianza delle specie, ma solo di registrare la presenza di uno o più componenti.

Nella tabella sottostante i valori iniziali che sono stati dati in input:

<i>LEFT</i>	<i>RIGHT</i>
$P_L = 1$	$P_R = 0.1$
$T_L = 1$	$T_R = 0.8$
$u_L = 0$	$u_R = 0$
$Y_L = 1$	$Y_R = 0$

Tabella 5-1: Left e Right input per il problema di Sod.

dove L ed R rappresentano i valori a sinistra ed a destra rispetto al centro del dominio (scelto di lunghezza unitaria e suddiviso in cento elementi) e p , T , u e Y rappresentano i valori di pressione, temperatura, velocità e frazione massica.

Si sono realizzate simulazioni con approssimazioni polinomiali di grado zero ($P0$), uno ($P1$) e due ($P2$), con una integrazione temporale di tipo esplicito a tre step per passo temporale per un migliore grado di accuratezza ed il flusso convettivo è stato discretizzato con il flusso numerico di Godunov basato sul solutore di Riemann nella versione proposta da Gottlieb e Groth [12]. Di seguito, i diagrammi che mostrano il confronto della soluzione $P2$ con la soluzione esatta ad un tempo adimensionale prestabilito pari a 0.2. Da notare che le curve sono, pressoché, sovrapposte ad eccezione delle onde d'urto, dove il codice, non essendo limitato, risente del fenomeno di Gibbs, ovvero delle oscillazioni della soluzione in corrispondenza della discontinuità. Perfettamente sovrapposte risultano invece le onde di rarefazione:

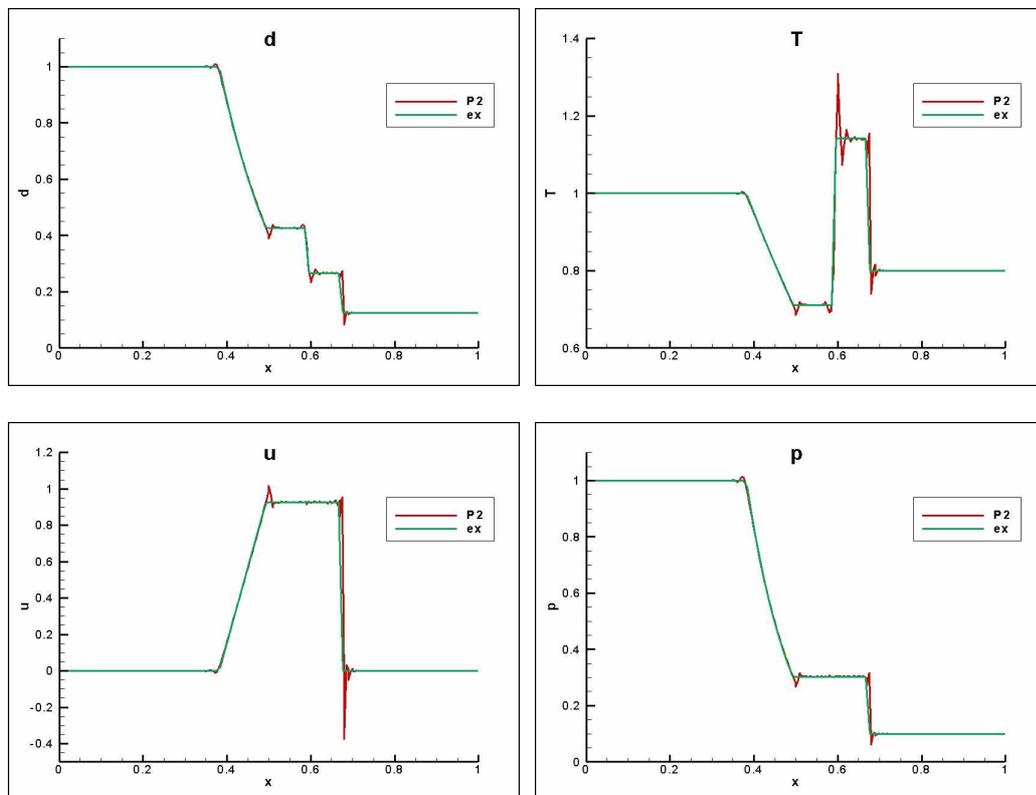


Figura 3: Confronto d , T , u , p del codice con la soluzione esatta al tempo fissato di 0.2.

Non è stato proposto l'andamento della frazione massica poiché non è possibile un confronto con la soluzione esatta; tuttavia, la sua verifica è presto ottenibile guardando l'ultimo diagramma della Figura 4, in cui si evince, chiaramente, l'andamento corretto della frazione massica, costituito, cioè, da un gradino in corrispondenza della discontinuità di contatto ($x \approx 0.6$).

Interessante è, anche, il confronto tra le curve riferite ai diversi gradi polinomiali; si noterà come, all'aumentare del grado polinomiale del polinomio interpolante, migliori l'accuratezza con cui viene riprodotta la soluzione nelle onde di rarefazione e d'urto. Di seguito per le grandezze di interesse, tra le quali, ora, anche la frazione massica, vengono proposti il grado $P0$, $P1$ e $P2$:

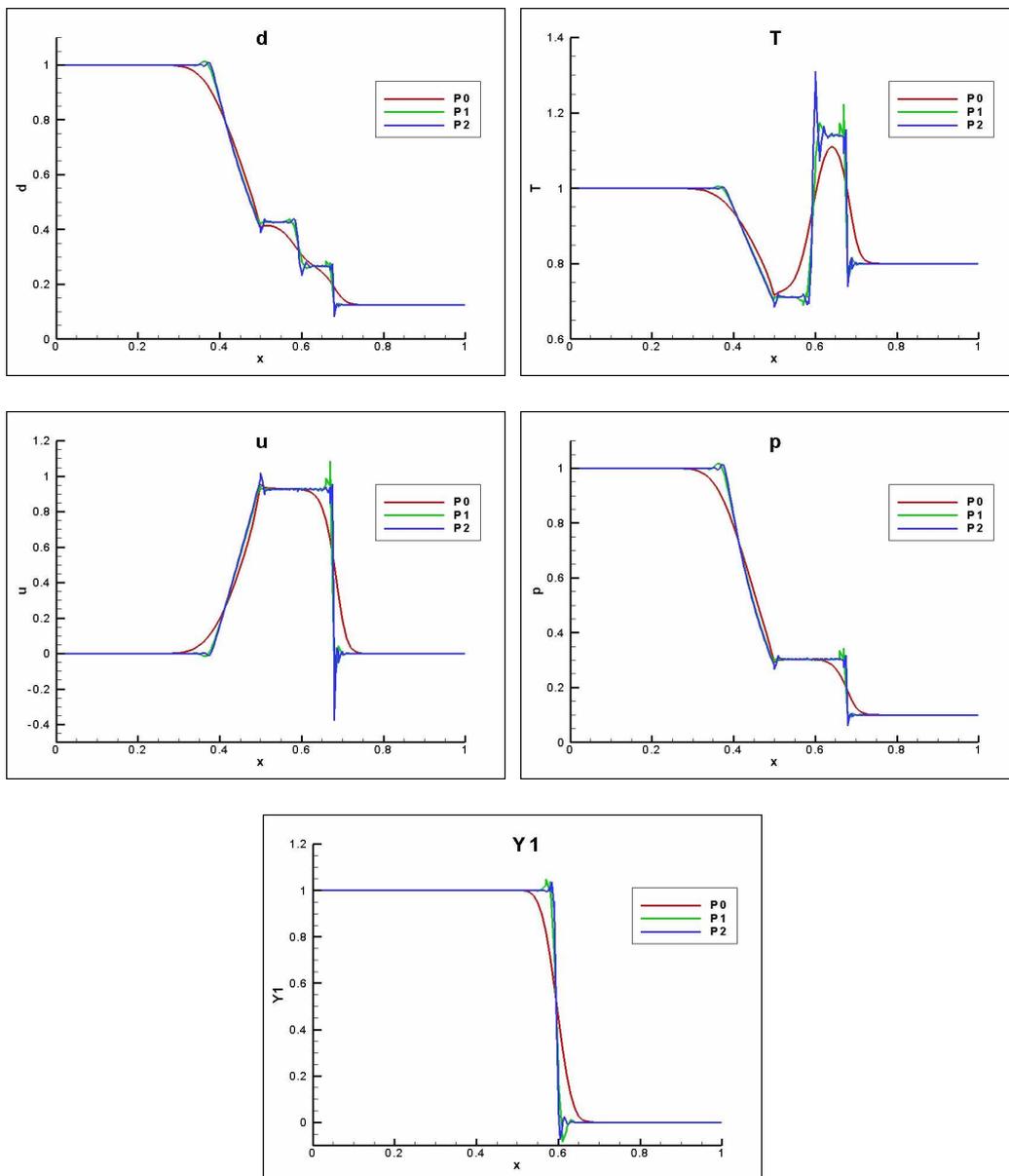


Figura 4: Confronto tra i gradi di approssimazione polinomiale P_0 , P_1 e P_2 .

Si noti, come è giusto che sia, che aumentando l'ordine di approssimazione polinomiale le oscillazioni tendano a concentrarsi nell'intorno della discontinuità.

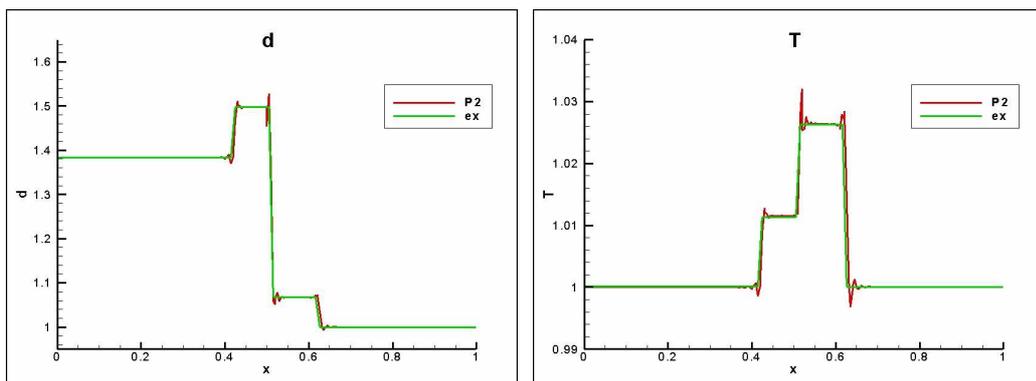
5.2.2. Problema monodimensionale a gas diversi

Poiché verranno successivamente prese in considerazione delle simulazioni in cui, su geometrie piane ed assialsimmetriche, aria e propano possano miscelarsi, si è deciso di fare un test monodimensionale che ne fosse propedeutico. Di conseguenza, sempre per una geometria costituita da una linea monodimensionale di lunghezza unitaria e suddivisa in cento elementi, si è scelto di realizzare una simulazione con i seguenti dati:

<i>LEFT</i>	<i>RIGHT</i>
$P_L = 1$	$P_R = 1$
$T_L = 1$	$T_R = 1$
$u_L = 0.182$	$u_R = 0.032$
$Y_L = 1$	$Y_R = 0$
$R_L = 0.723$	$R_R = 1$
$cp_L = 5.75$	$cp_R = 3.5$

Tabella 5-2: Left e Right input per il problema monodimensionale multicomponente.

Fondamentalmente la prova consiste nel dividere il dominio a metà; a sinistra e a destra sono presenti due specie chimiche differenti (a sinistra propano ed a destra aria) con velocità differenti, ma alla stessa pressione e temperatura. L'evoluzione temporale è sempre stata fatta con un metodo di integrazione di tipo esplicito a tre stadi per ogni passo temporale e con un solutore di Godunov per i flussi convettivi, fino ad un tempo adimensionale pari a 0.2; di seguito riportiamo gli andamenti delle grandezze e la loro comparazione con la soluzione esatta:



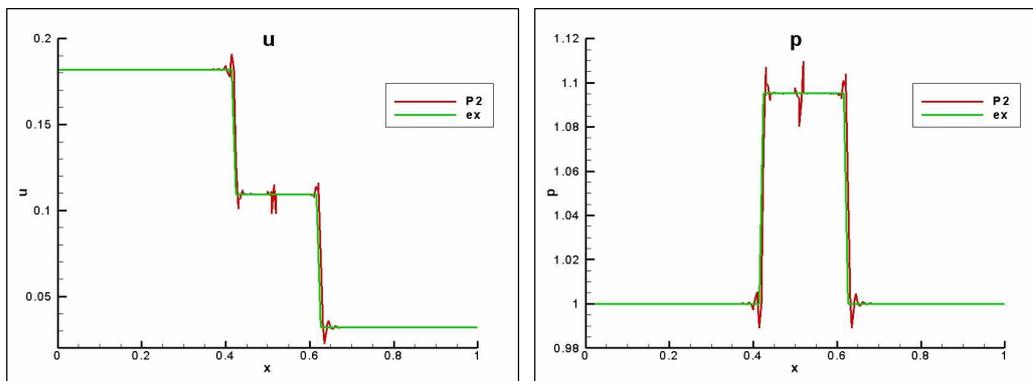


Figura 5: Confronto d , T , u , p del codice con la soluzione esatta al tempo fissato di 0.2.

I diagrammi sono nuovamente stati tracciati per un'approssimazione polinomiale di grado due ($P2$) e restano valide le considerazioni proposte al paragrafo precedente; notiamo solo la buona corrispondenza tra la soluzione esatta ed i valori calcolati col codice multicomponente, a parte le oscillazioni alle discontinuità dovute alla mancanza di limitazione del codice stesso. Un confronto con la soluzione esatta, chiaramente, non è nuovamente previsto per la frazione massica, da cui la mancanza del relativo diagramma; in ogni caso, la sua verifica è presto ottenibile guardando la curva al tempo $t1$ della Figura 6, in cui se ne evince, chiaramente, l'andamento corretto a gradino in corrispondenza della discontinuità di contatto ($x \approx 0.5$).

Interessante è, tuttavia, mostrare l'andamento, al variare del tempo, della frazione massica del propano (quella dell'aria ne è il complemento rispetto all'unità) la quale, evidentemente, ha valore unitario nelle zone in cui si ha esclusivamente questa specie chimica e valore nullo in presenza unicamente di aria.

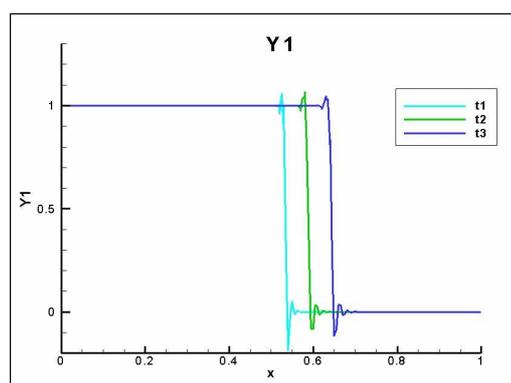


Figura 6: Andamento concentrazione propano per diversi istanti temporali $t1 > t2 > t3$.

Nella figura sono indicate tre curve, tracciate ad istanti temporali successivi ($t1 = 0.2 > t2 = 0.8 > t3 = 1.4$).

5.3. Simulazioni bidimensionali con gas uguali: comparazioni con il codice monocomponente

Dopo aver garantito la bontà con cui il codice realizza il calcolo dei flussi convettivi, attraverso i test monodimensionali presentati nei paragrafi precedenti, si è passato alla verifica del comportamento corretto del codice in situazioni bidimensionali; ancora una volta, la novità della ricerca, ha reso necessario procedere per gradi, in modo da consentire l'accertamento di alcuni punti fissi, ottenuti i quali proseguire il lavoro. In particolare per questo set di prove si è deciso di realizzare delle simulazioni di due specie chimiche in miscelamento, ma stabilendo che quest'ultime siano caratterizzate dalle stesse proprietà chimico-fisiche (nell'eccezione si è deciso di usare aria); di fatto, quindi, lo stesso gas anche se l'uguaglianza, chiaramente, non è riconosciuta dal codice multicomponente, il quale si limita a svolgere una simulazione di un mixing di due gas a prescindere dalla loro natura.

5.3.1. Profilo alare non viscoso

Innanzitutto si è optato per provare il codice multicomponente su un profilo alare; la prima simulazione ha riguardato un flusso *non viscoso* (quindi di tipo euleriano), il cui set di equazioni risulta rappresentabile nella forma vettoriale:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_m(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [5.2]$$

i termini dei flussi \mathbf{F}_c e \mathbf{F}_m sono facilmente ricavabili da un confronto col set completo di equazioni [4.55] - [4.67]; dal momento che l'obiettivo principale è rappresentato dal mixing di specie chimiche, anche trattandosi di simulazioni non viscosi, si è tenuto conto dei flussi viscosi 'di massa', ovvero di quei termini che permettono lo spostamento delle specie per effetto dei gradienti delle frazioni massiche.

Per le simulazioni si è scelta una mesh non strutturata a triangoli di 2048 elementi, rappresentata in Figura 7:

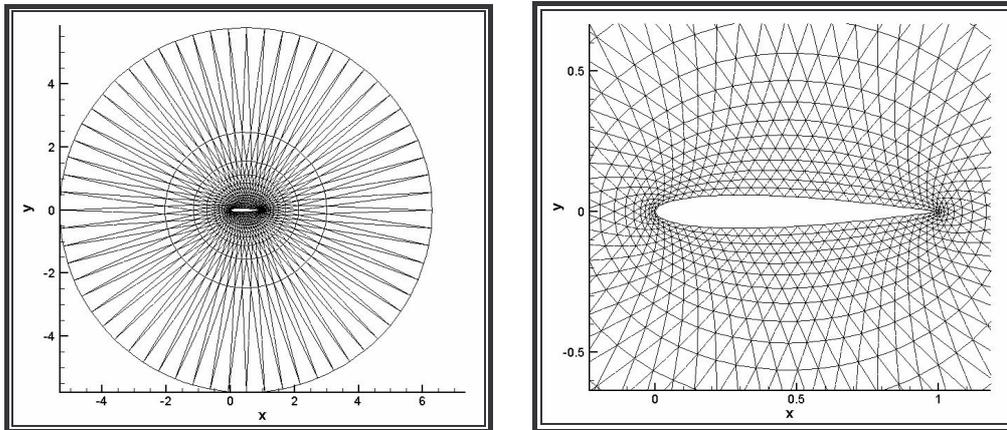


Figura 7: Griglia del profilo alare: visione d'insieme e particolare dell'ala.

Per svolgere le simulazioni si è utilizzato un metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, e con il solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov (di indubbia validità dopo i test mostrati al Paragrafo 5.2).

Per quanto riguarda i dati di bordo si è scelto di modellizzare il contorno esterno con bordo di tipo *far* e quello interno di tipo *wall* (vedere Paragrafo 3.4 e 4.7 per le spiegazioni a riguardo), con valori di input dei contorni e del campo di moto iniziale indicati nella tabella sottostante:

	p	T	V	<i>Angolo</i>	Y_1
<i>Far</i>	1	1	0.473	1°	0.25
<i>Wall</i>	-	-	-	-	-
<i>Field</i>	1	1	0.473	1°	0.5

Tabella 5-3: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni non viscosse di profilo alare.

che garantiscono un numero di Mach iniziale di 0.4. Le prove sono state eseguite utilizzando elementi $P0$, $P1$ e $P2$ e sono risultate, per tutte le variabili, perfettamente identiche a quelle realizzate col codice monocomponente; evitiamo, quindi, di presentare grafici 'identici', ma riportiamo, per il grado polinomiale due, quelli che riteniamo più significativi, del solo codice multicomponente. Di seguito l'andamento della pressione nella zona d'interesse, ovvero nell'intorno del profilo:

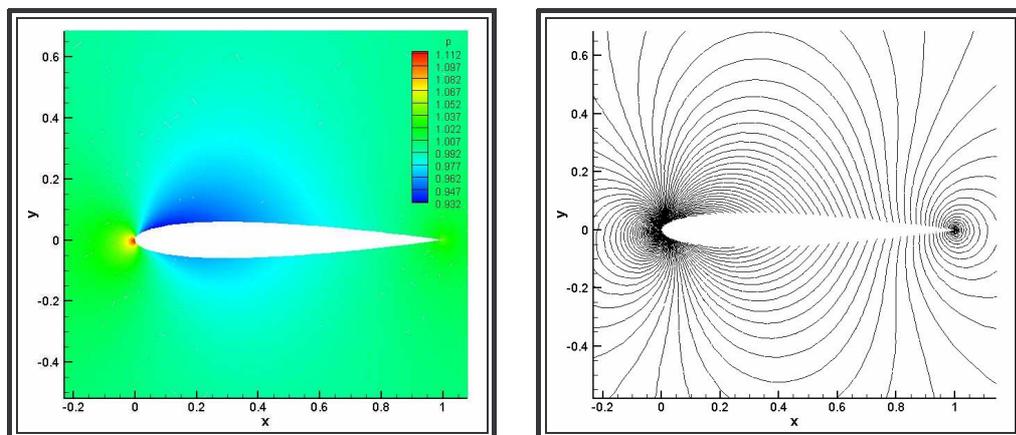


Figura 8: Andamento della pressione intorno al profilo alare.

e quello della densità:

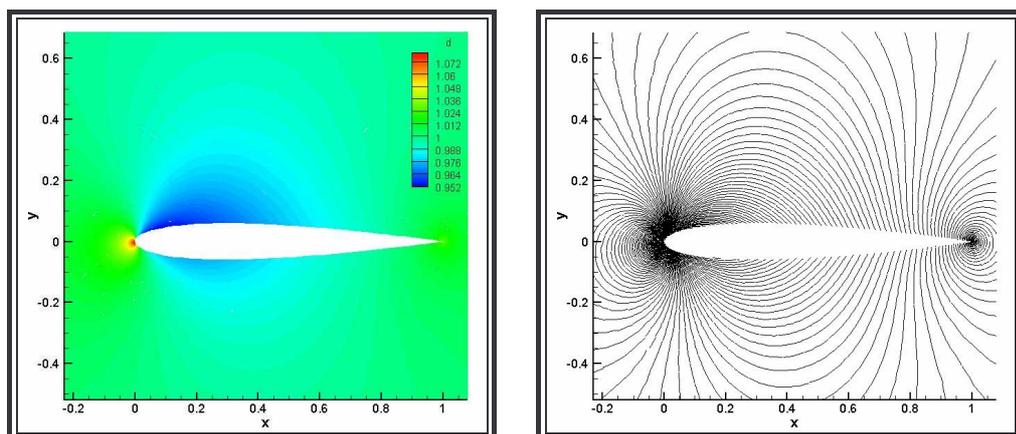


Figura 9: Andamento della densità intorno al profilo alare.

notiamo come correttamente le figure non siano simmetriche ma, seppur di poco, mettano in evidenza il leggero angolo di incidenza.

I diagrammi della frazione massica non sono stati rappresentati dal momento che al termine della simulazione in tutto il campo si osserva il valore 0.5; la qual cosa è perfettamente corretta in quanto, a transitorio avvenuto, ovunque la variabile raggiunge il valore imposto sul bordo di *far*. Queste simulazioni hanno permesso di capire che il codice sia in grado, in condizioni euleriane, di giungere alla soluzione corretta anche in presenza di due specie chimiche; la modifica multicomponente non rappresenta a questo livello un problema per il metodo degli elementi finiti discontinui.

5.3.2. Profilo alare viscoso

Dopo aver appurato la bontà con cui il codice calcola, in due dimensioni, il flusso convettivo e quello diffusivo ‘di massa’, si è passati ad analizzare il comportamento viscoso, ovvero si è cercato di capire se anche i flussi diffusivi ‘viscosi’ fossero trattati correttamente. Il problema risulta, quindi, di risolvere il set di equazioni sotto riportate in forma vettoriale compatta:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_m(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [5.3]$$

i termini dei flussi F_c , F_v e F_m sono facilmente ricavabili da un confronto col sistema completo di equazioni [4.55] - [4.67].

Nuovamente per le simulazioni si è utilizzata una griglia non strutturata di 2048 elementi rappresentata in Figura 7, si è ricorso ad un metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, con solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov.

Invariata la scelta del modello per le tipologie di bordo rispetto al caso euleriano, con l’eccezione unicamente dei valori di input nei contorni e del campo di moto iniziale, descritti dalla tabella sottostante:

	p	T	V	<i>Angolo</i>	Y_1
<i>Far</i>	1	1	0.591	0°	0.25
<i>Wall</i>	-	-	-	-	-
<i>Field</i>	1	1	0.591	0°	0.5

Tabella 5-4: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni viscosi di profilo alare.

che garantiscono un numero di Mach iniziale di 0.5 ed un numero di Reynolds pari a 5000. Le prove sono state eseguite utilizzando elementi $P0$, $P1$ e $P2$ e sono risultate, per tutte le variabili, perfettamente identiche a quelle realizzate col codice monocomponente. Di seguito riportiamo l’andamento della pressione nella zona d’interesse, ovvero nell’intorno del profilo:

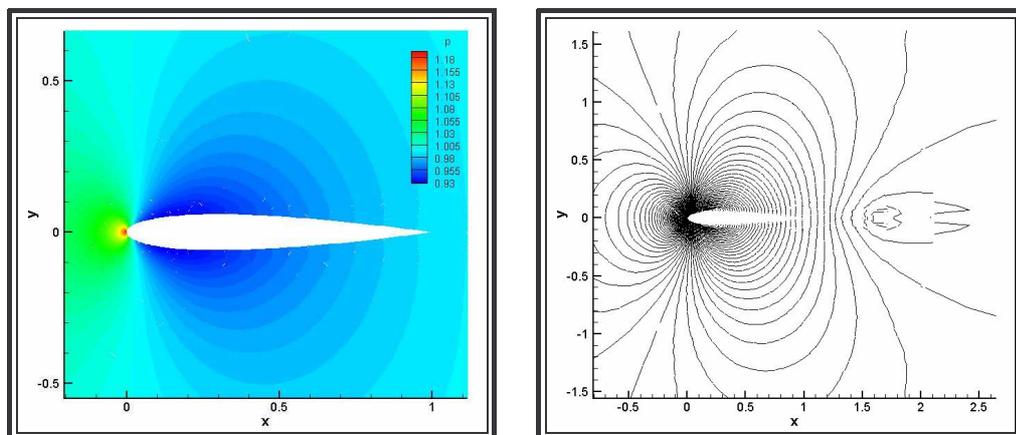


Figura 10: Andamento della pressione intorno al profilo alare.

e quello della densità:

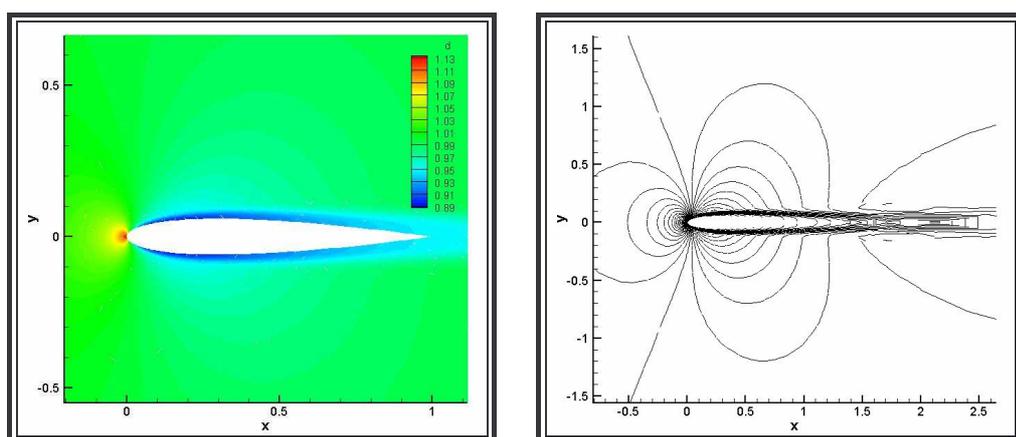


Figura 11: Andamento della densità intorno al profilo alare.

notiamo come correttamente le figure siano simmetriche avendo questa volta scelto un angolo di incidenza nullo.

La frazione massica al termine della simulazione ha sempre il valore 0.5 su tutto il dominio, coincidente con quello imposto al bordo. Queste simulazioni hanno permesso di capire che il codice sia in grado, in condizioni viscoso, di giungere alla soluzione corretta anche in presenza di due specie chimiche; la modifica multicomponente non rappresenta, neanche a questo livello, un problema per il metodo degli elementi finiti discontinui.

A titolo esemplificativo riportiamo i diagrammi dei residui:

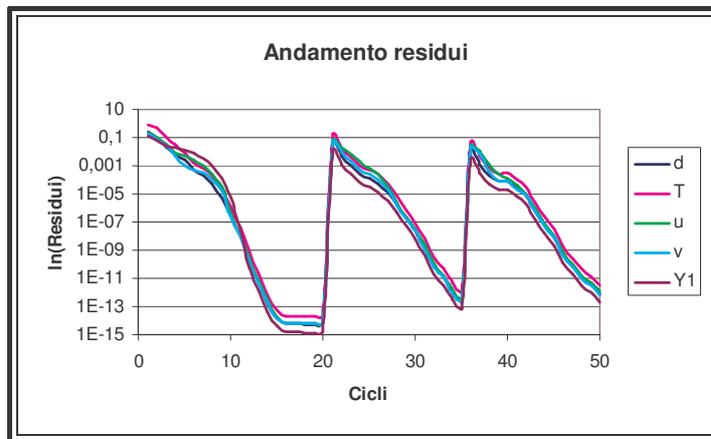


Figura 12: Andamento dei residui delle variabili.

I residui esprimono il grado di convergenza della soluzione: come mostra il grafico sono, per tutte le variabili, pressoché nulli (ordine 10^{-10} e più), ovvero indicano che la soluzione è a perfetta convergenza. I picchi rappresentano l'inizio delle simulazioni ai diversi ordini di approssimazione; infatti le prove sono state fatte a partire dal grado $P0$, la cui soluzione a convergenza è, poi, stata presa a campo iniziale per il $P1$ e così di seguito fino al $P2$. Con griglie di dimensioni modeste e con simulazioni di tipo euleriano e viscoso, si nota come sfruttando un metodo di tipo implicito, decine di cicli per ciascun ordine di approssimazione polinomiale bastano per giungere alla piena convergenza. Tali risultati sono validi anche per i test del Paragrafo 5.3.1; ecco perché si è deciso di riportare un unico grafico.

5.3.3. Lastra piana turbolenta

Con questo gruppo di prove si è cercato di evidenziare il comportamento del codice multicomponente nel caso di flusso *turbolento*; a livello matematico, quindi, il problema risulta quello di risolvere il set di equazioni sotto riportate in forma vettoriale compatta:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_m(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [5.4]$$

i termini dei flussi \mathbf{F}_c , \mathbf{F}_v , \mathbf{F}_m ed \mathbf{s} sono facilmente ricavabili da un confronto col sistema completo di equazioni [4.55] - [4.67].

Per questa nuova tipologia di simulazioni è stato necessario ricorrere ad una griglia più fitta, per cui si è preferito optare, per il test su lastra piana, ad una

mesh strutturata a quadrilateri di 8800 elementi rappresentata globalmente e nel dettaglio nelle figure sottostanti:

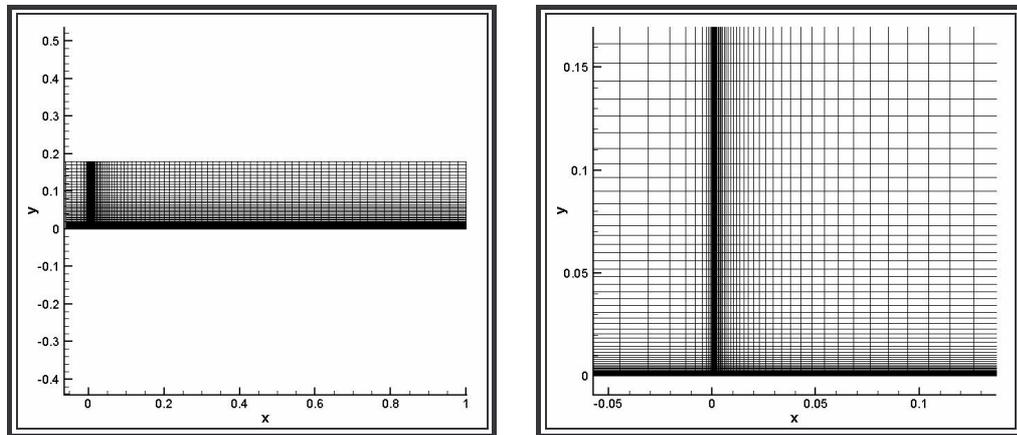


Figura 13: Griglia della lastra piana: visione d'insieme e particolare.

Per svolgere le simulazioni si è utilizzato un metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, con il solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov.

Per quanto riguarda i dati di bordo si è scelto di utilizzare un bordo di tipo *inflow* (lato sinistro) per rappresentare il flusso in ingresso, uno di tipo *outflow* (lato destro e lato alto) per rappresentare il flusso in uscita, uno di tipo *symmetry* (lato basso nell'intervallo $-0.5 < x < 0$) per il flusso libero, ovvero prima che incida sulla lastra ed uno di tipo *wall* (lato basso nell'intervallo $0 < x < 1$), con i seguenti parametri adimensionali:

	p	T	V	Angolo	Energia cinetica turbolenta	Pseudovorticità	Y_1
<i>Inflow</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.25
<i>Outflow</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.25
<i>Wall</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Simmetry</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Field</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.5

Tabella 5-5: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni turbolente di lastra piana.

che garantiscono un numero di Mach iniziale di 0.2 ed un numero di Reynolds pari a 1.11×10^7 . Le prove sono state eseguite utilizzando elementi *P0*, *P1* e *P2* e sono risultate, per tutte le variabili, perfettamente identiche a quelle realizzate col codice monocomponente; evitiamo, quindi, di presentare grafici 'identici',

ma rappresentiamo, per il grado polinomiale due, quelli che riteniamo più significativi.

Trattandosi di un problema su una lastra piana, risulta opportuno l'introduzione di grandezze adimensionali, che chiameremo con:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad \text{e} \quad y^+ = \frac{u_\tau y}{(\mu / \rho)} \quad [5.5]$$

avendo indicato con u_τ :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad [5.6]$$

ed essendo τ_w lo sforzo di taglio alla parete. Su diversi testi tra cui [10], si mostra come la legge logaritmica di tipo rettilineo:

$$u^+ = A^+ \ln(y^+) + B^+ \quad 30 \leq y^+ < 1000 \quad [5.7]$$

sia universale per qualunque sezione x/L , nella fascia intermedia dello strato limite, ovvero quella in cui lo strato più interno e quello più esterno fondono tra loro, relazione detta appunto *legge alla parete*. Di fatto una buona verifica risulta, quindi, quella di riportare i diagrammi:

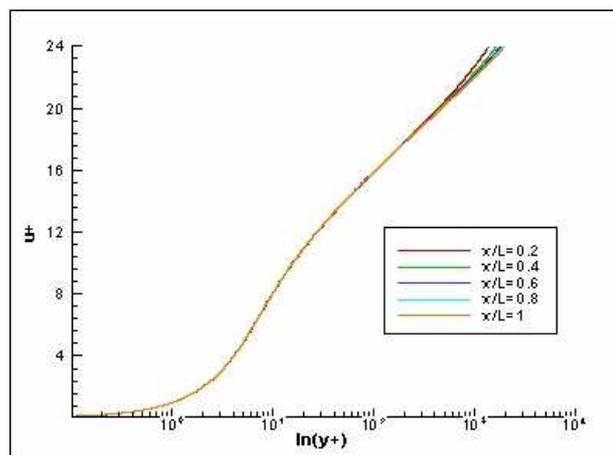


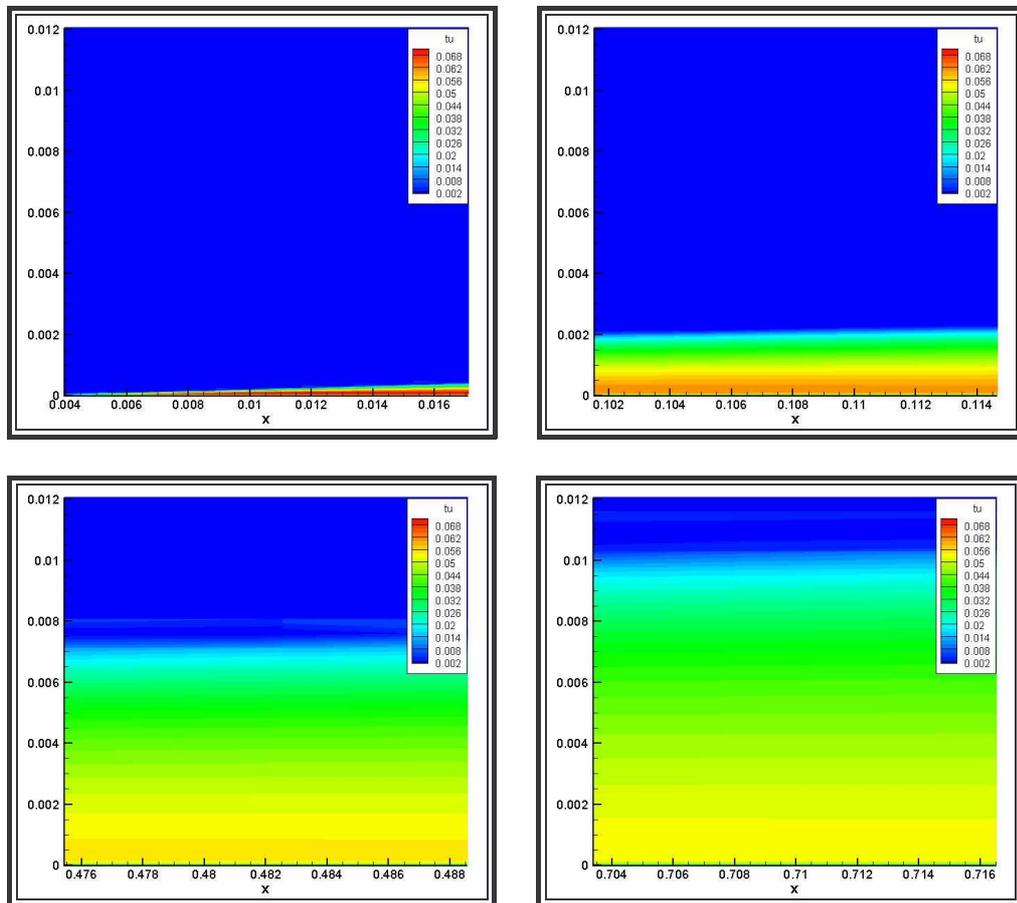
Figura 14: Verifica della legge alla parete nella lastra piana.

le curve sono tracciate per valori di x/L in cui il flusso d'aria ha già incocciato contro la lastra piana, ovvero per $x/L > 0$ ed è possibile osservare come, correttamente, all'aumentare di x/L le curve restino tutte sovrapponibili,

verificando così l'universalità della legge alla parete; verso l'esterno dello strato limite questa universalità tende a venir meno e le curve a divergere. Per simulazioni turbolente è significativo anche rappresentare l'intensità di turbolenza Tu , dato dalla relazione:

$$Tu = \sqrt{\frac{2}{3} \frac{k}{U_\infty^2}} \quad [5.8]$$

ovvero un numero proporzionale al rapporto tra l'energia cinetica turbolenta e l'energia cinetica all'infinito (in questo problema l''infinito' è da intendersi lontano dalla lastra, ovvero dove l'attrito non fa sentire il suo effetto):

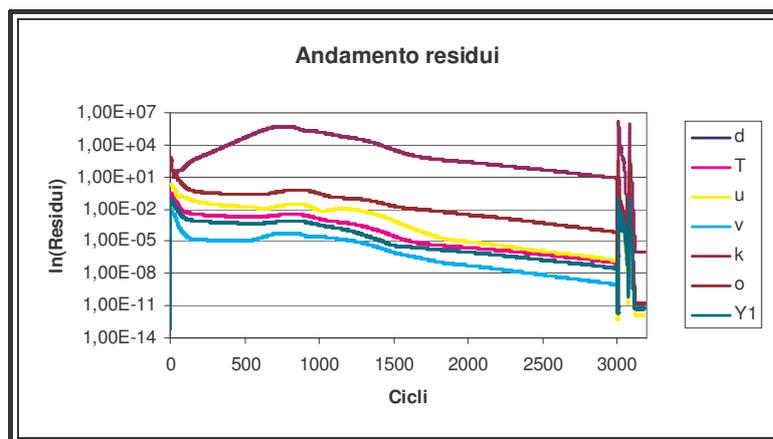


15: Andamento Tu a diversi valori di x su lastra piana.

Nei diagrammi sopra esposti, avendo mostrato la rappresentazione a diverse sezioni trasversali dell'intensità di turbolenza, possiamo notare, avvalendoci di questa variabile, il crescere dello spesso dello strato limite.

I diagrammi della frazione massica non sono stati rappresentati perché ritenuti poco significativi, dal momento che al termine della simulazione in tutto il campo si osserva sempre il valore imposto all'*inflow* di 0.5. Queste simulazioni hanno permesso di capire che il codice sia in grado, in condizioni turbolente, di giungere alla soluzione corretta anche in presenza di due specie chimiche; la modifica multicomponente non rappresenta, neanche a questo livello, un problema per il metodo degli elementi finiti discontinui.

In ultimo evidenziamo il diagramma dei residui delle variabili:



16: Andamento dei residui delle variabili.

notiamo come gli andamenti siano gli stessi di quelli già evidenziati in Figura 12, con la sola differenza che, per quanto riguarda i calcoli *PO*, la piena convergenza è raggiunta solo intorno alle migliaia di cicli e non le decine come nel caso di profilo alare, viscoso ed euleriano; questo è comprensibile visto il maggior impegno computazionale del calcolo, ovvero l'aumento del numero di celle della griglia e l'aumento della complessità del sistema di equazioni da risolvere. Tuttavia raggiunta la piena convergenza del calcolo ad ordine 1, è possibile far partire gli ordini superiori prendendo a campo iniziale quello ottenibile all'ordine precedente; di conseguenza per l'ordine 2 e 3, simulazioni di circa una decina di cicli bastano per una convergenza, pressoché, perfetta (ordine 10^{-10} e più).

5.3.4. Tubo cilindrico turbolento

Con questo gruppo di prove si è cercato di evidenziare il comportamento del codice multicomponente nel caso di flusso *turbolento*, ma in condizioni di *assialsimmetria*; a livello matematico, quindi, il problema risulta quello di risolvere il set di equazioni sotto riportate in forma vettoriale compatta:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_m(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad [5.9]$$

i termini dei flussi F_c , F_v , F_m ed s sono facilmente ricavabili da un confronto col sistema completo delle equazioni per flussi assialsimmetrici [4.80] - [4.94].

Per questa nuova tipologia di simulazioni si sempre utilizzata una griglia strutturata a 8800 elementi; di fatto la stessa già impiegata per quelle su lastra piana semplicemente ribaltata e con una modifica alle coordinate per tener conto della geometria assialsimmetrica. La griglia risulta, perciò, la stessa di quella mostrata in Figura 13, semplicemente ribaltata (la parte più fitta di elementi che rappresenta, cioè, la parete del tubo, risulta essere quella in alto).

Per svolgere le simulazioni si è utilizzato un metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, con il solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov.

Per quanto riguarda i dati di bordo si è scelto di utilizzare un bordo di tipo *inflow* (lato sinistro) per rappresentare il flusso in ingresso, uno di tipo *outflow* (lato destro) per rappresentare il flusso in uscita, uno di tipo *simmetry* (lato basso) per rappresentare l'asse di simmetria), uno di tipo *far* (lato alto nell'intervallo $-0.5 < x < 0$) per il flusso libero, ovvero prima che entri nel tubo ed uno di tipo *wall* (lato alto nell'intervallo $0 < x < 1$), con i seguenti parametri adimensionali:

	p	T	V	Angolo	Energia cinetica turbolenta	Pseudovorticità	Y_1
<i>Inflow</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.25
<i>Outflow</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.25
<i>Simmetry</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Wall</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Far</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.25
<i>Field</i>	1	1	0.236	0°	8.4×10^{-10}	394.06	0.5

Tabella 5-6: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni turbolente di tubo cilindrico.

che garantiscono un numero di Mach iniziale di 0.2 ed un numero di Reynolds pari a 1.11×10^7 . Le prove sono state eseguite utilizzando elementi $P0$, $P1$ e $P2$ e sono risultate, per tutte le variabili, perfettamente identiche a quelle realizzate col codice monocomponente; evitiamo, quindi, di presentare grafici 'identici', ma rappresentiamo, per il grado polinomiale due, quelli che riteniamo più significativi.

Come per la lastra piana, riportiamo i diagrammi di u^+ rispetto alla coordinata y^+ a x/L fissati:

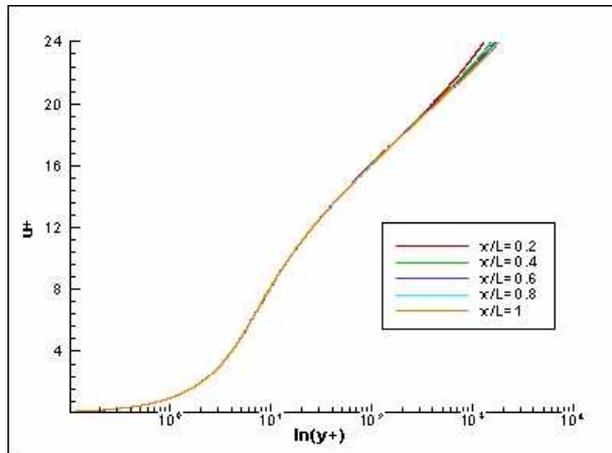
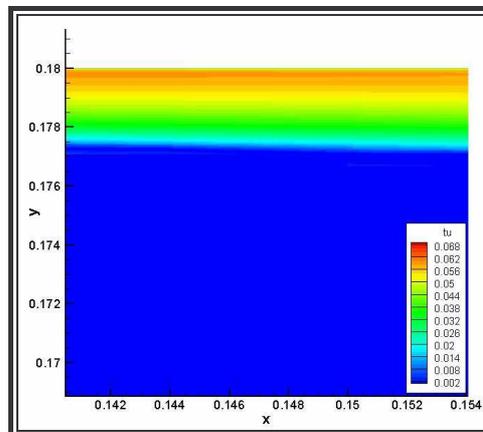
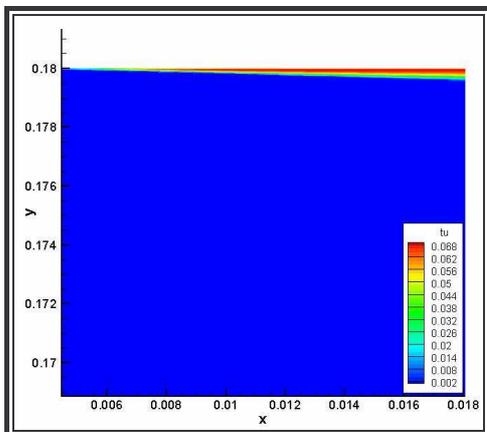


Figura 17: Verifica della legge alla parete per un tubo cilindrico.

le curve sono tracciate per valori di x/L in cui il flusso d'aria è già entrato nel tubo cilindrico, ovvero per $x/L > 0$ ed è possibile osservare come, correttamente, all'aumentare di x/L resti verificata l'universalità della legge a parete anche nel caso di un condotto assialsimmetrico. Per simulazioni turbolente significativo anche rappresentare l'intensità di turbolenza Tu :



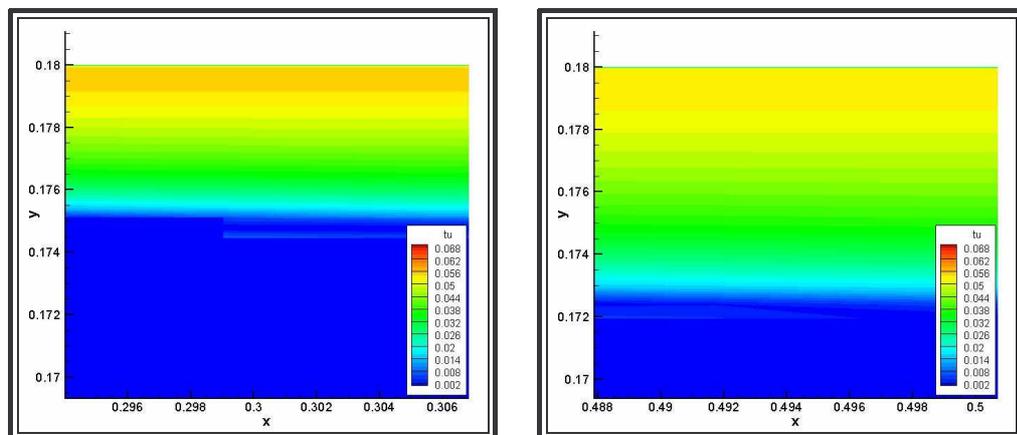


Figura 18: Andamento Tu a diversi valori di x su tubo cilindrico.

Nei diagrammi sopra esposti, avendo mostrato la rappresentazione a diverse sezioni trasversali dell'intensità di turbolenza, possiamo notare, avvalendoci di questa variabile, il crescere dello spesso dello strato limite.

I diagrammi della frazione massica non sono stati rappresentati perché ritenuti poco significativi, dal momento che al termine della simulazione in tutto il campo si osserva sempre il valore imposto all'*inflow* di 0.5. Queste simulazioni hanno permesso di capire che il codice sia in grado, anche su geometrie assialsimmetriche, di giungere alla soluzione corretta seppur in presenza di due specie chimiche; la modifica multicomponente non rappresenta, neanche a questo livello, un problema per il metodo degli elementi finiti discontinui.

Evitiamo di riportare i diagrammi dei residui dal momento che la tipologia di problema risulta molto simile a quella analizzata al paragrafo precedente in quanto a complessità computazionale (equazioni da risolvere ed elementi della griglia); gli andamenti risultano, perciò, gli stessi.

5.4. Simulazioni bidimensionali con gas diversi

Una volta appurata la bontà del codice multicomponente in situazioni di miscelamento di gas identici per geometrie piane ed assialsimmetriche, in cui, oltretutto, si è potuto utilizzare come confronto il codice monocomponente per verificare la, pressoché, uguaglianza dei risultati, si è passati al collaudo del nuovo codice, in casi che prevedessero la presenza di due specie chimiche differenti. E' chiaro che, come in ogni situazione nuova, i passi devono essere gradualmente. Di conseguenza si è scelto di realizzare delle simulazioni con soli due gas, nonostante la possibilità concreta di opzionare un numero qualsivoglia di specie chimiche, e di mantenere costanti i parametri termodinamici di ciascuna specie (calori specifici, viscosità, conducibilità termica e diffusività di massa); la qual cosa, di fatto, è di relativo poco conto in quanto per tutti i test la

temperatura all'ingresso si è sempre presa costante e pari al valore ambiente di 294 K, senza flussi termici alla parete ed a basse velocità. Infatti l'obiettivo principale è cercare di rendersi conto delle risposte del metodo degli elementi finiti discontinui in situazioni di miscelamento; ulteriori raffinamenti al modello potranno essere introdotti anche in seguito, ma l'aspetto principale di questo lavoro è capire se i risultati siano attendibili o meno. Per cui tale casistica può sembrare restrittiva, ma necessariamente propedeutica per l'ottenimento di certezze che potranno, poi, garantire sviluppi ed integrazioni future.

5.4.1. Simulazioni di flussi paralleli di aria-propano

Con questa tipologia di prove si è voluto analizzare il comportamento del codice multicomponente in una situazione apparentemente semplice, ovvero quella in cui due gas differenti, ma aventi un'interfaccia comune, sono spinti alla stessa velocità lungo un condotto. I test sono stati fatti per tutte le possibili situazioni fluidodinamiche implementate nel codice, ovvero eulero, viscoso e turbolento, in condizioni assialsimmetriche, utilizzando una griglia strutturata di 4500 elementi di cui riportiamo l'immagine globale ed il particolare, nella zona dove si infittisce, ovvero l'interfaccia tra i due gas che rappresenta la fascia più critica:

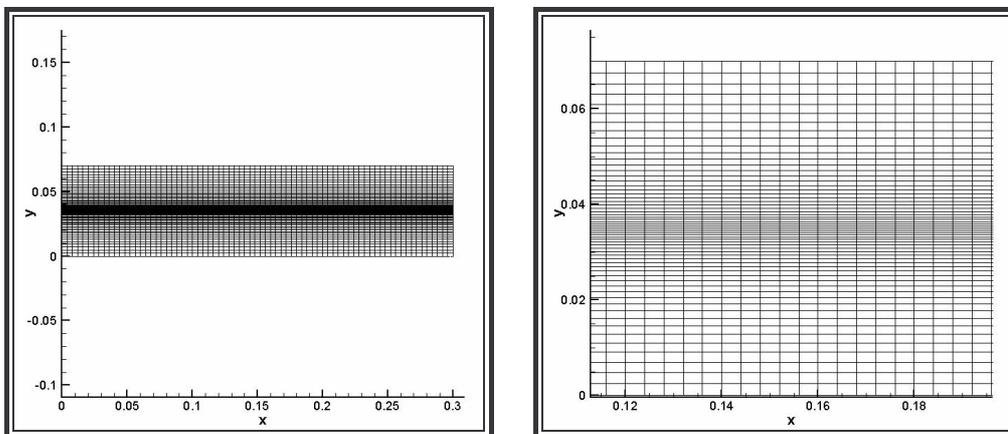


Figura 19 Griglia: visione d'insieme e particolare.

Per svolgere le simulazioni si è utilizzato metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, con il solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov.

Per le condizioni al contorno si è optato per una parete di tipo *simmetry* (quella in basso) per rappresentare l'asse di simmetria, una di tipo *far* (quella in alto) per rappresentare le condizioni all'"infinito" ed una di tipo *outflow* (quella a

destra) per indicare le condizioni di flusso uscente; il lato a sinistra è stato diviso in tre segmenti, ciascuno di tipo *given*, per assegnare le condizioni del flusso entrante: in particolare il segmento alto e quello basso per, rispettivamente, l'aria ed il propano e quello centrale per il miscelamento. Infatti si è deciso di dare un campo di temperatura, pressione e velocità uniforme su tutto il dominio e sui contorni, mentre si è fatta variare la concentrazione della miscela (e di conseguenza la sua densità in accordo con l'andamento delle frazioni massiche); dapprima prendendo un andamento graduale di tipo sinusoidale su tutto il campo (ovvero solo aria all'estremo alto e solo propano a quello basso, con un andamento a coseno in tutta la parte centrale), poi riducendo via via la fascia centrale, avendo così una fascia alta di sola aria, una in basso di solo propano ed una centrale graduale sempre di andamento sinusoidale. La fascia centrale, partendo da una lunghezza coincidente con l'intera altezza, è passata ad 1/2, 1/4, 1/8, 1/16 ed 1/32 dell'altezza totale del dominio rettangolare. Di seguito le condizioni scelte in termini adimensionali:

	p	T	V	<i>Angolo</i>	<i>Energia cinetica turbolenta</i>	<i>Pseudovorticità</i>	Y_1
<i>Given 1</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Given 2</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	1
<i>Given 3</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	$Y_1(y)$
<i>Outflow</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Simmetry</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Far</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Field</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0

Tabella 5-7: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni di flussi paralleli aria-propano.

dove per $Y_1(y)$, come già osservato, si è scelta una funzione di tipo coseno, della forma:

$$Y_1 = \cos \left[\frac{\pi (y - y_1)}{2 (y_2 - y_1)} \right] \quad [5.10]$$

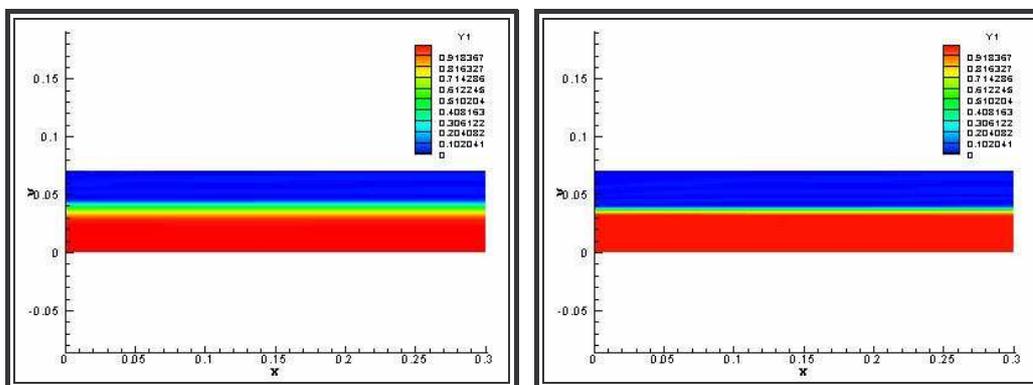
avendo indicato con y_1 ed y_2 gli estremi della fascia centrale di interfaccia tra i due gas, e con Y_1 la concentrazione del propano. Quella dell'aria ne sarà il complemento rispetto all'unità. Con i valori indicati dalla Tabella 5-7 si garantisce un numero di Mach iniziale per l'aria di 0.154 e per il propano di 0.204, un numero di Reynolds per l'aria di 1.04×10^6 e per il propano di $3.26 \times$

10^6 , mentre i valori adimensionali di k ed ω derivano dalla scelta di $Re_T = 1$ e di $Tu = 10\%$. Per quanto riguarda i valori termodinamici adimensionali riportiamo il riassunto in tabella:

	<i>Aria</i> ($Y_1 = 0$)	<i>Propano</i> ($Y_1 = 1$)
R	1	0.723
c_p	3.5	5.75
μ	2.32×10^{-8}	5.23×10^{-8}
λ	1.75×10^{-7}	2.56×10^{-7}

Tabella 5-8: Proprietà termodinamiche.

e come diffusività di massa aria-propano il valore adimensionale di 2.409×10^{-7} ; per le simulazioni turbolente si è scelto un numero di Pr_T di 0.9 ed uno Sc_T di 1. Riportare diagrammi della pressione, della temperatura o della velocità risulta di poco interesse dal momento che avendo dato dei valori uniformi e costanti al contorno ed al campo iniziale, il tutto si mantiene uniforme anche a transitorio esaurito; più significativi i diagrammi della frazione massica (o in alternativa della densità globale della miscela che ne ricalca l'andamento) che riportiamo di seguito per un grado polinomiale $P2$, ottenuto dopo successive simulazioni $P0$ e $P1$.



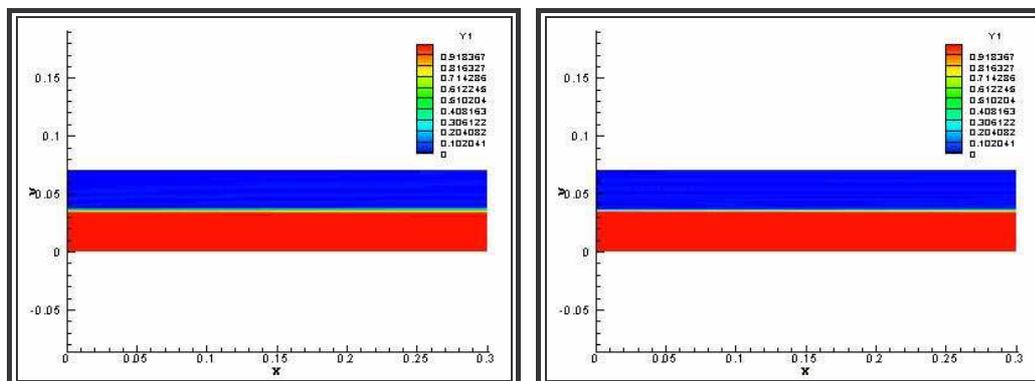
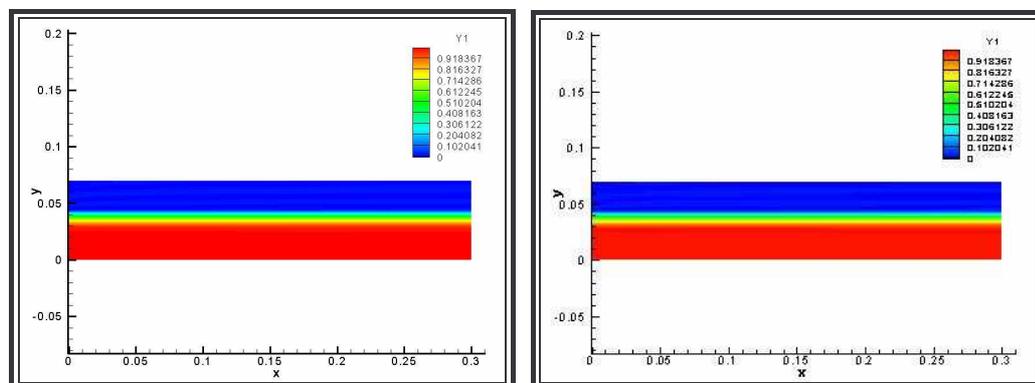


Figura 20: Andamento frazione massica propano per interfacce di spessore pari a 1/4, 1/8, 1/16, 1/32 dell'altezza totale del dominio rettangolare.

Si nota come in condizioni di velocità uniforme su tutto il campo, la zona di contatto tenda ad aprirsi ma solo leggermente, seppur in condizioni turbolente in cui, comunque, gli effetti diffusivi sono alti. Per questo motivo i diagrammi risultano 'simili' a quelli ottenibili attraverso simulazioni euleriane e viscosi. Evitiamo, quindi, di proporre diagrammi, pressoché, identici ma, a titolo esemplificativo, segnaliamo un confronto per il caso 1/4 (in cui la fascia centrale è ben marcata e, perciò, ben visibile) tra il caso euleriano, laminare e turbolento:



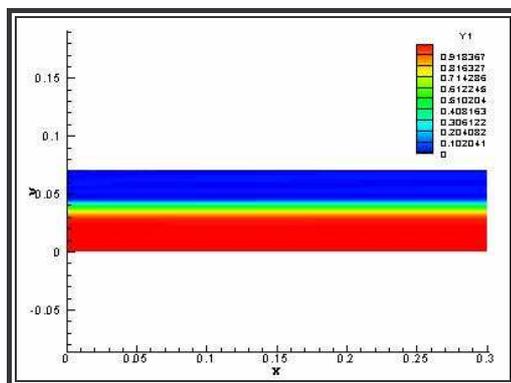


Figura 21: Confronto simulazioni non viscosa, viscosa e turbolenta nel caso a banda = 1/4.

Le medesime analogie si riscontrano anche per gli altri casi riportati per le simulazioni turbolente (da cui l'omissione del confronto), giustificate, chiaramente, dalla uniformità del campo di moto.

Per quanto riguarda l'andamento dei residui delle variabili, riportiamo esclusivamente il risultato per il calcolo turbolento (eulero e viscoso sono ovviamente più rapidi a convergere), che, chiaramente, risulta essere quello più impegnativo dal punto di vista computazionale:

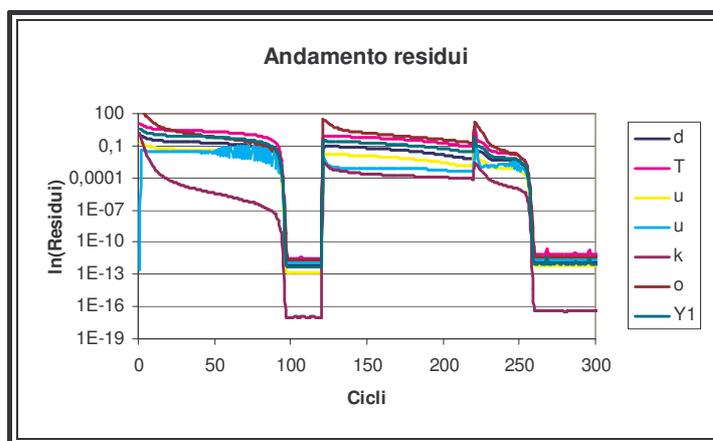


Figura 22: Andamento dei residui delle variabili.

Notiamo che non essendo la griglia particolarmente impegnativa (4500 elementi), anche nel caso turbolento, centinaia di cicli per ordine di approssimazione sono sufficienti per la piena convergenza; la presenza di due specie chimiche differenti non risulta, quindi, un problema per quanto riguarda i tempi di convergenza della simulazione.

Tuttavia, si sono registrati dei problemi per quanto riguarda la presenza di eccessivi gradienti della frazione massica. Infatti restringendo sempre più la banda centrale, fino ad arrivare al suo annullamento (che equivale ad una

situazione a gradino di concentrazione), si è osservato che, se per simulazioni con grado di approssimazione PO il tutto si svolga correttamente, l'aumento dell'ordine di interpolazione porta all'insorgere nella zona del contatto a delle instabilità che impediscono il corretto svolgimento del calcolo; questa condizione è, con ogni probabilità, riferita alla mancanza di limitazioni del codice multicomponente, che, all'aumentare dell'ordine polinomiale, sfocia in oscillazioni della frazione massica, la quale a sua volta influenza il comportamento di tutte le altre variabili, generando così delle instabilità nel calcolo. La qual cosa si è verificata sia in condizioni laminari e viscosi che in quelle turbolente. Si è capito, quindi, che in futuri lavori risulterà necessario provvedere all'introduzione di termini che possano garantire il controllo e la limitazione dell'andamento delle variabili frazioni massiche in calcoli con specie chimiche differenti in maniera tale da consentire anche per ordini maggiori di uno l'ottenimento della soluzione.

5.4.2. Simulazione di getti coassiali aria-propano

Come serie di simulazioni conclusive, si è scelto di riferirci a getti coassiali di propano, iniettato in un flusso d'aria; per i dati iniziali e le condizioni al contorno ci si è ispirati a degli esperimenti di laboratorio condotti da Schefer e riportati in [9]. Tuttavia, la necessità di non avere forti gradienti della frazioni massiche ha comportato il riarrangiamento dei dati sperimentali, per evitare di incorrere in situazioni di instabilità del codice e per poter avere, così, a disposizione una serie di misure da confrontare con dei campioni di riferimento; in particolare, per avere un riscontro si è scelto di riferirci ad un codice commerciale affermato, come il Fluent, e realizzare con quest'ultimo delle simulazioni a parità di griglia, valori iniziali e dato al bordo.

Per il dominio spaziale si sono costruite due griglie con caratteristiche differenti; una di tipo strutturato a quadrilateri di 10400 elementi realizzata in modo che l'infittimento diminuisca all'aumentare della coordinata y e rimanga costante lungo la coordinata x . Riportiamo di seguito una sezione:

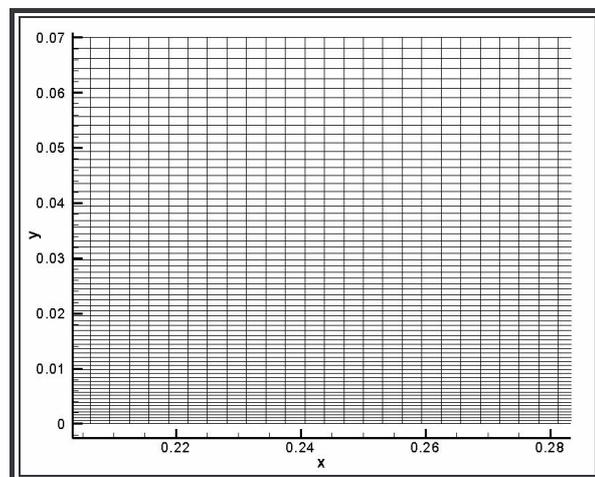


Figura 23: Particolare griglia strutturata.

L'altro volume è rappresentato da una griglia non strutturata a triangoli, molto più lasca della precedente di 6250 elementi, data da:

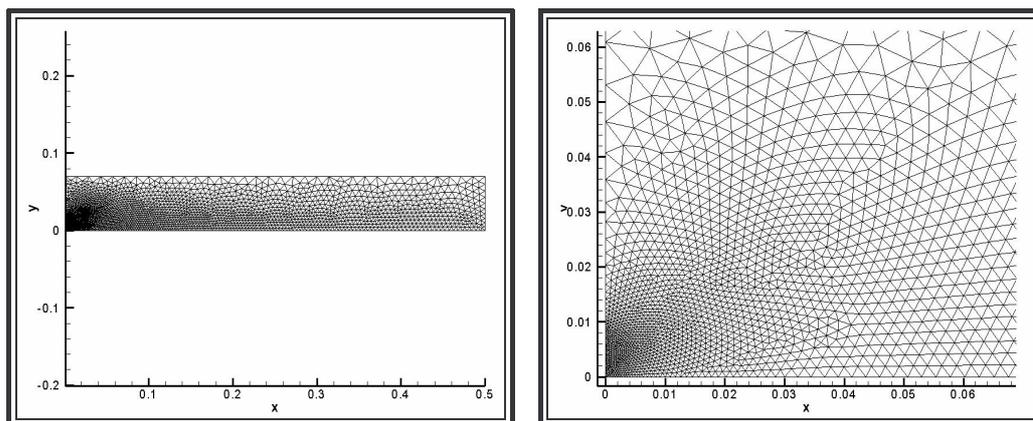


Figura 24: Griglia non strutturata: vista d'insieme e particolare.

Entrambe le griglie rappresentano mezzo volume di rivoluzione assialsimmetrico, in cui scorre aria in movimento dentro la quale viene iniettato un getto coassiale di propano, e su ciascuna si sono imposte le medesime condizioni al contorno, costituite da una parete di tipo *simmetry* (quella in basso) per rappresentare l'asse di simmetria, una di tipo *far* (quella in alto) per rappresentare le condizioni dell'aria all'"infinito" ed una di tipo *outflow* (quella a destra) per indicare le condizioni di flusso uscente; il lato a sinistra è stato, invece, diviso in tre segmenti, ciascuno di tipo *given*, per assegnare le condizioni del flusso entrante: in particolare un segmento basso ($0 < y < 0.0025$) indicante la sezione di uscita del flusso di propano (*Given 1*), quello alto ($0.0065 < y < 0.07$) rappresentante lo sbocco dell'aria (*Given 2*) ed uno centrale ($0.0065 < y <$

0.07) di miscelamento graduale dei due fluidi di tipo sinusoidale (*Given 3*), con le seguenti condizioni dei parametri adimensionali di bordo ed iniziali:

	p	T	V	Angolo	Energia cinetica turbolenta	Pseudovorticità	Y_1
<i>Given 1</i>	1	1	0.032	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Given 2</i>	1	1	0.182	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	1
<i>Given 3</i>	1	1	$u(y)$	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	$Y_1(y)$
<i>Outflow</i>	1	1	0.032	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Simmetry</i>	-	-	-	-	-	-	-
<i>Far</i>	1	1	0.032	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0
<i>Field</i>	1	1	0.032	0°	4.9×10^{-4}	2.9×10^4	0

Figura 25: Valori dati di bordo e campo iniziale per simulazioni di getti coassiali.

dove per $Y_1(y)$ si è scelta una funzione di tipo coseno, della forma:

$$Y_1 = \cos \left[\frac{\pi (y - y_1)}{2 (y_2 - y_1)} \right] \quad [5.11]$$

e per $u(y)$:

$$u = 0,032 + \left\{ (0,182 - 0,032) \cos \left[\frac{\pi (y - y_1)}{2 (y_2 - y_1)} \right] \right\} \quad [5.12]$$

avendo indicato con y_1 ed y_2 gli estremi della fascia centrale di interfaccia tra i due gas e con Y_1 la concentrazione del propano. Quella dell'aria ne sarà il complemento rispetto all'unità. Con i valori indicati dalla Figura 25 si garantisce un numero di Mach iniziale per l'aria di 0.027 e per il propano di 0.204, un numero di Reynolds per l'aria di 3.02×10^5 e per il propano di 3.26×10^6 , mentre i valori adimensionali di k ed ω derivano dalla scelta di $Re_T = 1$ e di $Tu = 10\%$. Per quanto riguarda i valori termodinamici adimensionali riportiamo il riassunto in tabella:

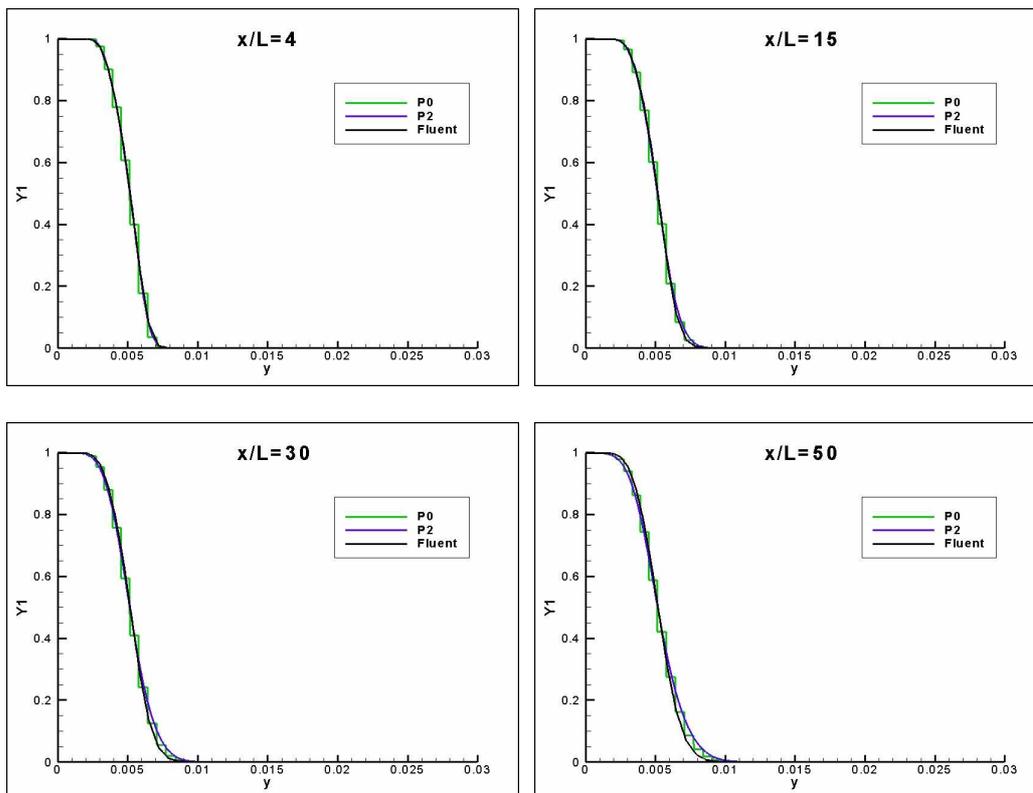
	Aria ($Y_1 = 0$)	Propano ($Y_1 = 1$)
R	1	0.723
c_p	3.5	5.75

μ	2.32×10^{-8}	5.23×10^{-8}
λ	1.75×10^{-7}	2.56×10^{-7}

Tabella 5-9: Proprietà termodinamiche.

e come diffusività di massa aria-propano il valore adimensionale di 2.409×10^{-7} ; per le simulazioni turbolente si è scelto un numero di Pr_T di 0.9 ed uno Sc_T di 1. Per svolgere tutte le simulazioni si è utilizzato metodo di avanzamento temporale implicito iterativo GMRES, preconditionato a sinistra, con 60 vettori dello spazio di Krylov e due restart, con il solutore dei flussi convettivi di tipo Godunov.

• Prima di tutto si vuole presentare un confronto per un regime viscoso; per tale scopo abbiamo considerato la griglia strutturata a diverse sezioni ($x/D = 4$, $x/D = 15$, $x/D = 30$, $x/D = 50$, $x/D = 80$) mettendo in evidenza gli andamenti della frazione massica, della velocità assiale e della temperatura in funzione della coordinata radiale, per diversi ordini di approssimazione polinomiale e con un raffronto col Fluent. Iniziamo con la frazione massica:



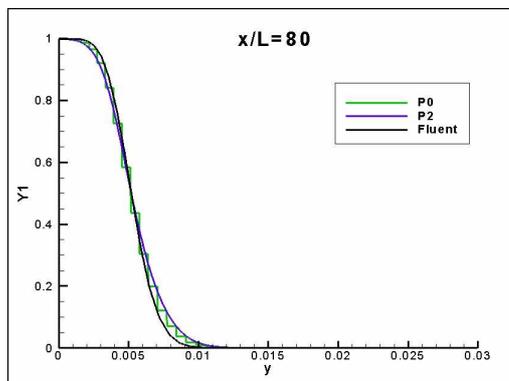
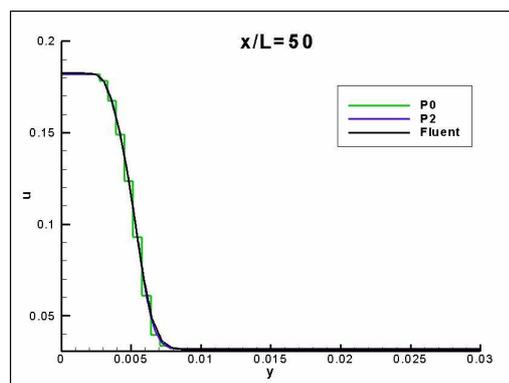
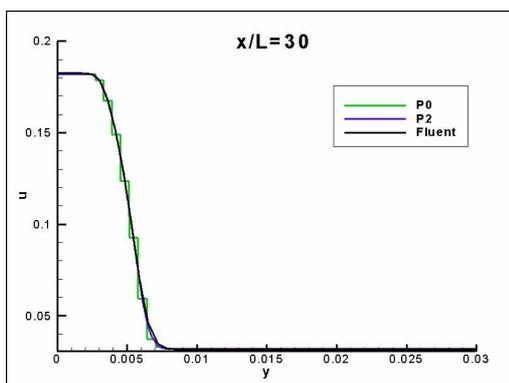
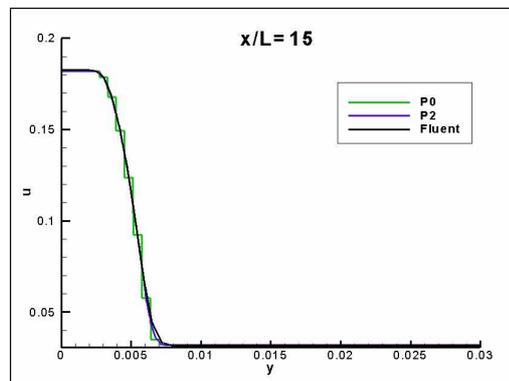
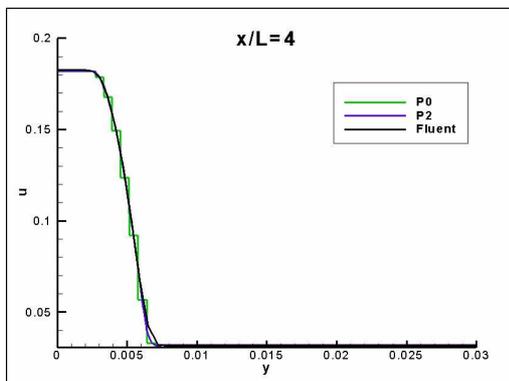


Figura 26: Andamento frazione massica P0, P2 e Fluent.

poi la velocità assiale:



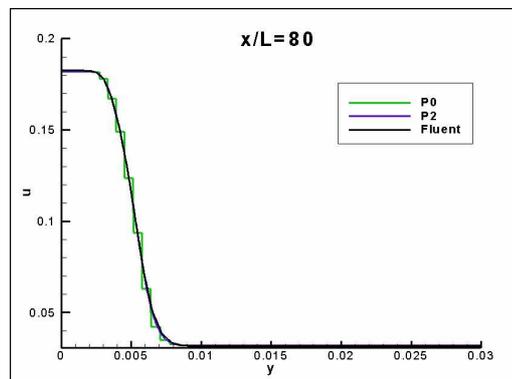


Figura 27: Andamento velocità assiale P0, P2 e Fluent.

ed, infine, un diagramma unico della temperatura in quanto il suo valore permane costante in tutte le sezioni e quindi sull'intero campo di moto:

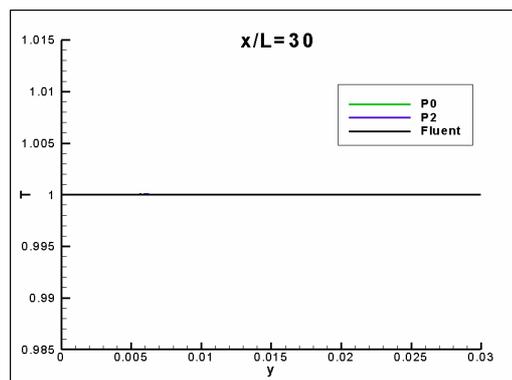


Figura 28: Andamento temperatura P0, P2 e Fluent.

Da notare come una simulazione di tipo viscoso sia caratterizzata da un'apertura del getto, pressoché, nulla; la qual cosa è osservabile dal fatto che le curve della frazione massica risultino, di fatto, identiche spostandosi verso l'uscita del dominio; coerentemente la velocità assiale si riduce man mano ci si allontani dall'imbocco. La cosa più rilevante è chiaramente la quasi perfetta coincidenza tra il Fluent ed il DG all'approssimazione P2 (salvo leggerissimi scostamenti nei diagrammi della frazione massica in sezioni lontane dall'imbocco); manca il P1 a causa dell'insorgere di instabilità nel corso delle prove. Il motivo si presume della stessa natura di quello già evidenziato al paragrafo precedente.

- Passiamo ora a concentrarci sulle prove turbolente. Dapprima riportiamo i risultati per la griglia lasca non strutturata, secondo le modalità di cui sopra, partendo, cioè, dalla frazione massica:

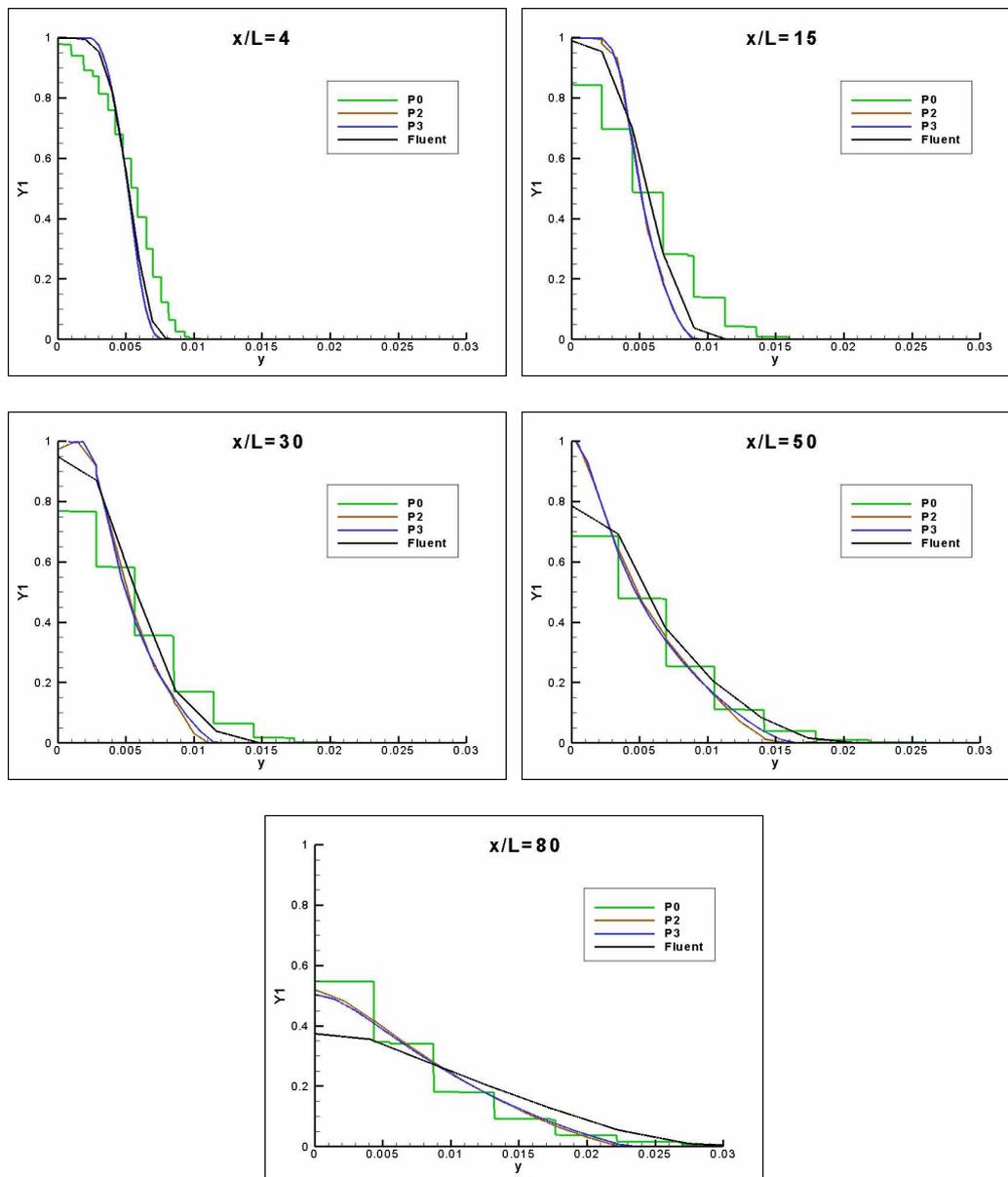


Figura 29: Andamento frazione massica P0, P2, P3 e Fluent.

e di seguito la velocità assiale:

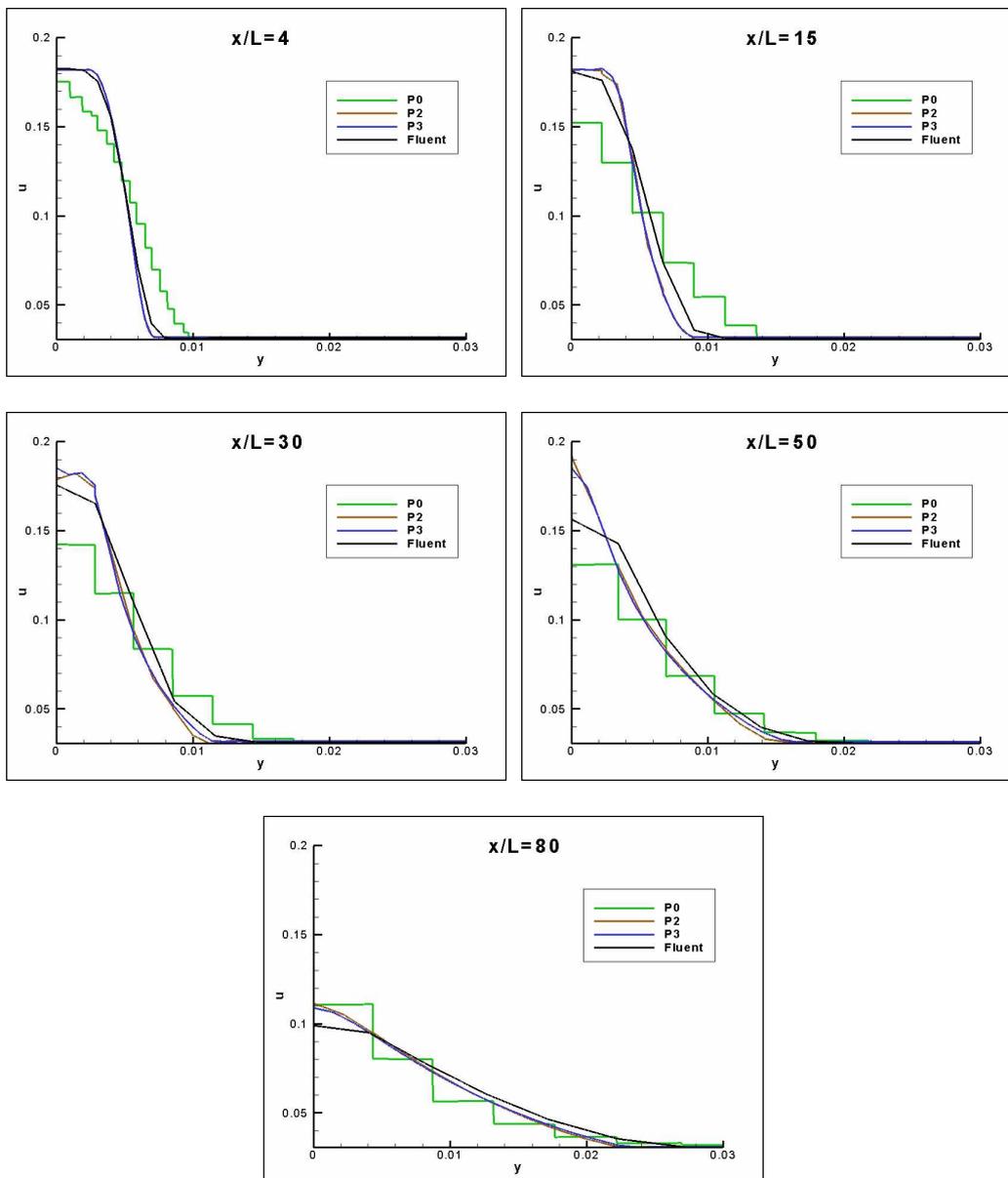


Figura 30: Andamento velocità assiale P_0 , P_2 , P_3 e Fluent.

Osserviamo come prima cosa che, essendo la griglia poco accurata, si sente molto lo stacco tra P_0 e gli ordini superiori; in questo caso fare un P_1 non è sufficiente, ma solo con un P_2 si ottiene per il DG una buona accuratezza, confermata dal fatto che il P_3 ne ricalca sostanzialmente l'andamento. Avendo la garanzia della convergenza del DG, si è evitato, quindi, di svolgere anche una simulazione P_4 , dal momento che l'irrelevante aumento di accuratezza che ne scaturirebbe non ne giustifica la spesa computazionale. Interessante è anche mostrare le curve della temperatura:

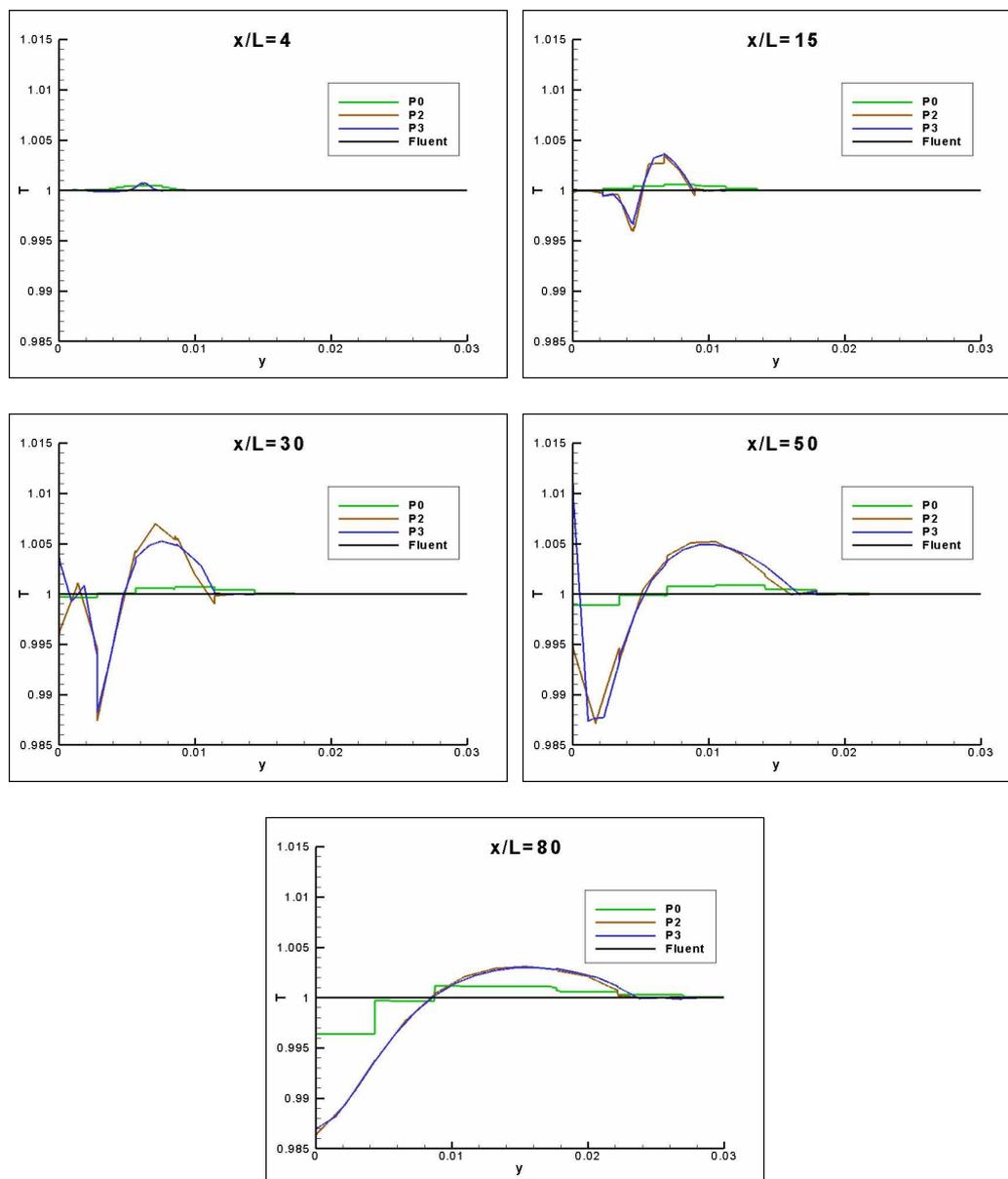
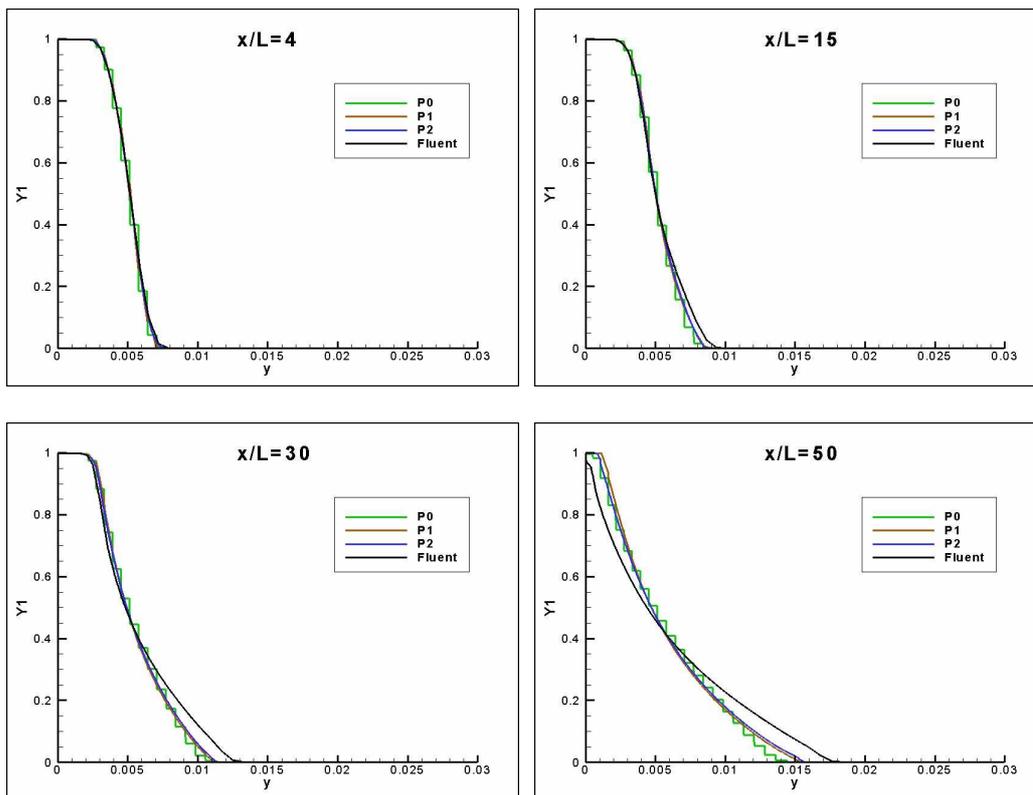


Figura 31: Andamento temperatura P0, P2, P3 e Fluent.

L'andamento risulta certamente curioso, dal momento che, mentre nel Fluent la temperatura resta sempre costante sull'intero dominio, col DG subisce delle oscillazioni all'interno del getto di propano, in maniera sempre più consistente allontanandosi dall'imbocco, da valori iniziali dell'ordine dell'1% fino a valori del 5%; questa anomalia potrebbe sempre essere legata a micro oscillazioni dei valori di concentrazione che si ripercuotono sulla temperatura in maniera più marcata; questo potrebbe essere la stessa causa che porta il codice ad instabilizzarsi in presenza di forti gradienti di concentrazioni e potrebbe

eventualmente essere limitata ponendo un controllo di stabilizzazione sulla variabile frazione massica (consigliato per futuri lavori). Tale fenomeno, potrebbe, altresì, essere la causa anche del comportamento meno diffusivo del DG rispetto al Fluent, ovvero spostandoci dall'imbocco si osserva che il Fluent tende ad avere andamenti più schiacciati delle curve di concentrazione e velocità, segno evidente di un getto molto più aperto. Questa divergenza, in ogni caso, non è da escludere sia legata, a questo livello, anche ad una scelta differente del modello di turbolenza o ad una non propria perfetta convergenza del Fluent con la tipologia di griglia esaminata; infatti il codice commerciale ha il limite di essere intrinsecamente legato alla regolarità ed alla raffinatezza della griglia con cui si trova ad operare.

- Per toglierci questo dubbio abbiamo, perciò, svolto le medesime prove turbolente sulla griglia fitta strutturata, di cui riportiamo i risultati partendo sempre dalla frazione massica:



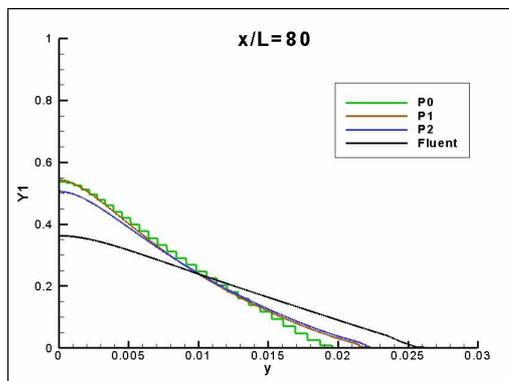
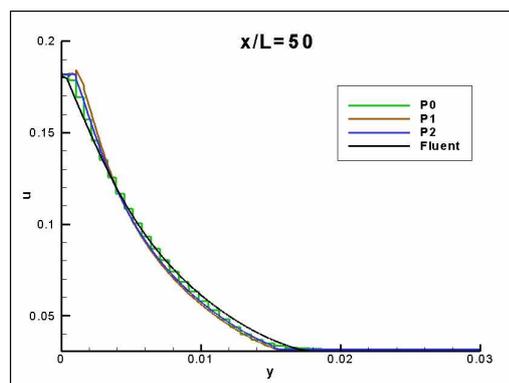
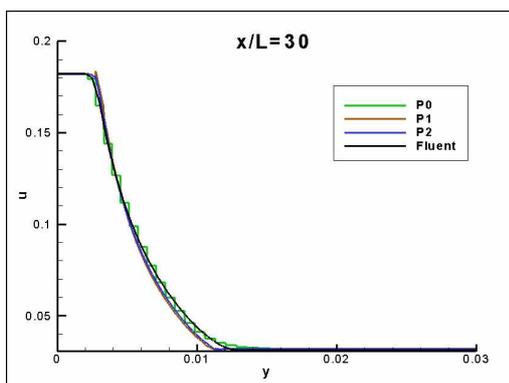
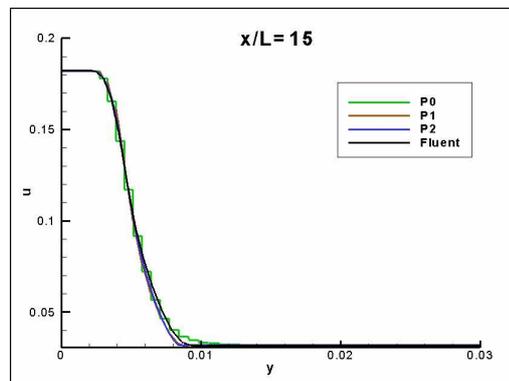
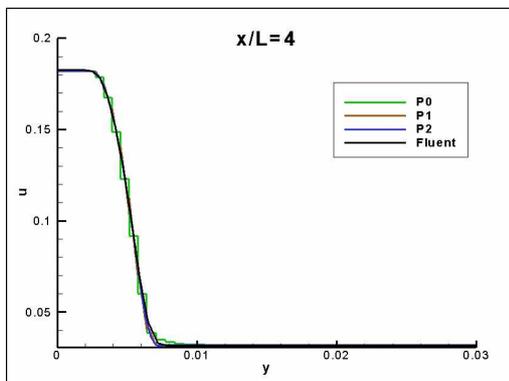


Figura 32: Andamento frazione massica P0, P1, P2 e Fluent.

seguito dalla velocità assiale:



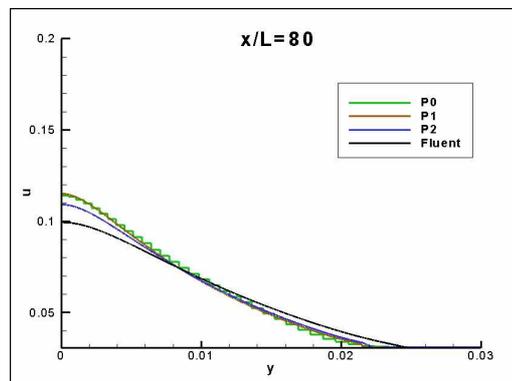
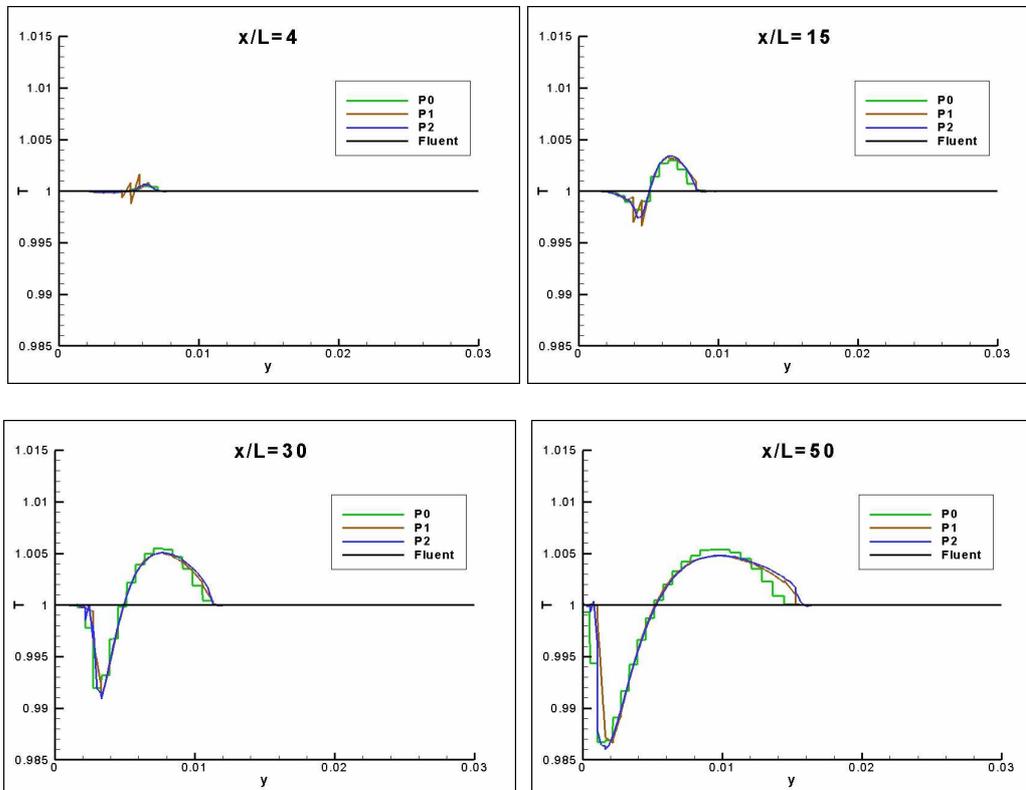


Figura 33: Andamento velocità assiale P0, P1, P2 e Fluent.

Da questi diagrammi si evince, innanzitutto, che essendo la griglia abbastanza fitta, la soluzione del DG a P1 o a P2 è pressoché identica; questo perché la griglia stessa riesce a consentire l'ottenimento di una buona accuratezza essendo stata infittita molto nella zona del getto, quindi l'aumento dell'ordine polinomiale dopo il P1 comporta ben pochi benefici da non giustificarne la spesa computazionale. Per questo motivo il P3 non è neppure stato preso in considerazione.

Riportiamo anche per questo caso l'andamento della temperatura:



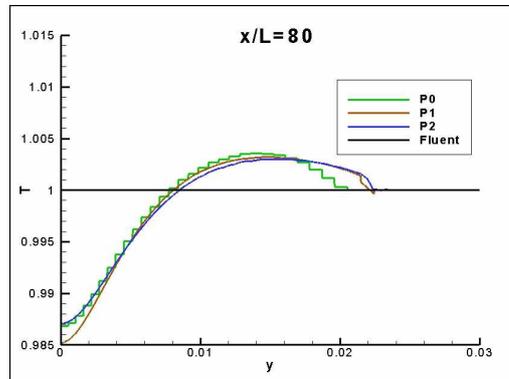
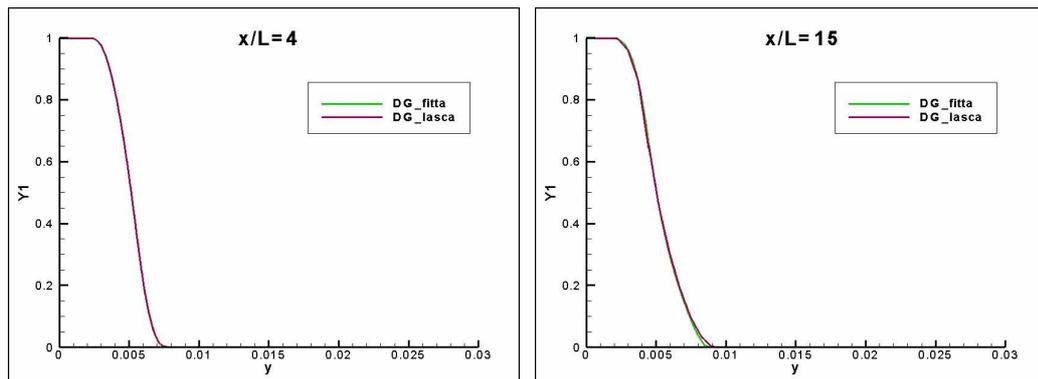


Figura 34: Andamento temperatura P0, P1, P2 e Fluent.

Nuovamente notiamo le oscillazioni percentuali della temperatura crescenti lungo l'asse x . In questo caso lo stacco tra il DG ed il Fluent risulta meno consistente; la qual cosa farebbe pensare che, ad ogni modo, il Fluent ha certamente bisogno di una griglia fitta per essere accurato mentre pecca di inaccuratezza con griglie troppo lasche. Il DG, al contrario, lavorando su un alto ordine di approssimazione, riesce a svincolarsi dalla griglia, raggiungendo buoni risultati anche con griglie molto più povere di elementi.

A conferma di quest'ultima affermazione, riportiamo un confronto dei risultati fornitici dalle due diverse griglie sia per il DG (col grado massimo di approssimazione polinomiale usato su ciascuna griglia) sia per il Fluent. Presentiamo i diagrammi per la frazioni massica poiché per le altre variabili i risultati sono dello stesso tipo e le considerazioni analoghe:



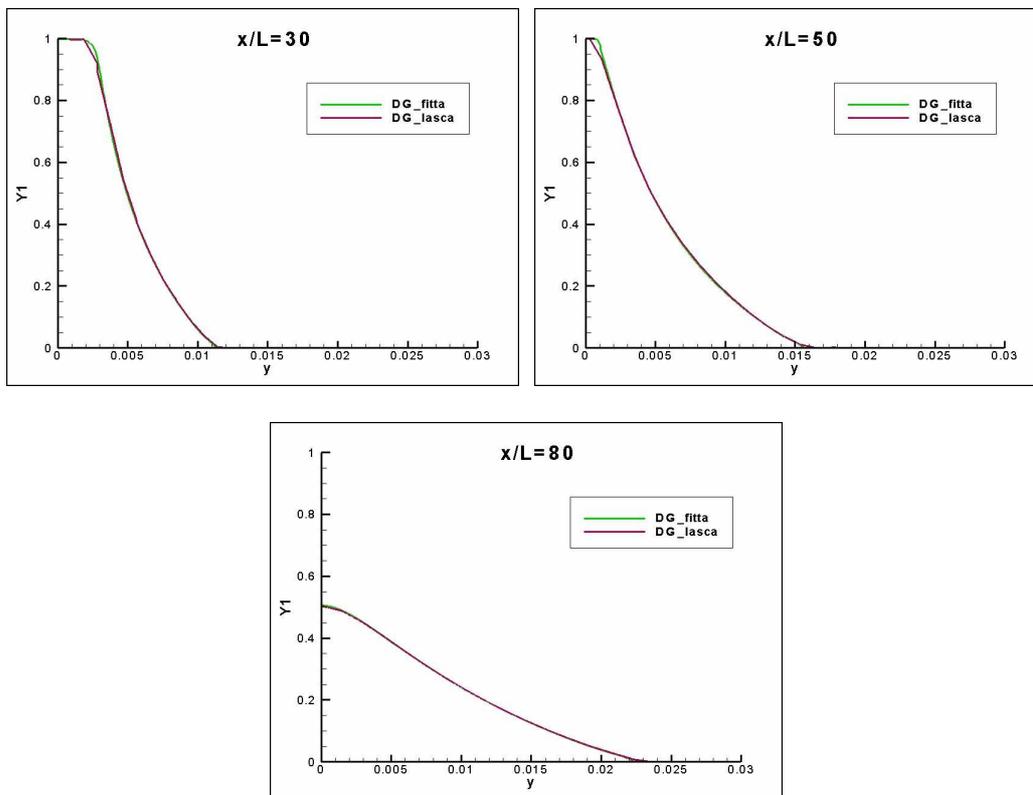
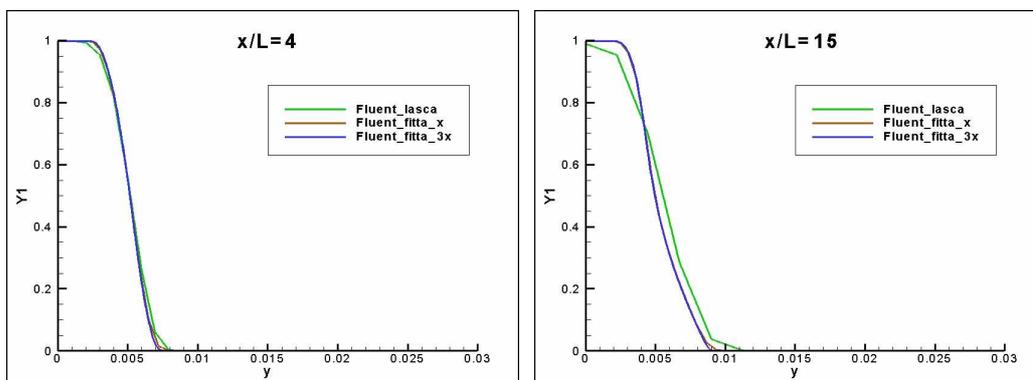


Figura 35: Confronto risultati DG per griglia fitta e lasca.

Notiamo, come già più volte ricordato, che i risultati nelle due griglie siano di fatto identici; permettendo alti ordine di approssimazione polinomiale, il DG risulta perciò indipendente dalla griglia e consente per questo di ottenere buone accuratezze anche con griglie decisamente poco fitte, con conseguente vantaggio in termini di tempi di calcolo.

Per il Fluent abbiamo invece questi risultati:



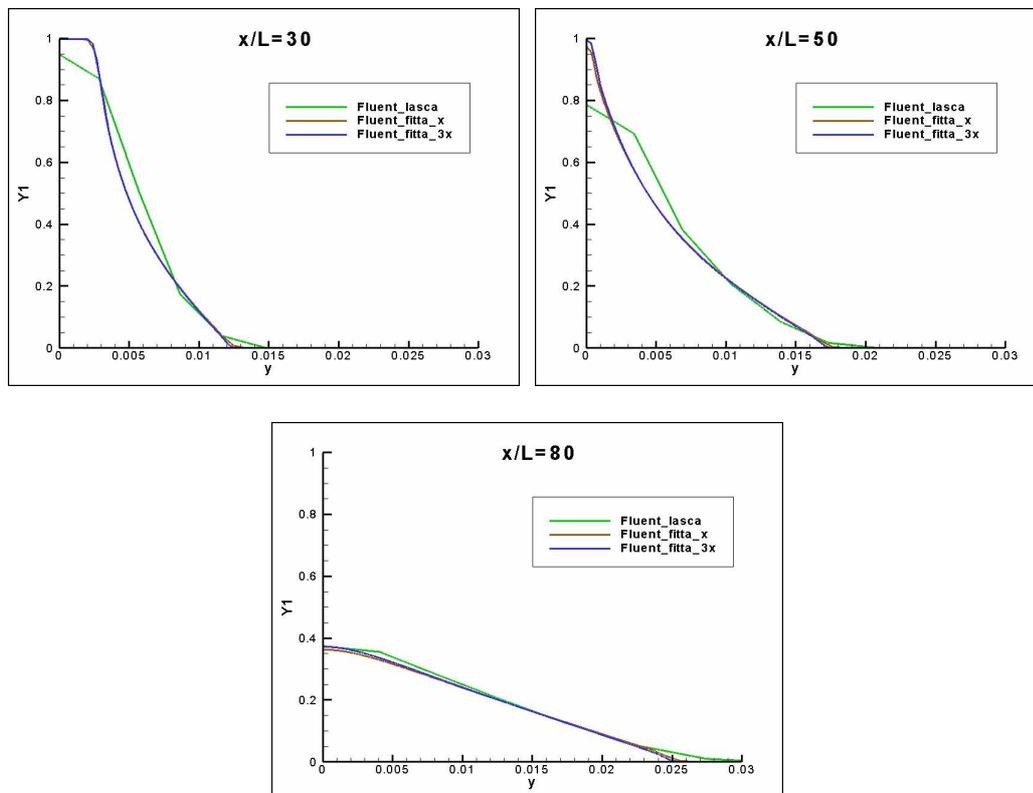


Figura 36: Confronto risultati Fluent per griglia fitta e lasca.

Nuovamente ribadiamo come il Fluent, in quanto intrinsecamente meno accurato, al ridurre degli elementi della griglia tenda inevitabilmente ad esserne influenzato, comportandosi di conseguenza in maniera più diffusiva. Proprio per questo motivo si è deciso di realizzare un'ulteriore simulazione, esclusivamente col Fluent, con una griglia strutturata a quadrilateri di infittimento triplicato rispetto a quello della griglia strutturata fin qui esaminata, per capire il limite di miglioramento del codice commerciale. Si nota, comunque, che a questo livello l'aumento degli elementi non crea eccessivi miglioramenti, segno, quindi, che i risultati sopra esposti per la griglia fitta siano già i migliori ottenibili col Fluent stesso.

Possiamo concludere, tuttavia, che il confronto tra le curve del DG e del Fluent a convergenza continua, seppur in maniera più attenuata dopo il raffinamento della griglia, a mostrare delle discordanze dei risultati; ancora una volta ribadiamo come se da un lato non sia sensato escludere che esse non dipendano dalla mancanza di un limite nel controllo delle oscillazioni nella frazione massica, che andrebbe a ripercuotersi anche sulle altre variabili, dall'altro lato il comportamento meno diffusivo del DG rispetto al Fluent potrebbe essere imputabile ad una scelta differente del modello di turbolenza; tale possibilità

risulta, di fatto, avallata anche dall'osservazione che, per simulazioni viscosi, in cui cioè la differenza nella scelta del modello è irrilevante, le divergenze risultano minime rispetto a quelle riscontrate in regimi di moto turbolenti e dall'osservazione dei diagrammi dell'intensità di turbolenza:

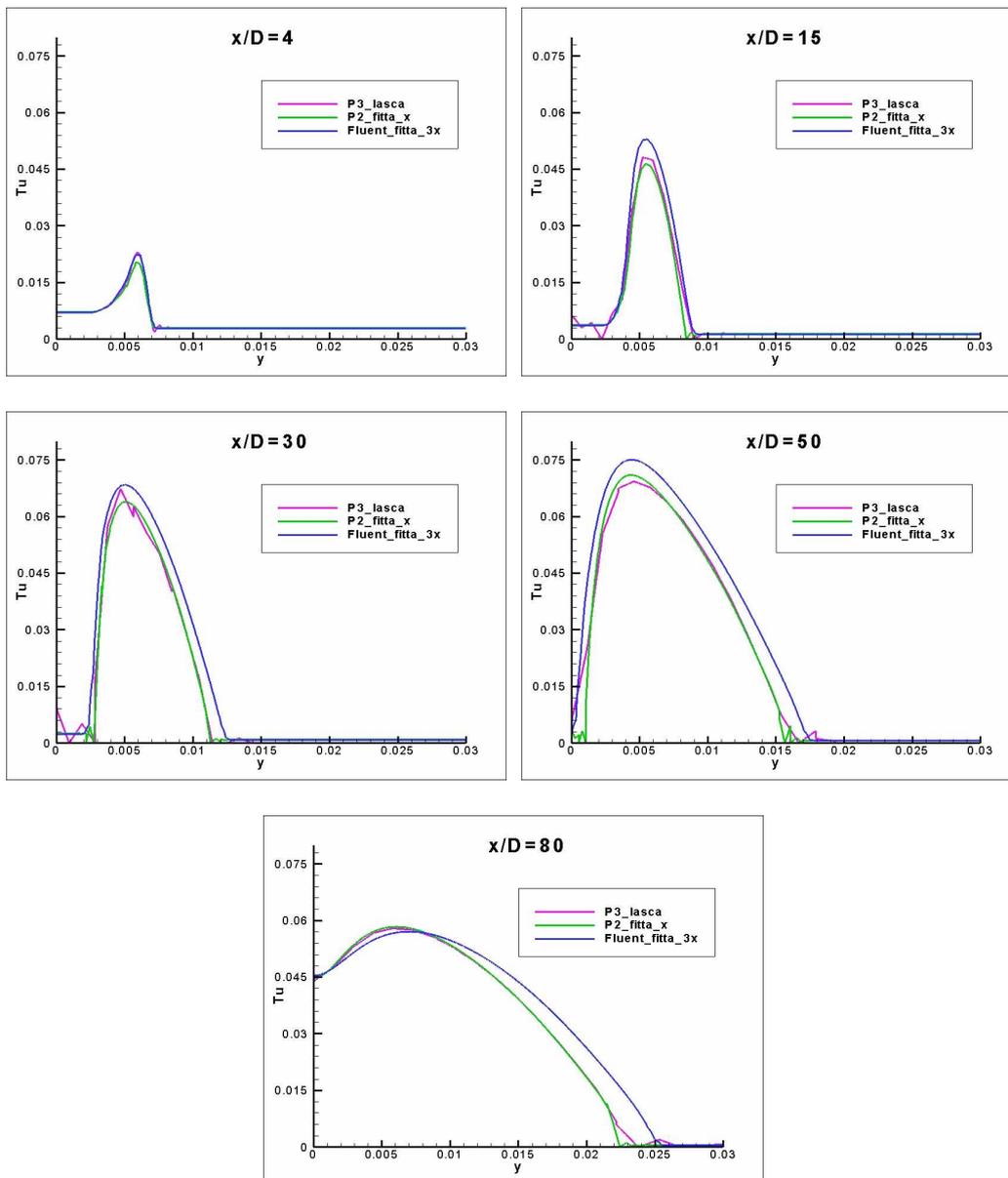


Figura 37: Confronto intensità di turbolenza DG e Fluent.

Le curve mostrano che all'imbocco le discrepanze sono minime come lo sono quelle delle altre variabili; ma spostandosi lungo l'asse il Fluent tende a sviluppare un'intensità di turbolenza maggiore che potrebbe essere strettamente

correlata, quindi, alla maggiore diffusività del getto elaborato col codice commerciale. Di conseguenza si può concludere che, con ogni probabilità, la differenza degli andamenti sia unicamente motivata da una differente scelta del modello di turbolenza, supposizione solo fortemente plausibile ma non verificabile a causa della mancanza di informazioni reperibili circa le equazioni e gli schemi implementati in Fluent.

Per completezza riportiamo, a conclusione del paragrafo, anche gli andamenti dei residui delle variabili nella condizione più gravosa di calcolo turbolento, sia per la griglia fitta strutturata:

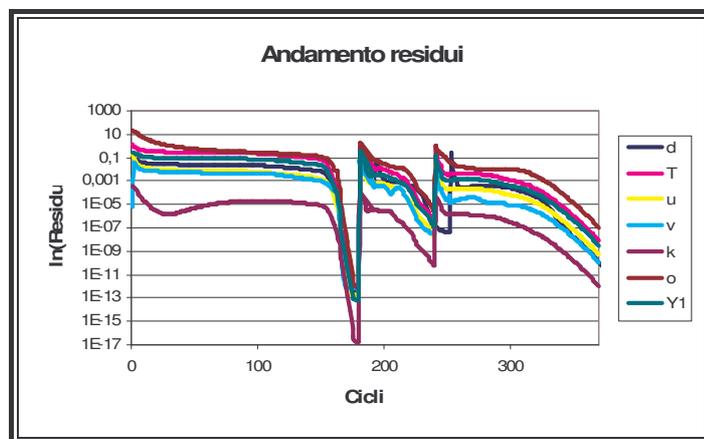


Figura 38: Andamento dei residui delle variabili nel caso di griglia fitta strutturata.

che per quella non strutturata:

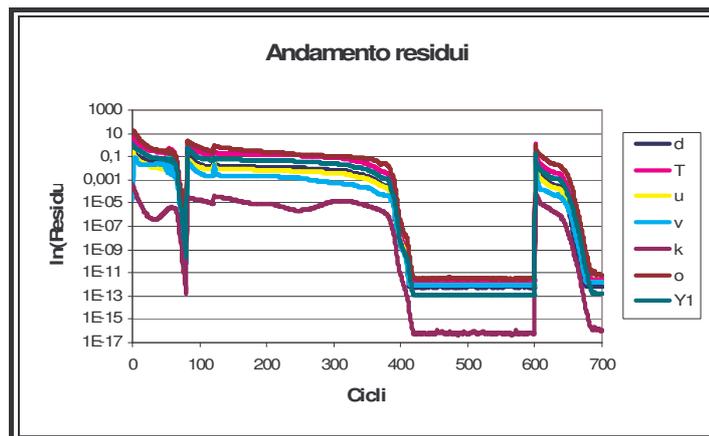


Figura 39: Andamento dei residui delle variabili nel caso di griglia lasca non strutturata.

Notiamo che la griglia strutturata impiega comunque più o meno gli stessi step per giungere a convergenza, per ogni ordine di approssimazione polinomiale;

quello che chiaramente e più elevato è il tempo macchina nell'esecuzione del singolo passo temporale, in quanto maggiore esso sarà per la griglia a quadrilateri e con un numero più elevato di elementi. Evidenziamo comunque come nel giro di circa 700 cicli si riesca ad ottenere una soluzione accurata $P3$ con una griglia non strutturata, anche con un calcolo turbolento. Tale risultato è certamente positivo per il metodo DG e ne incoraggia lo studio anche per flussi e miscele multicomponente ed eventualmente reattive.

6. CONCLUSIONI

Con la presente attività di ricerca si è cercato di affrontare lo studio della combustione da un punto di vista numero. Essa riveste una grande importanza in molte applicazioni ingegneristiche, ma coinvolgendo diverse discipline, quali la fluidodinamica, la cinetica chimica e la trasmissione del calore, presenta numerose difficoltà fenomenologiche riassumibili brevemente in: gran numero di specie chimiche coinvolte, ampio campo di scale temporali, elevati gradienti delle variabili primitive (vettore velocità, temperatura, concentrazioni, ...), regimi turbolenti che determinano effetti tridimensionali e transitori, trasferimento radiativo di calore, cambiamento di fase specialmente nel caso di combustibili solidi o liquidi, formazione di particolato, ecc. Ciascuno di questi fenomeni richiede un'adeguata comprensione ed un'accurata descrizione matematica, ma ciò non di meno anche la compartecipazione dei vari aspetti necessita di una corretta modellizzazione.

Tuttavia, attualmente, una delle principali limitazioni, per progettare sistemi di combustione industriali o più banalmente per predire il comportamento di fiamme molto semplici, riguarda la risoluzione stessa delle formule matematiche; soluzioni analitiche, infatti, per la maggior parte dei problemi tecnologici, non sono ottenibili. Dato l'incremento delle prestazioni dei moderni calcolatori, la soluzione numerica delle formulazioni è diventata uno strumento potente negli ultimi decenni e continua oggi a nutrire un grande interesse e sviluppo, tanto che la fluidodinamica computazionale è ormai un ingrediente irrinunciabile nello studio di strutture aerodinamiche, rappresentandone un punto fisso nella progettazione; si sta lavorando intensamente per cercare di estendere questi validi strumenti anche all'ambito della combustione, e molti sforzi e risorse, tra cui il presente lavoro, si stanno spendendo per raggiungere tale stimolante obiettivo.

In particolare con questa attività di dottorato si è cercato di approcciare lo studio numerico della fluidodinamica reattiva con una tecnica innovativa, ovvero quella degli elementi finiti discontinui; essi costituiscono un metodo agli elementi finiti in cui la soluzione nel dominio di calcolo viene approssimata da funzioni a tratti, continue all'interno del singolo elemento spaziale ed in generale di carattere polinomiale, ma in cui non è richiesta la continuità globale; di conseguenza la soluzione risulta discontinua all'interfaccia tra gli elementi. La mancanza di costrizione sulla continuità globale della soluzione garantisce una grande flessibilità, e di fatto la principale ragione per cui il metodo DG venga studiato con grande interesse e per cui lo si stia cercando di estendere ad un numero maggiore di applicazioni. Anche schemi di ordine elevato si possono costruire con nessuna difficoltà concettuale sia per griglie strutturate che per

quelle non strutturate; anche griglie non conformi possono essere trattate con facilità. Inoltre elementi di accuratezza differente possono coesistere nella stessa griglia in modo tale da aprire facilmente la strada all'implementazione delle strategie di tipo adattativo. In più il metodo permette formule di discretizzazione spaziale molto compatte; tale compattezza rende il tutto appetibile quando lo schema di avanzamento temporale risulta essere di tipo implicito e quando si sfrutta un'ulteriore implementazione con calcolo parallelo.

In particolare, essendo un progetto totalmente innovativo, è stato necessario procedere per gradi, ovvero non è sembrato sensato affrontare direttamente uno studio di fluidodinamica reattiva, ma si è deciso di analizzare in primis l'applicazione degli elementi finiti discontinui a miscele di gas inerti. Come primo passo si è, quindi, scelto il modello fisico, in cui si è considerata valida l'ipotesi di gas perfetto per ogni specie chimica (supportata dalle alte temperature e basse pressioni caratterizzanti i processi di combustione di interesse ingegneristico); le proprietà termodinamiche (calore specifico, viscosità, conducibilità termica) sono state scelte con formule polinomiali dipendenti dalla temperatura e facilmente reperibili in numerosi archivi scientifici, con lo scopo di migliorare il grado di accuratezza dei risultati numerici ottenibili, soprattutto in vista di un'estensione ai casi reattivi in cui si ha a che fare con forti gradienti di temperatura all'interno del dominio di calcolo. Il modello fisico, che, naturalmente, prevede la possibilità di trattare un miscelamento con un numero arbitrario di specie chimiche, ha, inoltre, la possibilità di effettuare simulazioni di tipo euleriano, viscoso e turbolento. Per quest'ultimo caso le equazioni sono state ottenute dopo un'elaborazione, effettuata utilizzando la media di Favre-Reynolds, tramite la quale è stato reso necessario effettuare delle modellizzazioni di alcuni termini, che insorgono nel momento in cui si passa da uno studio di flussi monocomponente a quelli di tipo multicomponente.

Il sistema di equazioni differenziali bidimensionali, piane e assialsimmetriche, è stato, poi, discretizzato spazialmente tramite un codice ad elementi finiti discontinui; i termini convettivi sono stati discretizzati sia con il flusso numerico di Van Leer modificato da Hanel [11] sia con quello di Godunov basato su un solutore di Riemann esatto, nella versione proposta da Gottlieb e Groth [12]. La valutazione del termine viscoso, di massa e sorgente, nell'ambito del metodo DG, è stata fatta non solo a partire dai gradienti delle variabili all'interno degli elementi, ma tenendo conto dell'effetto delle discontinuità di interfaccia sui gradienti stessi, ovvero con una sostituzione con dei gradienti 'modificati'.

L'integrazione spaziale è stata implementata attraverso sia un metodo esplicito fino a tre stadi per passo temporale, con garanzia di accuratezza in tempo pari all'ordine degli stadi, sia con metodi impliciti accurati in tempo fino al secondo ordine con l'utilizzo sia del metodo diretto multifrontale, adatto per matrici sparse non simmetriche, implementato nel pacchetto software UMFPACK, sia

del metodo iterativo GMRES con i preconditionatori BD ed ILU, disponibile nella SLATEC Common Mathematical Library.

Conclusa la programmazione, si è, per prima cosa verificata la bontà del solutore dei flussi convettivi con dei test pilota monocomponente (es. problema di Sod) confrontati direttamente con la soluzione esatta.

Il codice multicomponente è stato testato, successivamente, tramite un confronto con un codice per flussi monocomponente già consolidato ed utilizzato al Dipartimento di Ingegneria Industriale dell'Università degli Studi di Bergamo; per questo scopo sono state fatte delle simulazioni non viscoso e viscoso su un profilo alare, quindi su una geometria piana e, successivamente delle simulazioni turbolente sia su una lastra piana, cioè sempre su geometria piana, sia su un condotto cilindrico rappresentante una geometria assialsimmetrica. Per eseguire tali prove si sono utilizzati, nelle analisi numeriche, due gas distinti ma identici dal punto di vista delle proprietà termodinamiche (ovvero aria); il codice multicomponente, non ha, infatti, la capacità di discernere l'uguaglianza di due specie ma solo di risolvere, a prescindere dalla proprietà, l'evoluzione del miscelamento. Questa sezione di verifiche, condotta per tutti i casi fino ad approssimazioni polinomiale di grado due, ha permesso di notare la perfetta corrispondenza tra il vecchio codice mono gas e il nuovo multicomponente.

Appurata la correttezza dei risultati nel caso particolare di due gas uguali, si sono considerate situazioni a gas diversi. Nello specifico si è scelto di far evolvere nel dominio di calcolo aria e propano. Dapprima, su geometria assialsimmetrica, si sono considerati due flussi paralleli di aria e propano, separati da una fascia di miscela dei due gas definita da una legge sinusoidale, caratterizzati dagli stessi valori di temperatura, pressione e velocità; la larghezza della banda è stata via via ridotta fino al raggiungimento di 1/32 dell'intera altezza del dominio. Oltre questa soglia si è potuto constatare che l'effetto dei gradienti delle frazioni massiche porta all'insorgere di instabilità, legate all'oscillazione delle variabili stesse, per gradi di approssimazioni polinomiali maggiori di uno. Questo problema si è riscontrato per qualunque regime di moto: non viscoso, viscoso e laminare.

Sulla base di quanto scoperto si è cercato di realizzare un opportuno test di getti coassiali aria propano, ispirato a delle prove sperimentali eseguite da Schefer [9], che prevedesse, sia per regimi viscosi che per quelli turbolenti, degli accorgimenti sui valori iniziali, per addolcire gli eccessivi gradienti delle frazioni massiche per prevenirne l'instabilità ad essi legata. Le simulazioni si sono condotte sia su una griglia mediamente fitta strutturata arrivando fino a gradi di approssimazione polinomiale due sia una griglia molto meno impegnativa non strutturata che ha consentito l'ottenimento fino al quarto ordine di approssimazione, senza l'utilizzo di calcoli paralleli. Quanto ottenuto è successivamente stato confrontato con un codice numerico 'affermato', ovvero il Fluent; al di là di alcune discrepanze di risultati tra il Fluent ed il DG, legate con ogni probabilità all'utilizzo di un modello di turbolenza differente e/o alle

micro oscillazioni della frazione massica che, non essendo limitata, potrebbe andare a condizionare i valori di tutti gli altri parametri durante l'evoluzione del calcolo, il raffronto ha permesso di evidenziare la buona flessibilità del metodo DG, in grado di ottenere elevati livelli di accuratezza anche con griglie più lasche, semplicemente sfruttando la possibilità di ricorrere ad un grado di approssimazione polinomiale maggiore. Tale limite non è, invece, intrinsecamente superabile da altri codici quali proprio lo stesso Fluent.

In conclusione il lavoro ha permesso di apprezzare le qualità del metodo degli elementi finiti discontinui anche a problemi di miscele gassose, seppur lasciando aperta la necessità di operare un controllo, ad ordini polinomiali maggiori di uno, sulle oscillazioni delle concentrazioni delle specie chimiche in modo da garantire la stabilità del codice anche a situazioni con forti gradienti di quest'ultime variabili; successivamente esso sarà pronto per future implementazioni con modelli di fluidodinamica reattiva.

APPENDICE: FORMULE JACOBIANI

A. 1. Jacobiani flussi convettivi

$$\mathbf{F}_C = \begin{bmatrix} \rho u & \rho v \\ \rho H u & \rho H v \\ \rho u^2 + p & \rho uv \\ \rho uv & \rho v^2 + p \\ \rho k u & \rho k v \\ \rho \tilde{\omega} u & \rho \tilde{\omega} v \\ \rho Y_i u & \rho Y_i v \end{bmatrix}$$

JACOBIANI F

$$\frac{\partial F_1}{\partial \rho} = u; \quad \frac{\partial F_1}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial F_1}{\partial u} = \rho; \quad \frac{\partial F_1}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial F_1}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_1}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_1}{\partial Y_i} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial \rho} = H u; \quad \frac{\partial F_2}{\partial T} = \rho c_p u; \quad \frac{\partial F_2}{\partial u} = \rho H + \rho u^2; \quad \frac{\partial F_2}{\partial v} = \rho u v; \\ \frac{\partial F_2}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial Y_i} = \rho (h_i - h_N) u \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_3}{\partial \rho} = u^2 + R T; \quad \frac{\partial F_3}{\partial T} = \rho R; \quad \frac{\partial F_3}{\partial u} = 2 \rho u; \quad \frac{\partial F_3}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial F_3}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial Y_i} = \rho (R_i - R_N) T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_4}{\partial \rho} = u v; \quad \frac{\partial F_4}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial u} = \rho v; \quad \frac{\partial F_4}{\partial v} = \rho u; \\ \frac{\partial F_4}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_5}{\partial \rho} = ku; \quad \frac{\partial F_5}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial u} = \rho k; \quad \frac{\partial F_5}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial F_5}{\partial k} = \rho u; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_6}{\partial \rho} = \tilde{\omega} u; \quad \frac{\partial F_6}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial u} = \rho \tilde{\omega}; \quad \frac{\partial F_6}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial F_6}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \tilde{\omega}} = \rho u; \quad \frac{\partial F_6}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i}{\partial \rho} = Y_i u; \quad \frac{\partial F_i}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial u} = \rho Y_i; \quad \frac{\partial F_i}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial F_i}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \tilde{\omega}} = \rho u; \quad \frac{\partial F_i}{\partial Y_k} = \begin{cases} \rho u & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases} \end{aligned}$$

JACOBIANI G

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_1}{\partial \rho} = v; \quad \frac{\partial G_1}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial G_1}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_1}{\partial v} = \rho; \\ \frac{\partial G_1}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_1}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial G_1}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_2}{\partial \rho} = Hv; \quad \frac{\partial G_2}{\partial T} = \rho c_p v; \quad \frac{\partial G_2}{\partial u} = \rho uv; \quad \frac{\partial G_2}{\partial v} = \rho H + \rho v^2; \\ \frac{\partial G_2}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial Y_i} = \rho(h_i - h_N)v \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_3}{\partial \rho} = uv; \quad \frac{\partial G_3}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial u} = \rho v; \quad \frac{\partial G_3}{\partial v} = \rho u; \\ \frac{\partial G_3}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_4}{\partial \rho} = v^2 + RT; \quad \frac{\partial G_4}{\partial T} = \rho R; \quad \frac{\partial G_4}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial v} = 2\rho u; \\ \frac{\partial G_4}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial Y_i} = \rho(R_i - R_N)T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_5}{\partial \rho} = kv; \quad \frac{\partial G_5}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial v} = \rho k; \\ \frac{\partial G_5}{\partial k} = \rho v; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_6}{\partial \rho} = \tilde{\omega}v; \quad \frac{\partial G_6}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial v} = \rho \tilde{\omega}; \\ \frac{\partial G_6}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \tilde{\omega}} = \rho v; \quad \frac{\partial G_6}{\partial Y_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_i}{\partial \rho} = Y_i v; \quad \frac{\partial G_i}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial v} = \rho Y_i; \\ \frac{\partial G_i}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \tilde{\omega}} = \rho v; \quad \frac{\partial G_i}{\partial Y_k} = \begin{cases} \rho v & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases} \end{aligned}$$

A. 2. Jacobiani flussi Hanel

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \pm \frac{\rho c}{4} (M \pm 1)^2 \\ F_1^\pm H \\ F_1^\pm \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right] \\ F_1^\pm \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right] \\ F_1^\pm k \\ F_1^\pm \tilde{\omega} \\ F_1^\pm Y_i \end{bmatrix} \quad \text{con} \quad M = \frac{q_n}{c} \quad \text{e} \quad c = \sqrt{\gamma RT}$$

JACOBIANI F

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} &= \frac{F_1^\pm}{\rho}; & \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} &= -F_1^\pm \frac{c_T}{c} \frac{(M \mp 1)}{(M \pm 1)}; & \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} &= F_1^\pm \frac{2n_x}{c(M \pm 1)}; \\ \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} &= F_1^\pm \frac{2n_y}{c(M \pm 1)}; & \frac{\partial F_1^\pm}{\partial k} &= 0; & \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \tilde{\omega}} &= 0; & \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} &= -F_1^\pm \frac{c_{Y_i}}{c} \frac{(M \mp 1)}{(M \pm 1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} H; & \frac{\partial F_2^\pm}{\partial T} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} H + F_1^\pm c_p; & \frac{\partial F_2^\pm}{\partial u} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} H + F_1^\pm u; \\ \frac{\partial F_2^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} H + F_1^\pm v; & \frac{\partial F_2^\pm}{\partial k} &= 0; & \frac{\partial F_2^\pm}{\partial \tilde{\omega}} &= 0; & \frac{\partial F_2^\pm}{\partial Y_i} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} H + F_1^\pm (h_i - h_N) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_3^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right]; \\ \frac{\partial F_3^\pm}{\partial T} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right] + F_1^\pm \left[2(M \mp 1) \frac{p}{\rho c} \frac{a_T}{c} n_x - (M \mp 2) \frac{R}{c} n_x \right]; \\ \frac{\partial F_3^\pm}{\partial u} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right] + F_1^\pm \left[1 - \frac{p}{\rho c} \frac{1}{c} n_x^2 \right]; \\ \frac{\partial F_3^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right] + F_1^\pm \left[-\frac{p}{\rho c} \frac{1}{c} n_x n_y \right]; \\ \frac{\partial F_3^\pm}{\partial k} &= 0; & \frac{\partial F_3^\pm}{\partial \tilde{\omega}} &= 0; \\ \frac{\partial F_3^\pm}{\partial Y_i} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} \left[u - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_x \right] + F_1^\pm \left[2(M \mp 1) \frac{p}{\rho c} \frac{c_{Y_i}}{c} - (M \mp 2) \frac{T}{c} (R_i - R_N) \right] n_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_4^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right]; \\ \frac{\partial F_4^\pm}{\partial T} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right] + F_1^\pm \left[2(M \mp 1) \frac{p}{\rho a} \frac{c_T}{c} n_y - (M \mp 2) \frac{R}{c} n_y \right]; \\ \frac{\partial F_4^\pm}{\partial u} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right] + F_1^\pm \left[-\frac{p}{\rho c} \frac{1}{c} n_x n_y \right]; \\ \frac{\partial F_4^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right] + F_1^\pm \left[1 - \frac{p}{\rho c} \frac{1}{c} n_y^2 \right]; \\ \frac{\partial F_2^\pm}{\partial k} &= 0; \quad \frac{\partial F_2^\pm}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \\ \frac{\partial F_4^\pm}{\partial Y_i} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} \left[v - (M \mp 2) \frac{p}{\rho c} n_y \right] + F_1^\pm \left[2(M \mp 1) \frac{p}{\rho c} \frac{c_{Y_i}}{c} - (M \mp 2) \frac{T}{c} (R_i - R_N) \right] n_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_5^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} k; \quad \frac{\partial F_5^\pm}{\partial T} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} k; \quad \frac{\partial F_5^\pm}{\partial u} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} k; \\ \frac{\partial F_5^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} k; \quad \frac{\partial F_5^\pm}{\partial k} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial k} k + F_1^\pm; \quad \frac{\partial F_5^\pm}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_5^\pm}{\partial Y_i} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_6^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} \tilde{\omega}; \quad \frac{\partial F_6^\pm}{\partial T} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} \tilde{\omega}; \quad \frac{\partial F_6^\pm}{\partial u} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} \tilde{\omega}; \\ \frac{\partial F_6^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} \tilde{\omega}; \quad \frac{\partial F_6^\pm}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_6^\pm}{\partial \tilde{\omega}} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial k} \tilde{\omega} + F_1^\pm; \quad \frac{\partial F_6^\pm}{\partial Y_i} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} \tilde{\omega} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i^\pm}{\partial \rho} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial \rho} Y_i; \quad \frac{\partial F_i^\pm}{\partial T} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial T} Y_i; \quad \frac{\partial F_i^\pm}{\partial u} = \frac{\partial F_1^\pm}{\partial u} Y_i; \\ \frac{\partial F_i^\pm}{\partial v} &= \frac{\partial F_1^\pm}{\partial v} Y_i; \quad \frac{\partial F_i^\pm}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial F_i^\pm}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial F_i^\pm}{\partial Y_k} = \begin{cases} \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_i} Y_i + F_1^\pm & k=i \\ \frac{\partial F_1^\pm}{\partial Y_k} Y_i & k \neq i \end{cases} \end{aligned}$$

DERIVATE VELOCITA' DEL SUONO

$$\begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial a}{\partial T} = \frac{1}{2c} [\gamma_T RT + \gamma R]; \quad \frac{\partial c}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial c}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial c}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial c}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial c}{\partial Y_i} = \frac{1}{2c} [\gamma_{Y_i} RT + \gamma (R_i - R_N) T] \end{array}$$

DERIVATE γ

$$\begin{array}{l} \frac{\partial \gamma}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial \gamma}{\partial T} = \frac{c_{pT}}{c_v} (1 - \gamma); \quad \frac{\partial \gamma}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \gamma}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial \gamma}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial \gamma}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial \gamma}{\partial Y_i} = \frac{(c_{p_i} - c_{p_N})}{c_v} - \frac{c_p}{c_v^2} (c_{v_i} - c_{v_N}) \end{array}$$

DERIVATE CALORE SPECIFICO

$$\begin{array}{l} \frac{\partial c_p}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial c_p}{\partial T} = \sum_{i=1}^N c_{p_{T_i}} Y_i; \quad \frac{\partial c_p}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial c_p}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial c_p}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial c_p}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial c_p}{\partial Y_i} = c_{p_i} - c_{p_N} \\ \text{con } c_{p_T} = c_{p_i} (1) + c_{p_i} (2)T + c_{p_i} (3)T^2 + \dots \end{array}$$

A. 3. Jacobiani flussi Godunov

Risolti numericamente.

A. 4. Jacobiani flussi diffusivi

$$\mathbf{F}_d = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -(\mu + \bar{\mu}_T)[s_x u + \tau_{xy} v] & -(\mu + \bar{\mu}_T)[\tau_{xy} u + s_y v] \\ -(\lambda + \lambda_T) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{2}{3} \rho \bar{k} u & -(\lambda + \lambda_T) \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{2}{3} \rho \bar{k} v \\ -(\mu + \bar{\mu}_T) s_x + \frac{2}{3} \rho \bar{k} & -(\mu + \bar{\mu}_T) \tau_{xy} \\ -(\mu + \bar{\mu}_T) \tau_{xy} & -(\mu + \bar{\mu}_T) s_y + \frac{2}{3} \rho \bar{k} \\ -(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial x} & -(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T) \frac{\partial k}{\partial y} \\ -(\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} & -(\mu + \sigma \bar{\mu}_T) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

con s_x, τ_{xy} e s_y i tensori degli sforzi divisi per la viscosità $(\mu + \bar{\mu}_T)$

JACOBIANI F

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial \rho} &= -\bar{\mu}_{T\rho} [s_x u + \tau_{xy} v] - \lambda_{T\rho} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{2}{3} \bar{k} u; \\ \frac{\partial F_2}{\partial T} &= -(\mu_T + \bar{\mu}_T) [s_x u + \tau_{xy} v] - (\lambda_T + \lambda_{T_T}) \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial u} &= -(\mu + \bar{\mu}_T) s_x + \frac{2}{3} \rho \bar{k}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial v} &= -(\mu + \bar{\mu}_T) \tau_{xy} + (\mu + \bar{\mu}_T) \frac{2}{3} \frac{u}{y}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial k} &= -\bar{\mu}_{T_k} [s_x u + \tau_{xy} v] - \lambda_{T_k} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{2}{3} \rho u; \\ \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{\omega}} &= -\bar{\mu}_{T_\omega} [s_x u + \tau_{xy} v] - \lambda_{T_\omega} \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial Y_i} &= -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) [s_x u + \tau_{xy} v] - (\lambda_{Y_i} + \lambda_{T_{Y_i}}) \frac{\partial T}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \rho} = -\bar{\mu}_{T_\rho} s_x + \frac{2}{3} \bar{k}; \quad \frac{\partial F_3}{\partial T} = -(\mu_T + \bar{\mu}_{T_T}) s_x; \quad \frac{\partial F_3}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial v} = (\mu + \bar{\mu}_T) \frac{2}{3} \frac{1}{y};$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial k} = -\bar{\mu}_{T_k} s_x + \frac{2}{3} \rho; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \tilde{\omega}} = -\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} s_x; \quad \frac{\partial F_3}{\partial Y_i} = -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) s_x$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \rho} = -\bar{\mu}_{T_\rho} \tau_{xy}; \quad \frac{\partial F_4}{\partial T} = -(\mu_T + \bar{\mu}_{T_T}) \tau_{xy}; \quad \frac{\partial F_4}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial k} = -\bar{\mu}_{T_k} \tau_{xy}; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \tilde{\omega}} = -\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \tau_{xy}; \quad \frac{\partial F_4}{\partial Y_i} = -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \tau_{xy}$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \rho} = -\sigma^* \bar{\mu}_{T_\rho} \frac{\partial k}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_5}{\partial T} = -(\mu_T + \sigma^* \bar{\mu}_{T_T}) \frac{\partial k}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_5}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial k} = -\sigma^* \bar{\mu}_{T_k} \frac{\partial k}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \tilde{\omega}} = -\sigma^* \bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \frac{\partial k}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_5}{\partial Y_i} = -(\mu_{Y_i} + \sigma^* \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \frac{\partial k}{\partial x}$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \rho} = -\sigma \bar{\mu}_{T_\rho} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_6}{\partial T} = -(\mu_T + \sigma \bar{\mu}_{T_T}) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_6}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial k} = -\sigma \bar{\mu}_{T_k} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \tilde{\omega}} = -\sigma \bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_6}{\partial Y_i} = -(\mu_{Y_i} + \sigma \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}$$

DERIVATE JACOBIANI F

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = -(\lambda + \lambda_T); \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = -\left(2 - \frac{2}{3} \right) (\mu + \bar{\mu}_T) u;$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T) v; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = -\left(2 - \frac{2}{3}\right)(\mu + \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T);$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = -(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = -(\mu + \sigma \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T)v;$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = \frac{2}{3}(\mu + \bar{\mu}_T)u; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = \frac{2}{3}(\mu + \bar{\mu}_T);$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_3}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

JACOBIANI G

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_2}{\partial \rho} &= -\bar{\mu}_{T_p} [\tau_{xy} u + s_y v] - \lambda_{T_p} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{2}{3} \bar{k} v; \\ \frac{\partial G_2}{\partial T} &= -(\mu_T + \bar{\mu}_{T_T}) [\tau_{xy} u + s_y v] - (\lambda_T + \lambda_{T_T}) \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial u} &= -(\mu + \bar{\mu}_T) \tau_{xy}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial v} &= -(\mu + \bar{\mu}_T) s_y + (\mu + \bar{\mu}_T) \frac{2}{3} \frac{v}{y} + \frac{2}{3} \rho \bar{k}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial k} &= -\bar{\mu}_{T_k} [\tau_{xy} u + s_y v] - \lambda_{T_k} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{2}{3} \rho v; \\ \frac{\partial G_2}{\partial \tilde{\omega}} &= -\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} [\tau_{xy} u + s_y v] - \lambda_{T_{\tilde{\omega}}} \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial Y_i} &= -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) [\tau_{xy} u + s_y v] - (\lambda_{Y_i} + \lambda_{T_{Y_i}}) \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_3}{\partial \rho} &= -\bar{\mu}_{T_p} \tau_{xy}; & \frac{\partial G_3}{\partial T} &= -(\mu_T + \bar{\mu}_{T_T}) \tau_{xy}; & \frac{\partial G_3}{\partial u} &= 0; & \frac{\partial G_3}{\partial v} &= 0; \\ \frac{\partial G_3}{\partial k} &= -\bar{\mu}_{T_k} \tau_{xy}; & \frac{\partial G_3}{\partial \tilde{\omega}} &= -\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \tau_{xy}; & \frac{\partial G_3}{\partial Y_i} &= -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \tau_{xy} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_4}{\partial \rho} &= -\bar{\mu}_{T_p} s_y + \frac{2}{3} \bar{k}; & \frac{\partial G_4}{\partial T} &= -(\mu_T + \bar{\mu}_{T_T}) s_y; & \frac{\partial G_4}{\partial u} &= 0; & \frac{\partial G_4}{\partial v} &= (\mu + \bar{\mu}_T) \frac{2}{3} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial G_4}{\partial k} &= -\bar{\mu}_{T_k} s_y + \frac{2}{3} \rho; & \frac{\partial G_4}{\partial \tilde{\omega}} &= -\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} s_y; & \frac{\partial G_4}{\partial Y_i} &= -(\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) s_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_5}{\partial \rho} &= -\sigma^* \bar{\mu}_{T_p} \frac{\partial k}{\partial y}; & \frac{\partial G_5}{\partial T} &= -(\mu_T + \sigma^* \bar{\mu}_{T_T}) \frac{\partial k}{\partial y}; & \frac{\partial G_5}{\partial u} &= 0; & \frac{\partial G_5}{\partial v} &= 0; \\ \frac{\partial G_5}{\partial k} &= -\sigma^* \bar{\mu}_{T_k} \frac{\partial k}{\partial y}; & \frac{\partial G_5}{\partial \tilde{\omega}} &= -\sigma^* \bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \frac{\partial k}{\partial y}; & \frac{\partial G_5}{\partial Y_i} &= -(\mu_{Y_i} + \sigma^* \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \frac{\partial k}{\partial y} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial \rho} = -\sigma \bar{\mu}_{T_p} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}; \quad \frac{\partial G_6}{\partial T} = -(\mu_T + \sigma \bar{\mu}_{T_r}) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}; \quad \frac{\partial G_6}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial k} = -\sigma \bar{\mu}_{T_k} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \tilde{\omega}} = -\sigma \bar{\mu}_{T_\omega} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}; \quad \frac{\partial G_6}{\partial Y_i} = -(\mu_{Y_i} + \sigma \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}$$

DERIVATE JACOBIANI G

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = \frac{2}{3}(\mu + \bar{\mu}_T)v;$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T)u; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T);$$

$$\frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = \frac{2}{3}(\mu + \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = -(\lambda + \lambda_T); \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T)u;$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = -\left(2 - \frac{2}{3}\right)(\mu + \bar{\mu}_T)v; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = -(\mu + \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = -\left(2 - \frac{2}{3}\right)(\mu + \bar{\mu}_T);$$

$$\frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial G_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = -(\mu + \sigma^* \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = -(\mu + \sigma \bar{\mu}_T); \quad \frac{\partial G_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = 0$$

DERIVATA VISCOSITA' LAMINARE

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}}$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial \mu}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \frac{-X_i \mu_i}{\left(\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij} \right)^2} \left(\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij_T} \right) + \sum_{i=1}^N \frac{X_i \mu_{i_T}}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}};$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \mu}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial \mu}{\partial \tilde{\omega}} = 0;$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial Y_k} = \frac{(R_k / R) \mu_k}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{kj}} - \frac{(R_N / R) \mu_N}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{Nj}} - \sum_{i=1}^N \frac{(X_i \mu_i) / R}{\left(\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij} \right)^2} (R_k \phi_{ik} - R_N \phi_{iN})$$

con $\mu_{i_T} = \mu_i(1) + \mu_i(2)T + \mu_i(3)T^2 + \dots$

$$\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \rho} = 0;$$

$$\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial T} = \frac{2\phi_{ij}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]} \left\{ \left(\frac{R_j}{R_i}\right)^{1/4} \left[\frac{1}{2} \mu_i^{-0.5} \mu_j^{-0.5} \mu_{i_T} - \frac{1}{2} \mu_i^{0.5} \mu_j^{-1.5} \mu_{j_T} \right] \right\};$$

$$\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial Y_k} = 0$$

DERIVATA VISCOSITA' TURBOLENTA

$$\bar{\mu}_T = \alpha^* \rho \bar{k} e^{-\tilde{\omega}}$$

$$\frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial \rho} = \alpha^* (1-f) \bar{k} e^{-\tilde{\omega}}; \quad \frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial T} = \alpha^* f \text{Re}_T \mu_T; \quad \frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial k} = \alpha^* (1-f) \rho e^{-\tilde{\omega}}; \quad \frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial \tilde{\omega}} = -\alpha^* (1-f) \rho \bar{k} e^{-\tilde{\omega}}; \quad \frac{\partial \bar{\mu}_T}{\partial Y_i} = \alpha^* f \text{Re}_T \mu_{Y_i}$$

$$\text{con } f = \frac{(\alpha_0^* R_k - R_k) \text{Re}_T}{(\alpha_0^* R_k + \text{Re}_T)(R_k + \text{Re}_T)}$$

DERIVATA CONDUCIBILITA' TERMICA LAMINARE

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}}$$

Analogo viscosità termica laminare.

DERIVATA CONDUCIBILITA' TERMICA TURBOLENTA

$$\lambda_T = \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_T$$

$$\begin{array}{l}
\frac{\partial \lambda_T}{\partial \rho} = \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_{T_p}; \quad \frac{\partial \lambda_T}{\partial T} = \text{Pr}_T c_{p_T} \bar{\mu}_T + \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_{T_r}; \quad \frac{\partial \lambda_T}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \lambda_T}{\partial v} = 0; \\
\frac{\partial \lambda_T}{\partial k} = \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_{T_k}; \quad \frac{\partial \lambda_T}{\partial \tilde{\omega}} = \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}}; \quad \frac{\partial \lambda_T}{\partial Y_i} = \text{Pr}_T c_{p_i} \bar{\mu}_T + \text{Pr}_T c_p \bar{\mu}_{T_{Y_i}}
\end{array}$$

A. 5. Jacobiani flussi di massa

$$\mathbf{F}_m = \begin{bmatrix}
0 & 0 \\
\left(-\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \left(-\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T \text{Pr}_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right) & \left(-\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im} + \frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T \text{Pr}_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\
0 & 0 \\
0 & 0 \\
0 & 0 \\
0 & 0 \\
\left(-\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) & \left(-\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + \left(-\frac{\bar{\mu}_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)
\end{bmatrix}$$

JACOBIANI F

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_2}{\partial \rho} &= -\sum_{i=1}^N \left[h_i \left(D_{im} + \rho D_{im\rho} + \frac{\bar{\mu}_{T\rho}}{Sc_T} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T\rho} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial T} &= -\sum_{i=1}^N \left[\rho (D_{imr} h_i + D_{im} c_{p_i}) + h_i \frac{\bar{\mu}_{Tr}}{Sc_T} \right] \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \\ &\quad - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{Tr} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 + \bar{\mu}_T \sum_{i=1}^N c_{p_{Tr}} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial u} &= 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial F_2}{\partial k} &= -\sum_{i=1}^N \left(h_i \frac{\bar{\mu}_{T_k}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_k} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{\omega}} &= -\sum_{i=1}^N \left(h_i \frac{\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial Y_i} &= -\sum_{i=1}^N h_i \left[\left(\rho D_{im_{Y_i}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{Y_i}}}{Sc_T} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \\ &\quad - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_{Y_i}} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 + \bar{\mu}_T (c_{p_i} Y_i - c_{p_N} Y_N) \right) \frac{\partial T}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i}{\partial \rho} &= - \left[\left(D_{im} + \rho D_{im\rho} \right) + \frac{\bar{\mu}_{T\rho}}{Sc_T} \right] \frac{\partial Y_i}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_i}{\partial T} &= - \left(\rho D_{imr} + \frac{\bar{\mu}_{Tr}}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_i}{\partial u} &= 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial k} = - \frac{\bar{\mu}_{T_k}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x}; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \tilde{\omega}} = - \frac{\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x}; \\ \frac{\partial F_i}{\partial Y_k} &= - \left(\rho D_{im_{Y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{Y_k}}}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x} \end{aligned}$$

DERIVATE JACOBIANI F

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = -\frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{\rho_i} (Y_i)^2 \right);$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x} \right)} = \begin{cases} -\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im_{y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{y_k}}}{Sc_T} \right) & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases}$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x} \right)} = \begin{cases} -\left(\rho D_{im_{y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{y_k}}}{Sc_T} \right) & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_i}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial y} \right)} = 0$$

JACOBIANI G

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_2}{\partial \rho} &= -\sum_{i=1}^N \left[h_i \left(D_{im} + \rho D_{im\rho} + \frac{\bar{\mu}_{T\rho}}{Sc_T} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial y} - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T\rho} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial T} &= -\sum_{i=1}^N \left[\rho (D_{im_T} h_i + D_{im} c_{p_i}) + h_i \frac{\bar{\mu}_{T_T}}{Sc_T} \right] \frac{\partial Y_i}{\partial y} \\ &\quad - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_T} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 + \bar{\mu}_T \sum_{i=1}^N c_{p_{T_i}} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial u} &= 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial v} = 0; \\ \frac{\partial G_2}{\partial k} &= -\sum_{i=1}^N \left(h_i \frac{\bar{\mu}_{T_k}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_k} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial \tilde{\omega}} &= -\sum_{i=1}^N \left(h_i \frac{\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right) \frac{\partial T}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_2}{\partial Y_i} &= -\sum_{i=1}^N h_i \left[\left(\rho D_{im_{Y_i}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{Y_i}}}{Sc_T} \right) \right] \frac{\partial Y_i}{\partial y} \\ &\quad - \frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\bar{\mu}_{T_{Y_i}} \sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 + \bar{\mu}_T (c_{p_i} Y_i - c_{p_N} Y_N) \right) \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_i}{\partial \rho} &= - \left[\left(D_{im} + \rho D_{im\rho} \right) + \frac{\bar{\mu}_{T\rho}}{Sc_T} \right] \frac{\partial Y_i}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_i}{\partial T} &= - \left(\rho D_{im_T} + \frac{\bar{\mu}_{T_T}}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_i}{\partial u} &= 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial k} = - \frac{\bar{\mu}_{T_k}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y}; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \tilde{\omega}} = - \frac{\bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial y}; \\ \frac{\partial G_i}{\partial Y_k} &= - \left(\rho D_{im_{Y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{Y_k}}}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial y} \end{aligned}$$

DERIVATE JACOBIANI G

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = -\frac{1}{Sc_T Pr_T} \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} (Y_i)^2 \right);$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_2}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = \begin{cases} -\sum_{i=1}^N h_i \left(\rho D_{im_{y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{y_k}}}{Sc_T} \right) & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases}$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial G_i}{\partial \left(\frac{\partial Y_k}{\partial y} \right)} = \begin{cases} -\left(\rho D_{im_{y_k}} + \frac{\bar{\mu}_{T_{y_k}}}{Sc_T} \right) & k=i \\ 0 & k \neq i \end{cases}$$

JACOBIANO DIFFUSIVITA' DI MASSA

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}}}$$

$$\frac{\partial D_{im}}{\partial \rho} = - \frac{1 - X_i}{\left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}} \right)^2} \left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{-X_j}{D_{ij}^2} D_{ij\rho} \right); \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial T} = - \frac{1 - X_i}{\left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}} \right)^2} \left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{-X_j}{D_{ij}^2} D_{ijT} \right);$$

$$\frac{\partial D_{im}}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial \tilde{\omega}} = 0;$$

$$\left. \begin{aligned} & k \neq i \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial Y_k} = \frac{(R_k - R_N)/R}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}}} + \\ & - \frac{1 - X_i}{\left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}} \right)^2} \left[\frac{R_k/R}{D_{ik}} - \frac{R_N/R}{D_{iN}} - \frac{R_N/R}{D_{iN}^2} D_{iN_{Y_k}} + \frac{X_N}{D_{iN}^2} D_{iN_{Y_k}} - \sum_{j=1, j \neq i}^{N-1} \frac{X_j}{D_{ij}^2} D_{ij_{Y_k}} \right] \\ & k = i \quad \frac{\partial D_{im}}{\partial Y_k} = \frac{(-R_N)/R}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}}} + \\ & - \frac{1 - X_i}{\left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}} \right)^2} \left[- \frac{R_N/R}{D_{iN}} - \frac{R_N/R}{D_{iN}^2} D_{iN_{Y_k}} + \frac{X_N}{D_{iN}^2} D_{iN_{Y_k}} - \sum_{j=1, j \neq i}^{N-1} \frac{X_j}{D_{ij}^2} D_{ij_{Y_k}} \right] \end{aligned} \right\}$$

JACOBIANO DIFFUSIVITA' DI MASSA BINARIA

$$D_{ij} = D_{ij}(0) \frac{T^{D_{ij}(1)}}{p^{D_{ij}(2)}}$$

$$\frac{\partial D_{ij}}{\partial \rho} = -\frac{D_{ij}(2)}{\rho} D_{ij}; \quad \frac{\partial D_{ij}}{\partial T} = -\frac{(D_{ij}(0) - D_{ij}(2))}{T} D_{ij}; \quad \frac{\partial D_{ij}}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial D_{ij}}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial D_{ij}}{\partial k} = 0; \quad \frac{\partial D_{ij}}{\partial \tilde{\omega}} = 0; \quad \frac{\partial D_{ij}}{\partial Y_i} = 0$$

A. 6. Jacobiani termini sorgente

$$s = \begin{bmatrix} 0 \\ -F_5 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{k} (pf + \beta^* df) \\ \alpha pf + \beta df - omu \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right] \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$df = \rho e^{\tilde{\omega}}$$

$$pf = -\rho \alpha^* e^{\tilde{\omega}} \left[s_x \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy}^2 + s_y \frac{\partial v}{\partial y} + \left(2 \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{v}{y} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) \frac{v}{y} \right] +$$

$$+ \frac{2}{3} \rho \left(\frac{v}{y} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

$$omu = (1 + \sigma_0^* \alpha^* Re_T) \mu$$

JACOBIANI F

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_5}{\partial \rho} &= \bar{k} (pf_\rho + \beta_\rho^* df + \beta^* df_\rho); & \frac{\partial F_5}{\partial T} &= \bar{k} (pf_T + \beta_T^* df + \beta^* df_T); \\ \frac{\partial F_5}{\partial u} &= 0; & \frac{\partial F_5}{\partial v} &= \bar{k} (pf_v); \\ \frac{\partial F_5}{\partial k} &= \bar{k} (pf_k + \beta_k^* df + \beta^* df_k) + (pf + \beta^* df); & \frac{\partial F_5}{\partial \tilde{\omega}} &= \bar{k} (pf_{\tilde{\omega}} + \beta_{\tilde{\omega}}^* df + \beta^* df_{\tilde{\omega}}); \\ \frac{\partial F_5}{\partial Y_i} &= \bar{k} (pf_{Y_i} + \beta_{Y_i}^* df + \beta^* df_{Y_i}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_6}{\partial \rho} &= \alpha_\rho pf + \alpha pf_\rho + \beta df_\rho - omu_\rho \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right]; \\ \frac{\partial F_6}{\partial T} &= \alpha_T pf + \alpha pf_T + \beta df_T - omu_T \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right]; \\ \frac{\partial F_6}{\partial u} &= 0; & \frac{\partial F_6}{\partial v} &= \alpha pf_v; \\ \frac{\partial F_6}{\partial k} &= \alpha_k pf + \alpha pf_k + \beta df_k - omu_k \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right]; \\ \frac{\partial F_6}{\partial \tilde{\omega}} &= \alpha_{\tilde{\omega}} pf + \alpha pf_{\tilde{\omega}} + \beta df_{\tilde{\omega}} - omu_{\tilde{\omega}} \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right]; \\ \frac{\partial F_6}{\partial Y_i} &= \alpha_{Y_i} pf + \alpha pf_{Y_i} + \beta df_{Y_i} - omu_{Y_i} \left[\left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

DERIVATE COEFFICIENTI

$$\frac{\partial \alpha^*}{\partial w_i} = -\alpha^* \left[\frac{(\alpha_0^* R_k - R_k)}{(R_k + \text{Re}_T)(\alpha_0^* R_k + \text{Re}_T)} \right] \text{Re}_{T_{w_i}};$$

$$\frac{\partial \beta^*}{\partial w_i} = -\beta^* \left[\frac{4 \text{Re}_T^3 (\beta_0^* R_\beta^4 - R_\beta^4)}{(R_\beta^4 + \text{Re}_T^4)(\beta_0^* R_\beta^4 + \text{Re}_T^4)} \right] \text{Re}_{T_{w_i}};$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial w_i} = \alpha \left[\frac{(\alpha_0^* R_k - R_k)}{(R_k + \text{Re}_T)(\alpha_0^* R_k + \text{Re}_T)} - \frac{(\alpha_0 R_\omega - R_\omega)}{(R_\omega + \text{Re}_T)(\alpha_0^* R_\omega + \text{Re}_T)} \right] \text{Re}_{T_{w_i}};$$

$$\frac{\partial \text{Re}_T}{\partial \rho} = \frac{\text{Re}_T}{\rho}; \quad \frac{\partial \text{Re}_T}{\partial T} = \text{Re}_T \frac{\mu_T}{\mu}; \quad \frac{\partial \text{Re}_T}{\partial u} = 0; \quad \frac{\partial \text{Re}_T}{\partial v} = 0;$$

$$\frac{\partial \text{Re}_T}{\partial k} = \frac{\text{Re}_T}{k}; \quad \frac{\partial \text{Re}_T}{\partial \tilde{\omega}} = -\text{Re}_T; \quad \frac{\partial \text{Re}_T}{\partial Y_i} = \text{Re}_T \frac{\mu_{Y_i}}{\mu}$$

DERIVATE JACOBIANI F

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = \bar{k} \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} s_x + \frac{2}{3}\rho \right); \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = \bar{k} \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} \tau_{xy} \right);$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = \alpha \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} s_x + \frac{2}{3}\rho \right); \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)} = \alpha \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} \tau_{xy} \right);$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right)} = -2omu \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x} \right); \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = \bar{k} \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} \tau_{xy} \right); \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = \bar{k} \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} s_y + \frac{2}{3}\rho \right);$$

$$\frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_5}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)} = \alpha \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} \tau_{xy} \right); \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)} = \alpha \left(-2\rho\alpha^* e^{-\tilde{\omega}} s_y + \frac{2}{3}\rho \right);$$

$$\frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y} \right)} = 0; \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right)} = -2omu \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y} \right); \quad \frac{\partial F_6}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)} = 0$$

A. 7. Jacobiani termine assialsimmetrico

$$\mathbf{ax} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \left\{ -\rho + (\mu + \bar{\mu}_T) \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \right\} \frac{1}{y} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

JACOBIANI F

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_4}{\partial \rho} &= \left\{ -RT + \bar{\mu}_{T_p} \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] - \frac{2}{3} \bar{k} \right\} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial F_4}{\partial T} &= \left\{ -\rho R + (\mu_T + \bar{\mu}_{T_r}) \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \right\} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial F_4}{\partial u} &= 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial v} = \left\{ (\mu + \bar{\mu}_T) \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{1}{y} \right] \right\} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial F_4}{\partial k} &= \left\{ \bar{\mu}_{T_k} \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] - \frac{2}{3} \rho \right\} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial F_4}{\partial \tilde{\omega}} &= \left\{ \bar{\mu}_{T_{\tilde{\omega}}} \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \right\} \frac{1}{y}; \\ \frac{\partial F_4}{\partial Y_i} &= \left\{ -\rho (R_i - R_N) T + (\mu_{Y_i} + \bar{\mu}_{T_{Y_i}}) \left[\left(2 - \frac{2}{3} \right) \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \right\} \frac{1}{y} \end{aligned}$$

DERIVATE JACOBIANI F

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} = -\frac{2}{3}(\mu_T + \bar{\mu}_T) \frac{1}{y}; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} = 0;$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)} = 0$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} = -\frac{2}{3}(\mu_T + \bar{\mu}_T) \frac{1}{y};$$

$$\frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial y}\right)} = 0; \quad \frac{\partial F_4}{\partial \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y}\right)} = 0$$

REFERENCE

- [1] K.C. Altimira. *Numerical simulation of non-premixed laminar flames and turbulent flames by means of flamelet modelling approaches*. PhD thesis. Universitat Politècnica de Catalunya, 2005.
- [2] R.B. Bird, E.E. Steward, E.N. Lightfoot. *Transport phenomena*. John Wiley and Sons Inc., 1960.
- [3] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics, 1995.
- [4] P.A. Libby, F.A. Williams. *Turbulent Reacting Flows*. Libby and F.A. Williams.
- [5] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldember, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Quin. Gri-Mech 3.0, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [6] H. Tennekes, J.L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MIT Press, Cambridge, 1971.
- [7] R.J. Kee, F. M. Rupley, J.A. Miller. *The Chemkin Thermodynamic Database*. Technical report, Sandia National Laboratories, 1987.
- [8] T. F. Irvine Jr. *Equipping science for the 21st century* .
- [9] R.W. Schefer. *Data base for turbulent, nonpremixed, nonreacting propane-jet flow*. Technical report, Sandia National Laboratories, 1987.
- [10] D.C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc., 2002.
- [11] D. Hanel, R. Schwane, G. Seider. *On the accuracy of upwind schemes for the solution of the Navier-Stokes equations*. AIAA Paper 87-1105 CP, AIAA, proceedings of the AIAA 8th Computational Fluid Dynamics Conference, July 1987.
- [12] J.J. Gottlieb, C.P.T. Groth. *Assessment of Riemann Solvers for Unsteady One-Dimensional Inviscid Flows of Perfect Gases*. Journal of Computational Physics 78, 437-458, 1988.
- [13] G.S. Iannelli, A.J. Baker, *A stiffy-stable implicit Runge-Kutta algorithm for CFD applications*, AIAA Paper 88-0416, AIAA 1988.
- [14] F. Bassi, S. Rebay. *A high order discontinuous Galerkin method for compressible turbulent flows*, in: *Discontinuous Galerkin Method. Theory, Computation and Applications*, Vol. 11 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer-Verlag, 2000, First Symposium on Discontinuous Galerkin Method, May 24-26, 1999, Newport, RI, USA.
- [15] F. Bassi, S. Rebay. *A High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier-*

- Stokes Equations*. Journal of Computational Physics. Vol. 131, pp. 267-279 ISSN: 0021-9991, 1997.
- [16] F. Bassi, S. Rebay, G. Mariotti, S. Pedinotti, M. Savini. *A High Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for Inviscid and Viscous Turbomachinery Flows*. 2nd European Conference on Turbomachinery-Fluid Dynamics and Thermodynamics. March 5-7, Antwerpen, Belgium. (pp. 99-108). ISBN/ISSN: 90-504-032-X, 1997.
- [17] F. Bassi, A. Crivellini, M. Savini. *Discontinuous Galerkin Solution of the Reynolds Averaged Navier-Stokes and $k-\omega$ Turbulence Model Equations*. COMPUTERS & FLUIDS. vol. 34, pp. 507-540 ISSN: 0045-7930, 2005.