



**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI  
DI GENOVA**

Scuola Politecnica

Corso di Laurea triennale in Ingegneria Meccanica

DIME sez. TEC

Tesi di Laurea

**Valutazioni delle potenzialità del codice OpenFOAM per  
l'analisi di un elemento di combustibile nucleare  
refrigerato mediante metalli liquidi**

*Relatori:*

*Dr. Ing. Guglielmo Lomonaco  
Ing. Walter Borreani*

*Candidato:  
Riccardo Rubini*

Anno Accademico:

2013/2014



# PREFAZIONE

La tesi qui proposta si pone nell'ambito della CFD (Computational Fluid Dynamics) ed in particolar modo si propone di esplorare le potenzialità dei programmi CFD opensource i quali, sempre maggiormente utilizzati non solo a scopo accademico ma anche per problemi di ambito prettamente industriale, stanno acquisendo un'importanza crescente in un ambiente finora monopolio dei codici commerciali con licenza (CFX, Fluent, Ansys, etc.)

In particolar modo nel seguente lavoro di tesi verranno valutate le potenzialità del codice di calcolo OpenFOAM applicato ad un problema solitamente analizzato da codici commerciali; il problema preso in considerazione è lo studio dell'applicazione dei metalli liquidi come refrigeranti del core di un reattore nucleare di IV generazione (ALFRED).

Dopo una veloce introduzione al modello fisico-matematico ed alle caratteristiche termo fisiche peculiari dei metalli liquidi verrà brevemente presentata la struttura di un “caso” all'interno di OpenFOAM e fatta una veloce introduzione alle tecniche numeriche utilizzate.

Successivamente verrà inquadrata la geometria del problema, creata la griglia di calcolo su cui verranno svolte le tre simulazioni:

- la prima con acqua con il solo scopo di confermare la stabilità del software con un fluido standard
- in seguito verranno svolte le simulazioni con sodio e piombo prestando particolare attenzione ai modelli di turbolenza utilizzati (come noto argomento ancora oggetto di numerose ricerche).

# ABSTRACT

The thesis proposed here arises in the context of CFD (Computational Fluid Dynamics) and in particular aims to explore the capabilities of CFD programs opensource which, used more and more not only for academic purposes but also for industrial problems scope, are gaining increasing importance in an environment up to now monopolized by commercial codes (CFX , FLUENT, Ansis , etc.)

In particular, the following thesis will assess the potential of computer code OpenFOAM applied to a problem usually analyzed only by commercial codes . The considered problem is the study of the application of liquid metals as coolants in the core of a nuclear reactor generation IV (ALFRED) .

After a quick introduction to the physical-mathematical model and to the thermo physical features of liquid metals it will be briefly presented the structure of a "case" within OpenFOAM and made a quick introduction to numerical techniques.

Then it will be showed the geometry used for the three computational simulations to be carried out

- the first with water with the only purpose to confirm the reliability of the software with a standard fluid
- then the other respectively with sodium and lead, paying particular attention to the used turbulence models (as known this latter is a topic still subject of numerous studies) .

## SOMMARIO

CAPITOLO 1.....	11
1.1 Applicazione della CFD nell'ingegneria nucleare .....	11
1.1.1 Safety analysEs .....	11
1.1.2 Situazione attuale e sviluppi della CFD in ambito nucleare .....	13
1.2 Introduzione al lavoro di tesi .....	14
1.2.1 Obbiettivi della tesi.....	14
1.2.2 Giustificazione analisi tridimensionale .....	14
CAPITOLO 2.....	16
2.1 Modello Fisico-Matematico .....	16
2.1.1 Definizione di fluido.....	16
2.1.2 Ipotesi di corpo continuo .....	17
2.2 Equazioni di bilancio .....	19
2.2.1 Teorema del trasporto di Reynolds .....	20
2.2.2 Conservazione della massa in un volume materiale $V_t$ in moto con il fluido.....	20
2.2.3 Principi di conservazione , equazione di Navier-Stokes e dell'energia.....	21
2.2.4 Secondo principio della Dinamica .....	23
2.2.5 Equazione dell'energia.....	24
2.2.6 Sistema completo di equazioni .....	26
2.3 Turbolenza .....	27
2.3.1 Caratteristiche fenomenologiche della turbolenza .....	27
2.3.2 Scale turbolente .....	29
2.3.3 Scale di Kolmogorov .....	30
2.4 Modelli di turbolenza .....	31
2.4.1 DNS: simulazione diretta della turbolenza.....	32
2.4.2 LES: simulazione per grandi vortici .....	33
2.4.3 RANS: equazioni mediate alla Reynolds .....	34

2.5 Legge di parete.....	37
CAPITOLO 3.....	39
3.1 Metalli Liquidi .....	39
3.1.1 Fluidodinamica dei metalli liquidi; un problema ancora aperto .....	39
3.2 Analisi qualitativa delle proprietà termofisiche dei metalli liquidi .....	41
3.2.1 Forma delle equazioni di governo .....	41
3.3 Fenomeni di strato limite nei metalli liquidi.....	43
CAPITOLO 4.....	46
4.1 Breve introduzione alla CFD in particolare al metodo dei volumi finiti .....	46
4.1.1Breve introduzione alla CFD.....	46
4.2 Schemi di discretizzazione .....	48
4.2.1 Interpolazione: .....	48
4.2.3 Discretizzazione degli operatori differenziali .....	49
4.2.4 Discretizzazione temporale.....	49
4.2.5 Condizioni al contorno.....	50
4.2.6 Esempio: equazione di convezione-diffusione discretizzata (cenni) .....	52
4.3 Risoluzione numerica equazione discretizzata (cenni) .....	53
4.3.1 Metodi iterativi stazionari.....	54
4.3.2 Metodi iterativi non stazionari:.....	54
4.4 Algoritmi solutori (cenni).....	54
CAPITOLO 5.....	57
5.1 OpenFOAM .....	57
5.1.1 Un po' di storia .....	57
5.1.2Cos'è OpenFOAM?.....	57
5.1.3 Caso in OpenFOAM.....	58
5.1.4 Post-processing .....	60
Capitolo 6 .....	62

6.1 Analisi termofluidodinamica dell'assembly di un reattore nucleare (Refrigerato a pb na h <sub>2</sub> o) .....	62
6.2 Definizione del dominio fluido da analizzare.....	62
6.3 Definizione dominio e creazione griglia di calcolo .....	66
6.3.1 Creazione della griglia di calcolo .....	66
6.3.2 Definizione delle condizioni al contorno.....	67
Capitolo 7 .....	76
7.1 Analisi termofluidodinamica fuel_assembly ALFRED .....	76
7.1.1 Scelta del solutore più appropriato .....	76
7.1.2 Formule e correlazioni Impiegate per il calcolo preliminare .....	78
7.2 Prima Simulazione con h <sub>2</sub> o .....	79
7.2.1 Esecuzione delle simulazioni.....	80
7.3 Seconda simulazione .....	82
7.4 Simulazioni con metalli liquidi .....	88
7.4.1 Modello k-ε .....	90
7.4.2 RNG k-ε .....	91
7.4.3 Modello k-ω .....	93
7.4.4 Modello k-ωSST .....	94
7.4.5 Conclusioni.....	95
7.5 Risultati modello k-ω.....	96
7.5.1 Sodio .....	96
7.5.2 Piombo.....	101
Conclusioni e sviluppi futuri .....	107
Appendice A .....	109
Appendice B.....	112
Appendice C.....	115
Appendice D .....	120
Appendice E.....	123
Appendice F .....	131

## INDICE FIGURE

Figura 1 - Elemento infinitesimo di superficie .....	16
Figura 2 - Fluttuazioni delle proprietà molecolari in funzione del volume analizzato.....	18
Figura 3 - Schema concettuale di: approccio Euleriano (a sinistra) approccio Lagrangiano (a destra) .....	19
Figura 4 - Spettro della turbolenza.....	31
Figura 5 - Differenza concettuale tra i modelli: RANS LES e DNS .....	32
Figura 6 - Decomposizione di un segnale nella parte media e in quella fluttuante .....	35
Figura 7 - Andamento della velocità media in funzione della distanza da parete. Le linee continue indicano l'andamento teorico , i simboli il valore misurato .....	37
Figura 8 - Schema concettuale del modello wall function (a sinistra) e Near Wall Function (a destra) .....	38
Figura 9 - Schema concettuale della discretizzazione spaziale e temporale del dominio da analizzare .....	47
Figura 10 - Dominio di calcolo unidimensionale .....	48
Figura 11 - Algoritmo Simple .....	55
Figura 12 - Algoritmo Piso .....	56
Figura 13 - Panoramica sulla struttura di OpenFOAM.....	58
Figura 14 - Struttura di un caso in OpenFOAM .....	59
Figura 15 - Interfaccia utente di paraFoam .....	60
Figura 16 - Schema di massima del reattore nucleare ALFRED.....	62
Figura 17 - Fuel-assembly .....	63
Figura 18 - Fuel assembly .....	64
Figura 19 - Sezione retta di un fuel-assembly.....	65
Figura 20 - Creazione del dominio di calcolo (a sinistra) e successiva meshatura (destra) .....	66
Figura 21 - Estrusione del dominio di calcolo per tutta la lunghezza del core.....	67
Figura 22 - Patch SHELL .....	67
Figura 23 - Patch SYMMETRY PLANES .....	69
Figura 24 - Patch PIN .....	70
Figura 25 - Patch INLET e OUTLET .....	72

Figura 26 -Griglia prima di essere raffinata	Figura 27 - Griglia dopo il raffinamento in prossimità delle pareti .....	81
Figura 28 - Residui loop di correzione della pressione .....		82
Figura 29 - Residui componenti cartesiane della velocità .....		82
Figura 30 - Residui campo di Temperatura.....		83
Figura 31 - Campo di pressione lungo il fuel assembly (si ricorda che il campo di pressione è scalato rispetto alla densità) quindi per ottenere il valore in Pa è necessario moltiplicare il valore riportato per la densità ..		83
Figura 32 - Sezioni del campo di velocità lungo la coordinata z del fuel-assembly.....		84
Figura 33 - Campo di temperatura.....		84
Figura 34 - Temperatura lungo i PIN	Figura 35 - Temperatura lungo la SHELL .....	85
Figura 36 - Andamento delle isoterme in una sezione retta del fuel assembly .....		85
Figura 37 - Istogramma rappresentante il numero di celle che presentano il valore di temperatura riportato in ascisse.....		86
Figura 38 - Celle del dominio in cui $T > 750$ K (a destra) e zone del dominio in cui $T > 770$ K (a sinistra) .....		86
Figura 39 - Residui nel loop di correzione della pressione .....		96
Figura 40 - Residui campo di temperatura .....		96
Figura 41 - Residui componenti cartesiane della velocità .....		97
Figura 42 - Campo di pressione.....		97
Figura 43 - Sezioni rette del campo di velocità lungo la coordinata Z .....		98
Figura 44 - Sezioni rette del campo di temperatura lungo Z .....		98
Figura 45 - Campo di temperatura .....		98
Figura 46 - Isoterme in una sezione retta.....		99
Figura 47 - Temperaura lungo i PIN	Figura 48 - Temperatura lungo la SHELL .....	99
Figura 49 - Istogramma che riporta il numero di celle che presentano una data temperatura.....		100
Figura 50 - Parte del dominio con $T > 720$ K .....		100
Figura 51 - Residui della pressione nel corrector-loop.....		101
Figura 52 - Residui delle componenti cartesiane della velocità .....		101
Figura 53 - Residui del campo di Temperatura .....		102
Figura 54 - Campo di pressione.....		102

Figura 55 - Campo di velocità.....	103
Figura 56 - Particolare del campo di velocità.....	103
Figura 57 - Sezioni rette lungo z del campo di temperatura.....	104
Figura 58 - Andamento delle isoterme del campo di temperatura .....	104
Figura 59 - Temperatura sui PIN   Figura 60 - Temperatura lungo la SHELL .....	105
Figura 61 - Istogramma riportante la distribuzione di temperatura all'interno del fuel assembly .....	105
Figura 62 - Parti del dominio fluido con T>780 K.....	106
Figura 63 - Elemento infinitesimo di superficie .....	117
Figura 64 - Definizione della frontiera di un volumetto elemetare.....	120
Figura 65 - Struttura di OpenFOAM .....	123
Figura 66 - Campo di velocità all'istante t=0.....	133
Figura 67 - Campo di pressione all'istante t=0.....	134
Figura 68 - Residui componenti cartesiane della velocità .....	136
Figura 69 - Residui della pressione per il corrector loop .....	137
Figura 70 - Valori del numero di Courant Max e Medio .....	137
Figura 71 - Sezione lungo z del campo di velocità.....	139
Figura 72 - Campo di pressione.....	139
Figura 73 - Energia cinetica turbulent.....	140

## CAPITOLO 1

### 1.1 APPLICAZIONE DELLA CFD NELL'INGEGNERIA NUCLEARE

#### 1.1.1 SAFETY ANALYSES

Le safety analyses sono uno strumento fondamentale per la valutazione ed il controllo del rischio correlato al funzionamento di un impianto, in particolare consistono di un insieme di studi analitici, deterministici e probabilistici, per dimostrare che i requisiti di sicurezza sono soddisfatti per un ampio range di condizioni operative ed eventi inattesi.

Soltamente le safety analyses sono svolte mediante l'uso di codici che permettono di simulare l'impianto a volte anche sulla base di approssimazioni mono-dimensionali o a parametri concentrati (lumped) dei componenti dell'impianto stesso.

Tuttavia nell'ingegneria nucleare ci sono alcune problematiche per cui l'analisi tradizionale basata su modelli 1D o lumped si dimostra inefficace o inconcludente al fine di caratterizzare fenomeni termofluidodinamici comprendenti ad esempio la trasmissione del calore in condizioni tridimensionali [1-1].

Quindi per supplire alle lacune dei modelli tradizionali si sta sviluppando un interesse crescente nell'applicazione della Computational-Fluid-Dynamics (CFD), in grado di simulare modelli tridimensionali in combinazione con i codici esistenti (e già validati).

I recenti codici CFD risolvono le equazioni della fluidodinamica e della termodinamica per fluidi differenti con un livello di accuratezza pari alla finezza della discretizzazione spaziale, solitamente molto più fine delle dimensioni caratteristiche del problema; inoltre i codici CFD sono in grado di calcolare i valori delle grandezze fisiche (e.g velocità, pressione, temperatura) in corrispondenza di ogni centro delle celle della griglia di campo; sono quindi in grado di fornire una istantanea delle condizioni del sistema per ogni intervallo di tempo considerato.

In particolare in ambito nucleare i codici CFD possono essere applicati nei seguenti ambiti:

- miscelamento e/o convezione in geometrie specifiche
- applicazione nell'analisi della termo-fluidodinamica dei metalli liquidi
- analisi di flussi bifase
- analisi in condizioni di rischio per l'impianto
- analisi della eterogeneità nella distribuzione di temperatura del refrigerante e i suoi effetti sullo shock termico da pressurizzazione
- propagazione e miscelamento degli aereiformi (idrogeno, aria, vapore) nella struttura di contenimento ed effetti su quest'ultima sulla loro distribuzione

- reazioni chimiche nella struttura di contenimento
- valutazione delle performance dei componenti di sicurezza passivi
- investigazione sui fenomeni locali che potrebbero portare alla rottura delle barriere
- analisi multidimensionale della termo-idraulica in vari componenti
- analisi del comportamento dell'interfaccia liquido gas
- dinamica delle bolle nella piscina di soppressione [1-1]

Quindi è ormai assodato che i codici CFD possono essere applicati per innumerevoli problemi e sono in grado di fornire risultati qualitativamente superiori in aree nei quali i tradizionali sistemi 1D e lumped risultano essere troppo approssimate; inoltre a differenza dei metodi tradizionali, i codici CFD sono in grado di fornire risultati locali all'interno del dominio di calcolo contribuendo ad una migliore comprensione della fisica del fenomeno e quindi a mettere il progettista in grado di definire al meglio il design, ridurre i costi e quantificare in maniera più accurata i margini di sicurezza applicati.

Infine come parzialmente già anticipato si vuole sottolineare come l'introduzione dei codici CFD non implica l'eliminazione dei vecchi modelli ma piuttosto comporta un'integrazione dei due metodi (a volte anche con l'eventuale ulteriore supporto sperimentale), specialmente in situazione in cui è richiesto un approccio multidisciplinare.

Purtroppo l'accuratezza delle simulazioni CFD presenta anche il rovescio della medaglia infatti le applicazioni in ambito nucleare necessitano una potenza di calcolo ancora parzialmente limitata dalla tecnologia attualmente disponibile, tuttavia grazie l'esponenziale sviluppo dei calcolatori si può pensare che nell'immediato futuro le applicazioni della CFD saranno ulteriormente incrementate.

Un'altra nota a sfavore della CFD è che il suo uso è abbastanza differente dai codici tradizionali e sono presenti ancora dei limiti alla loro applicabilità come strumenti di routine per la sicurezza di una centrale nucleare.

### 1.1.2 SITUAZIONE ATTUALE E SVILUPPI DELLA CFD IN AMBITO NUCLEARE

Come già anticipato in precedenza grazie al recente aumento della potenza dei calcolatori gli sviluppi e le applicazioni della CFD si sono sviluppate in innumerevoli campi; tuttavia rimangono ambiti in cui la CFD è già sufficientemente penetrata ed altri in cui necessita di ulteriori sviluppi e miglioramenti in particolare ci teniamo a sottolineare che per le applicazioni di flussi monofase i codici di calcolo sono già discretamente avanzati e validati, lo stesso non si può dire appieno per modelli di turbolenza e di combustione.

D'altro canto ci sono ambiti, estremamente importanti dal punto di vista applicativo, in cui la fluidodinamica computazionale è attualmente allo stato embrionale e richiede ancora dei considerevoli sforzi di ricerca; uno tra tutti è lo studio di flussi bifase[1-1].

Un altro settore nel quale l'analisi CFD sta venendo sempre maggiormente utilizzata è l'analisi della distribuzione nella struttura di contenimento di un impianto nucleare del vapore ed dell' idrogeno rilasciato in seguito di sequenze incidentali; tuttavia lo stato attuale dei codici permette di compiere analisi più improntate all'aspetto qualitativo che quello quantitativo, proprio per questo servono ulteriori sviluppi ed approfondimenti in questa area.

Quindi detto ciò possiamo fare una veloce ricapitolazione della situazione attuale dello sviluppo e della applicazione dei codici di fluidodinamica computazionale:

- È ormai assodato dalla comunità scientifica internazionale che gli strumenti forniti dalla CFD hanno vastissime potenzialità di investigazione, specialmente per analisi locali
- Attualmente vengono impiegati con successo sia codici commerciali che (seppure non ancora allo stesso livello) open-source
- In situazioni molto complesse che sono possibili incontrare nella safety analyses la definizione delle condizioni al contorno per il problema fluidodinamico ha bisogno di essere accoppiato con altri tipi di codici (in particolare con quelli 1D)
- La applicazione ai flussi bifase è ancora ad uno stato (relativamente) preliminare
- La questione della validazione (e conseguente accettazione legale) dei risultati non è ancora pienamente definita, almeno in termini di norme, dalla comunità internazionale (e più nello specifico dagli enti di controllo nucleari, e.g. NRC) alcuni dei problemi ancora parzialmente aperti sono l'adeguatezza dei modelli di turbolenza, degli schemi numerici, della meshatura del dominio [1-1].

## 1.2 INTRODUZIONE AL LAVORO DI TESI

### 1.2.1 OBIETTIVI DELLA TESI

L'analisi termo-fluidodinamica qui presentata si propone di investigare la capacità del codice OpenFOAM di riprodurre il comportamento fluidodinamico dei metalli liquidi nel loro attraversamento del core del reattore ed in particolare i vantaggi, dal punto di vista dell'asportazione del calore e della sicurezza in caso di condizione critiche, nell'utilizzo di metalli liquidi rispetto a refrigeranti tradizionali.

In particolare l'analisi proposta nella seguente tesi si può dividere in tre fasi principali

- 1) Come prima cosa la definizione del dominio fluido e l'individuazione di possibili simmetrie al fine di minimizzare le risorse computazionali richieste.
- 2) Creazione del dominio fluido di primo tentativo con lo scopo di :
  - Compiere una validazione del dominio stesso dal punto di vista della fisicità della fluidodinamica del problema
  - Avere una prima stima approssimativa del numero di celle necessarie per ottenere risultati soddisfacenti e quindi di conseguenza stimare le risorse computazionali necessarie
- 3) Modifica della griglia di calcolo in base ai risultati del punto 2 ed esecuzione delle simulazioni con i liquidi di nostro interesse:
  - La prima con acqua dalla quale ci si aspetta buoni risultati in quanto è un liquido ampiamente studiato
  - Per le simulazioni con i metalli liquidi invece verranno svolte più prove utilizzando quattro diversi modelli di turbolenza in particolar modo saranno utilizzati il modello k- $\epsilon$  k- $\omega$  k- $\omega$ SST e RNG k- $\epsilon$ .

### 1.2.2 GIUSTIFICAZIONE ANALISI TRIDIMENSIONALE

Dedichiamo infine questo paragrafo alla veloce spiegazione del perché si sia resa necessaria un'analisi del problema tridimensionale. La scelta della simulazione tridimensionale è dovuta principalmente alla forma del dominio abbastanza complicata dal punto di vista geometrico, infatti quest'ultimo è costituito da più cilindrici inseriti in una shell di contenimento di forma esagonale, circostanza che implica che lo sviluppo di un modello bidimensionale o addirittura monodimensionale possa portare a risultati errati o addirittura di possibile interpretazione equivoca. Quindi l'unica simulazione in grado di fornire risultati soddisfacenti è resa possibile solo da una modellazione in tutte le tre dimensioni spaziali del problema stesso.

## Bibliografia

[1-1] <http://www.enea.it>

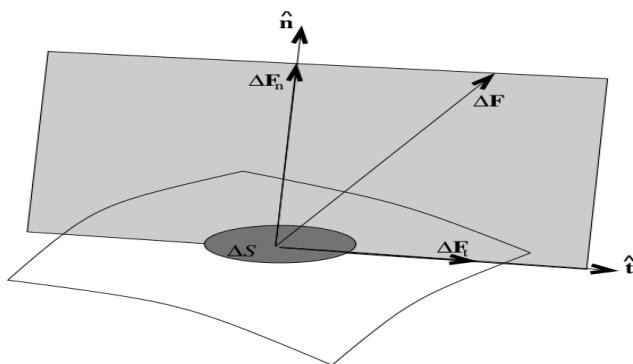
**CAPITOLO 2****2.1 MODELLO FISICO-MATEMATICO**

In questo capitolo ci occuperemo di descrivere brevemente il modello fisico-matematico e le relative approssimazioni necessarie per ottenere una simulazione il più possibile completa, coerente e fisicamente realistica della termofluidodinamica del sistema preso in esame.

**2.1.1 DEFINIZIONE DI FLUIDO**

Come primo obiettivo di questo capitolo ci proponiamo di dare una risposta esaustiva e rigorosa alla domanda <<cos'è un fluido>> Nell'accezione comune un fluido è lo stato della materia che comprende liquidi, gas (e plasma) quindi sempre dall'esperienza comune possiamo affermare che un fluido assume la forma del recipiente che lo contiene cioè è un qualcosa di deformabile tuttavia anche un'ala di un aeroplano è in qualche modo deformabile quindi questa definizione è molto grossolana e poco rigorosa.

Per ricercare una definizione più esaustiva di fluido bisogna introdurre il concetto di sforzo, per fare ciò consideriamo una superficie infinitesima  $dS$  sulla quale agisce una forza infinitesima  $dF$  (Fig 1)



**Figura 1 - elemento infinitesimo di superficie**

Naturalmente all'elemento infinitesimo di superficie  $dS$  può essere associata la rispettiva normale  $n$ ; a questo punto definiamo le due componenti della forza  $\vec{\Delta F}$  come

Si tiene a ricordare al lettore che d'ora in poi verrà utilizzata la notazione di Einstein: gli indici ripetuti si intendono sommati.

$$\overrightarrow{\Delta F}n = (\overrightarrow{\Delta F} \cdot \vec{n})\vec{n} \quad (2.1)$$

$$\overrightarrow{\Delta F}t = \overrightarrow{\Delta F} - \overrightarrow{\Delta F}n \quad (2.2)$$

E definiamo successivamente le quantità

$$\sigma_n = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta F n}{\Delta S} \quad (2.3)$$

$$\sigma_t = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta F t}{\Delta S} \quad (2.4)$$

rispettivamente come gli sforzi normali e tangenziali che la forza dF esercita sull'area dA; ora grazie all'introduzione di queste due grandezze siamo in grado di dare una definizione più precisa e rigorosa di fluido

*D: definiamo fluido una sostanza in grado di deformarsi in modo continuo ed indefinitamente quando quest'ultimo viene sottoposto ad uno sforzo tangenziale esterno.*

Quindi in altre parole un fluido in quiete può opporsi solamente allo sforzo normale ( lo sforzo normale non è altro che la pressione ) mentre se sottoposto allo sforzo tangenziale si mette necessariamente in moto. Infine è importante precisare come la definizione di fluido qui fornita sia solamente di tipo fenomenologico in quanto si basa sulla risposta del materiale ad uno stimolo esterno e non va ad indagare sulle proprietà molecolari ed atomiche dello stesso[2-1].

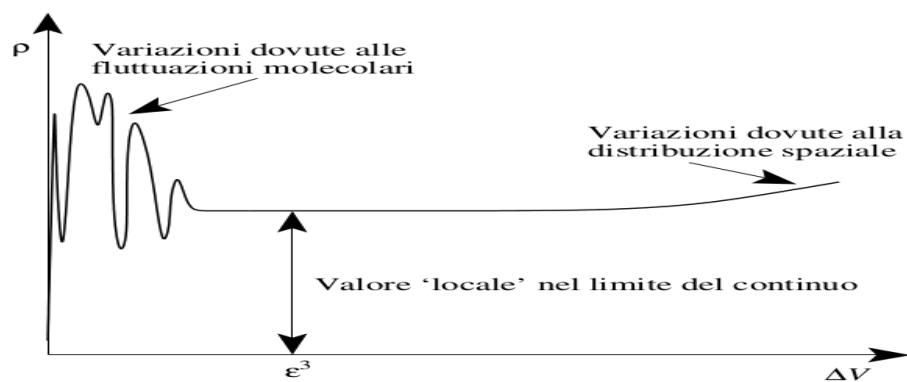
### 2.1.2 IPOTESI DI CORPO CONTINUO

In questo paragrafo verrà introdotto il concetto di corpo continuo cioè l'ipotesi fondamentale per fare in modo che le generiche funzioni di campo ( scalari e vettoriali necessarie per descrivere al meglio il fluido stesso) A(x,y,z,t) siano definite in maniera corretta e consistente in tutto il dominio fluido da analizzare.

Per fare ciò prendiamo in esame una grandezza fondamentale in fluidodinamica cioè la densità definita come la massa contenuta dentro il volumetto fluido ed il volumetto stesso.

$$\rho = \frac{\Delta M}{\Delta V} \quad (2.5)$$

A questo punto si potrebbe pensare di ottenere una misura puntuale della densità nel campo fluido riducendo sempre di più il volume  $\Delta V$  fino a farlo tendere a zero ed ottenere punto per punto il valore della densità; tuttavia nonostante la nostra idea sia teoricamente legittima nella pratica incapperemo in un grave (e purtroppo non risolvibile) problema: infatti nel far tendere  $\Delta V$  a zero quando il lato di quest'ultimo raggiunge il valore del libero cammino medio delle molecole all'interno del volumetto analizzato potrebbero esserci un numero variabile nel tempo di molecole o addirittura non essercene affatto (il suddetto fenomeno è schematizzato in (Fig. 2))



**Figura 2 - fluttuazioni delle proprietà molecolari in funzione del volume analizzato**

Per ovviare a questo grave inconveniente si decide di guardare il fluido da una scala spaziale sostanzialmente maggiore del libero cammino medio delle molecole in maniera da poter considerare la densità (e le altre grandezze) come funzioni continue e lisce (almeno con derivate seconde continue) nello spazio e nel tempo. Questa ipotesi è detta **Ipotesi del continuo**

La bontà della applicazione dell'ipotesi del continuo è misurata del parametro adimensionale chiamato numero di Knudsen  $Kn = \frac{\Lambda}{L}$  definito come il rapporto tra il libero cammino medio ,identificato con la lettera  $\Lambda$ , delle molecole e la lunghezza caratteristica del problema (nel nostro caso il lato del volumetto) che ovviamente deve mantenersi adeguatamente al di sotto dell'unità affinché l'ipotesi del continuo possa venire applicata con successo.

Quindi ora siamo in grado di dare una definizione più rigorosa di densità senza incappare nel grossolano errore prima illustrato cioè :

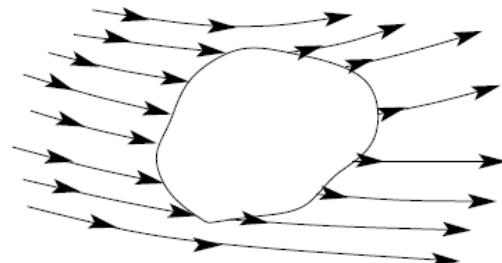
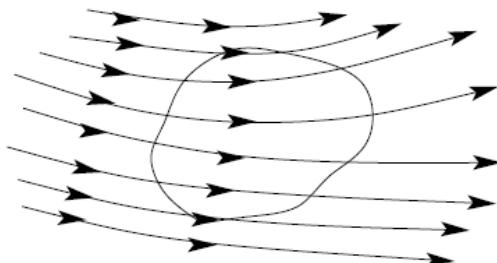
$$\rho = \lim_{\Delta V \rightarrow \varepsilon^3} \frac{\Delta M}{\Delta V} \quad \text{a cui dobbiamo aggiungere le ipotesi } \varepsilon \rightarrow 0 \quad \text{e} \quad \frac{\Lambda}{L} \ll 1 \quad [2-1]$$

## 2.2 EQUAZIONI DI BILANCIO

Dopo aver precedentemente introdotti i concetti di fluido e l' ipotesi di corpo continuo ci concentriamo ora sul descrivere il modo di rappresentare matematicamente il fenomeno.

Le equazioni di bilancio della termofluidodinamica non sono altro che le tre leggi di conservazione (massa, quantità di moto ed energia) riscritte su di un volume di controllo che può essere descritto in due modi differenti (fig. 3):

- Approccio Lagrangiano: il volume in esame (indicato con  $V_t$ ) viene chiamato in questo caso volume materiale, perché il volume in esame si muove con il fluido e di conseguenza le particelle all'interno di quest'ultimo sono sempre le stesse, il volume materiale scambia con il fluido solo energia e non massa.
- Approccio Euleriano: il volume in esame (indicato con  $V$ ) viene chiamato volume di controllo poiché quest'ultimo è fisso nello spazio quindi le molecole al suo interno cambiano allo scorrere del tempo, il volume di controllo scambia con il flusso sia massa che energia.



**Figura 3 - Schema concettuale di: approccio Euleriano (a sinistra) approccio Lagrangiano (a destra)**

### 2.2.1 TEOREMA DEL TRASPORTO DI REYNOLDS

Riportiamo in questo paragrafo un importantissimo risultato (che verrà dimostrato in appendice C) che permette di passare dalla descrizione lagrangiana del moto a quella euleriana cioè dal volume materiale a quello fisso:

*Teorema: sia  $f: R^n \rightarrow R^n$  una funzione ,scalare o vettoriale, continua e sufficientemente liscia consideriamo il suo integrale nello spazio variabile del tempo ( $t > 0$ )  $V_t$  allora:*

$$\frac{d}{dt} \iiint f(\vec{r}, t) dV = \iiint \frac{\partial f(\vec{r}, t)}{\partial t} dV + \iint f(\vec{r}, t) (\vec{U} \cdot \vec{n}) dS \quad (2.6)$$

[si ricorda che gli integrali tripli sono estesi al volume materiale mentre quelli doppi al bordo di quest'ultimo]

Applicando il teorema della divergenza si ottiene

$$\frac{d}{dt} \iiint f dV = \iiint \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (f \otimes \vec{U}) \right) dV \quad (2.7)$$

Nell'applicazione del teorema del trasporto ricordiamo che nel caso di funzione scalare il prodotto tensoriale si ricuce alla moltiplicazione dello scalare per il vettore (quindi possiamo trattare la presenza di una funzione scalare come il caso particolare del teorema generalizzato)

### 2.2.2 CONSERVAZIONE DELLA MASSA IN UN VOLUME MATERIALE $V_t$ IN MOTO CON IL FLUIDO

Come esempio pratico dei concetti teorici esposti precedentemente proveremo a dimostrare l'equazione di continuità: consideriamo un volume materiale  $V_t$  (il pedice  $t$  sta proprio ad indicare la dipendenza di  $V$  rispetto al tempo) in moto con il fluido stesso in grado di cambiare sia forma che volume nel corso del moto, poiché, per come abbiamo definito il volume materiale, la sua superficie è in movimento alla stessa velocità del fluido quindi non c'è alcun flusso di massa attraverso la frontiera del volume stesso e quindi il sistema è chiuso e la massa all'interno dello stesso non cambia.

Cioè:  $\frac{dM}{dt} = 0$  dove  $M$  denota la massa del volume materiale, quindi  $\frac{d}{dt} \iiint \rho(\vec{r}, t) dV = 0$

(2.8)

Tuttavia a causa della dipendenza di  $V_t$  dal tempo l'integrale sul volume materiale dipende dal tempo bisogna applicare il teorema del trasporto di Reynolds per passare dal volume materiale al volume dei controllo ed ottenere l'equazione di continuità in forma conservativa:

$$\frac{d}{dt} \iiint \rho(\vec{r}, t) dV = \iiint \left( \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho(\vec{r}, t) \vec{U}) \right) dV = 0 \quad (2.9)$$

e poiché l'integrale al secondo membro deve essere nullo qualunque sia il dominio di integrazione  $V_t$  necessariamente deve essere nulla la funzione integranda; quindi otteniamo[2-2]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (2.10)$$

### 2.2.3 PRINCIPI DI CONSERVAZIONE, EQUAZIONE DI NAVIER-STOKES E DELL'ENERGIA

Considerando un volume materiale variabile nel tempo e racchiuso da una superficie anch'essa funzione del tempo in modo che ogni punto al suo interno si muova con la stessa velocità del campo di moto esterno. Come visto nel caso dell'equazione di continuità il flusso attraverso la superficie esterna è nullo e quindi il volume  $V_t$  si comporta come un sistema chiuso; questa osservazione comporta alla logica conclusione che la massa al suo interno non varia ma che tuttavia possono esserci delle forze che agiscono sul sistema e ci può essere passaggio di energia (cioè il sistema è chiuso ma non isolato) calore o lavoro attraversano la frontiera del sistema.

Quindi le tre leggi fondamentali che devono essere verificate sono:

-conservazione della massa:  $M=\text{cost}$        $\frac{dM}{dt}=0$       (2.8)

-secondo principio della dinamica ( 2<sup>a</sup> legge di Newton):  $\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}$       (2.11)

-Primo principio della termodinamica ( conservazione dell'energia):  $\frac{\delta Q}{\delta t} - \frac{\delta W}{\delta t} = \frac{dE}{dt}$       (2.12)

Dove  $M$  è la massa espressa in [kg] e contenuta in  $V_t$  al tempo  $t$ ,  $p$  è la quantità di moto del sistema espressa in [ $\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}$ ],  $F$  è la risultante delle forze esterne agenti sul sistema misurate in [N],  $E$  è l'energia totale del sistema in moto espressa in [J],  $Q$  il calore fornito (il  $\delta$  indica che il differenziale in questione non è esatto),  $W$  è il lavoro compiuto dal sistema espresso anch'esso in [J]. Ci teniamo a precisare che il primo principio della termodinamica è stato scritto per unità di tempo e quindi l'unità di misura risultante non saranno i Joule ma i Watt ed inoltre nella forma classica dell'equazione dell'energia compare al membro destro solamente l'energia interna mentre in questa sede viene utilizzata  $E=U+K$ ; infatti per un fluido in moto a differenza che per un gas contenuto in un recipiente l'energia interna del sistema stesso contiene in modo ineluttabile anche il termine cinetico dovuto al moto medio (non nullo) del fluido stesso.

Quindi indicando con  $\rho$  la densità del fluido con  $\vec{U}$  la sua velocità e con  $e$  la densità di energia interna, possiamo definire la densità di energia interna come  $e_{tot} = e + \frac{|\vec{U}|^2}{2}$

Quindi applicando il teorema del trasporto di Reynolds rispettivamente alle funzioni scalari e vettoriali e tre principi di conservazione prima elencati vengono riscritti nelle forme:

- $\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \iiint \rho dV = \iiint \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U}) \right) dV = 0$  (2.8)

- $\frac{d}{dt} \iiint \rho \vec{U} dV = \iiint \left( \frac{\partial(\rho \vec{U})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) \right) dV = \vec{F}_{ext}$   
(2.10)
- $\frac{d}{dt} \iiint \rho e_{tot} dV = \iiint \left( \frac{\partial(\rho e_{tot})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho e_{tot} \vec{U}) \right) dV = \frac{\delta Q}{\delta t} - \frac{\delta W}{\delta t}$  (2.11)

La conservazione della massa è già stata abbondantemente descritta nel paragrafo precedente quindi ci concentreremo ora sul calcolo dettagliato del secondo principio della dinamica e della legge di conservazione dell'energia.

### 2.2.4 SECONDO PRINCIPIO DELLA DINAMICA

Per quanto riguarda la legge di Newton le forze agenti sul volume material preso in esame si posso dividere in: forze di volume e forze di superficie cioè il valore del tensore degli sforzi integrato su tutto il bordo del volume materiale considerato. Considerando la i-esima componente di  $F$  otteniamo:

$$F_i = \iint \sigma_{ij} n_j dS + \iiint \rho g_i dV \quad (2.12)$$

dove  $g_i$  è la i-esima componente della forza per unità di massa (quindi un'accelerazione) diretta secondo l'asse  $x_i$  e  $\sigma_{ij}$  è il tensore delle tensioni; ora applicando il teorema della divergenza possiamo trasformare l'integrale di superficie in un integrale di volume ottenendo:

$$F_i = \iiint \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \right) dV \quad (2.13)$$

Come detto nel paragrafo introduttivo (e calcolato dettagliatamente in appendice A) i fluidi, in condizioni statiche sono in grado di opporsi ad uno sforzo normale di compressione (pressione) che indicheremo con  $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$  il segno negativo indica appunto che lo sforzo è di compressione e la delta (ricordiamo che  $\delta_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j}$ ) sta ad indicare che agisce in ugual modo nelle tre direzioni.

In condizioni dinamiche invece al tensore degli sforzi si aggiunge un termine che chiameremo  $d_{ij}$ , (sempre in appendice A) è stato calcolato la forma di per un fluido newtoniano che diviene :

$$d_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.14)$$

$$\text{e di conseguenza } \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.15)$$

inserendo il tensore degli sforzi in questa forma nel l'integrale precedentemente trovato e ricordando che tale integrale di volume deve essere nullo per un qualunque volume  $V_t$  scelto arbitrariamente si giunge alla formulazione:

$$F_i = \iiint (\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i) dV = \iiint \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -p \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) dV = \\ \iiint (\rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)) dV \quad (2.16)$$

Che va inserita nel secondo principio della dinamica ottenendo

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial p u_i u_j}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.17)$$

### 2.2.5 EQUAZIONE DELL'ENERGIA

Prima di giungere alla forma finale del primo principio della termodinamica scritto per un volume di controllo si vuole ricordare velocemente le ipotesi di base necessarie per definire lo stato termodinamico di un sistema; innanzitutto per definire le variabili termodinamiche (pressione volume temperatura) è necessario che il sistema sia in equilibrio termodinamico (le variabili non devono variare nel tempo) infatti sebbene si possa facilmente definire il volume di un palloncino pieno di elio non avrebbe senso parlare di volume del gas di un palloncino che si sta sgonfiando.

Ricapitoliamo brevemente le condizioni che devono essere contemporaneamente verificate affinché un sistema sia in equilibrio termodinamico globale:

- equilibrio meccanico: cioè equilibrio tra tutte le forze e tutti i momenti applicati
- equilibrio termico: non sono presenti flussi di calore
- equilibrio chimico: non sono in corso reazioni chimiche
- equilibrio nucleare: non avvengono reazioni nucleari

Evidentemente questa serie di ipotesi è troppo restrittiva per i problemi di interesse ingegneristico in quanto un fluido in moto che scambia calore con l'esterno non potrà mai essere in equilibrio termodinamico globale (variabili costanti nello spazio e nel tempo). Tuttavia per un fluido in movimento si può pensare che nell'intorno di un punto le variazioni dei variabili parametri termodinamici siano sufficientemente piccoli (sia nel tempo che nello spazio) e quindi si può assumere che su piccola scala il fluido sia in equilibrio termodinamico locale. Questo significa che le variabili possono cambiare sia nel tempo che nello spazio ma che lo devono fare molto lentamente.

Sotto l'ipotesi fondamentale di equilibrio termodinamico locale procediamo con il calcolo delle grandezze che intervengono nell'equazione della conservazione dell'energia:

**Flusso termico:** la legge di Fourier ci assicura che localmente all' interno del fluido l'entità del calore trasmesso per conduzione vale:

$$q_i'' = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \left[ \frac{W}{m^2} \right] \quad (2.18)$$

Pertanto l'entità del flusso entrante/uscente nel sistema vale:

$$\frac{\delta Q}{\delta t} = \iint k \left( \frac{-\partial T}{\partial x_i} \right) (-n_i) dS = \iiint \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV \quad \text{espresso in Watt} \quad (2.19)$$

**NB:** osservare i segni nell'equazione di Fourier ed il segno della normale in accordo con le convenzioni sul calore entrante uscente.

**Potenza delle forze agenti sul sistema:** ricordandosi che la potenza non è altro che il prodotto di una forza per una velocità considerando sia le forze di volume che quelle superficiali (prestando la dovuta attenzione ai segni) si perviene alla forma

$$\frac{\delta W}{\delta t} = - \iint u_i \sigma_{ij} n_j dS - \iiint \rho g_i u_i dV = - \iiint \left( \frac{\partial(u_i \sigma_{ij})}{\partial x_j} + \rho g_i u_i \right) dV \quad (2.20)$$

Ora unendo i tre termini in base al primo principio della termodinamica e imponendo che l'integrale sia nullo qualunque dominio di integrazione scelto si ottiene:

$$\begin{aligned} \iiint \left( \frac{\partial(\rho e_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e_{tot} u_j)}{\partial x_j} \right) dV &= \iiint \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV + \iiint \left( \rho g_i u_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i (-p \delta_{ij} + \right. \right. \\ &\left. \left. \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) \right) dV \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e_{tot} u_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( u_i \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) + \rho g_i u_i \\ (2.21) \end{aligned}$$

Tuttavia si può pervenire a forme esattamente equivalenti scritte però in termini di temperatura o entalpia; di seguito verranno riportati i risultati finali (rimandando per ulteriori approfondimenti al calcolo dettagliato eseguito in appendice B) :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.22)$$

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \beta T \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.23)$$

### 2.2.6 SISTEMA COMPLETO DI EQUAZIONI

Per arrivare al sistema completo che descrive in comportamento fluidodinamico e termodinamico di un fluido partendo dal principio della conservazione della massa, dalla legge di Newton e dal principio della conservazione dell'energia abbiamo richiesto che il sistema soddisfacesse le seguenti ipotesi:

- Fluido continuo cioè non visto come insieme di singole molecole ma su una scala molto più ampia del libero cammino medio di una singola molecola imponendo che il numero di Knudsen fosse  $\ll 1$
- Fluido isotropo ovvero le proprietà fisiche non dipendono dalla direzione spaziale
- Fluido Newtoniano cioè il tensore degli sforzi dipende linearmente dai gradienti di velocità con costante di proporzionalità chiamata viscosità
- Nel fluido vale l'ipotesi di Stokes (si veda appendice A)
- Fluido localmente in equilibrio termodinamico, le variabili possono variare anche se di poco
- La trasmissione di calore nel fluido avviene solamente la legge di Fourier

Quindi le equazioni precedentemente ricavate non sono altro che una banale riscrittura dei tre principi fondamentali della fisica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.8)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \rho g_i \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial(\rho e_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e_{tot} u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( u_i \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) + \rho g_i u_i \quad (2.21)$$

Il sistema è quindi composto da cinque equazioni:

- Una equazione per la conservazione della massa
- Tre equazioni (una per ogni direzione spaziale) per la seconda legge della dinamica
- Una equazione per il primo principio della termodinamica

Tuttavia si osserva facilmente che sono presenti 5 equazioni per un totale di 7 incognite: 3 componenti della velocità, densità del fluido, pressione del fluido, energia interna, temperatura del fluido. Quindi ad una prima analisi il problema sembrerebbe mal posto in quanto il sistema in esame è sottodeterminato presentando più incognite che equazioni; tuttavia un'analisi più attenta permette di risolvere questo problema apparentemente insanabile in quanto bisogna aggiungere un'equazione di stato che lega le tre variabili di stato (temperatura, densità e pressione); pertanto se si esprime lo stato termodinamico, per esempio tramite pressione e temperatura con una relazione del tipo  $\rho=f(p,T)$  ed  $e=f(p,T)$  si riesce a ridurre le quattro variabili  $\rho$ ,  $p$ ,  $T$ , e da quattro a due ottenendo finalmente un ugual numero di equazioni ed incognite e chiudendo matematicamente in maniera definitiva il problema.

### 2.3 TURBOLENZA

In questo paragrafo descriveremo in modo rapido e schematico la fenomenologia e l'approccio per la risoluzione dei flussi turbolenti; lo studio dei flussi turbolenti oltre ad essere indispensabile per quasi qualunque applicazione ingegneristica è anche uno degli ultimi problemi non completamente risolti della fisica classica.

#### 2.3.1 CARATTERISTICHE FENOMENOLOGICHE DELLA TURBOLENZA

Sperimentalmente si possono individuare due regimi ben distinti nel moto di un fluido: il moto laminare nel quale il flusso è ordinato (scorre appunto su lamine) ed in cui le caratteristiche microscopiche in ogni punto ed in ogni istante sono perfettamente determinate dalle condizioni al contorno ed iniziali quindi l'esperimento è ripetibile; se questo non accade si può appunto parlare di flusso turbolento caratterizzato dalla casualità delle proprietà macroscopiche nel flusso e quindi anche con stesse condizioni iniziali ed al contorno sarebbe impossibile ripetere perfettamente un esperimento (questo non è altro che un esempio del famoso "butterfly effect").

Quindi si può intuire che dare una definizione rigorosa e completa di turbolenza non è affatto semplice, tuttavia è possibile elencare alcune caratteristiche tipiche di una corrente turbolenta.

- Non stazionarietà: caratteristiche macroscopiche dipendenti fortemente dal tempo con variazioni di quest'ultime dipendenti da un'ampia banda di frequenze
- Apparente casualità: forte sensibilità alle condizioni iniziali; studiare la turbolenza con metodi deterministici potrebbe non portare ad alcun risultato apprezzabile
- Vorticità e tridimensionalità: forti fluttuazioni di velocità implicano fluttuazioni della vorticità, cosa che conferisce al flusso caratteristiche tridimensionali (non sono facilmente individuabili simmetrie nel sistema)
- Dissipazione: la viscosità converte l'energia cinetica del fluido in energia interna, quindi la turbolenza richiede una continua fornitura di energia al moto medio per sostentarsi
- Rimescolamento: tutte le grandezze fisiche a causa della vorticità e delle fluttuazioni subiscono un forte rimescolamento; questo aspetto è in realtà positivo poiché favorisce alcuni fenomeni strettamente legati al trasporto come ad esempio lo scambio termico
- Ampia gamma di scale: i flussi turbolenti coinvolgono gamme di scale (spazio e tempo) che si estendono da scale piccolissime fino a grandezze equivalenti a quelle del sistema stesso
- Corrente e **non** fluido: infine ci teniamo a sottolineare che la turbolenza è una proprietà della corrente (cioè del moto) e non del fluido[2-1].

Quindi dopo questo breve introduzione sulle caratteristiche delle correnti turbolente sorge spontanea una domanda: perché studiarla viste le enormi complessità che la caratterizzano? Perché la turbolenza oltre ad essere presente nella stragrande maggioranza dei problemi ingegneristici che coinvolgono fluidi è presente anche nella vita di tutti i giorni e soprattutto è un argomento ancora al centro di approfondite ricerche. Inoltre come ulteriore difficoltà il modello matematico (eq Navier-Stokes) presentando forti non linearità è praticamente intrattabile dal punto di vista matematico visto nel suo insieme. Infine è importante sottolineare che la "risoluzione" o una più completa comprensione del problema della turbolenza oltre ad essere un importante traguardo intellettuale per gli scienziati, avrebbe anche notevole ricadute tecnologiche ed economiche. Infatti tra gli innumerevoli settori tecnologici in cui la turbolenza fa la sua comparsa ricordiamo:

- la combustione, i flussi nei condotti per i trasporti
- Gli strati limite su apparecchi aeronautici, automobili, navi, etc
- Il comportamento del sangue nelle arterie/vene

- Gli spray e gli aerosol
- Le applicazioni geofisiche (uragani, corrente del golfo, etc.)
- Le applicazioni in astrofisica (nuvole di gas interstellare, galassie gassose)
- Etc.

### 2.3.2 SCALE TURBOLENTE

Come anticipato precedentemente la turbolenza si sviluppa su scale di spaziali e temporali molto differenti; in questo paragrafo approfondiremo questa affermazione.

Innanzitutto consideriamo una lunghezza ed una velocità caratteristica del moto medio che chiameremo  $L_0$  e  $U_0$  aventi ordine di grandezza paragonabile con quello della geometria caratteristica del sistema, a questo punto possiamo definire il numero di Reynolds ed il tempo caratteristico basandoci su queste due scale:

$$Re_0 = \frac{U_0 L_0}{\nu}$$

e

$$\tau_0 = \frac{L_0}{U_0}$$

Introduciamo un'altra scala di tempi basata sulla diffusione viscosa facendo un'analisi sugli ordini di grandezza dell'equazione di diffusione:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{U_0}{\tau_\nu} = \nu \frac{U_0}{L_0^2} \rightarrow \tau_\nu = \tau_0 \mathfrak{R}_0$$

Quindi essendo il numero di Reynolds molto elevato il tempo di diffusione viscosa è molto più elevato del tempo caratteristico della corrente media per cui nello studio della dinamica della turbolenza a grandezze pari a quelle del sistema la diffusione viscosa non è rilevante.

Tuttavia i vortici della dimensione del sistema stesso (dimensioni  $L_0$  e tempi  $\tau_0$ ) sono essi stessi caratterizzati dalle forti instabilità (dovute alle non linearità) che creano strutture più piccole caratterizzate da numeri di Reynolds minori; se nelle nuove strutture il tempo di diffusione viscosa è ancora trascurabile, rispetto ai tempi caratteristici di scala, il processo si ripete fino ad arrivare a strutture sempre più piccole che non presentano instabilità di conseguenza non si possono creare scale più piccole (non esistono) e quindi l'energia viene dissipata per effetto viscoso in calore. Le scale che dissipano energia, o microscale, sono dette scale di Kolgomorov; la loro lunghezza caratteristica si indica con  $\eta$

, la velocità caratteristica con  $u_\eta$  e di conseguenza  $\tau_\eta = \frac{\eta}{u_\eta}$  infine si osservi che poiché nelle piccole scale la viscosità gioca un ruolo rilevante  $\tau_0$  è dell'ordine di  $\tau_\eta$  e quindi il numero di Reynolds è dell'ordine dell'unità.

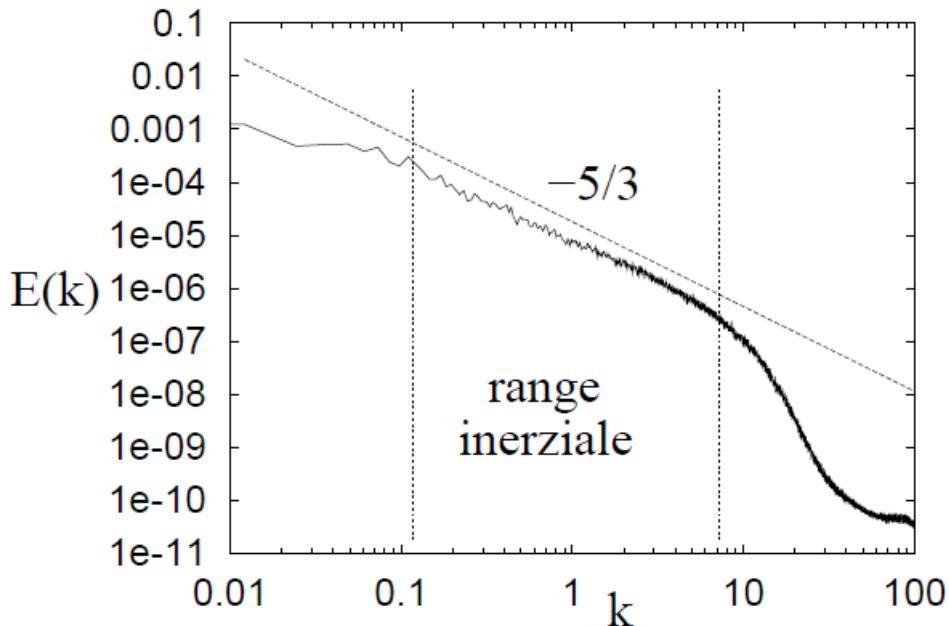
Quindi ricapitolando la turbolenza 3D (quella 2D ha un comportamento opposto) parte da strutture grandi da cui comincia una cascata di energia cinetica fino alle strutture in cui la viscosità diventa preponderante e dissipata l'energia sottratta dal moto medio[2-1].

### 2.3.3 SCALE DI KOLMOGOROV

Il meccanismo delle cascata di energia cinetica descritto in precedenza fu per la prima volta quantificato da Kolmogorov in un articolo pubblicato nel 1941 nel quale calcolava le scale alla quale avveniva la dissipazione viscosa[2.2]. Nel formulare la sua teoria Kolmogorov fece uso di tre ipotesi fondamentali che elencheremo in seguito:

- Isotropia locale: se  $Re$  è sufficientemente alto i moti su piccola scala non dipendono dalla particolare direzione (su piccola scala le informazioni sulla geometria vengono distrutte)
- Prima ipotesi di similarità: nei moti su piccola scala, a  $Re$  sufficientemente elevato, le statistiche di questi ultimi sono universali e determinate solamente dalla viscosità e dalla dissipazione di energia per unità di massa; sotto questa ipotesi è possibile legare le scale di lunghezza in modo univoco alla viscosità e al tasso di dissipazione ottenendo  $\eta \propto \left(\frac{v^3}{\epsilon}\right)^{1/4}$  e scale di velocità e tempi pari a  $u_\eta \propto (\epsilon v)^{1/4}$  e  $\tau_\eta \propto \left(\frac{v}{\epsilon}\right)^{1/2}$
- Seconda ipotesi di similarità: in ogni flusso turbolento le statistiche dei moti tali che  $\eta < L < L_0$  sono universali e dipendono esclusivamente da  $\epsilon$  e  $L$  non dalla viscosità, questa scala è chiamata scala inerziale e l'unico parametro rilevante è il tasso di dissipazione  $\epsilon$ ; utilizzando come in precedenza l'analisi dimensionale si ottiene:  $\tau_l \propto \left(\frac{l^2}{\epsilon}\right)^{1/3}$  e  $u_l \propto (l\epsilon)^{1/3}$

Introducendo ora  $E(k)$ , con  $k$  numero d'onda ( $k = \frac{2\pi}{L}$ ), tale che  $\frac{|\vec{U}|^2}{2} = \int_0^\infty E(k) dK$  è possibile calcolare la dipendenza funzionale di  $E$  dal numero d'onda  $k$  ottenendo uno dei risultati più importanti e meglio verificati sperimentalmente della teoria di Kolmogorov basato esclusivamente su considerazioni di tipo dimensionale. Nella figura seguente è riportato l'andamento di  $E(k)$  in funzione del numero d'onda (opportunamente adimensionalizzati)



**Figura 4 - Spettro della turbolenza**

In conclusione all'introduzione alla teoria di Kolmogorov abbiamo dimostrato come la turbolenza si sviluppi su una grande varietà di scale spaziali, tuttavia è di fondamentale importanza per la validità del modello sottolineare che le scale spaziali più piccole sono comunque sufficientemente più grandi del libero cammino medio delle molecole quindi  $\text{Kn} \ll 1$  e le equazioni di Navier-Stokes (ricavate in precedenza grazie all'ipotesi del continuo) possono essere utilizzate a buon diritto per predire, nei limiti del possibile, l'evoluzione di una corrente turbolenta.

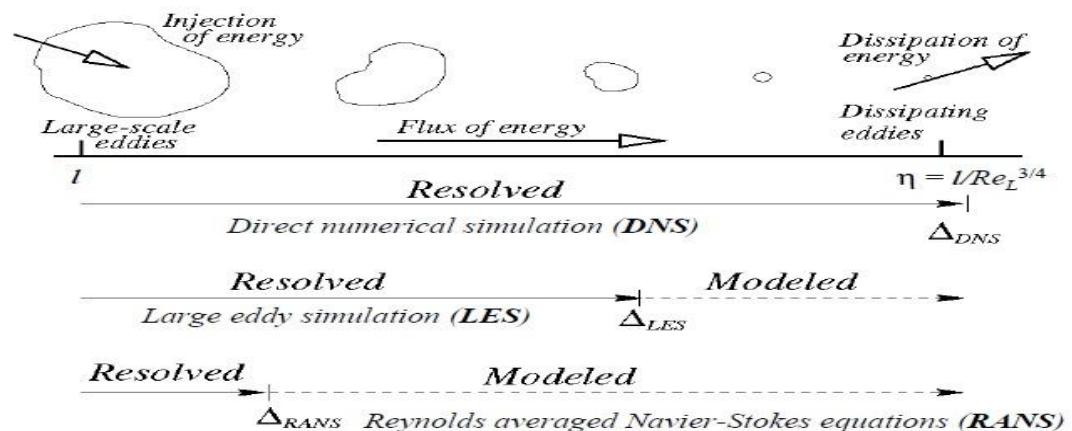
#### 2.4 MODELLI DI TURBOLENZA

A questo punto della trattazione ci siamo convinti che la fenomenologia delle correnti turbolente presenta difficoltà matematiche praticamente insormontabili quindi i ricercatori e gli sviluppatori di codici CFD di tutto il mondo hanno cercato di sviluppare modelli che permettessero di descrivere in modo soddisfacente le caratteristiche di tipo macroscopico (flusso medio) e di modellare in modo intelligente i termini più complessi da trattare sia matematicamente che numericamente.

Essenzialmente si possono individuare tre classi di modelli di turbolenza usati più comunemente nei codici CFD (fig. 5):

- DNS (Direct Numerical Simulation)
- LES (Large Eddies Simulation)
- RANS (Reynolds Averaged Navier –Stokes Equation)

In questa sede faremo una breve introduzione dei primi due metodi mentre ci soffermeremo più a lungo sul metodo RANS in quanto è quello utilizzato nella nostra simulazione.



**Figura 5 – Differenza concettuale tra i modelli: RANS, LES e DNS**

#### 2.4.1 DNS: SIMULAZIONE DIRETTA DELLA TURBOLENZA

Questo metodo fonda le sue basi teoriche sul fatto che le equazioni di Navier-Stokes non perdono validità alle scale di turbolenza più piccole (l'ipotesi del continuo è sempre verificata) ed è quindi possibile ottenere una soluzione numerica di tali equazioni. Si vuole osservare che dal punto di vista dell'accuratezza, dell'affidabilità dei risultati e per la comprensione fisica del fenomeno questo è sicuramente il metodo migliore; tuttavia come rovescio della medaglia, è notevole la potenza di calcolo richiesta per poter completare le simulazioni e di conseguenza la grande quantità di dati da trattare.

Infatti una simulazione DNS richiede tre componenti della velocità variabili nello spazio e nel tempo e la risoluzione spaziale della griglia di calcolo deve essere della scala di grandezza di Kolmogorov e la risoluzione temporale nell'ordine della scala dei tempi di Kolmogorov.

### 2.4.2 LES: SIMULAZIONE PER GRANDI VORTICI

In base a quanto detto precedentemente la simulazione diretta della turbolenza, nonostante sia un potente strumento per la verifica sperimentale dei risultati teorici, non è applicabile a problemi di interesse pratico a causa della enorme potenza di calcolo e quantità di memoria richiesta.

Un'ottima alternativa è il modello LES che raggiunge un ottimo compromesso tra accuratezza del risultato e velocità di calcolo richiamando quanto visto nella teoria di Kolmogorov sulle diverse scale turbolente.

- Le strutture turbolente di scala macroscopiche presentano scala temporale e spaziale pari a quelle del moto medio e hanno origine e struttura fortemente dipendente da quella del moto medio e quindi necessariamente dipendono dalla geometria e dalle condizioni al contorno del problema, sono generalmente anisotrope.
- Le strutture turbolente di scala intermedia hanno la funzione di proseguire il trasferimento dell'energia cinetica estratta dal moto medio dalle strutture macroscopiche ai vortici più piccoli delle scale di Kolmogorov.
- Le strutture turbolente di piccola scala sono caratterizzati da numeri di Reynolds nell'ordine dell'unità e dissipano l'energia cinetica proveniente dai vortici più grandi convertendola in calore inoltre presentano una vita media molto breve e per la prima ipotesi di Kolmogorov sono isotropi cioè presentano un comportamento dinamico indipendente dai vortici macroscopici.

Queste tre considerazioni fungono da nucleo per lo sviluppo del modello LES che ha come idee base le seguenti:

- i vortici grandi e medi poiché dipendono fortemente dalla geometria del flusso in esame vengono risolti direttamente dal codice tramite simulazione numerica diretta
- i vortici della scala di Kolmogorov essendo isotropi e non dipendendo dalla particolare geometria del problema vengono modellati

Quindi nel modello LES si applica un filtraggio spaziale alla griglia di calcolo risolvendo direttamente le strutture medie e macroscopiche e modellando i vortici su piccola scala in base a considerazioni molto generali sul comportamento di questi ultimi, questo approccio permette di avere un modello di calcolo abbastanza generale senza però necessitare di una potenza di calcolo spropositata.

### 2.4.3 RANS: EQUAZIONI MEDiate ALLA REYNOLDS

Illustriamo ora l'ultimo modello di turbolenza che abbandona l'obbiettivo, a volte eccessivamente ambizioso, di determinare la dinamica del fluido dalle grandi alle piccole scale ma che si pone come target quello di cercare una soluzione "media" che caratterizzi la corrente mediata lungo un certo intervallo di tempo.

Il modello RANS si basa sull'assunzione che la turbolenza sia un fenomeno puramente statistico e cerca di descriverne il comportamento attraverso un processo di media temporale; ci teniamo a sottolineare che nonostante sia quello ingegneristicamente più usato è anche quello più limitativo dal punto di vista della comprensione del fenomeno stesso inoltre come vedremo in seguito poiché durante il processo di media vengono perse delle informazioni si rende necessario trovare un modo per chiudere matematicamente il problema.

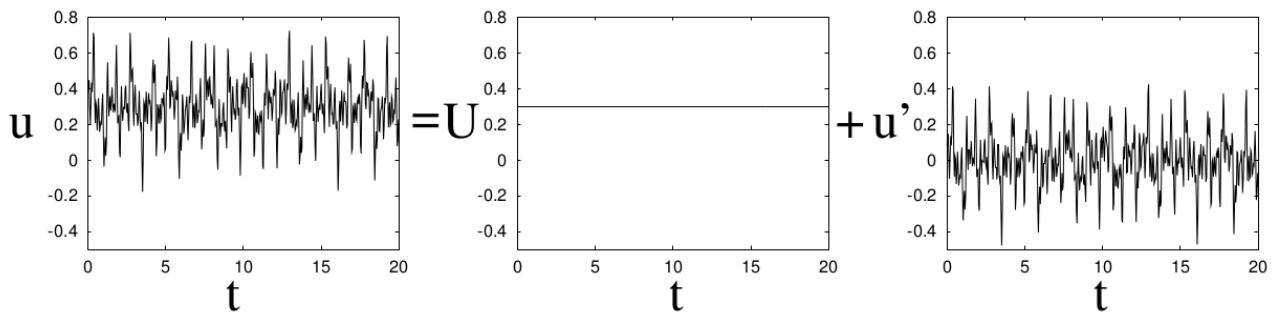
Il cuore del modello RANS è l'assunzione che le incognite di un qualunque moto turbolento e quindi caotico possano venire scritte come la somma di una parte media e di una parte fluttuante (funzione sia dello spazio che del tempo ma avente media nulla) e di introdurle nelle equazioni di Navier-Stokes.

Per cominciare introduciamo le medie temporali di velocità e pressione (ricordando che l'intervallo temporale su cui viene fatta la media deve esser molto più grande rispetto alle fluttuazioni del moto medio)

$$u(x) = U(x) + u'(x) \quad e \quad p(x) = P(x) + p'(x)$$

Dove

$$U(x) = \frac{1}{T} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T u(x, t) dt \quad e \quad P(x) = \frac{1}{T} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T p(x, t) dt$$



**Figura 6 - Decomposizione di un segnale nella parte media e in quella fluttuante**

A questo punto si possono riscrivere la velocità come parte media e parte fluttuante con media nulla ora introduciamo le decomposizioni della velocità e delle pressioni nelle equazioni di Navier-Stokes ed dopo alcuni passaggi otteniamo un'equazione per la parte media del moto ed una per la parte fluttuante; riportiamo solamente le equazioni per il moto medio in quanto è quella effettivamente risolta nei codici.

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{\partial(u'_i u'_j)}{\partial x_j}$$

Ora trascuriamo l'equazione di trasporto per le fluttuazioni e concentriamoci su quella del moto medio; si può osservare come quest'ultima sia uguale all'equazione di Navier-Stokes originaria a meno della comparsa di un termine aggiuntivo (chiamato Tensore di Reynolds) che rappresenta uno sforzo supplementare, in aggiunta a quello viscoso già presente, dovuto all'interazione tra i vortici e alle fluttuazioni di velocità nel moto; si vuole sottolineare come quest'ultimo termine introduca nel sistema di equazioni 6 nuove incognite rendendo il problema sottodeterminato. Una possibile soluzione potrebbe essere quella di cercare un'equazione per il tensore di Reynolds tuttavia si ci verrebbe a trovare sempre con un numero di incognite superiore a quello delle equazioni rendendo il problema comunque sottodeterminato, questo è chiamato problema della chiusura della turbolenza.

La filosofia delle equazioni mediate di Reynolds è proprio quella di modellare il termine aggiuntivo al fine di chiudere il problema; di seguito passeremo in rassegna i modelli di turbolenza per le equazioni mediate alla Reynolds concentrandosi su quello utilizzato nella nostra simulazione.

### 2.4.3.1 MODELLI A VISCOSITÀ TURBOLENTE

Questi modelli sono quelli storicamente prima proposti e si basano sull'assunzione che l'effetto delle più piccole scale filtrate si manifesti a livello macroscopico come un aumento della dissipazione; quindi si modella il tensore di Reynolds con un termine proporzionale al tensore velocità di deformazione introducendo il coefficiente di proporzionalità viscosità turbolenta.

Questi si dividono principalmente in modelli:

- Algebrici: ipotesi di Boussinesq della viscosità turbolenta
- Ad una equazione: la viscosità turbolenta viene ipotizzata come funzione di una quantità turbolenta da determinare risolvendo un'equazione differenziale di trasporto (in questo caso di  $k$  energia cinetica turbolenta)
- A due equazioni: Per primo Kolmogorov ipotizzò che la turbolenza possa essere efficacemente descritta da due grandezze indipendenti la cui dinamica viene descritta da due equazioni di trasporto;

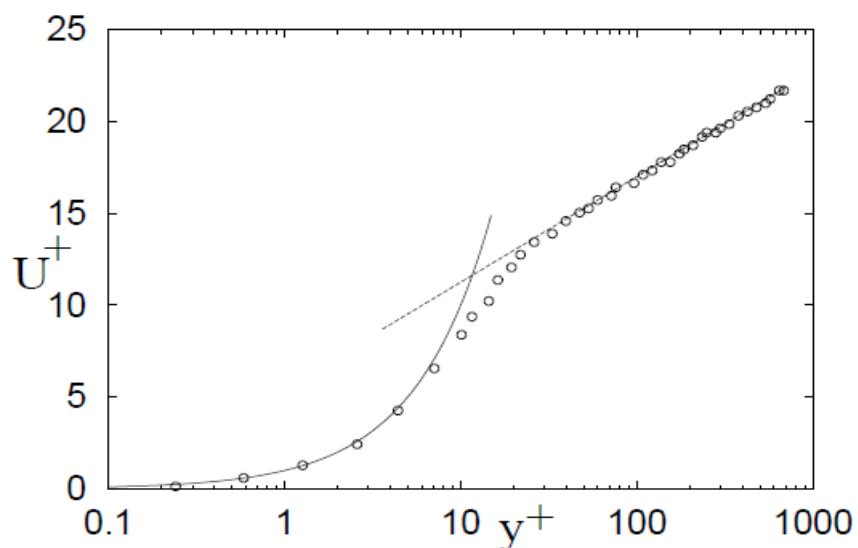
Tra i modelli a due equazioni quelli maggiormente utilizzati nei problemi in ambito ingegneristico sono:

- $k-\varepsilon$ : per la chiusura del problema si introducono due equazioni aggiuntive di trasporto; una per l'energia turbolenta specifica e l'altra per la dissipazione turbolenta
- $k-\omega$ : si introducono nel modello un'equazione di trasporto per l'energia turbolenta specifica ed un'altra per il tasso di dissipazione specifico (indicatore della scala di turbolenza)
- $k-\omega$ SST: cerca di unire i pregi dei due modelli precedentemente illustrati
- RNG  $k-\varepsilon$ : riformulazione del modello a due equazioni  $k-\varepsilon$  rielaborato sulla base della tecnica dei gruppi di rinormalizzazione si propone di colmare le lacune del  $k-\varepsilon$  standard

## 2.5 LEGGE DI PARETE

La zona di interazione tra il flusso turbolento ed una parete può essere suddiviso in quattro zone principali;

1. In prossimità della parete stessa il flusso è fermo o si muove molto lentamente a causa della no slip condition in questa zona chiamata viscous sublayer il legame tra la velocità del flusso e la distanza dalla parete è lineare
2. Allontanandosi dalla parete si entra in una regione chiamata buffer layer; in questa regione il flusso comincia a spostarsi verso la turbolenza,
3. Allontanandosi ulteriormente dalla parete si entra nella regione chiamata log layer una regione in cui il flusso è completamente turbolento e la velocità segue una legge logaritmica della distanza dalla parete,
4. Infine allontanandosi ulteriormente si entra nella freestream region in cui la turbolenza del flusso è completamente sviluppata.



**Figura 7 - Andamento della velocità media in funzione della distanza da parete. Le linee continue indicano l'andamento teorico , i cerchi il valore misurato**

Dove (in fig.7) vengono utilizzate le seguenti grandezze adimensionali:

- velocità di taglio:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$$

- velocità adimensionale

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau}$$

- distanza adimensionale dalla parete

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}$$

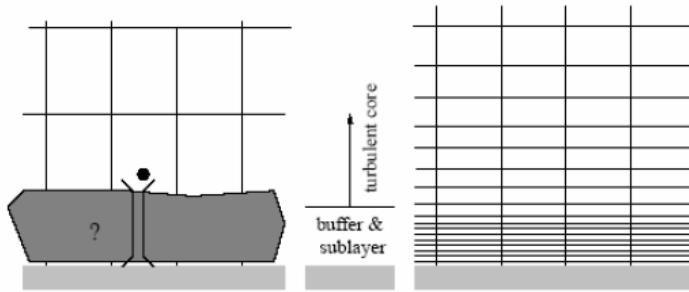
Quindi nella zona viscoso sublayer si assume  $u^+ = y^+$  mentre nella log layer si assume

$$u^+ = \frac{1}{k} \log y^+ + B$$

In cui k prende il nome di costante di VonKarman e B è una costante dimensionale

Per applicazioni di interesse ingegneristico è possibile usare con successo questa zona di interazione fluido parete i modelli di turbolenza RANS ; dalle osservazioni sperimentali si evince che poiché la zona che si estende fino al buffer layer è estremamente sottile può essere vantaggioso non calcolare direttamente il flusso fino alla parete stessa (cosa che richiederebbe una griglia estremamente accurata ed una onerosità computazionale non indifferente) ma utilizzare una approssimazione che si estende dalla parete al termine del buffer-layer.

Questa approssimazione prende il nome di WallFunction e consiste nell'ignorare il campo di moto all'interno del buffer layer e calcolare una velocità non nulla del flusso in corrispondenza della parete; quindi usando una wallfunction si assume che il campo di moto segua la soluzione analitica all'interno degli strati più interni; il vantaggio di questo tipo di approssimazione è che il modello richiede una onerosità computazionale di gran lunga minore di quella richiesta da una simulazione diretta (caratteristica che si rileva estremamente utile per i problemi di interesse ingegneristico).



**Figura 8 - Schema concettuale del modello wall function (a sinistra) e Near Wall Function (a destra)**

## Bibliografia

[2-1] Cengel Cimbala *Fluid Mechanics Fundamentals Application* McGraw Hill 2006

[2-2] S. Zuccher Note di Fluidodinamica Versione Maggio 2014

## CAPITOLO 3

### 3.1 METALLI LIQUIDI

In questo capitolo illustreremo le principali proprietà dei due metalli liquidi presi in esame: piombo e sodio.

#### 3.1.1 FLUIDODINAMICA DEI METALLI LIQUIDI; UN PROBLEMA ANCORA APERTO

Nella breve sezione introduttiva abbiamo accennato alle innumerevoli applicazioni dei codici di calcolo CFD nell'ambito dell'ingegneria nucleare, uno di questi è proprio lo studio della termofluidodinamica associata alla refrigerazione di reattori nucleari mediante metalli liquidi.

In merito sono stati fatti numerosi studi i quali hanno, nella quasi totalità dei casi, portato alla luce il fatto che a causa del basso numero di Peclet, conseguenza diretta del basso numero di Prandtl (infatti  $Pe=Re \cdot Pr$ ), i modelli di turbolenza usualmente utilizzati dai codici CFD commerciali non sono del tutto affidabili per le suddette applicazioni.

#### 3.1.1.1 PROPRIETÀ TERMOFISICHE DEI METALLI LIQUIDI (CENNI)

##### 3.1.1.1 PIOMBO

Il piombo (Pb) fa parte del 14° gruppo e del 6° periodo della tavola periodica ed appartiene agli elementi di post-transizione del blocco p, è l'elemento chimico stabile con numero atomico più elevato 82 ed ha configurazione elettronica  $4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$ .

Per quanto riguarda le proprietà termofisiche il piombo a temperatura ambiente ha una densità di circa  $11340 \text{ kg/m}^3$  fonde a circa  $600\text{K}$  ed arriva al punto di ebollizione a  $2022 \text{ K}$ , ha calore specifico pari a  $129 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$  e conducibilità termica pari a  $35 \text{ W/m}\cdot\text{K}$  [3.2].

Invece per l'impiego come refrigerante il piombo presenta le seguenti caratteristiche:

- economicità: facilmente reperibile sul mercato a prezzi ridotti
- inerte chimicamente (se messo in contatto con acqua)
- elevato punto di ebollizione
- capacità schermanti rispetto all'emissione di raggi gamma e la capacità di trattenere i prodotti della fissione rilasciati dal nocciolo

Infine, come conseguenza delle proprietà prima elencate, il piombo richiede requisiti di sicurezza meno stringenti in caso ci possano essere fuoruscite accidentali di refrigerante [3.2].

### 3.1.1.2 SODIO

Il sodio (Na) situato nel 1°gruppo e 3° periodo della tavola periodica, appartiene alla categoria dei metalli alcalini; ha numero atomico 11 e configurazione elettronica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Inoltre a temperatura ambiente il sodio presenta le seguenti proprietà termofisiche:

- densità di circa  $970 \text{ kg/m}^3$
- punto di fusione ed ebollizione rispettivamente a  $371 \text{ K}$  e  $1156 \text{ K}$
- calore specifico  $1230 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$
- conducibilità termica di  $141 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ .

Per quanto riguarda l'impiego come refrigerante, rispetto al piombo possiede il punto di ebollizione inferiore e, soprattutto (aspetto certamente negativo) reagisce in maniera esplosiva se messo in contatto con acqua e si incendia in aria (quest'ultimo inconveniente obbliga i progettisti a imporre requisiti di sicurezza molto stringenti riguardo la sua applicazione).

### 3.1.1.3 FENOMENI DI CORROSIONE ASSOCIATI AI METALLI LIQUIDI

Tuttavia nonostante il Pb presenti interessanti caratteristiche fisiche e termodinamiche, uno dei suoi principali limiti per le applicazioni pratiche è di carattere tecnologico; infatti si sono individuati nei fenomeni di corrosione ed erosione come i fattori più limitanti da tenere in considerazione.

Nei fenomeni di natura corrosiva i metalli liquidi presentano sostanziali differenze rispetto alla corrosione correlata ai tradizionali refrigeranti di natura acquosa per i quali il fenomeno in esame è essenzialmente di natura elettrochimica: per i metalli liquidi la corrosione è un processo complesso di natura fisica o fisico-chimica che comporta il passaggio in soluzione dei materiali strutturali il trasporto delle due fasi e l'insorgere di reazioni chimiche tra i prodotti della corrosione stessa e le impurità presenti nel fluido. Il fenomeno corrosivo che si instaura tra metallo liquido e parete metallica può modificare microstruttura, composizione e morfologia della parete stessa andando a peggiorare le caratteristiche meccaniche e fisiche dei materiali. Tuttavia a causa delle grandi potenzialità nell'utilizzo dei metalli liquidi in particolare il piombo liquido è stato oggetto di numerosi studi per cercare di limitare questo grave e limitante inconveniente.

La prevenzione o la riduzione della corrosione associata al flusso dei metalli liquidi rappresenta una sfida cruciale per un efficace utilizzo di quest'ultimo; e proprio per questo motivo sono stati proposti alcuni metodi per cercare di affrontare il problema: uno dei metodi più efficacemente testati è stato quello di aggiungere elementi che inibiscono la corrosione, per il piombo liquido questi elementi possono essere approssimativamente divisi in due categorie cioè gli inibitori metallici (per esempio Zr e Ti) e quelli non metallici; appartenente a quest'ultima categoria l'ossigeno è stato oggetto degli studi più recenti a causa dello strato di ossido protettivo che forma tra il metallo liquido ed il materiale[3-2].

### 3.1.1.4 FENOMENI EROSVI

Inoltre oltre ai fenomeni corrosivi (principalmente di natura chimica) il flusso dei metalli liquidi sottopone il materiale con cui viene messo in contatto a pericolosi fenomeni di natura erosiva (fenomeno principalmente fisico). Proprio per queste problematiche si pone un limite massimo intorno ai 4 m/s alla velocità media del refrigerante all'interno del reattore[3-1].

## 3.2 ANALISI QUALITATIVA DELLE PROPRIETÀ TERMOFISICHE DEI METALLI LIQUIDI

Nella sezione precedente abbiamo fornito una (breve) panoramica delle proprietà fisiche e di trasmissione del calore del sodio e del piombo allo stato liquido mentre, in questa sezione faremo un'indagine qualitativa sulla natura di queste proprietà analizzando, sempre dal punto di vista macroscopico, le equazioni di bilancio che regolano il trasferimento di calore nel problema che abbiamo preso in esame.

### 3.2.1 FORMA DELLE EQUAZIONI DI GOVERNO

Come prima cosa analizziamo i termini che compaiono nell'equazione dell'energia (primo principio della termodinamica applicato ad un volume materiale) scritta nei termini della temperatura e fatte le dovute semplificazioni cioè fluido incompressibile senza generazione interna di calore.

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = k \nabla^2 T + \mu \varphi \quad (3.1)$$

Dove si individuano i seguenti termini:

- $\frac{D}{Dt}$  derivata materiale di una grandezza generica (variazione della grandezza lungo la traiettoria di una particella fluida)
- $\nabla^2 T$  è il termine che descrive la diffusione molecolare
- $\phi$  rappresenta la generazione di calore dovuta agli effetti viscosi del fluido

Per capire quali effetti siano preponderanti nella fluidodinamica dei metalli liquidi adimensionalizziamo le equazioni di bilancio (in questo caso solo quella dell' energia) : per fare ciò bisogna innanzitutto determinare nel sistema delle grandezze caratteristiche nel nostro caso possono essere:

- $L_0$  lunghezza caratteristica
- $U_0$  velocità caratteristica
- $\Delta T = T_w - T_0$  differenza di temperatura caratteristica

Introdotte le grandezze caratteristiche è possibile adimensionalizzare le variabili presenti nell'equazione di bilancio e rintrodurle nell'equazione stessa ottenendo la riscrittura di quest'ultima in funzione delle sole variabili adimensionali con l'aggiunta della comparsa di alcuni noti gruppi adimensionali [3-3]:

$$\frac{DT^*}{Dt^*} = \frac{1}{RePr} \nabla^{*2} T^* + \frac{Br}{RePr} \phi^* \quad (3.2)$$

dove si riconosco i seguenti gruppi adimensionali.

- Re: numero di Reynolds cioè il rapporto tra forze inerziali e forze viscose
- Pr: rapporto tra la diffusività termica e la diffusività della quantità di moto
- Br: numero di Brinkman cioè il rapporto tra calore prodotto per dissipazione viscosa e calore asportato per conduzione

A questo punto bisogna analizzare quali dei seguenti termini siano preponderanti e quali si possano trascurare:

- Il numero di Prandtl per i metalli liquidi è <<1 (proprietà molecolare non legata al flusso)
- Il numero di Reynolds è caratteristico del flusso, tuttavia essendo la turbolenza pienamente sviluppata quest'ultimo assume valori nell'ordine di  $10^6$
- Essendo le velocità del fluido modeste possiamo trascurare Br (legato alla produzione di calore per attriti intermolecolari) che assume valori dell'ordine di  $10^{-6}$

Quindi dopo aver svolto un analisi sugli ordini di grandezza possiamo giungere alla forma finale dell'equazione dell'energia :

$$\frac{DT^*}{Dt^*} \sim \frac{1}{RePr} \nabla^2 T \quad (3.3)$$

Quindi in conclusione siamo giunti al risultato che nello scambio termico nei metalli liquidi la variazione di temperatura e quindi di energia di una particella fluida (cioè la derivata temporale di T) è influenzata maggiormente dal termine  $\nabla^2 T = 0$  che non è altro che il termine diffusivo che rappresenta lo scambio termico per conduzione (tipico dei solidi).

Questo risultato , dovuto alle proprietà molecolari dei metalli liquidi (in particolare il basso valore del numero di Prandtl), risulta particolarmente interessante in quanto può essere interpretato come il fatto che i metalli liquidi trasmettono il calore principalmente come solidi, la componente conduttiva di scambio termico non può mai essere trascurata, quindi possono fungere come refrigeranti molto efficienti anche in regime di flusso molto lento o addirittura a flusso fermo (situazione che potrebbe creare criticità in caso di utilizzo di refrigerante tradizionali come l'acqua).

### 3.3 FENOMENI DI STRATO LIMITE NEI METALLI LIQUIDI

Dopo esserci soffermati nel paragrafo precedente sulle caratteristiche fisiche del refrigerante in questa sezione indagheremo più a fondo i fenomeni di interazione tra il liquido e le pareti solide del sistema, cioè i fenomeni relativi allo strato limite.

Come già anticipato con il termine strato limite si intende una zona molto limitata in prossimità di una parete solida in cui le forze viscose diventano preponderanti causando forti gradienti di velocità in prossimità della parete rispetto al flusso esterno (assimilabile ad un flusso potenziale non viscoso).

Grazie alla normalizzazione dell' equazione di continuità si può osservare che, secondo l'ipotesi di Prandtl (secondo cui lo strato limite deve avere una dimensione preponderante rispetto all'altra) si ottiene tramite la normalizzazione dell'equazione di continuità:

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} = 0 \rightarrow U_y \propto U_x \frac{\delta}{L} \text{ e analogamente } \delta \propto L \frac{U_y}{U_x}$$

quindi essendo  $U_y$  molto più piccolo di  $U_x$  lo spessore in  $y$  è molto piccolo rispetto alla dimensione in  $x$ , confermando l'ipotesi di Prandtl.

Si può definire ora lo spessore dello strato limite di quantità di moto

$$\delta(x) = \sqrt{\frac{xv}{U_x}} \quad (3.4)$$

e conseguentemente in forma adimensionale

$$\frac{\delta(x)}{x} = \frac{1}{\sqrt{Re_x}} \quad (3.5)$$

Al fine di stimare lo spessore dello strato limite di temperatura (analogo a quello di quantità di moto illustrato prima) eseguiamo la procedura di normalizzazione all'equazione dell'energia (dopo aver ovviamente operato le dovute semplificazioni)

$$U_x \frac{\partial T}{\partial x} + U_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \rightarrow U_x \frac{\Delta T}{L} + U_y \frac{\Delta T}{\delta_T} \propto \alpha \frac{\Delta T}{\delta_T^2} \quad (3.6)$$

Ora inseriamo nell'equazione precedente l'espressione di  $U_y$  dedotta dall'equazione di continuità e consideriamo sue situazioni opposte:

- Se  $\frac{\delta}{\delta_t} \ll 1$  nell'equazione  $U_x \frac{\Delta T}{L} + U_x \frac{\delta}{L} \frac{\Delta T}{\delta_T} \propto \alpha \frac{\Delta T}{\delta_T^2}$  il secondo termine del membro di destra si può trascurare ottenendo  $\frac{\delta}{\delta_T} \approx \sqrt{Pr}$
- Al contrario se  $\frac{\delta}{\delta_t} \gg 1$  si sostituisce sempre  $U_y$  con il valore stimato dall'equazione di continuità e si osserva che secondo termine del membro di sinistra è preponderante rispetto al primo ottenendo  $\frac{\delta}{\delta_T} \approx Pr^{\frac{1}{3}}$

In entrambi i casi si può vedere come il numero di Prandtl influenzi direttamente lo spessore relativo dello strato limite di temperatura e di quantità di moto. Quindi nonostante l'analisi svolta sia solo di carattere qualitativo (basata sugli ordini di grandezza) possiamo già affermare che in base alle proprietà molecolari dei metalli liquidi che lo definiscono, il numero di Prandtl per questi ultimi è <<1 lo strato limite di temperatura è notevolmente maggiore di quello di quantità di moto [3-2].

Questo per rimarcare come la modalità di trasmissione termica nei metalli liquidi sia molto più simile alla conduzione termica, rispetto ai refrigeranti tradizionali come l'acqua, risultando estremamente efficiente anche in caso di fluido fermo o in movimento molto lento.

## Bibliografia

[3-1] W.Borreani *Analisi Termofluodinamica di un generatore di vapore per centrali nucleari LFR di IV generazione*

[3-2] *Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Combability, Thermal-hydraulics and Technologies ISBN 978-92-64-99002-9 2007*

[3-3] *Giovanni Guglielmini Claudio Pisoni Elementi di trasmissione del calore seconda edizione*

## CAPITOLO 4

### 4.1 BREVE INTRODUZIONE ALLA CFD IN PARTICOLARE AL METODO DEI VOLUMI FINITI

Come spiegato nel capitolo 2, il modello fisico alla base della termofluidodinamica si basa principalmente su 3 equazioni vettoriali per il bilancio della quantità di moto ed una equazione per la conservazione dell'energia; il software deve inoltre risolvere anche due equazioni per modellare la turbolenza; purtroppo la risoluzione delle equazioni della quantità di moto presentano difficoltà matematiche insormontabili a causa della non linearità del termine convettivo e l'equazione dell'energia nonostante possa essere disaccoppiata dalla precedente (se si applica l'ipotesi di fluido incomprimibile). Tuttavia se il problema coinvolge fenomeni di trasporto convettivo l'equazione dell'energia per essere risolta necessita della conoscenza del campo di moto a causa del termine convettivo.

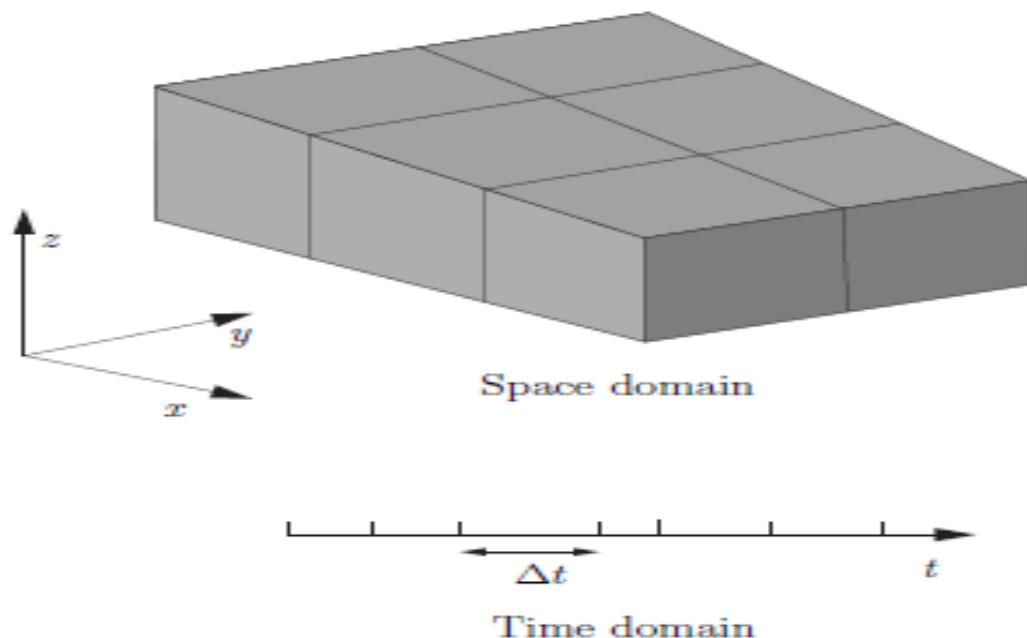
Ricapitolando il problema termofluidodinamica è modellato da:

- 5 incognite nelle variabili  $(x,y,z,t)$  cioè  $T$   $p$  e  $U_x$   $U_y$   $U_z$
- Ricapitolando si hanno a disposizione 5 equazioni differenziali alle derivate parziali:
  - i. continuità
  - ii. quantità di moto (3 eq.)
  - iii. una equazione per la conservazione dell'energia

Quindi abbiamo bisogno di un altro approccio al problema che non sia quello analitico...

#### 4.1.1 BREVE INTRODUZIONE ALLA CFD

A causa della complessità del modello matematico abbiamo abbandonato la speranza di trovare una soluzione analitica; tuttavia grazie allo sviluppo delle potenzialità dei calcolatori è possibile usare un altro approccio: quella della soluzione numerica approssimata. Prima di procedere a tale risoluzione delle equazioni è necessario passare da un dominio continuo (definito in ogni punto dello spazio) ad uno discreto questo può avvenire grazie alla meshatura del dominio; fondamentalmente si crea una rappresentazione discreta della geometria di interesse dividendo quest'ultima in un insieme discreto di punti sui quali verranno risolte le equazioni di bilancio.



**Figura 9 - Schema concettuale della discretizzazione spaziale e temporale del dominio da analizzare**

Una volta diviso il dominio in un insieme discreto di punti si può procedere alla risoluzione delle equazioni approssimate, tipicamente mediante uno dei tre metodi di discretizzazione qui illustrati:

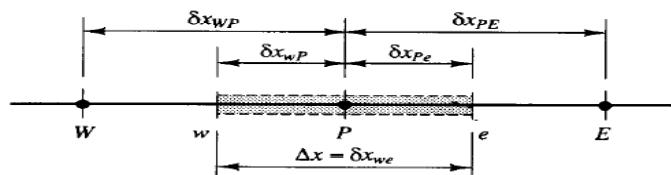
- **Differenze finite:** è il metodo di discretizzazione più antico si basa sull'approssimazione delle derivate parziali con rapporti incrementali calcolati su punti nodali vicini, necessita di mesh strutturate e ha l'inconveniente di non soddisfare automaticamente la continuità.
- **Volumi finiti:** in questo metodo le mesh sono divise in piccoli volumi di spazio al centro dei quali giace il nodo, successivamente le equazioni di governo integrate sul volumetto elementare vengono convertite , grazie al teorema di Gauss, da integrali di volume in integrali di flusso. Il principale vantaggio di questo metodo è che la continuità è facilmente verificata ed il metodo è estremamente flessibile ed applicabile a svariate geometrie (anche molto complicate) lo svantaggio principale è la grande onerosità computazionale che richiede questo metodo. Praticamente tutti i moderni codici di CFD si basano su questo sistema(OpenFOAM incluso).
- **Elementi finiti:** molto simile al metodo dei volumi finiti anch'esso si basa sulla discretizzazione spaziale del dominio in volumetti elementari l'unica differenza è che la soluzione viene approssimata da una combinazione di funzioni elementari (solitamente polinomi) definiti in tutto il dominio e non solo nei punti nodali.

## 4.2 SCHEMI DI DISCRETIZZAZIONE

Come detto nella sezione precedente la risoluzione dei problemi fluidodinamici per essere risolti tramite la tecnica CFD necessitano prima di essere discretizzati sia nelle variabili spaziali sia nella variabile temporale, una volta discretizzato il dominio anche le equazioni di bilancio (ricavate matematicamente sull' ipotesi di corpo continuo) necessitano di essere "riscritte" sul dominio discreto.

### 4.2.1 INTERPOLAZIONE:

Come anticipato in precedenza la tecnica dei volumi finiti si basa sulla definizione di un volume elementare attorno ad ogni nodo al centro del quale vengono definite le variabili di interesse, la divisione del dominio in questo modo rende necessario, per poter creare una correlazione tra i diversi "cubetti" la conoscenza delle variabili non solo al centro del cubo (nel nodo) ma anche sulle facce, questo rende necessario applicare degli schemi di interpolazione per calcolare questa quantità noti i valori dei nodi adiacenti [4-2].



**Figura 10 - Dominio di calcolo unidimensionale**

I principali schemi di interpolazione sono i seguenti:

- Upwind/ Downwind :  $\phi_w = \phi_W$  upwind se  $U > 0$  e  $\phi_w = \phi_P$  se  $U < 0$  downwind in pratica si assegna alla frontiera il valore del nodo a sinistra, se il flusso scorre da sinistra a destra, a destra se il contrario: è un metodo molto stabile tuttavia non è molto accurato
- Central :  $\phi_w = (\phi_W + \phi_P)/2$  il valore in una faccia non è altro che la media dei due nodi adiacenti, è un metodo meno stabile ma più accurato dell'up/downwind
- Hybrid scheme: unisce i vantaggi dello schema upwind e di quello central, si usa lo schema central per bassi numeri di Peclet e quello upwind per alti numeri di Peclet
- QUICK: quadratic upwind interpolation for convective kinetics il valore di  $\phi$  viene interpolato usando una funzione quadratica passante per i due nodi adiacenti alla

faccia ed un nodo upstream, si commette un errore molto piccolo (schema al 3° ordine) tuttavia può dare problemi di stabilità

- Power-law scheme: si basa sulla soluzione analitica dell'equazione monodimensionale dell'equazione di convezione diffusione.

#### 4.2.3 DISCRETIZZAZIONE DEGLI OPERATORI DIFFERENZIALI

Nelle equazioni della meccanica del continuo compaiono frequentemente gli operatori differenziali quali: gradiente, rotore, divergenza e laplaciano che necessitano di essere riscritti su un dominio discreto. Al fine di discretizzare le equazioni ci viene in aiuti il teorema di Gauss il quale, sotto opportune ipotesi permette di passare da un integrale di volume ad un integrale sul bordo del volume stesso. Una volta applicato il teorema di Gauss si rende necessario calcolare il valore del campo sulle facce del volume elementare, questo è possibile grazie agli schemi di interpolazione presentati nel paragrafo 4.2.1 . Alla fine di tale procedura si riduce il problema alla risoluzione di un sistema lineare nella forma [4-2].

$$AX = B$$

risolvibile dal codice tramite procedure numeriche iterative.

Le tecniche di discretizzazione sono presentate nella appendice D

#### 4.2.4 DISCRETIZZAZIONE TEMPORALE

Fino ad ora ci siamo occupati di descrivere operatori che descrivono la distribuzione dei campi vettoriali nello spazio, tuttavia in presenza di fenomeni transitori nelle equazioni di bilancio compaiono anche derivate rispetto alla variabile temporale ; questo tipo di problema è conosciuto come marching problem. La tecnica di discretizzazione temporale consiste nel sostituire la derivata con un opportuno rapporto incrementale (procedura descritta in appendice D) che si propone di sostituire l'operatore di derivazione al prezzo di commettere un errore di troncamento.

Si tiene inoltre a far osservare che, se per la discretizzazione spaziale non ci pone vincoli a priori sulla geometria e sulle dimensioni delle celle nelle quali si è diviso il dominio, nel momento in cui si aggiunge anche la variabile temporale bisogna rispettare dei vincoli ben precisi al fine di garantire la stabilità numerica e l'accuratezza della soluzione [4-2].

#### 4.2.5 CONDIZIONI AL CONTORNO

La modellazione dei fenomeni da noi analizzati tramite il modello matematico della meccanica del continuo introduce complicati sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali che per essere risolti necessitano delle tecniche di discretizzazione precedentemente illustrate; tuttavia la conoscenza delle sole equazioni non è sufficiente alla chiusura matematica del problema poiché non sono ancora state definite le condizioni al contorno e le eventuali condizioni iniziali.

Le condizioni al contorno di tipo matematico da applicarsi alle equazioni differenziali si possono dividere in due categorie ben distinte:

- **Condizioni di Neumann:** in questo tipo di condizioni al contorno viene specificato il valore del gradiente normale al contorno del nostro dominio ; un esempio può essere una parete con flusso termico imposto (che sappiamo essere uguale al gradiente della temperatura sulla parete)
- **Condizione di Dirichlet:** in questo tipo di condizione al contorno viene specificato il valore della variabile in corrispondenza del bordo del dominio ; un esempio potrebbe essere la no slip condition nella quale il valore della velocità in corrispondenza di una parete viene posto uguale a zero.

Tuttavia molte volte i problemi ingegneristici fluidodinamici necessitano di condizioni al contorno che rispecchino il comportamento fisico del sistema da analizzare, per esempio si possono applicare le condizioni:

- Inlet: valore di un parametro fissato all'inlet (*condizione di Dirichlet*)
- Outlet: valore imposto di un parametro fissato all'uscita (*condizione di Dirichlet*)
- Fixed o moving Wall (*sempre condizione di Dirichlet*)

Esiste inoltre un'altra condizione al contorno (di tipo di Neumann) che si applica comunemente quando è possibile individuare evidenti simmetrie nel sistema esaminato (per esempio il flusso potenziale attorno ad un cilindro) cioè SymmetryPlane nella quale il gradiente della funzione viene posto nullo nella direzione normale alla parete in corrispondenza di quest'ultima.

Ci teniamo inoltre a precisare che in caso di problemi stazionari è sufficiente specificare le condizioni ai bordi ed una condizione iniziale di primo tentativo, successivamente il codice tramite iterazioni successive arriverà a convergere; al contrario se il sistema è tempovariante è necessario specificare una o più condizioni iniziali ( a seconda del grado

massimo delle derivate temporali ed almeno una per ogni campo preso in esame) da cui deve partire il calcolo per ottenere il valore ricercato ad ogni time-step.

In precedentemente abbiamo portato ad esempio le condizioni al bordo da applicarsi nel caso di fluido incompressibile e senza trasmissione del calore, tuttavia condizioni al contorno analoghe (quindi sempre riconducibili al tipo di Neumann o Dirichlet) devono essere applicate anche in tutta la rimanente varietà di problemi inerenti la meccanica del continuo.

#### 4.2.6 ESEMPIO: EQUAZIONE DI CONVEZIONE-DIFFUSIONE DISCRETIZZATA (CENNI)

Come esempio conclusivo di questo capitolo dedicata alle tecniche CFD dei volumi finiti applicate alle equazioni della meccanica dei fluidi; si vuole mostrare una applicazione delle regole precedentemente proposte discretizzando l'equazione di convezione diffusione (che regola appunto il trasporto è la diffusione spaziale di una generica grandezza scalare  $\phi$ ) monodimensionale in forma differenziale tramite il metodo dei volumi finiti [4-2].

L'equazione presa in esame assume la seguente forma

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\varphi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + S$$

Essendo il modello monodimensionale la griglia sarà semplicemente un segmento di retta

Integrando la seguente equazione su di un volume di controllo ed applicando opportunamente il teorema di Gauss si perviene alla forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\varphi dV + \int_{\partial V} (\rho u\varphi) i \cdot ndA = \int_{\partial V} \left(k \frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) i \cdot ndA + \int_V S dV$$

Ipotizzando che la densità e la costante di diffusione siano costanti nello spazio l'equazione da noi analizzata può essere riscritta nella forma precedente:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = F(\varphi)$$

A questo punto si può discretizzare la derivata temporale con il metodo ritenuto più idoneo al problema preso in esame; in questa sede utilizzeremo il metodo di Eulero esplicito ottenendo

$$\frac{\varphi^n - \varphi^0}{\Delta t} = F(\varphi^0)$$

Successivamente si riscrive l'equazione sulla griglia discretizzata utilizzando le regole viste in precedenza ottenendo:

$$\frac{\rho_P^n \varphi_P^n - \rho_P^0 \varphi_P^0}{\Delta t} \Delta x = -(F_e \varphi_e^0 - F_w \varphi_W^0) + D_e (\varphi_E^0 - \varphi_P^0) - D_w (\varphi_P^0 - \varphi_W^0) + (S_{\varphi,C} + S_{\varphi,P} \varphi_p^0) \Delta x$$

Dove  $F_i$  indicano i flussi attraverso la frontiera cioè  $F_i = (\rho u)_i \Delta x$  e  $D_i$  i flussi diffusivi

$$D_i = \left( \frac{k}{\delta x_i} \right) \Delta x$$

che può essere riscritta in forma più compatta come:

$$a_{\varphi,P} \varphi_P = a_{\varphi,W} \varphi_W + a_{\varphi,E} \varphi_E + b_\varphi$$

I coefficienti che appaiono all'interno della formula assumono i seguenti valori:

$$\begin{cases} a_{\varphi,W} = D_{\varphi,W} + F_w \\ a_{\varphi,E} = D_{\varphi,E} + F_E \\ a_{\varphi,P} = a_{\varphi,W} + a_{\varphi,E} + a_{\varphi,P}^0 - S_{\varphi,P} \Delta x \\ a_{\varphi,P}^0 = \rho_P^0 \frac{\Delta x}{\Delta t} \\ b_\varphi = S_{\varphi,C} \Delta x + a_{\varphi,P}^0 \varphi_P^0 \end{cases}$$

dove per alleggerire la notazione si è omesso l'apice "n" per indicare il nuovo time step

### 4.3 RISOLUZIONE NUMERICA EQUAZIONE DISCRETIZZATA (CENNI)

Una volta discretizzata, l'equazione di convezione diffusione è formalmente un'equazione lineare anche se nella stragrande maggioranza dei casi i coefficienti dell'equazione potrebbero dipendere dal campo  $\phi$  creando non linearità; per affrontare le non linearità presenti e tenere, inoltre conto, dei legami tra le varie equazioni di governo sono richieste numerose soluzioni ripetute delle forme nominalmente lineari; esistono due diversi approcci per fare ciò:

- Soluzione sequenziale: ciascuna equazione viene risolta come se in essa fosse presente una sola variabile considerando le altre variabili note (utilizzando la migliore stima possibile per esse) e compiendo iterazioni fino al raggiungimento della convergenza.
- Soluzione simultanea: Si considerano tutte le equazioni come parte di un grande sistema e risolte simultaneamente

Tuttavia indipendentemente dal metodo solutivo utilizzato il problema una volta discretizzato si presenta nella forma

$$A\varphi = b$$

Dove A è la matrice (a struttura sparsa) sei coefficienti,  $\phi$  è il vettore delle incognite, b è il vettore dei termini noti; i metodi iterativi producono una sequenza di vettori convergenti al vettore soluzione  $\phi$  del sistema iniziale:

$$\varphi^i = C\varphi^{i-1} + d$$

dove 'C' è la matrice di iterazione e 'd' un opportuno vettore

Attualmente i metodi iterativi disponibili si dividono in due grandi categorie che passeremo velocemente in rassegna:

**4.3.1 METODI ITERATIVI STAZIONARI:** per i quali C e d rimangono uguali attraverso le successive iterazioni; citiamo due dei metodi iterativi maggiormente utilizzati nei codici di calcolo:[4.2]

- Metodo di Jacobi
- Metodo Gauss-Siedel

**4.3.2 METODI ITERATIVI NON STAZIONARI:** C e d variano ad ogni iterazione

#### 4.4 ALGORITMI SOLUTORI (CENNI)

In generale nei problemi di termofluidodinamica affrontati nell'ambito CFD un qualunque campo scalare dipende dalla direzione e dall'intensità del campo di velocità; tuttavia il campo d' velocità non è quasi mai noto a priori ma viene calcolato come parte della soluzione generale quindi si pone la necessità di trovare una strategia per risolvere contemporaneamente ed in maniera coerente tutti i campi (scalari o vettoriali che siano) che compaiono nel problema.

La maggior parte dei solutori presenti nei software di calcolo (ed in particolar modo in OpenFOAM) usano gli algoritmi : [4-1]

- **Pressure-Implicit-Split-Operator (PISO)** (fig. 15)
- **Semi-Implicit-Method for Pressure Linked Equation** (fig. 14)

Entrambi gli algoritmi si basano sulla strategia di assegnare un valore iniziale alla soluzione e successivamente correggerlo nel procedere dell'algoritmo stesso in particolar modo per il PISO, essendo utilizzato nei problemi tempo varianti, verrà assegnato come valore di primo tentativo il valore iniziale mentre per il SIMPLE, essendo usato per problemi stazionari, è possibile assegnare un qualunque valore (sensato).

Più in particolare l'algoritmo SIMPLE richiede 1 correzione mentre il PISO ne richiede più di una (anche se in generale meno di 4) tuttavia ci teniamo a ricordare che questo, come molti altri parametri, possono essere modificati dall'utente.

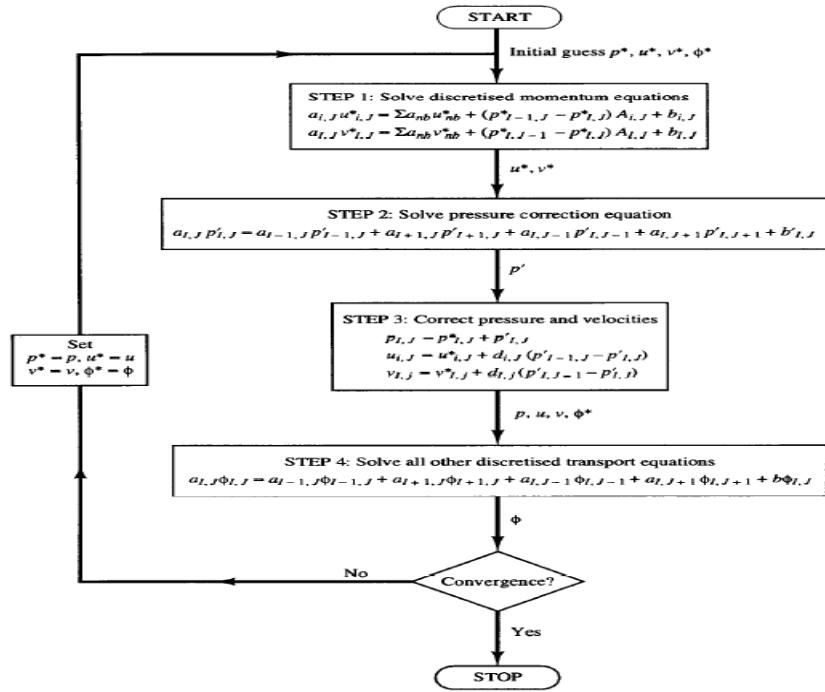


Figura 11 - Algoritmo Simple

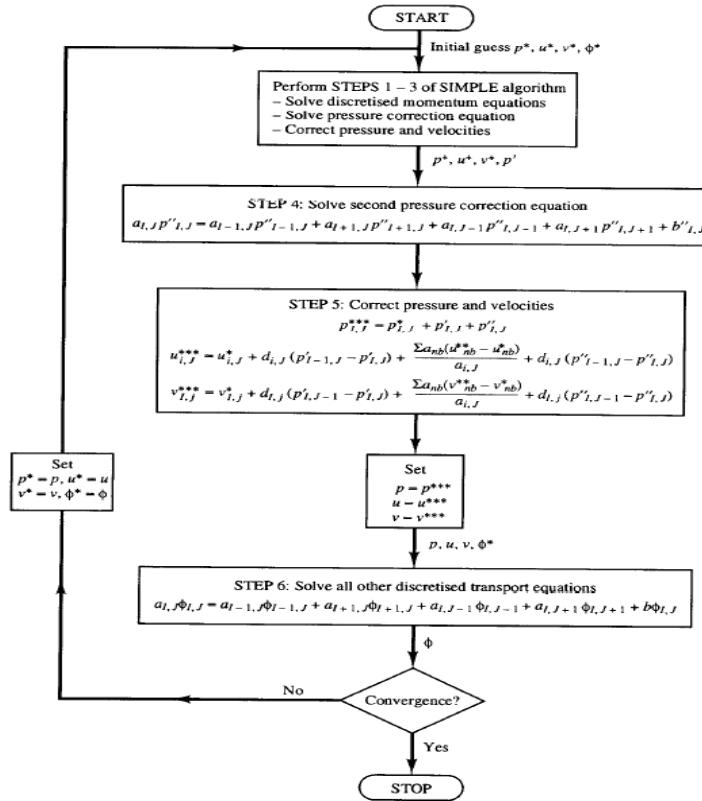


Figura 12 - Algoritmo Piso

## Bibliografia

[4-1] OpenFoam-ProgrammerGuide Version 2.3.0

[4-2] Versteeg-H-K-Malalasekera-W-Introduction-to-Computational-Fluid-Dynamics-the-Finite-Volume-Method Longman Scientific & Technical 0-582-21884-5 1995

## CAPITOLO 5

### 5.1 OPENFOAM

In questa sezione ci proponiamo di svolgere una breve panoramica sul codice utilizzato per effettuare le simulazioni numeriche nell'analisi termofluidodinamica.

#### 5.1.1 UN PO' DI STORIA

OpenFOAM nacque con il nome di FOAM nel 1993 all' Imperial College di Londra frutto della collaborazione di Henry Weller e Hrvoje Jasak per lo sviluppo della loro tesi di dottorato; la motivazione che spinse questi due brillanti ricercatori a cominciare lo sviluppo di questo software fu l'insoddisfazione nei confronti dei codici Fortran (ormai obsoleti) e l'obbiettivo di creare qualcosa di riutilizzabile e configurabile in accordo con le esigenze di altri utilizzatori.

Per i primi anni FOAM fu sviluppato come un closed-source commercial software per poi diventare open-source nel dicembre del 2004 con il rilascio di OpenFOAM 1.0; da allora sono state rilasciate molte versioni fino ad arrivare alla versione 2.3.0 attuale (rilasciata agli inizi del 2014).

#### 5.1.2 COS'E' OPENFOAM?

L'acronimo OpenFOAM sta per **O**pensource **F**ield **O**peration **A**nd **M**anipulation è un toolbox in C++ per la risoluzione numerica di problemi della meccanica del continuo (pre e postprocessing); come il nome stesso sta ad indicare è un software opensource distribuito gratuitamente da OpenCFD con licenza GNU, pertanto tale toolbox è utilizzabile solo su macchine con sistemi operativi Linux come Ubuntu, Fedora, OpenSuse, Debian, etc che condividono la filosofia freesoftware [5-2].

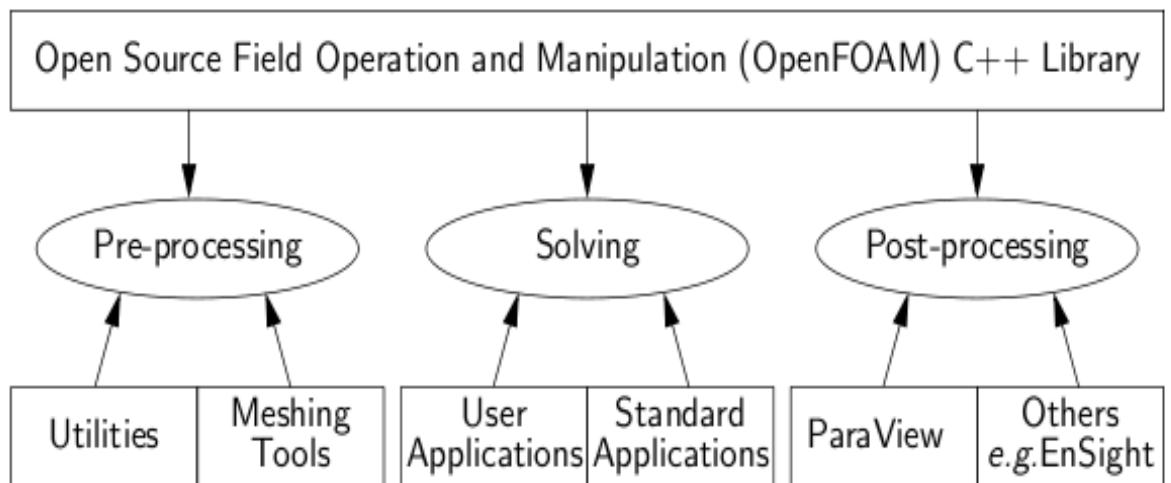
All' interno di OpenFoam possiamo distinguere due principali categorie di applicativi:

- solvers: solutori progettati per risolvere uno specifico problema della meccanica del continuo
- utilities: applicativi il cui scopo è la gestione e l'analisi dei dati ottenuti dai solvers

Nei file sorgenti sono presenti numerosi solutori progettati per risolvere i più disparati problemi della meccanica del continuo spaziando dai flussi potenziali, ad incomprimibili

comprimibili con trasferimento di calore (caso di nostro interesse) sub-trans-supersonici, multifase; tuttavia la vera potenzialità di questo software non è tanto l'ampia classe di problemi risolubili già di default ma bensì la possibilità, per un utente sufficientemente esperto, di creare o modificare a proprio piacimento un qualunque solutore per meglio adattarlo al problema in esame.

Quindi dopo aver chiarito ciò possiamo affermare che OpenFOAM è fornito di ambienti per pre e post-processing (inclusa l'analisi dei dati) assicurando una robusta e veloce



**Figura 13 - Panoramica sulla struttura di OpenFOAM**

interfaccia per collegare al meglio tutti gli ambienti [5-1].

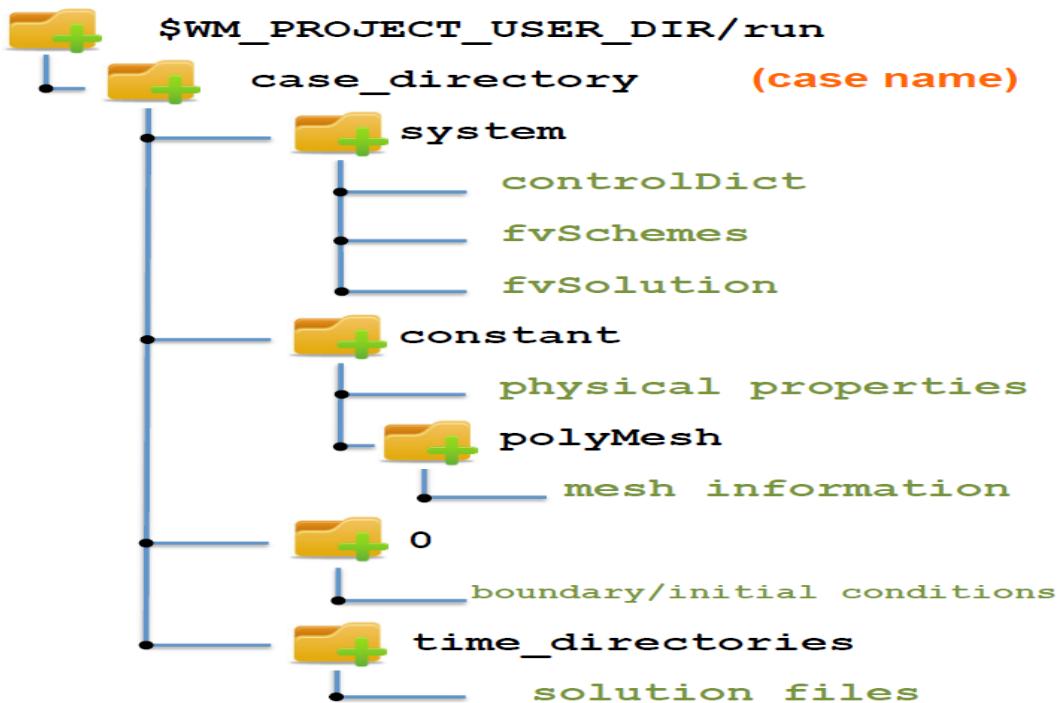
### 5.1.3 CASO IN OPENFOAM

Per cominciare un'analisi CFD del caso di interesse innanzitutto bisognerà creare una cartella all'interno di OpenFOAM stesso (per esempio tramite il comando `home/utente/OpenFOAM/utente/ mkdir my_case`) a questo punto all'interno della cartella da noi creata bisognerà creare altre tre cartelle cioè:

- 0: in 0 saranno posizionate le condizioni al contorno ed iniziali delle variabili di nostro interesse (è importante sottolineare che in OpenFOAM i campi, di qualunque grandezza, devono comunque essere inizializzati).
- constant: nella cartella constant vengono posizionate tutte le quantità che non variano durante la simulazione, sia quelle che rappresentano la fisica del problema

(viscosità, modulo di comprimibilità, conduttività, etc) sia quelle che definiscono la geometria del problema (raccolte nella cartella polymesh)

- system: nella cartella system sono collocati tutti i file necessari alla risoluzione numerica del problema cioè lo schema numerico adottato, i criteri di convergenza, il tempo di inizio e fine simulazione il passo di discretizzazione temporale e gli intervalli di output dei risultati.



**Figura 14 - Struttura di un caso in OpenFOAM**

Queste tre cartelle sono necessarie per far “partire” la simulazione; successivamente il software crea altre cartelle dei tempi all'interno delle quali sono collocati i risultati (calcolati) delle variabili di interesse una volta giunti a convergenza [5-1].

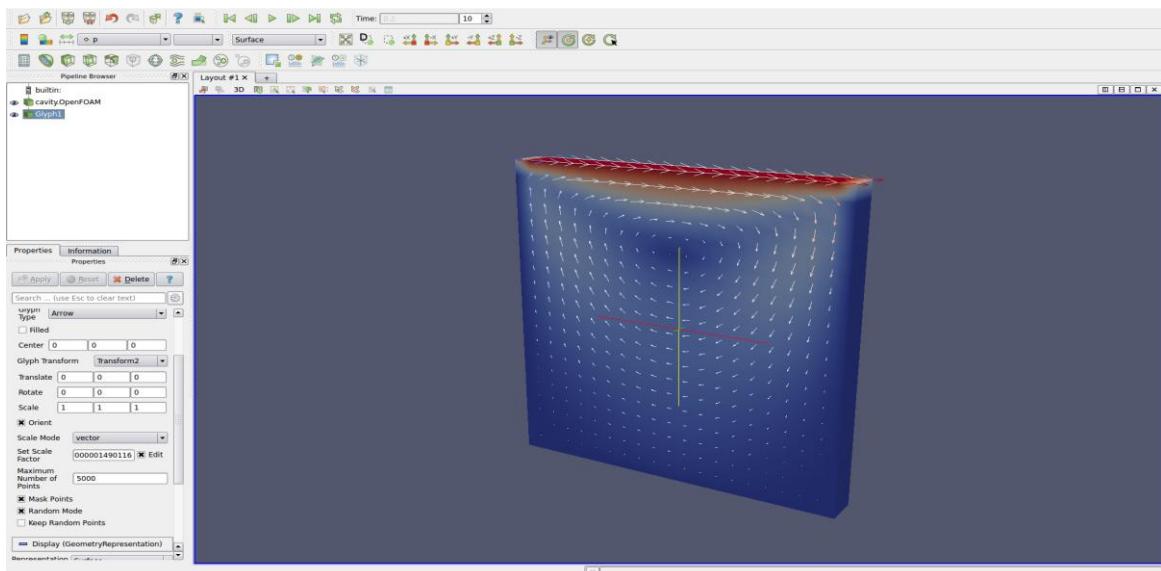
### 5.1.4 POST-PROCESSING

Una volta terminato il calcolo è necessario rendere i risultati leggibili per l'utente, per fare ciò è necessario uno strumento di post-processing; il principale tool utilizzato è Paraview (un applicativo di visualizzazione, sempre opensource) che adopera il Visualisation ToolKit (VTK) come motore di elaborazione dati (ed è quindi in grado di leggere qualunque formato VTK) [5-2].

Viene inoltre fornito nei sorgenti di OpenFOAM l'utility paraFoam che lanciata da terminale, (sempre ovviamente dentro la cartella del caso), lancia Paraview utilizzando il modulo di lettura fornito da OpenFOAM.

Come già sottolineato, i risultati si presentano all'utente in veste grafica attraverso paraFoam, in cui si possono individuare tre principali funzioni:

- Pipeline browser: contiene i moduli aperti in Paraview cioè i risultati elaborati precedentemente durante la simulazione
- Properties panel: permette all'utente di scegliere gli input per il caso
- Display panel: gestisce la raffigurazione visiva del modulo scelto (colori stile di rappresentazione)



**Figura 15 - Interfaccia utente di paraFoam**

## Bibliografia:

[5-1] *OpenFoam-UserGuide Version 2.3.0*

[5-2] <http://www.openfoam.com>

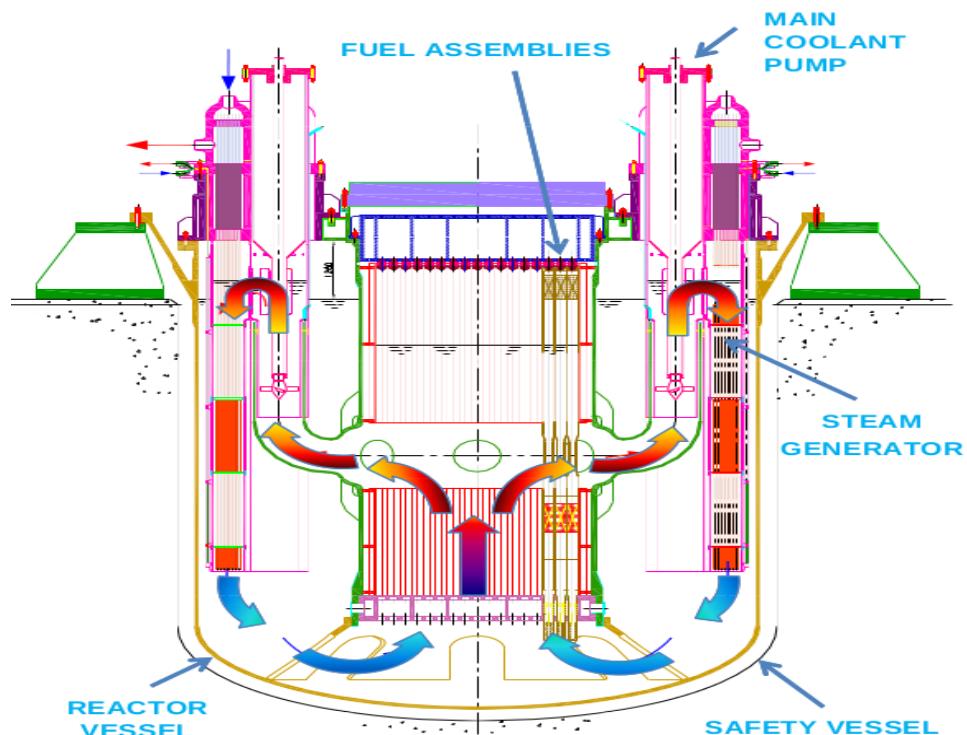
**CAPITOLO 6****6.1 ANALISI TERMOFLUIDODINAMICA DELL'ASSEMBLY DI UN REATTORE NUCLEARE (REFRIGERATO A PB NA H<sub>2</sub>O)**

In questo capitolo verranno illustrate la prima fase dell'analisi termofluidodinamica svolta nella seguente tesi ed in particolare verranno definite la geometria del dominio le eventuali semplificazioni dovute alle possibili simmetrie insite nel sistema e la definizione delle condizioni al contorno ed infine la creazione della griglia per un'analisi di primo tentativo.

Si vuole sottolineare come questa prima analisi si ponga come obiettivo quello di ottenere una prima validazione del dominio fluido verificandone l'accuratezza fisica dal punto di vista fluidodinamico ed infine cercare di fornire, seppur in via preliminare, il numero di celle necessarie per ottenere un'analisi soddisfacente del problema.

**6.2 DEFINIZIONE DEL DOMINIO FLUIDO DA ANALIZZARE**

Nella figura seguente viene riportato lo schema costruttivo del core di ALFRED [6-1]



**Figura 16 - schema di massima del reattore nucleare ALFRED**

Nella fig. 16 si possono individuare i principali componenti costruttivi del reattore fra cui:

- Il reactor vessel, componente adibito a contenere la zona attiva del nocciolo dove le reazioni di fissione hanno luogo ed ha come compito principale il mantenimento di una adeguata pressione di esercizio
- Il generatore di vapore, nel quale il calore asportato dal refrigerante nel core di ALFRED viene trasferito all'acqua che poi andrà a devolvere in turbina
- Le pompe, necessarie per mettere la massa di piombo o sodio in movimento.

In particolar modo il nostro studio si concentrerà sull'attraversamento da parte del refrigerante di uno dei fuel-assembly del reattore.

Il core di ALFRED è costituito da 171 fuel assembly 4 safety rods 12 control rods e 108 dummy elements (che non esistono nel reattore fisico ma solamente nella sua schematizzazione computazionale) come riportato nella figura seguente in cui vengono indicate: [6-1]

- in grigio i fuel assembly
- in verde le safety rods
- in rosa le control rods ed
- in bianco i dummy elements.

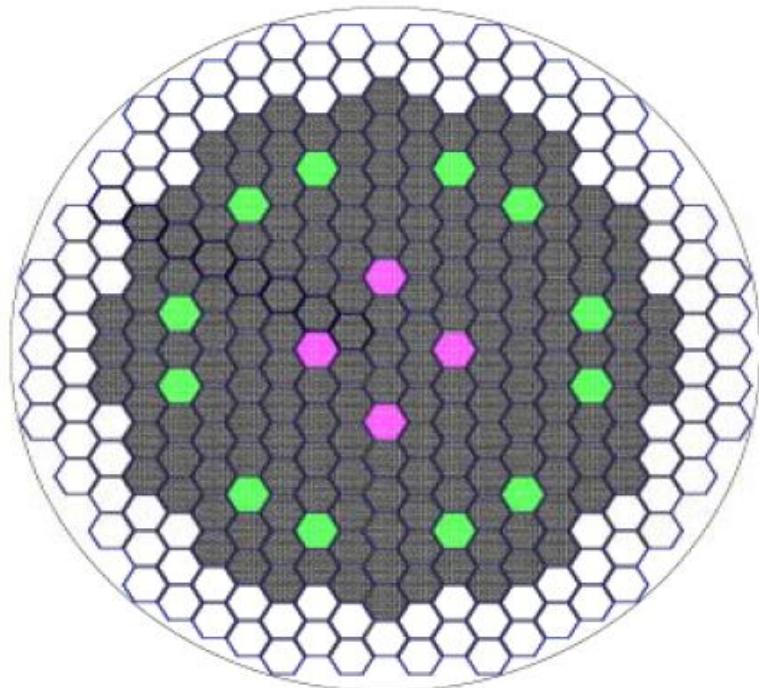


Figura 17 - Fuel-assembly

Dopo questa veloce panoramica sul core del reattore passiamo ora allo studio dei fuel assembly nel quale ha luogo il flusso del refrigerante oggetto del nostro studio.

Uno dei 171 fuel assembly presenti nel core di ALFRED è schematizzato in fig. 18 [6-2]:

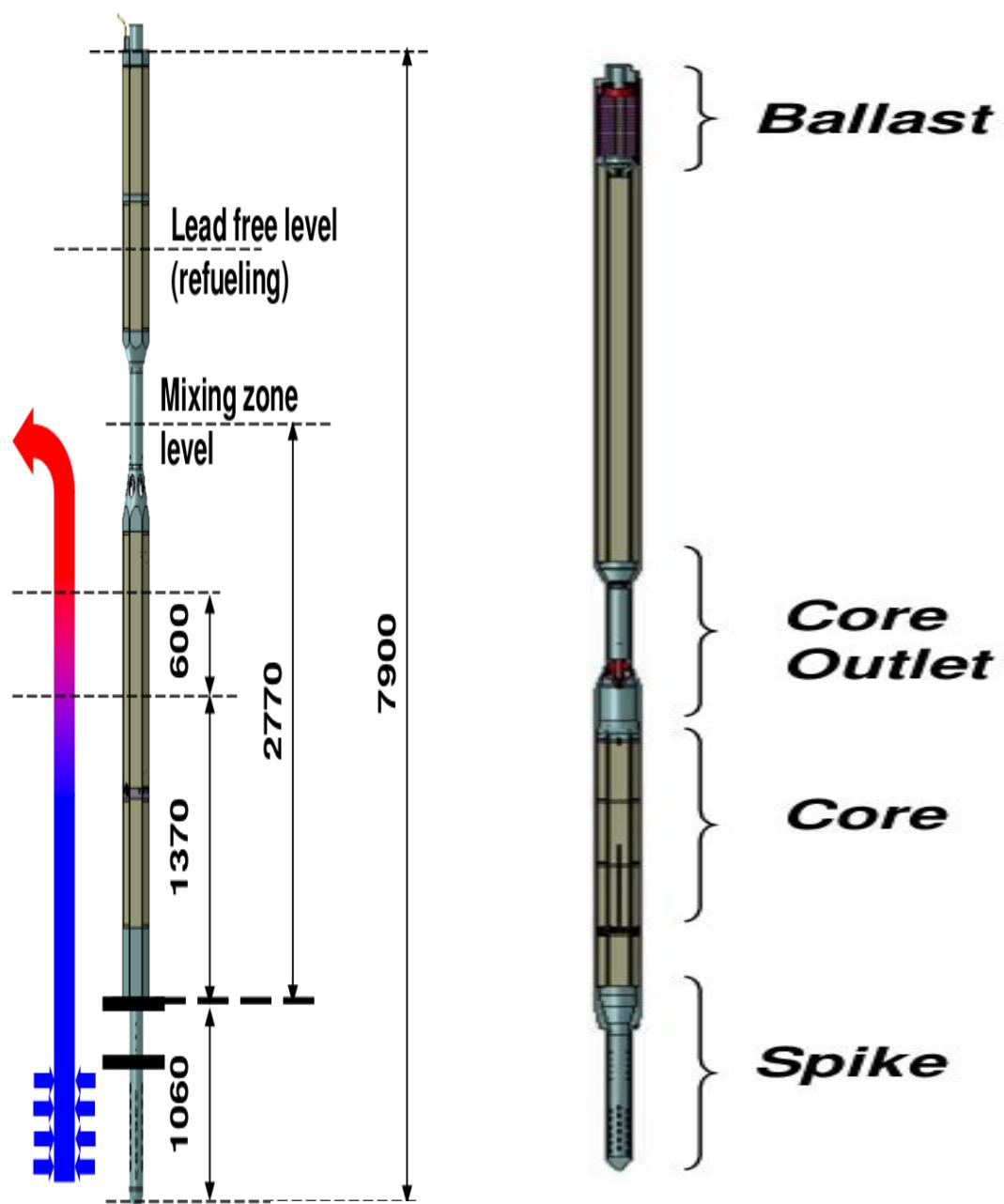


Figura 18 - fuel assembly

E rispettivamente una sezione trasversale eseguita all'altezza della sezione del core[6-2]

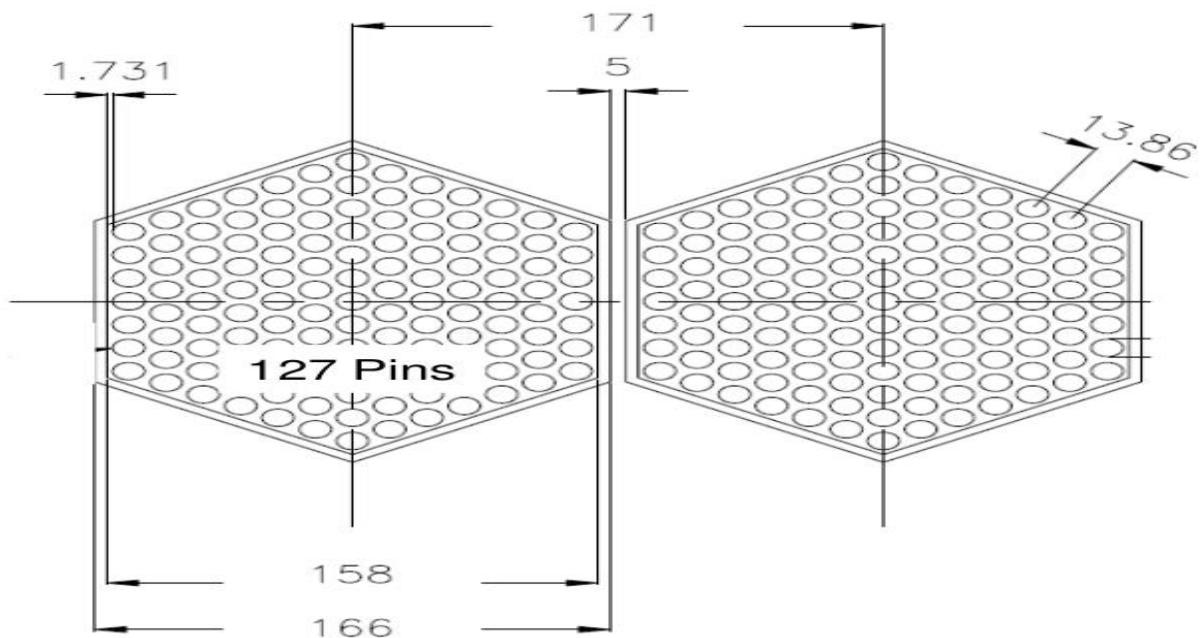


Figura 19 - sezione retta di un fuel-assembly

Dalla sezione diametrale (fig.19) si evince che all'interno di ogni fuel assembly sono presenti 127 pin, gli elementi di combustibile fissile, disposti secondo un esagono regolare e contenuti all'interno di un guscio, di forma appunto esagonale, che verrà denominato shell. Il flusso di refrigerante fluirà, come si evince dalla figura precedente, dal basso verso per tutta la lunghezza del core (1.97 m) e sarà contenuto dalla shell stessa.

### 6.3 DEFINIZIONE DOMINIO E CREAZIONE GRIGLIA DI CALCOLO

#### 6.3.1 CREAZIONE DELLA GRIGLIA DI CALCOLO

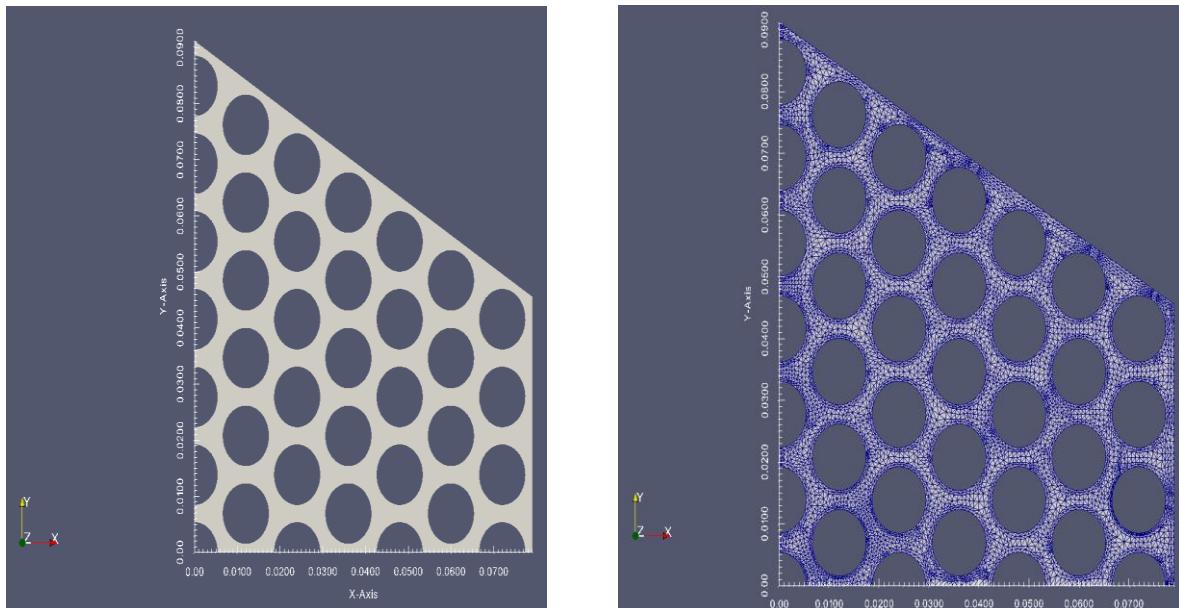
Dopo che nel paragrafo precedente abbiamo illustrato le principali caratteristiche geometriche del problema preso in esame, in questa sezione ci occuperemo della creazione del dominio fluido di investigazione e della creazione della griglia di calcolo.

Come primo approccio si è scelto di semplificare il problema tramite l'utilizzo di una simmetria; del sistema stesso infatti non è stato modellato un intero fuel assembly ma solo un quarto di esso figura usando in corrispondenza della parete di simmetria una specifica condizione al contorno più tardi meglio definita.

La costruzione e la meshatura del dominio può essere approssimativamente divisa in tre step:

1. Creazione di una sezione retta di un quarto di esagono basandosi sulle misure riportate nella figura precedente tramite il programma di CAD e creazione delle mesh tramite fluent-icem
2. Meshatura dell'elemento bi-dimensionale individuato dalla sezione retta precedentemente descritta
3. Estrusione dell'elemento stesso per tutta la lunghezza del tratto del core (1.97 m)

Nelle figure seguenti sono illustrate le tre fasi in cui è stata divisa la costruzione del dominio fluido:



**Figura 20 - Creazione del dominio di calcolo ( a sinistra ) e successiva meshatura ( destra )**

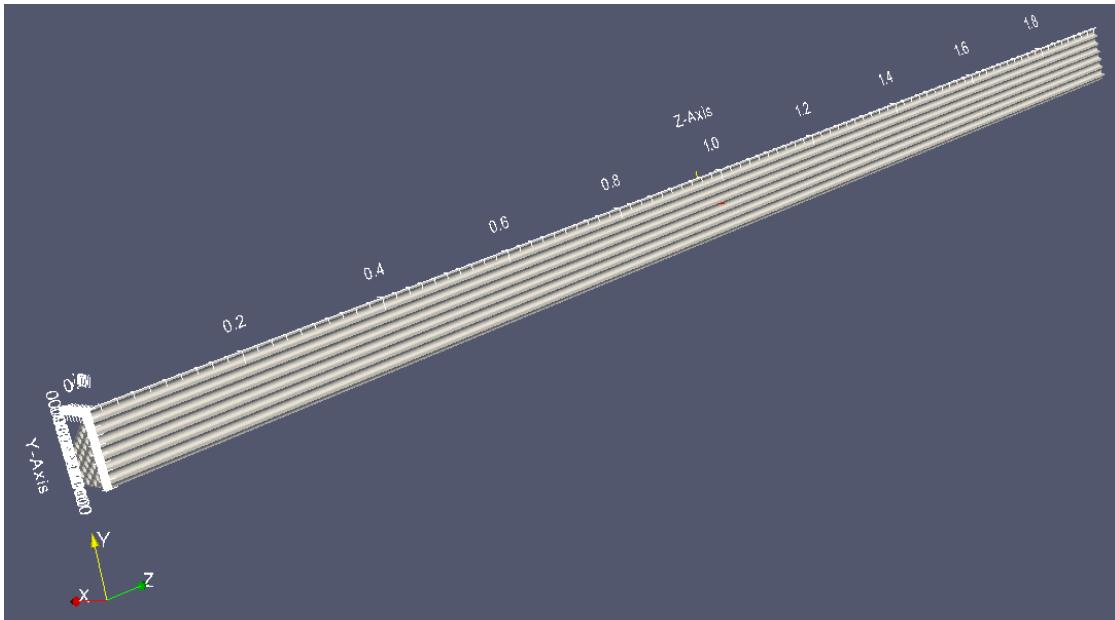


Figura 21 - Estrusione del dominio di calcolo per tutta la lunghezza del core

### 6.3.2 DEFINIZIONE DELLE CONDIZIONI AL CONTORNO

Come già anticipato nel capitolo 4 ricordiamo come i codici di calcolo numerico non facciano altro che risolvere numericamente le equazioni di bilancio del fluido su di un dominio discreto (mesh) anziché su di un dominio continuo; quindi, affinché il problema venga matematicamente determinato è necessario imporre le dovute condizioni al contorno per ogni campo preso in esame. In questa sezione ci occuperemo di definire le componenti con le opportune condizioni al contorno per i campi di velocità, pressione e temperatura all'interno del nostro dominio di calcolo.

#### 6.3.2.1 SHELL

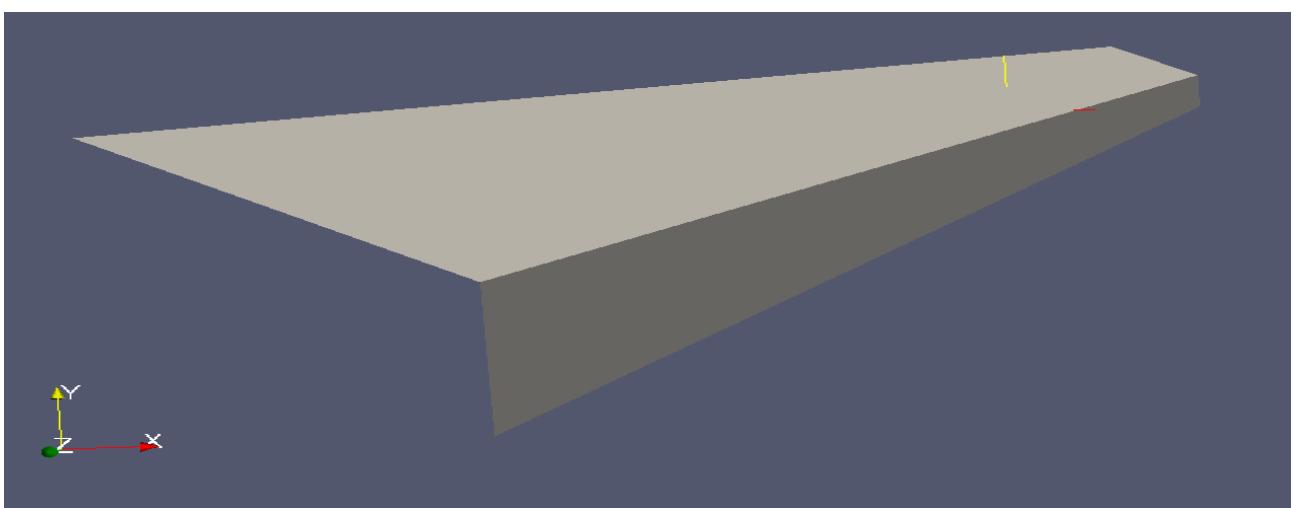


Figura 22 - Patch SHELL

La Shell ha il compito di isolare l'interno del fuel-assembly dall'esterno; dal punto di vista matematico può essere trattata come una parete adiabatica senza gradiente di pressione ortogonale alla stessa, quindi le condizioni al contorno saranno rispettivamente:

- **Pressione:** abbiamo già sottolineato che non ci sono gradienti di pressioni imposti normali alla parete tuttavia la pressione non è costante lungo l'intera lunghezza della stessa poiché è presente un battente idrostatico dovuto alla gravità; per questo motivo è stata usata la condizione al contorno:

SHELL

```
{
    type      buoyantPressure;
    rho       rhok;
}
}
```

- **Temperatura:** la shell è supposta adiabatica di conseguenza in accordo con la legge di Fourier il gradiente di temperatura attraverso la parete è nullo per questo viene usata la condizione al contorno

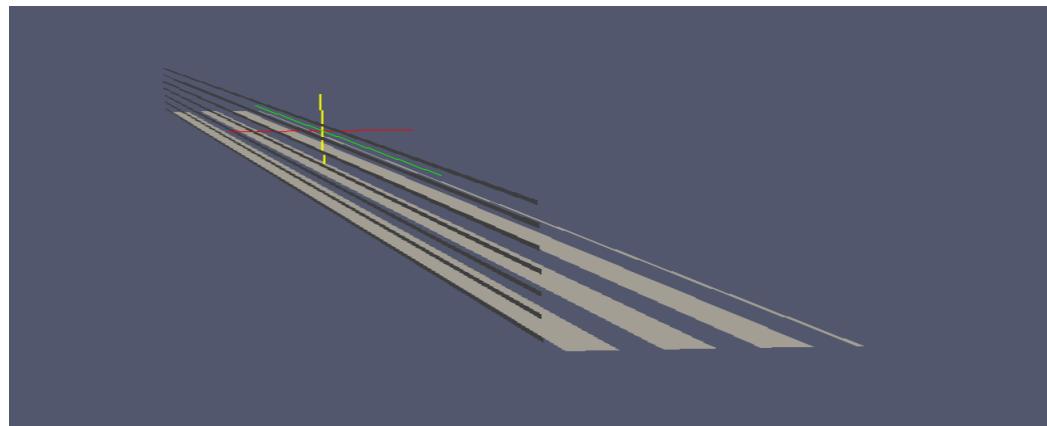
SHELL

```
{
    type      zeroGradient;
}
}
```

**Velocità:** come per ogni interazione di una parete solida con un fluido viscoso bisogna imporre la no-slip condition tramite la condizione al contorno

SHELL

```
{
    type      fixedValue;
    value     uniform (0 0 0);
}
}
```

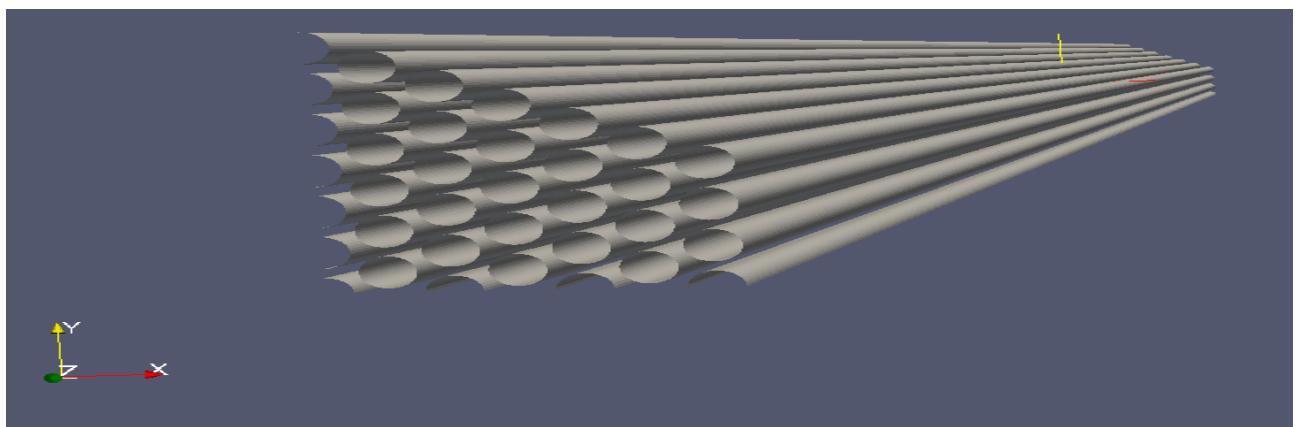
**6.3.2.2 PIANI DI SIMMETRIA:****Figura 23 - Patch SYMMETRY PLANES**

Precedentemente avevamo già anticipato come la particolare geometria del problema preso in esame permetta di semplificare notevolmente il problema stesso sia dal punto di vista geometrico che computazionale sfruttando una sua naturale simmetria e cioè considerando solamente un quarto dell' esagono e non nella sua interezza; per queste evenienze i codici di calcolo CFD hanno una condizione al contorno ad hoc cioè :

GENERIC PATCH

```
{  
    type      symmetryPlane;  
}
```

### 6.3.2.3 PIN:



**Figura 24 - Patch PIN**

I pin costituiscono il “cuore” del reattore cioè è dove le reazioni di fissione hanno luogo producendo il flusso termico che verrà poi asportato dal core per essere utilizzato , in questo caso, da un impianto a vapore. Dal punto di vista matematico per quanto riguarda velocità e pressione i pin si comportano esattamente come la shell cioè come una parete solida e di conseguenza saranno impostate le stesse condizioni al contorno:

- **Pressione:** come nel caso della shell per tutta la lunghezza dei pin è presente il battente idrostatico causato dalla presenza della forza di gravità e dal fatto che il fuel assembly è disposto verticalmente.

PIN

```
{
    type      buoyantPressure;
    rho       rhok;
}
```

- **Velocità:**

PIN

```
{
    type      fixedValue;
    value     uniform (0 0 0);

}
```

- **Temperatura:** per quanto riguarda la temperatura esendo presente un flusso termico imposto si posso seguire due strade:

1. la prima è quella di calcolare il gradiente di temperatura utilizzando la legge Fourier ed applicando la condizione

```

    type          fixedGradient;
    gradient     uniform (scalare);
```

2. La seconda strada è quella di utilizzare una condizione al contorno derivata presente nelle librerie di OpenFOAM nella quale viene specificata direttamente l'entità del flusso termico insieme ad alcune proprietà termofisiche del fluido utilizzato:

PIN\_BULK

```
{
    type      turbulentHeatFluxTemperature;
    heatSource flux;
    q         uniform (scalar value);
    alphaEff  alphaEff;
    Cp        uniform (scalarvalue);
    value     uniform (scalarvalue) ;
}
```

#### 6.3.2.4 INLET ED OUTLET

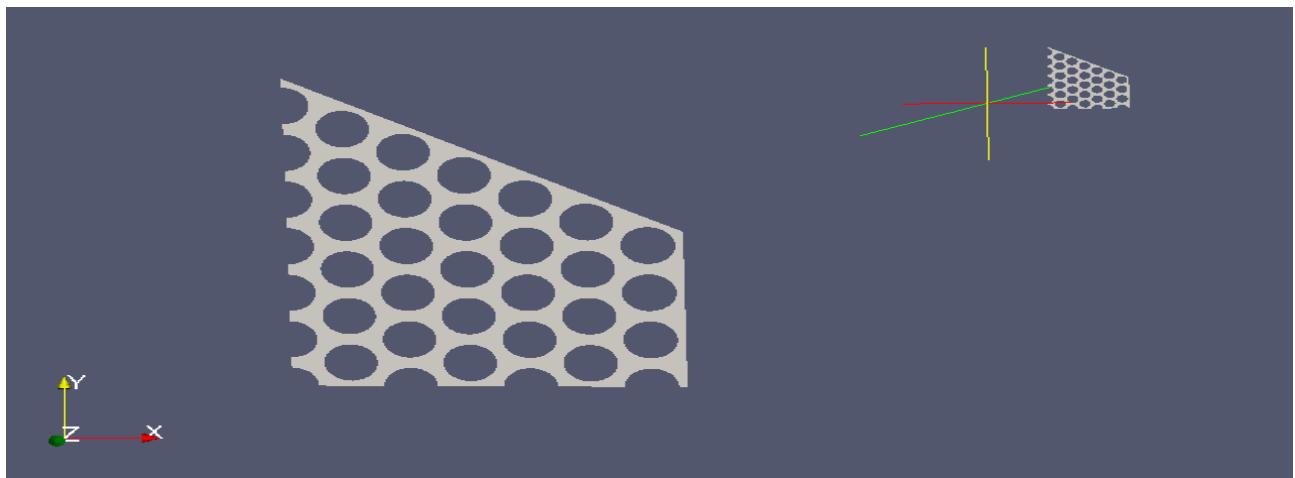


Figura 25 - Patch INLET e OUTLET

L'inlet ed l'outlet sono le due zone della mesh attraverso cui il flusso viene immesso nel sistema (inlet) e smaltito dal sistema stesso (outlet); in corrispondenza dell'inlet e dell'outlet solitamente si impostano condizioni al contorno che possono essere sia del tipo Neumann che Dirichlet (ricordiamo che la condizione al contorno di Neumann consiste nell'imporre il valore del gradiente del campo normale al contorno mentre quelle di Dirichlet consistono nell'imporre il valore del campo stesso)

**Outlet:** in corrispondenza dell'outlet si aggiunge inoltre l'ipotesi di flusso completamente sviluppato e quindi le grandezze come velocità e temperatura non varieranno nell'attraversamento di quest'ultimo.

- **Velocità:**

```
OUTLET
{
    type      zeroGradient;
}
```

- **Pressione:** in corrispondenza dell'outlet è stata imposta la pressione di esercizio quindi:

```
OUTLET
```

```
{
    type      fixedValue;
    value      uniform (scalare);
}
```

- **Temperatura:**

OUTLET

```
{
    type      zeroGradient;
}
```

**INLET:** come già anticipato in corrispondenza dell'inlet sarà posta una condizione al contorno in funzione del tempo per la velocità.

- **Velocità:** nelle librerie di OpenFOAM è presente la seguente condizione al contorno in grado di impostare un valore prefissato della velocità:

INLET

```
{
    type      fixedValue;
    value      uniform(Ux,Uy,Uz);
}
```

- **Pressione:**

INLET

```
{
    type      zeroGradient;
}
```

- **Temperatura:** per la temperatura si impone un valore fisso per l'immissione del fluido nel dominio:

INLET

```
{
    type      fixedValue;
    value     uniform (scalare);
}
```

#### 6.3.2.5 CONDIZIONI INIZIALI

Infine dopo aver esaminato le condizioni ai bordi necessarie per la definizione matematica del problema ricordiamo come nelle equazioni di bilancio analizzate nel secondo capitolo siano presenti oltre alle derivate spaziali anche una derivata temporale al primo ordine; la presenza di quest'ultima rende necessaria l'aggiunta di una condizione iniziale da cui il codice partirà per ottenere gli istanti successivi. La condizione iniziale viene imposta all'interno dell'intero dominio fluido e non ai bordi tramite il comando (in questo caso consideriamo la velocità ma il ragionamento vale per qualunque campo analizzato):

```
{
    dimensions [0 1 -1 0 0 0];
    internalField uniform (grandezza vettoriale o scalare);
}
```

Infine si vuole sottolineare che dal punto di vista puramente matematico l'imposizione di una condizione iniziale si rende necessaria solamente se si intende compiere un'analisi che comprenda dei transitori. Nel caso di un analisi stazionario al contrario; sempre in via teorica , sarebbe possibile fornire al codice una qualunque condizione iniziale da cui partire per raggiungere la convergenza; tuttavia, anche nel caso stazionario, fornire una condizione iniziale che si avvicina il più possibile al risultato finale è consigliabile sia per ridurre il tempo di calcolo che diminuire le possibili oscillazioni numeriche dei valori nei primi istanti della simulazione.

## Bibliografia

[6-1] *The ALFRED project on Lead-cooled Fast Reactor Alessandro Alemberti Nuclear Science Development Manager*

[6-2] *WP2 Task 2.4-ALFRED CORE Fuel Assembly*

**CAPITOLO 7****7.1 ANALISI TERMOFLUIDODINAMICA FUEL-ASSEMBLY ALFRED**

Nel capitolo precedente è stato mostrato come implementare in OpenFOAM una simulazione CFD settando le condizioni iniziali, le condizioni al contorno, le proprietà termo-fisiche del fluido in esame, la scelta del modello di turbolenza, la definizione degli schemi numerici, la scelta dei solver , delle tolleranze e del numero massimo di iterazioni.

Quindi in questo capitolo ci occuperemo di compiere un ulteriore passo in avanti implementando in OpenFOAM le simulazioni complete sia degli aspetti fluidodinamici che termici, in particolar modo sarà eseguita una simulazione con acqua al fine di verificare l'attendibilità del codice per un fluido noto.

Successivamente verranno svolte una serie di simulazioni con i metalli liquidi lasciando invariate geometria, raffinatezza della griglia, condizione al contorno e solutore mentre saranno testati quattro diversi modelli di turbolenza RANS.

**7.1.1 SCELTA DEL SOLUTORE PIÙ APPROPRIATO**

Lo studio portato avanti prevede l'utilizzo dei metalli liquidi come refrigerante del core di un reattore a fissione di quarta generazione quindi ,come già anticipato, i fenomeni fisici maggiormente indagati hanno a che fare con lo scambio termico parete fluido. I fluidi da noi analizzati tuttavia presentano valori del modulo di comprimibilità ( $E = \frac{dp}{d\rho}$ ) estremamente elevati (nell'ordine della decina di GPa).

Ciò sta ad indicare come per variazioni limitate di pressione corrispondano variazioni della densità praticamente trascurabili e quindi non si commette un errore apprezzabile a considerare la densità del fluido costante.

**7.1.1.1 APPROXIMAZIONE BOUSSINESQ**

Anche se la densità non varia al variare della pressione essa può (in forma del tutto generale) essere espressa come:

$$\rho = \rho(p, T)$$

Quindi dobbiamo considerare quelle legate alle variazioni di temperatura. Le condizioni appena introdotte prendono il nome di ipotesi di Boussinesq: nel caso in cui le variazioni di densità siano limitate tali ipotesi introduco nell'equazione della quantità di moto un termine sorgente nella forma:

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = \beta(T - T_0)$$

dove  $\beta$  è il valore del modulo di dilatazione termica (bulk) del fluido in esame.

#### 7.1.1.2 ANALISI STAZIONARIA : ALGORITMO SIMPLE

A causa dell'onerosità del calcolo eseguiremo in questa sede un'analisi stazionaria: per risolvere il sistema di equazioni differenziali in condizioni stazionarie nei codici CFD (ed in particolar modo all'intero delle librerie di OpenFOAM è stato implementato l'algoritmo SIMPLE ovvero **Semi-Implicit-Method-for Pressure-Linked-Equation** che si articola nei seguenti passi:

1. Definizione delle condizioni al contorno leggendo i file contenuti nella cartella 0
2. Risoluzione dell'equazione della quantità di moto per calcolare i valori intermedi del campo di velocità
3. Calcolo del flusso in massa attraverso le celle della griglia
4. Risoluzione dell'equazione della pressione
5. Correzione del flusso attraverso le facce delle celle
6. Correzione della velocità sulla base del nuovo campo di pressione
7. Risoluzione di tutte le altre equazioni di trasporto incluse nel modello
8. Si è giunti a convergenza ? Se sì l'algoritmo si ferma. Se no ripete i passi precedentemente elencati a partire dal punto 2

Quindi ricapitolando le ipotesi fino a qui elencate:

- Flusso incompressibile, uniche variazioni di densità dovute ai gradienti di temperatura
- Flusso stazionario, algoritmo SIMPLE.

La scelta del solutore più appropriato per il nostro problema ricade su :

**buoyantBoussimesqSimpleFoam** il quale contiene il modello fisico per flussi con scambio termico in regime stazionario nei quali è presente il fenomeno del galleggiamento (trattato con l'ipotesi di Boussinesq) e risolve il set completo delle equazioni di governo tramite l'algoritmo SIMPLE. (Un'analisi più approfondita del solutore è presente in appendice E)

### 7.1.1.3 PSEUDO TRANSITORIO

Precedentemente abbiamo spiegato che la nostra analisi sarà fatta mediante un solutore che utilizza l'algoritmo SIMPLE ed è quindi a tutti gli effetti un'analisi in regime stazionario; tuttavia nel settaggio dei parametri di controllo all'interno del file controlDict viene richiesto di settare il tempo iniziale e finale nonché il time step, questo non viene fatto con l'intento di un calcolo transitorio ma solamente per dare al codice dei valori di primo tentativo (**NON** condizioni iniziali) da cui partire per giungere alla soluzione stazionaria.

### 7.1.1.4 SCELTA DELLA TECNICA DI SIMULAZIONE DELLA TURBOLENZA

Come spiegato nel secondo capitolo esistono tre diverse tecniche per simulare i flussi turbolenti la DNS cioè simulazione numerica diretta , la LES simulazione a grandi vortici ed infine la RANS ce si basa sulla media temporale delle equazioni di Navier-Stokes. Ricordiamo inoltre che ci siamo posti come obiettivo della tesi quello di testare le potenzialità di OpenFOAM nel simulare un problema di interesse pratico; quindi ci interessiamo principalmente alle proprietà medie del flusso (perdite di carico, differenze di temperatura fra ingresso ed uscita ...ecc ecc) per cui si è scelto di affrontare la turbolenza mediante le tecniche RANS sicuramente meno accurate delle altre due ma che come già anticipato forniscono risultati in tempi minori e più facili da implementare.

### 7.1.2 FORMULE E CORRELAZIONI IMPIEGATE PER IL CALCOLO PRELIMINARE

Al fine di verificare che i risultati del software siano fisicamente accettabili sono stati calcolati preliminarmente i valori di due grandezze rilevanti del flusso:

Per calcolare le perdite di carico è stata impiegata la correlazione di Colebrook per tubi lisci:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1.8 \log \frac{6.9}{Re} \quad (7.1)$$

Calcolando il numero di Reynolds usano come lunghezza caratteristica il diametro idraulico

$$D_{idraulico} = \frac{4A_{passaggio}}{P_{bagnato}} \quad (7.2)$$

Successivamente è calcolato la perdita di carico mediante la formula

$$\Delta p_{loss} = \rho f \frac{L}{D_{eq}} \frac{U^2}{2} \quad (7.3)$$

Per calcolare la differenza di temperatura ingresso uscita si ci è serviti del primo principio della termodinamica eseguendo un bilancio energetico sul volume di controllo individuato dal fuel assembly

$$\dot{Q} = \dot{m} c_p \Delta T \quad (7.5)$$

## 7.2 PRIMA SIMULAZIONE CON H<sub>2</sub>O

Si tiene a sottolineare che la simulazione con acqua è stata svolta solo per verificare il comportamento del software con un fluido standard estremamente utilizzato ma che l'utilizzo dell'acqua come refrigerante non è una soluzione tecnologicamente fattibile per un reattore nucleare di questa tipologia.

Riportiamo nella Tab. 1 le proprietà dell'acqua a 155 bar e 300 gradi Celsius

**Tabella 1 - proprietà dell'acqua**

	Viscosità dinamica [kg/m/s]	Viscosità cinematica [m <sup>2</sup> /s]	Densità [kg/m <sup>3</sup> ]	$\beta$ [K <sup>-1</sup> ]	Numero di Prandtl	Calore specifico [J/kg/K]
ACQUA	$9,01 \cdot 10^{-5}$	$1,24 \cdot 10^{-7}$	727	$2.1 \cdot 10^{-4}$	1	4186

In Tab.2 sono inoltre riportate le condizioni iniziali ed al contorno da applicare al problem

**Tabella 2 - Condizioni iniziali ed al contorno**

	T <sub>inlet</sub> [°C]	Flusso termico specifico [kW/m <sup>2</sup> ]	Pressione esercizio [bar]	U <sub>inlet</sub> [m/s]
ACQUA	300	205	155	4

Al fine di capire se la simulazione abbia dato valori fisicamente accettabili ( almeno come ordine di grandezza ) sono stati calcolati per via teorica ( utilizzando note correlazioni ) alcuni valori di alcune variabili di interesse per esempio:

- La temperatura di uscita del fluido facendo un banale bilancio energetico di primo principio
- Le perdite di carico che il fluido subisce nell'attraversamento del condotto
- Il battente idrostatico dovuto al fatto che fuel assembly è in posizione verticale

Si sono ottenuti i seguenti risultati:

**Tabella 3 - Risultati teorici acqua**

ACQUA	$T_{outlet}$ [°C]	$\Delta p_{loss}$ [bar]	$\Delta p_{idro}$ [bar]
Valori teorici	320	0.12	0.14

#### 7.2.1 ESECUZIONE DELLE SIMULAZIONI

Nell'esecuzione delle simulazioni è stata seguita la seguente strategia:

- Come prima cosa è stata eseguita una simulazione su di una griglia di primo tentativo in seguito sono stati analizzati i risultati per vedere di quanto si discostano dai valori teorici , in particolar modo è stata posta molta attenzione al valore di  $y^+$  che per la corretta applicazioni delle funzioni di parete deve mantenersi in un valore tra 20 e 300
- Successivamente dopo la prima simulazione la griglia è stata raffinata nelle parti più critiche del dominio; cioè le pareti solide dei pin e la shell per poi rieseguire la simulazione.

#### Risultati prima simulazione

La prima simulazione ha fornito i seguenti risultati:

**Tabella 4 - risultati prima simulazione**

ACQUA	$T_{outlet}$ [°C]	$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	$T_{max}$ [°C]	$\Delta p$ [bar]	$Y^+$ medio
Valori calcolati	307	7	800	0.2	580

Quindi possiamo effettuare un primo confronto con i dati calcolati per via delle correlazioni

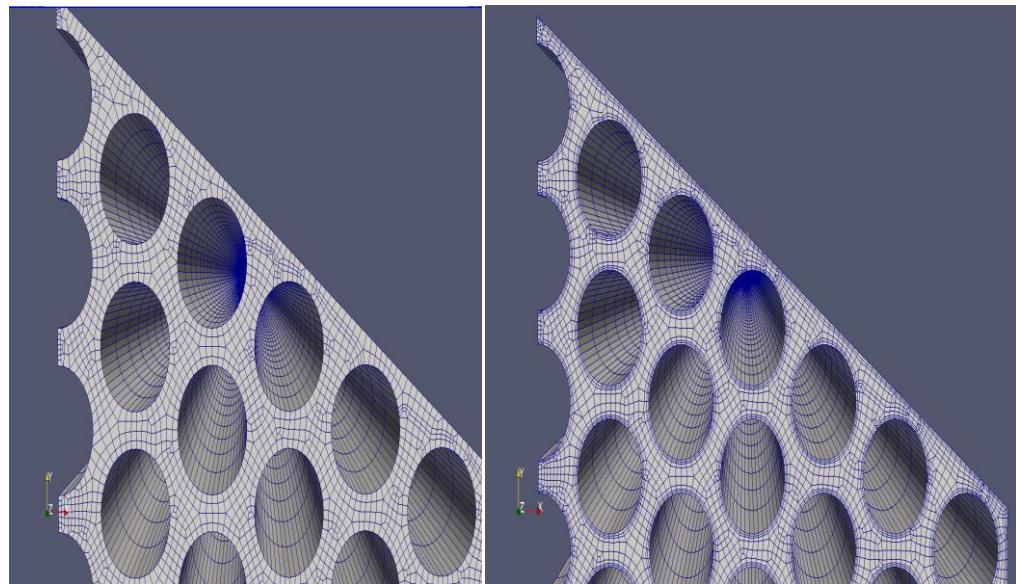
**Tabella 5 - Confronto risultati teorici valori calcolati**

	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{outlet} - T_{inlet}$ [°C]	7	20	65
$\Delta p$ [bar]	0.2	0.26	23

Quindi si può constatare come la griglia di primo tentativo sia del tutto inadeguata per ottenere una descrizione fisica realistica del problema infatti i risultati computazionali presentano errori relativi rispetto ai valori teorici molto elevati; inoltre il valore di  $y^+$  medio calcolato in corrispondenza delle pareti è al di sopra del limite di accettabilità per le applicazioni delle funzioni di parete.

La griglia di calcolo necessita di essere raffinata:

Riportiamo due immagini della griglia prima e dopo essere stata raffinata, si tiene a sottolineare come il raffinamento sia avvenuto in prossimità delle pareti (pin e shell) dove si concentrano i fenomeni di strato limite e di trasporto convettivo.



**Figura 26 - Griglia prima essere raffinata  
raffinamento in prossimità delle pareti**

**Figura 27 : Griglia dopo il raffinamento**

### 7.3 SECONDA SIMULAZIONE CON H<sub>2</sub>O

Dopo aver opportunamente raffinato la griglia di calcolo per cercare di ridurre le risorse computazionali è possibile tramite l'utility –mapFields- interpolare la soluzione calcolata nella prima simulazione sulla griglia raffinata e quindi utilizzarla come punto di partenza per la seconda simulazione.

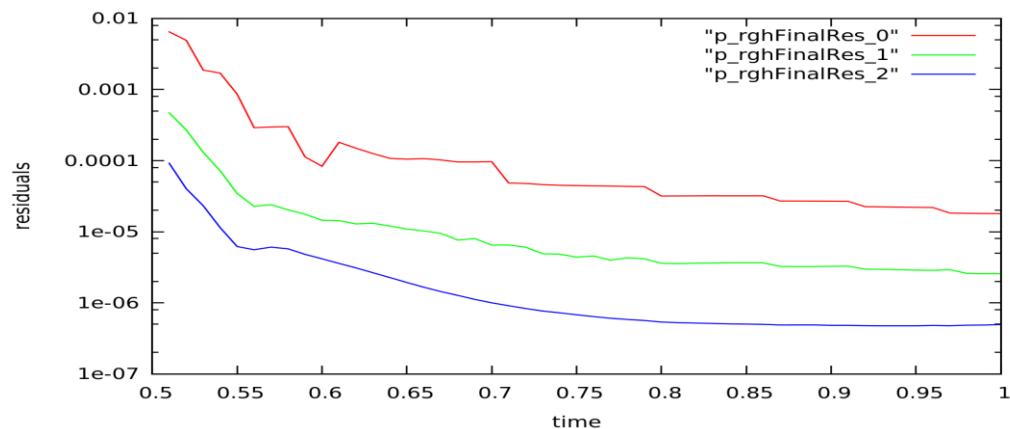


Figura 28 : Residui loop di correzione della pressione

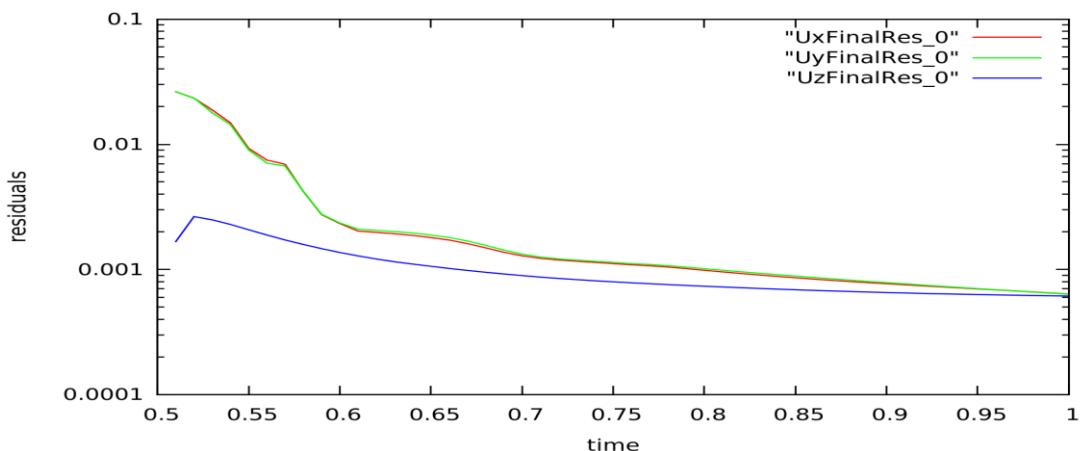
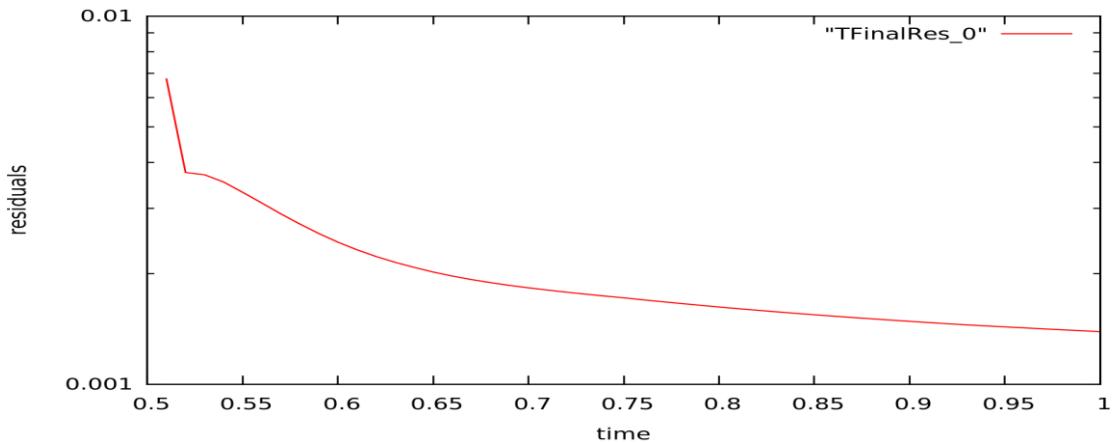
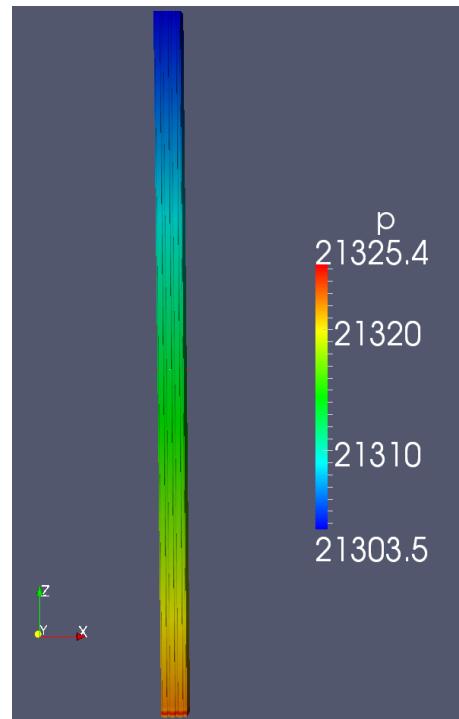


Figura 29 : Residui componenti cartesiane della velocità



**Figura 30 : Residui campo di Temperatura**

Riportiamo inoltre nelle figure successive alcune immagini dei campi di velocità temperatura e pressione



**Figura 31 : Campo di pressione lungo il fuel assembly (si ricorda che il campo di pressione è scalato rispetto alla densità) quindi per ottenere il valore in Pa è necessario moltiplicare il valore riportato per la densità**

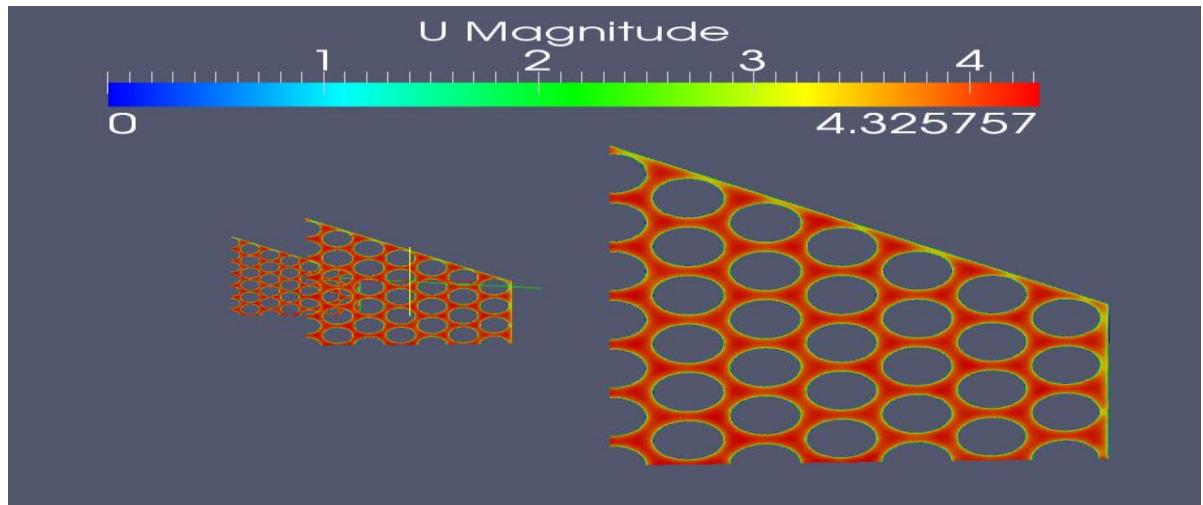


Figura 32 : Sezioni del campo di velocità lungo la coordinata z del fuel-assembly

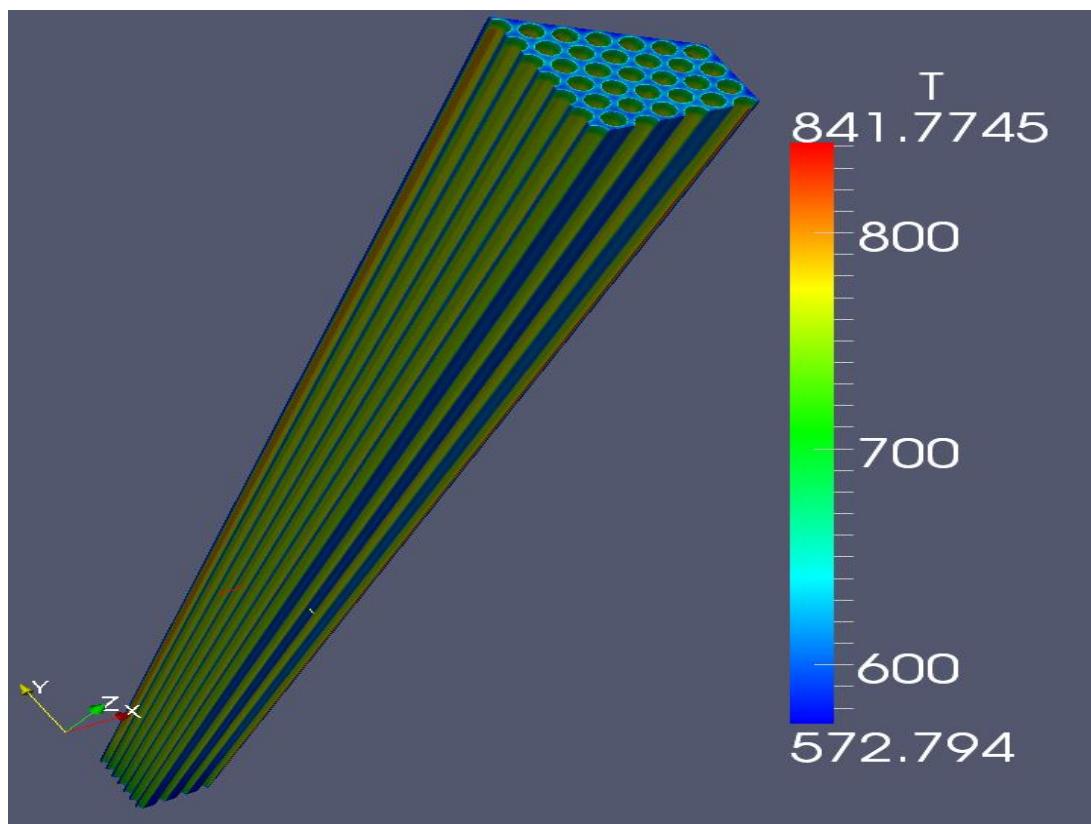
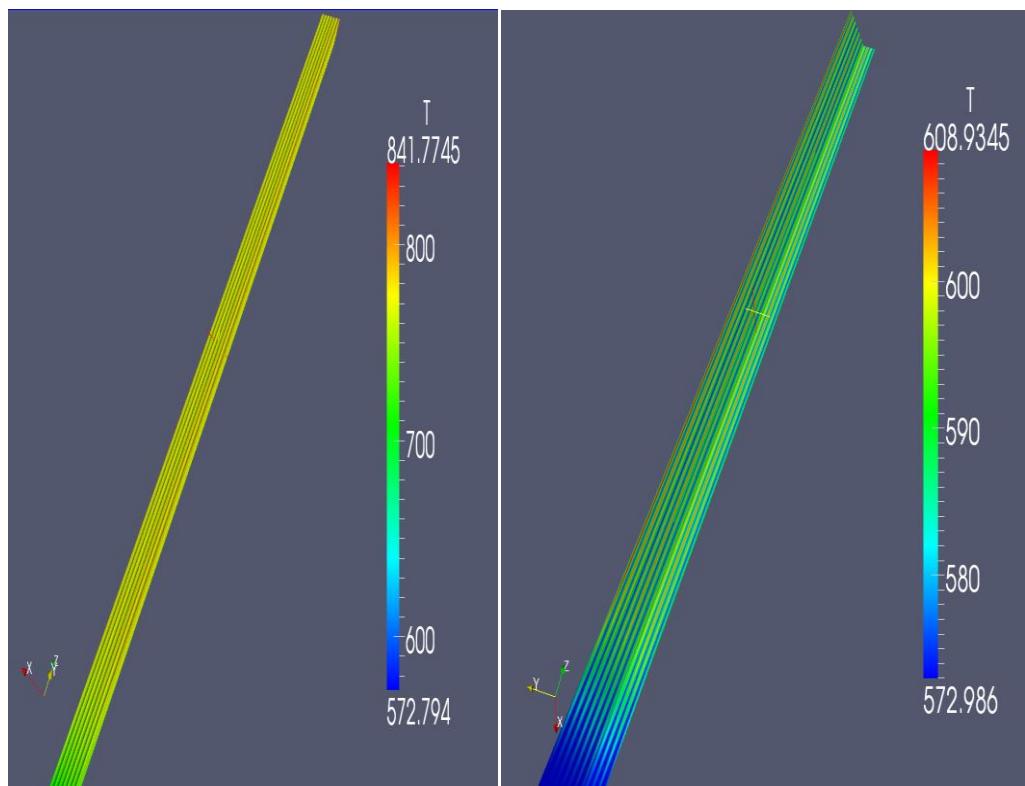


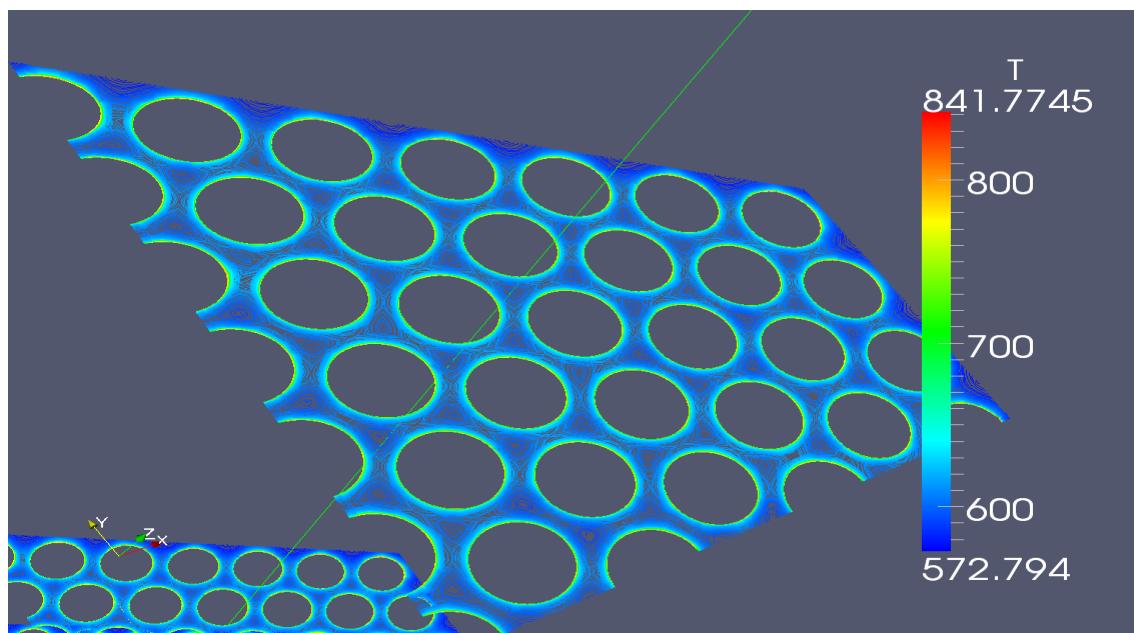
Figura 33 : Campo di temperatura

All'interno di Paraview è inoltre possibile isolare una PATCH specifica al fine di analizzarla più nel dettaglio, riportiamo in (fig. 34) e (fig. 35) i campi di temperatura sulla shell e sui pin isolati dall'intero dominio



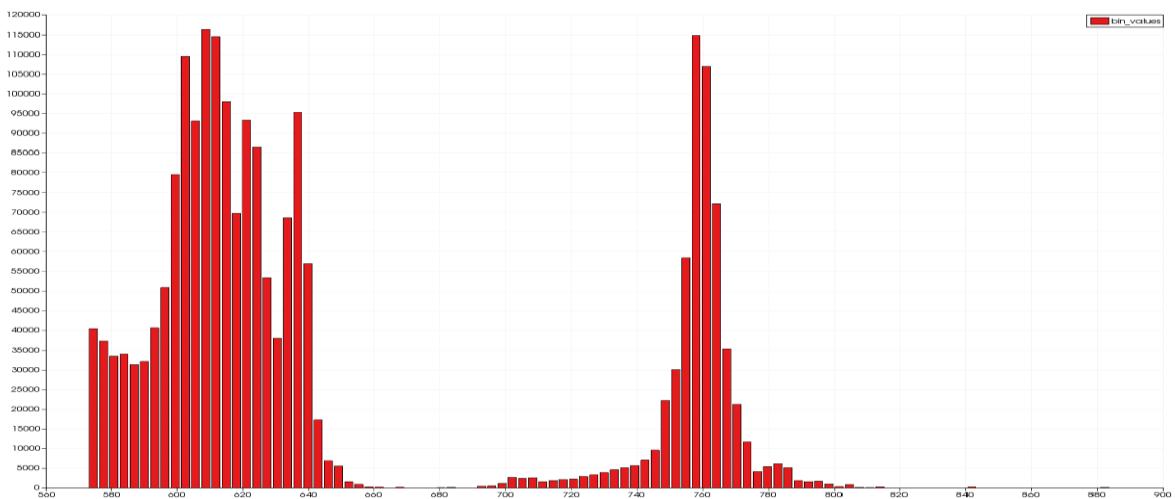
**Figura 34 - Temperatura lungo i PIN  
la SHELL**

**Figura 35 - Temperatura lungo**



**Figura 36 - Andamento delle isoterme in una sezione retta del fuel assembly**

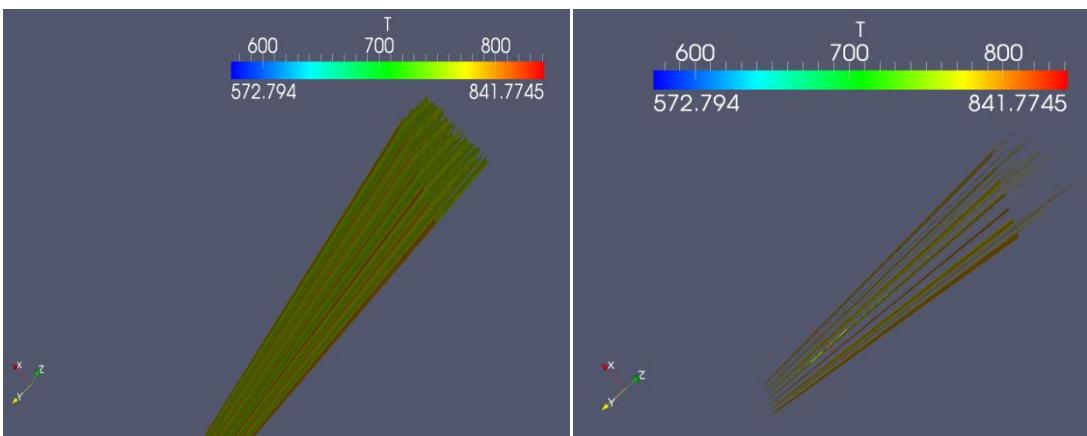
Sempre all'interno del pacchetto Paraview è possibile creare un istogramma in cui in ascisse viene visualizzato il valore della temperatura (in gradi kelvin) ed in ordinate il numero di celle del dominio di calcolo nelle quale viene calcolata una determinata temperatura (fig. 37)



**Figura 37 - Istogramma rappresentante il numero di celle che presentano il valore di temperatura riportato in ascisse**

Dalla fig 37 si possa vedere come un grande numero di celle presentino una temperatura compresa nell'intervallo tra i 600 ed i 630 gradi K ed un'altro gruppo (anche se meno cospicuo del precedente) presenti temperatura intorno ai 760 K:

Grazie alla funzione Threshold è possibile isolare dall'intero dominio una parte di esso in base all'intervallo di valori assegnati ad un parametro (velocità, temperatura, pressione, etc). Nel nostro caso siamo interessati ad isolare le celle nelle quali la temperatura è superiore a 750 K fig 38 e superiore a 770 K fig. 39



**Figura 38 - Celle del dominio in cui  $T>750$  K (a destra) e zone del dominio in cui  $T>770$ K (a sinistra)**

Si può osservare come la zona interessata sia quella dei pin , superficie sulla quale avviene lo scambio termico; questo risultato conferma l'attendibilità della simulazione in quanto lo scambio termico all'interno dell'acqua è limitato , questo causa la comparsa di punti caldi all'interno del dominio fluido.

### Risultati

La seconda simulazione eseguita con H<sub>2</sub>O ha impiegato per giungere a convergenza 103 minuti ed ha fornito i seguenti risultati

**Tabella 6 - Valori calcolati numericamente**

ACQUA	T <sub>outlet</sub> [°C]	T <sub>outlet-T<sub>inlet</sub></sub> [°C]	T <sub>max</sub> [°C]	Δp [bar]	Y <sup>+</sup> medio
Valori calcolati	322	22	568	0.25	135

Possiamo quindi come in precedenza effettuare un confronto tra i valori calcolati dal software e quelli ottenuti mediante le correlazioni

**Tabella 7 - Confronto risultati teorici - risultati calcolati**

	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
T <sub>outlet-T<sub>inlet</sub></sub> [°C]	22	20	9
Δp [bar]	0.25	0.26	4

Quindi si può osservare come il raffinamento della griglia di calcolo abbia portato a risultati molto simili a quelli ottenuti con le correlazioni ed a un valore di y<sup>+</sup> che rientra ampiamente nei limiti prefissati per l'applicazione funzioni di parete.

## 7.4 SIMULAZIONI CON METALLI LIQUIDI

Dopo un simulazione preliminare con l'acqua nella quale ci siamo accertati che il cosi cedi calcolo risponde in maniera positiva fornendo risultati in accordo con i valori che corrispondono con quelli ricavati da correlazioni sperimentali entriamo nel cuore di questa tesi ed andiamo ad indagare come il codice si comporta nel caso di flussi con metalli liquidi.

In particolare in questa sede ci occuperemo di indagare quale dei modelli di turbolenza presenti nelle librerie di OpenFOAM meglio si presta a modellare le proprietà di un fluido così particolare.

### Proprietà termo fisiche

Riportiamo in tab. (8) le proprietà termo fisiche del Pb e del Na alla temperatura di 400 gradi Celsius e la pressione di 1 bar

**Tabella 8 - proprietà termofisiche del Sodio e del Piombo**

	Viscosità dinamica [kg/m/s]	Viscosità cinematica [m <sup>2</sup> /s]	Densità [kg/m <sup>3</sup> ]	$\beta$ [K <sup>-1</sup> ]	Numero di Prandtl	Calore specifico [J/kg/K]
SODIO	$2.7 \cdot 10^{-4}$	$3.14 \cdot 10^{-7}$	856	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$	1280
PIOMBO	$2.23 \cdot 10^{-3}$	$2.11 \cdot 10^{-6}$	10563	$1.13 \cdot 10^{-4}$	$1.94 \cdot 10^{-2}$	148

Riportiamo in Tab. 9 le condizioni iniziali ed al contorno che verranno applicate alle simulazioni con i metalli liquidi.

**Tabella 9 - Condizioni iniziali ed al contorno per le simulazioni con i metalli liquidi**

	T <sub>inlet</sub> [K]	Flusso termico specifico [kW/m <sup>2</sup> ]	Pressione esercizio [bar]	U <sub>inlet</sub> [m/s]
SODIO	400	205	1	2
PIOMBO	400	205	1	1.4

Come già illustrato in precedenza al fine di verificare l'attendibilità della soluzione sono state calcolate per via teorica i valori delle perdite di carico per attrito del battente idrostatico e della temperatura del fluido all'uscita del fuel-assembly; ottenendo i seguenti risultati:

**Tabella 10 - Risultati teorici**

Valori Teorici	T <sub>outlet</sub> [°C]	Δp <sub>loss</sub> [bar]	Δp <sub>idro</sub> [bar]
SODIO	470	0.15	0.2
PIOMBO	480	1,4	2

A questo punto a parità di condizioni iniziali , al contorno ed utilizzando la stessa griglia di calcolo sono state svolte quattro differenti simulazioni utilizzando quattro modelli di turbolenza tra i maggiormente diffusi per le simulazioni RANS.

### 7.4.1 MODELLO K-E

Come già parzialmente anticipato il modello k- $\epsilon$  si propone di modellare la turbolenza aggiungendo al modello matematico due equazioni di trasporto: una che descrive l'evoluzione dell'energia cinetica turbolenta delle fluttuazioni e l'altra che descrive l'evoluzione del tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - \rho \epsilon$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \epsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$$

In cui;

- $E_{ij}$  rappresenta la parte simmetrica del gradiente di velocità
- $\mu_T$  rappresenta la viscosità turbolenta definita come  $\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$
- $\sigma_k=1.00$   $\sigma_\epsilon=1.30$   $C_{1\epsilon}=1.44$   $C_{2\epsilon}=1.92$   $C_\mu=0.09$  sono costanti che devono essere settate opportunamente

Il modello k- $\epsilon$  nonostante sia quello maggiormente applicato tra quelli a due equazioni presenta i seguenti inconvenienti:

- difficoltà di implementazione a causa della necessità di una attenta calibrazione dei coefficienti
- può richiedere correzioni all'interno dello stato limite
- completa inadeguatezza nel simulare flussi con gradienti di pressione contrari

#### 7.4.1.1RISULTATI MODELLO K-E

Riportiamo nelle tabelle seguenti i risultati calcolati della simulazione eseguita con il modello di turbolenza k- $\epsilon$ ; il calcolo è giunto a convergenza in un tempo di circa 100 minuti per l'Na e 145 per il Pb; tuttavia il modello non ha dato risultati soddisfacenti

**Tabella 11 - Risultati modello k- $\epsilon$**

Valori calcolati	T <sub>outlet</sub> [°C]	T <sub>outlet</sub> -T <sub>inlet</sub> [°C]	T <sub>max</sub> [°C]	Δp [bar]	Y <sup>+</sup> medio
Sodio	407	7	410	0.23	55
Piombo	441	41	477	6	30

**Tabella 12 - Confronto risultati teorici-calcolati per il Sodio**

Sodio	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{\text{outlet}} - T_{\text{inlet}}$ [°C]	7	70	90
$\Delta p$ [bar]	0.23	0.35	34

**Tabella 13 - Confronto risultati teorici-calcolati per il Piombo**

Piombo	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{\text{outlet}} - T_{\text{inlet}}$ [°C]	41	80	50
$\Delta p$ [bar]	5.8	3.2	45

Quindi possiamo affermare che il modello k- $\epsilon$  standard presente nelle librerie di OpenFOAM si dimostra inadeguato a modellare il problema da noi preso in esame

#### 7.4.2 RNG K-E

Il modello RNG k- $\epsilon$  è stato ricavato mediante la complessa tecnica dei gruppi di rinormalizzazione applicata al modello k- $\epsilon$  standard, matematicamente è simile al modello k- $\epsilon$  tuttavia risulta più completo per la presenza delle seguenti migliorie:

- aggiunta di un termine addizionale nell'equazione per epsilon che ne migliora l'accuratezza per flussi rapidamente forzati
- inclusione dell'effetto del movimento vorticoso sulla turbolenza migliorandone l'accuratezza per flussi vorticosi
- Esistenza di una formula per il calcolo (per via teorica) del numero di Prandtl turbolento (nel modello k-epsilon standard questo valore veniva introdotto dall'utente)
- Estensione della validità del modello fino a valori di Re più bassi

Le principali equazioni del modello RNG k- $\epsilon$  sono le seguenti:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - \rho \epsilon$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\epsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - C_{2\epsilon}^* \rho \frac{\epsilon^2}{k}$$

Dove

$$C_{2\epsilon}^* = C_{2\epsilon} + \frac{C_\mu n^3 (1 - \frac{n}{n_0})}{1 + \beta n^3}$$

$$n = \frac{Sk}{\epsilon}$$

$$S = \sqrt{2E_{ij}E_{ij}}$$

E' interessante notare che nel modello RNG  $k-\epsilon$  siano presenti 7 costanti di cui solo una "β" debba essere ricavata sperimentalmente (contro le 5 del modello  $k-\epsilon$  standard)

#### 7.4.2.11 RISULTATI MODELLO RNG

Riportiamo nelle tabelle seguenti i risultati ottenuti con il modello RNG  $k-\epsilon$ ; dal punto di vista del tempo di calcolo le simulazioni presentano risultati analoghi a quelle eseguite con il  $k-\epsilon$  tuttavia anche in questo caso il modello si dimostra inadeguato a descrivere lo scambio termico (analogamente al  $k-\epsilon$ )

**Tabella 14 - Risultati modello RNG  $k-\epsilon$**

Valori calcolati	$T_{outlet}$ [°C]	$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	$T_{max}$ [°C]	$\Delta p$ [bar]	$Y^+$ medio
Sodio	407	7	427	0.2	53
Piombo	442	42	477	13.6	27

**Tabella 15 - Confronto risultati teorico-calcolati per il Sodio**

Sodio	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	7	70	90
$\Delta p$ [bar]	0.2	0.35	43

**Tabella 16 - Confronto risultati teorico calcolati con il Piombo**

Piombo	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
T <sub>outlet</sub> -T <sub>inlet</sub> [°C]	42	80	47
Δp [bar]	13.6	3.2	300

**7.4.3 MODELLO K-Ω**

Il modello k-ω è sempre un modello a due equazioni nel quale vengono modellati :

- L'evoluzione dell'energia cinetica delle fluttuazioni turbolente ( analogo al k-ε)
- Il tasso di dissipazione specifico definito come  $\omega = \frac{\epsilon}{k}$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\nu + \sigma^* \nu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \beta^* k \omega$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\nu + \sigma \nu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + \alpha \frac{\omega}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \beta \omega^2$$

$$\nu_T = \frac{k}{\omega}$$

In esso sono presenti 5 coefficienti da inserire manualmente

Rispetto al modello k-ε il modello qui illustrato presenta i seguenti vantaggi:

- A differenza del k-ε non richiede correzione nello strato limite
- Riproduce adeguatamente anche correnti soggette ad un gradiente di pressione contrario

Quindi grazie a queste due caratteristiche il modello k-omega si pone come un ottimo candidato per il nostro problema

**7.4.3.1 RISULTATI**

Dal punto di vista teorico il modello k-ω si propone come un ottimo candidato in quanto il modello non necessita correzioni nello stato limite e quindi si presta maggiormente alla descrizione dell'interazione fluido parete. Il calcolo con il modello k-ω è giunto a convergenza in 97 minuti con Na e 181 minuti con il Pb; i risultati sono riportati nelle tabelle seguenti

**Tabella 17 - Risultati k- $\omega$** 

Valori calcolati	$T_{outlet}$ [°C]	$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	$T_{max}$ [°C]	$\Delta p$ [bar]	$Y^+$ medio
Sodio	452	52	462	0.4	20
Piombo	485	85	542	3.5	10

**Tabella 18 - Confronto risultati teorico-calcolati Sodio**

Sodio	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	52	70	25
$\Delta p$ [bar]	0.4	0.35	12

**Tabella 19 - Confronto risultati teorico-calcolati Piombo**

Piombo	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{outlet}-T_{inlet}$ [°C]	85	80	5
$\Delta p$ [bar]	3.5	3.3	5.6

Le simulazioni con il modello k- $\omega$  hanno fornito ottimi risultati sia per la descrizione dello scambio termico sia per il calcolo delle perdite di carico.

#### 7.4.4 MODELLO K- $\Omega$ SST

Infine sono state implementate simulazioni utilizzando il modello di turbolenza k- $\omega$ SST; anch'esso fa parte della classe dei modelli di turbolenza a due equazioni ed in particolare si propone di cercare di integrare gli aspetti positivi del modello k- $\epsilon$  (il quale presenta un buon comportamento per i flussi lontani da parete) e quelli del k- $\omega$  (particolarmente adatto a descrivere il comportamento dello strato limite). Tuttavia il modello k- $\omega$ SST può presentare difficoltà di convergenza per l'equazione di trasporto di  $\omega$ ; questo inconveniente può essere risolto correggendo opportunamente il fattore di sottorilassamento per quest'ultima (ricordiamo che il fattore di sottorilassamento  $\alpha$  è definito come  $\varphi = \varphi_{old} + \alpha(\varphi_{new} - \varphi_{old})$ ) al prezzo di aumentare il tempo di calcolo richiesto.

#### 7.4.4.1 RISULTATI MODELLO K-ΩSST

Il modello k- $\omega$ SST si pone come ottimo candidato in quanto cerca di conciliare i vantaggi del k- $\epsilon$  e del k- $\omega$ ; tuttavia dalla letteratura si apprende che può presentare divergenza del parametro  $\omega$  [7-1] se non adeguatamente sottorilassato.

**Tabella 20 - Risultati k- $\omega$ SST (n.c. significa che il calcolo no è giunto a convergenza)**

Valori calcolati	$T_{\text{outlet}}$ [°C]	$T_{\text{outlet}}-T_{\text{inlet}}$ [°C]	$T_{\max}$ [°C]	$\Delta p$ [bar]	$Y+$ medio
Sodio	407	7	412	0.34	50
Piombo	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.

Come evidenziato nella tab. (20) la simulazione con il piombo non è giunta a convergenza; in particolar modo si è notato che dopo alcune iterazioni del solutore il valore di  $\omega$  usciva dai limiti di accettabilità impostati in input (in particolare assumeva valori negativi, cosa non possibile essendo  $\omega$  definito positivo). Un tentativo di soluzione è stato quello di sottorilassare  $\omega$  in modo che non risentisse troppo delle possibili oscillazioni numeriche iniziali, tuttavia il tentativo non ha fornito risultati positivi.

**Tabella 21 - Confronto risultati teorico-calcolati per il Sodio**

Sodio	Valore calcolato	Valore teorico	Errore percentuale %
$T_{\text{outlet}}-T_{\text{inlet}}$ [°C]	7	70	90
$\Delta p$ [bar]	0.34	0.35	3

Anche il k- $\omega$ SST non fornisce risultati positivi per il problema che stiamo analizzando in particolar modo non sembra in grado di descrivere lo scambio termico parete fluido

#### 7.4.5 CONCLUSIONI

Dopo aver svolto le simulazioni a parità di condizioni al contorno e cambiando solamente il modello di turbolenza si è giunti alla conclusione che il modello più adatto a descrivere il comportamento dei metalli liquidi sia il modello k- $\omega$

## 7.5 RISULTATI MODELLO K- $\Omega$

### 7.5.1 SODIO

La simulazione con Na ha impiegato 97 minuti per giungere a convergenza; di seguito (figure 39-40) sono riportati l'andamento dei residui di temperatura, componenti cartesiane della velocità e campo di temperatura.

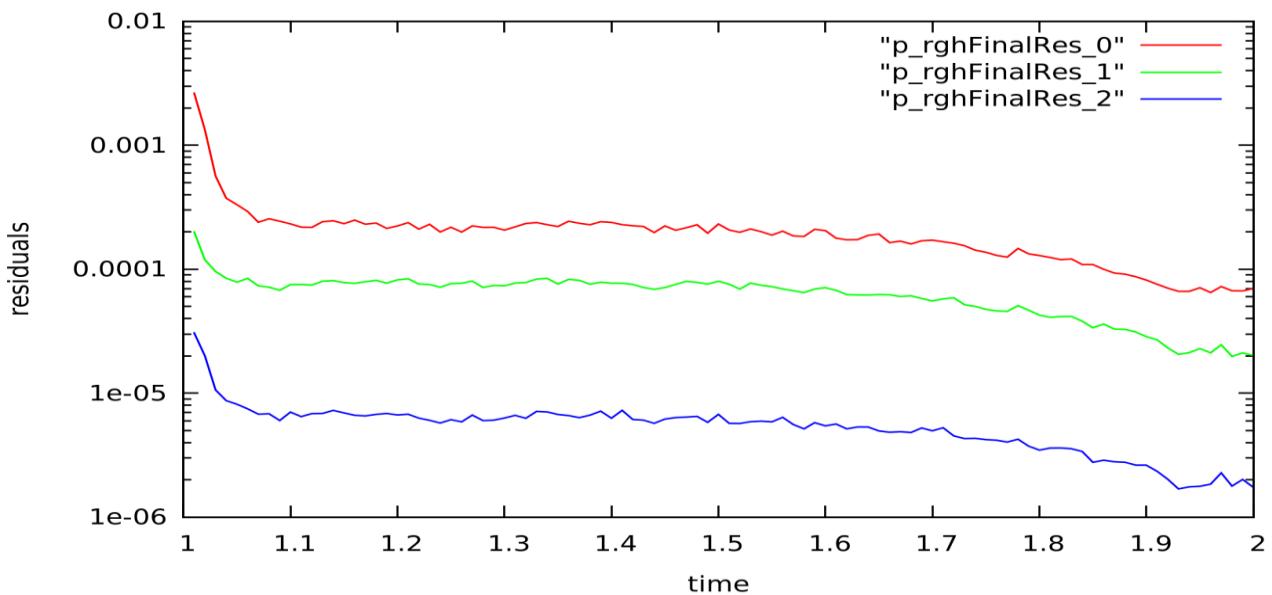


Figura 39 - Residui nel loop di correzione della pressione

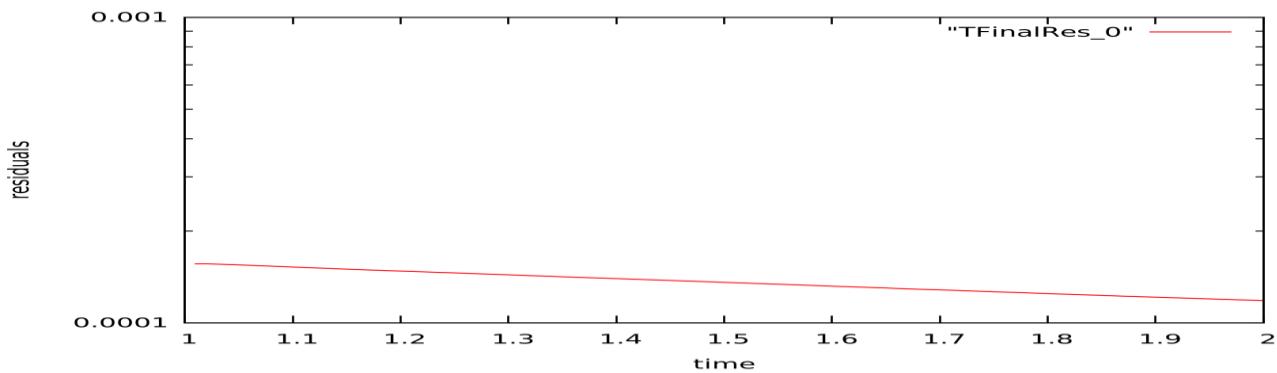
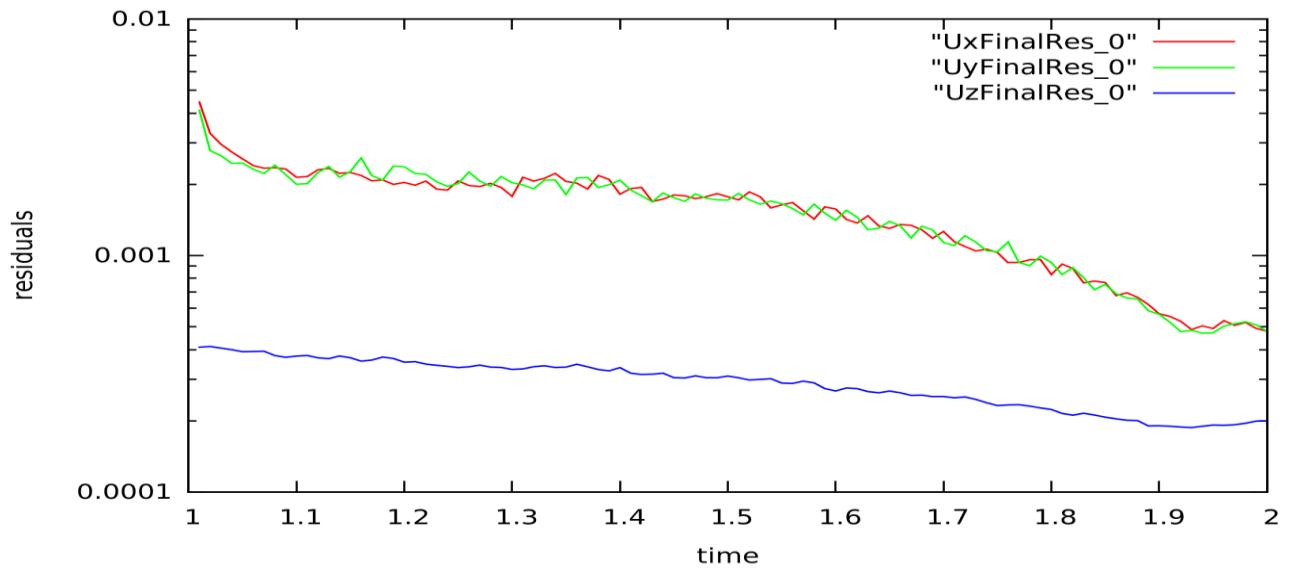
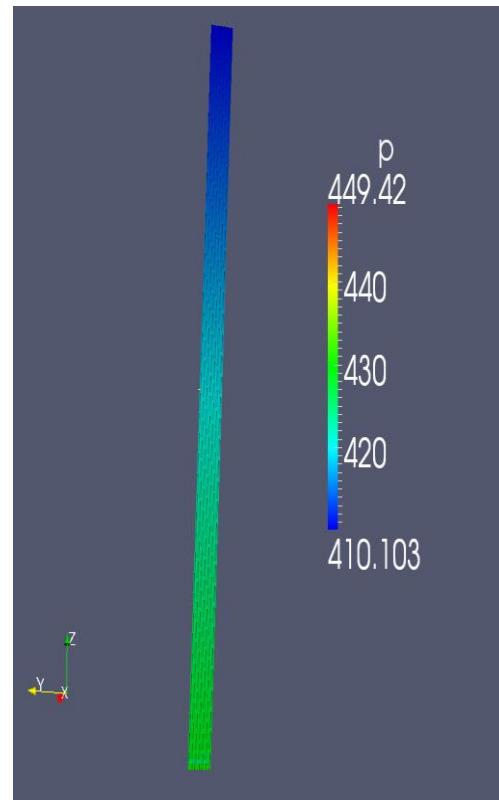


Figura 40 - Residui campo di temperatura



**Figura 41 - Residui componenti cartesiane della velocità**

Analogamente alle simulazioni precedenti riportiamo alcune immagini raffiguranti campo di velocità pressione e temperatura nel fuel assembly.



**Figura 42 - Campo di pressione**

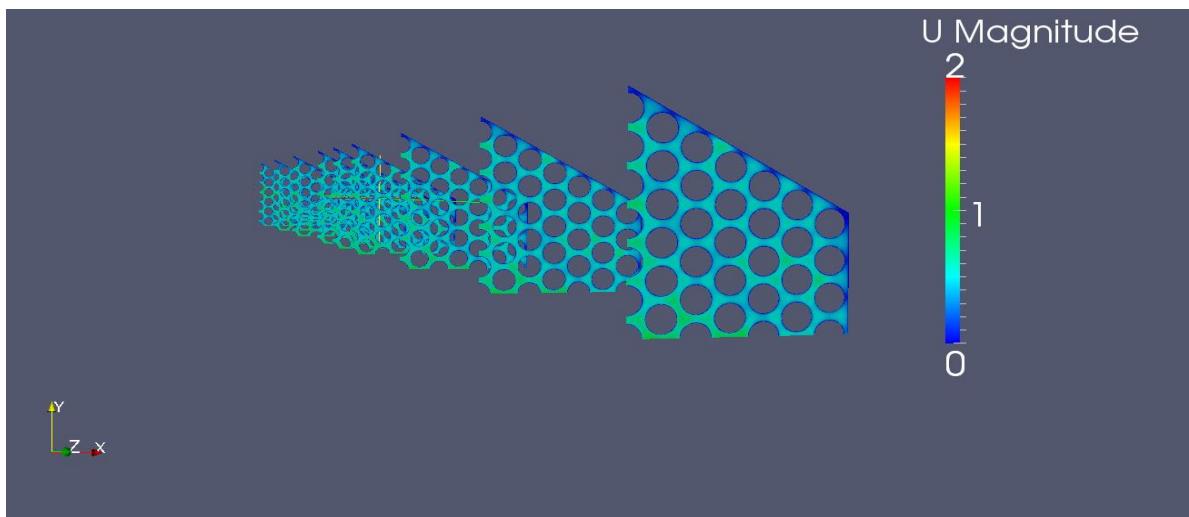


Figura 43 - Sezioni rette del campo di velocità lungo la coordinata Z

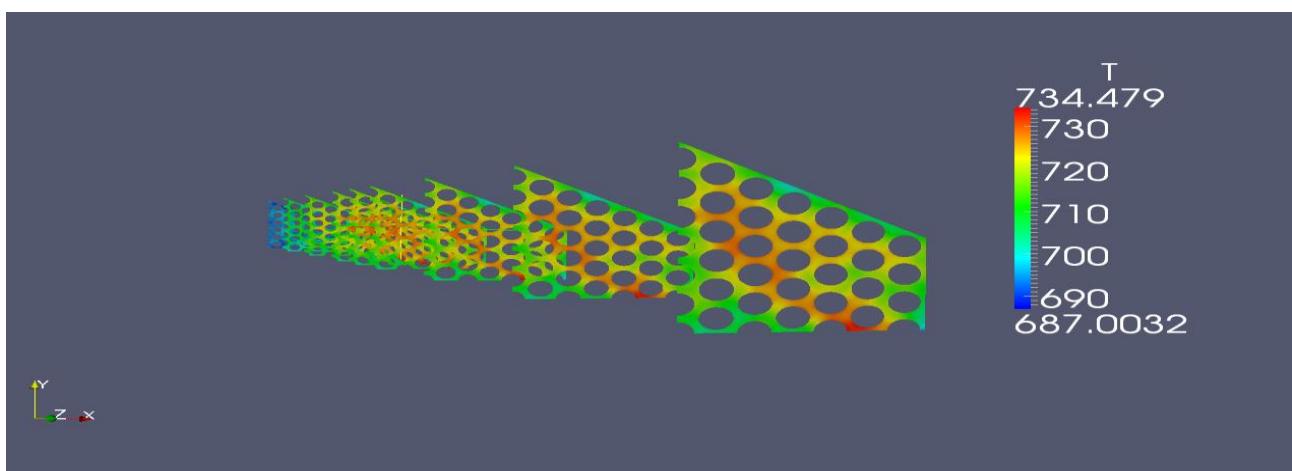


Figura 44 - Sezioni rette del campo di temperatura lungo Z

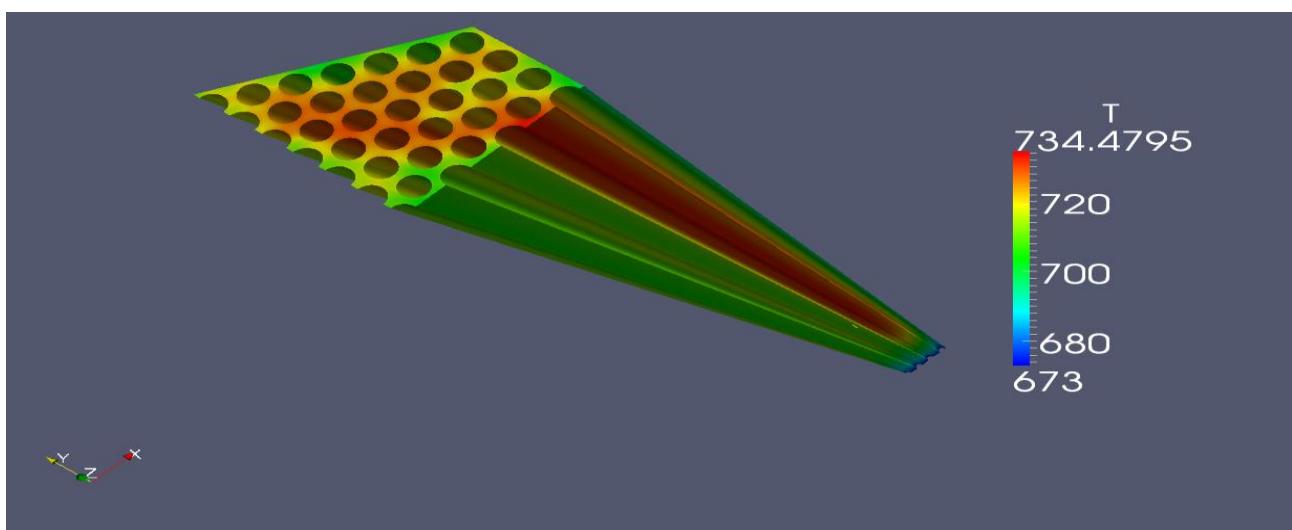


Figura 45 - Campo di temperatura

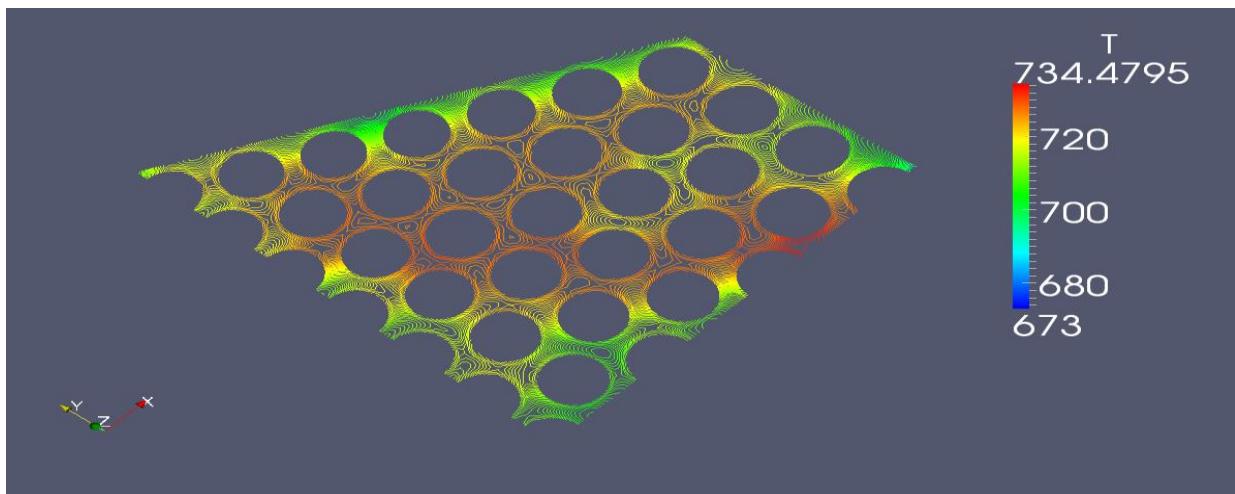


Figura 46 - Isoterme in una sezione retta

Come precedentemente illustrato nelle simulazioni con l' $H_2O$  è possibile isolare dall'intero dominio delle Patch specifiche al fine di compiere un'analisi più approfondita; riportiamo in fig (47-48) il campo di temperatura sui pin e sulla shell

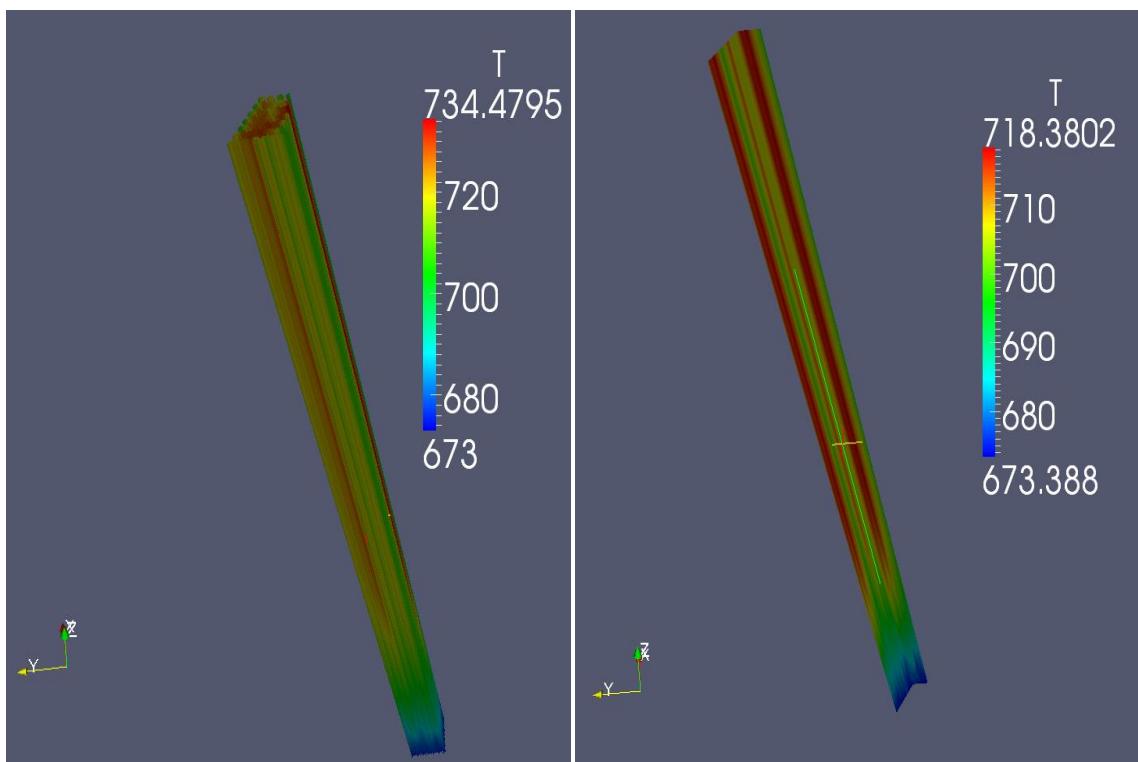
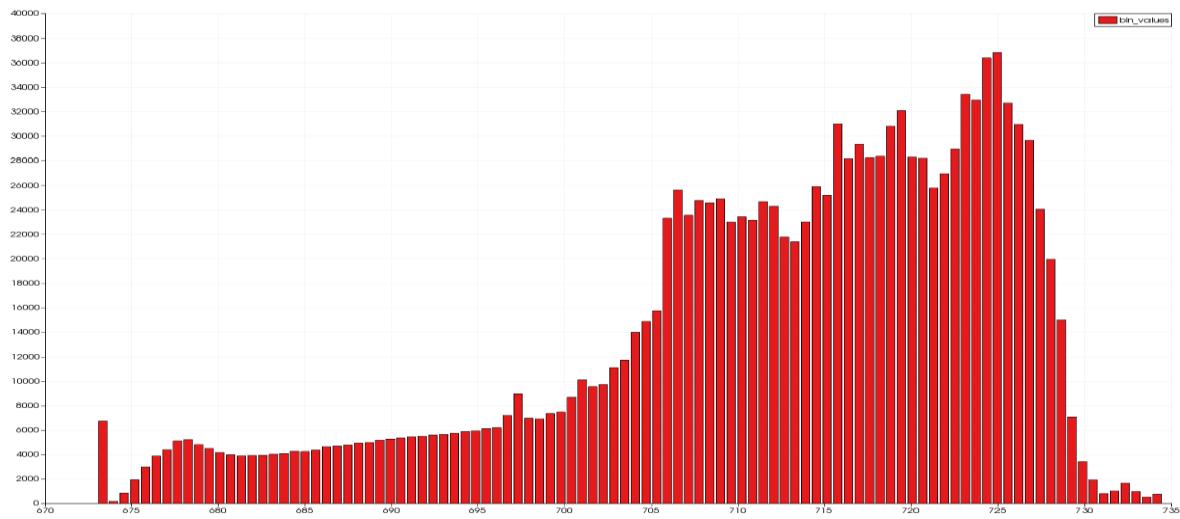


Figura 47 - Temperatura lungo i PIN  
la SHELL

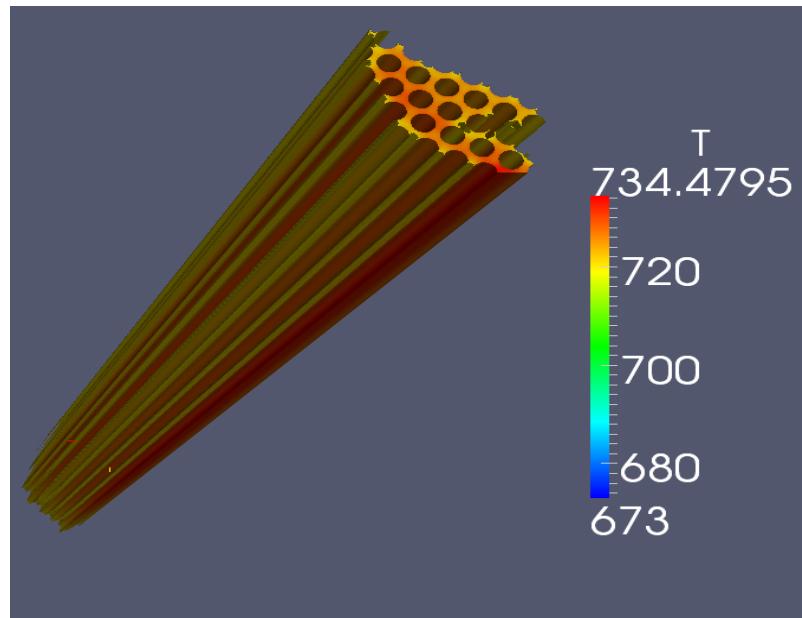
Figura 48 - Temperatura lungo

Possiamo inoltre riportare su di un istogramma la distribuzione di temperatura all'interno del fuel assembly , riportiamo l'istogramma in fig. (49)



**Figura 49 - Iстограмма che riporta il numero di celle che presentano una data temperatura**

Possiamo immediatamente notare come (rispetto alla simulazione con H<sub>2</sub>O) la temperatura presenti un andamento molto più uniforme all'interno del dominio di calcolo stesso non presentando punti caldi isolati. A conferma di ciò utilizzando sempre la funzione Threshold isolare la zona del dominio in cui T è maggiore di 720 K.

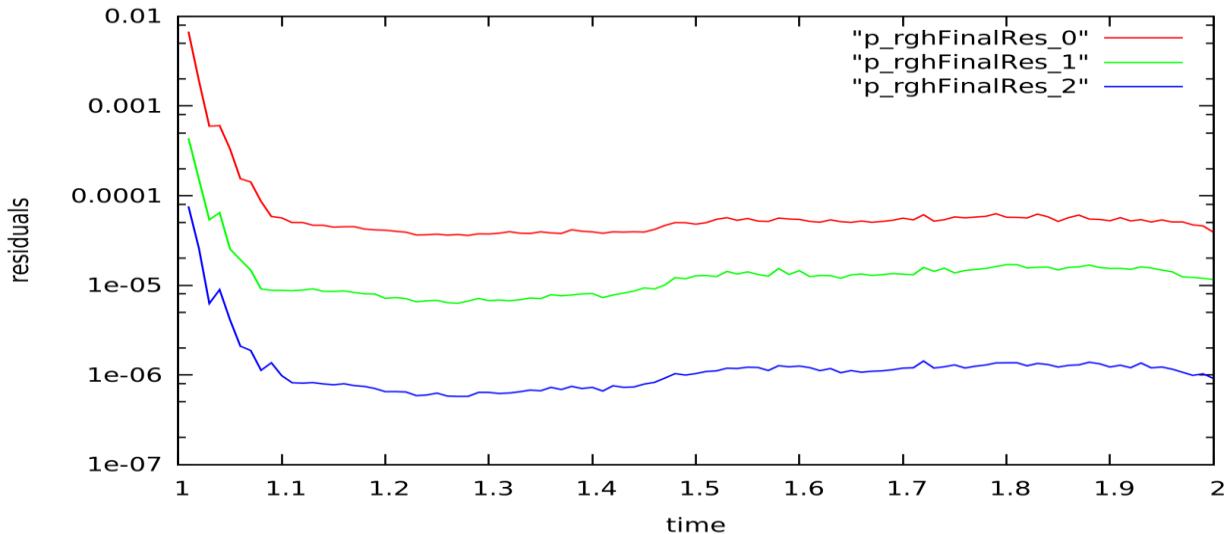


**Figura 50 - Parte del dominio con T > 720 K**

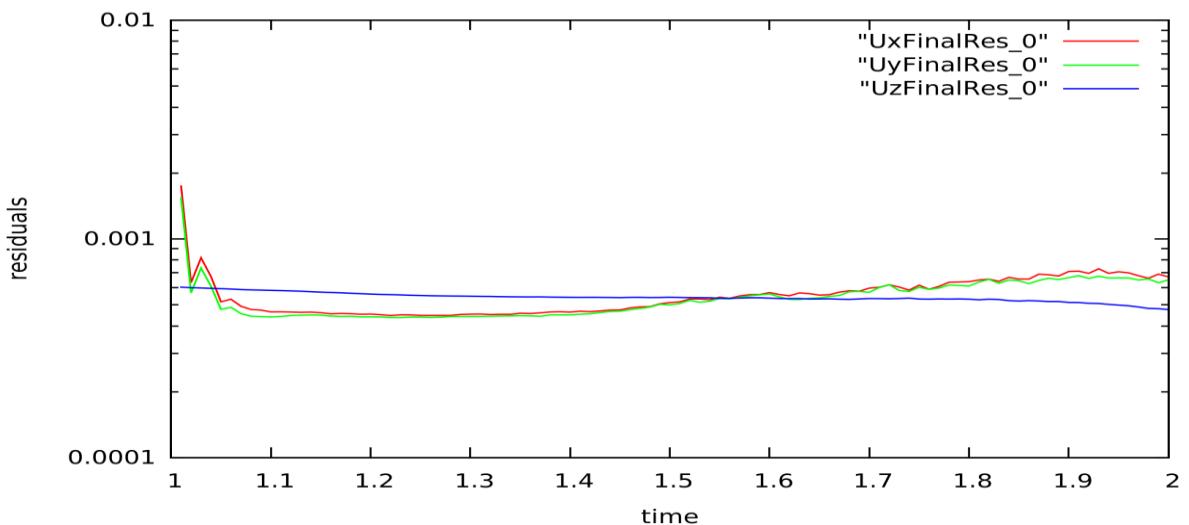
Questo risultato conferma come il codice abbia riprodotto in maniera qualitativamente corretta la trasmissione del calore all'interno dei metalli liquidi.

### 7.5.2 RISULTATI PIOMBO

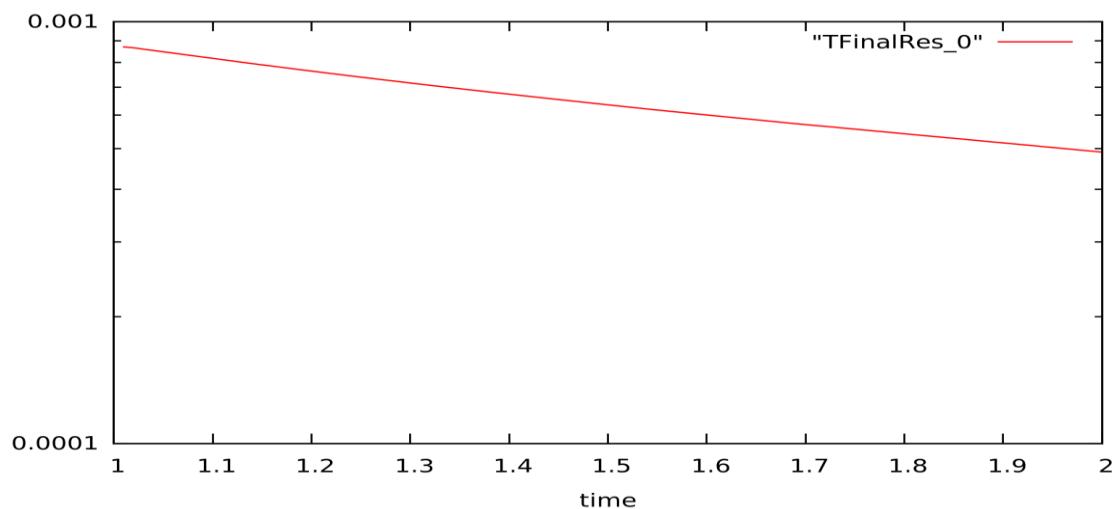
La simulazione eseguita con il piombo ha necessitato di 181 (ovviamente simulazioni eseguite sulla stessa macchina) minuti per giungere a convergenza, tempo significativamente maggiore rispetto a quello impiegato dall' H<sub>2</sub>O e dal Na.



**Figura 51: Residui della pressione nel corrector-loop**

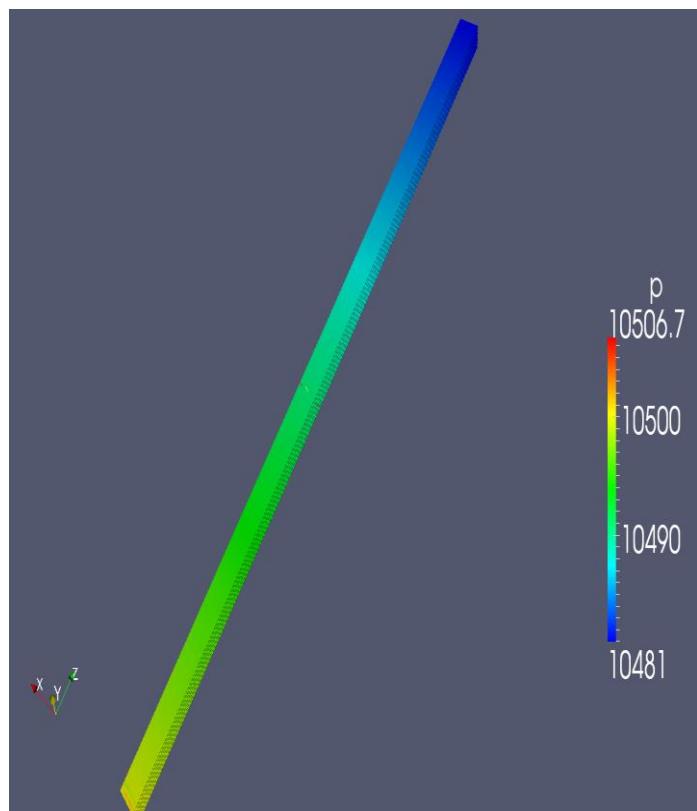


**Figura 52 : Residui delle componenti cartesiane della velocità**



**Figura 53 : Residui del campo di Temperatura**

Riportiamo nelle figure seguenti i campi di velocità e pressione su tutta la lunghezza del fuel assembly



**Figura 54 - Campo di pressione**

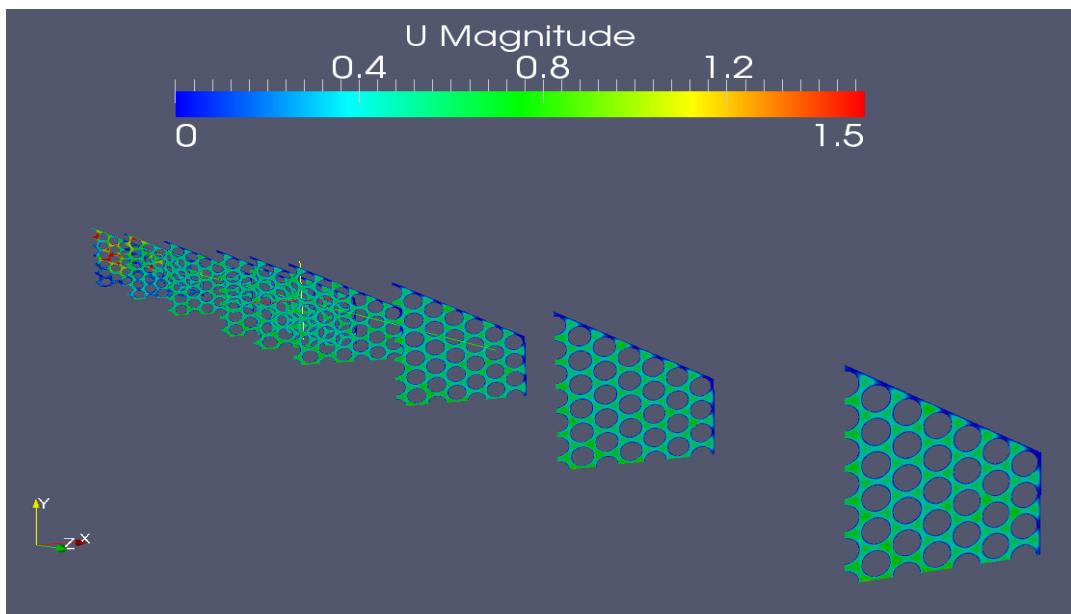


Figura 55 - Campo di velocità

In fig. (56) è riportato un particolare del campo di velocità all'imbocco del fuel assembly nel quale si osservano degli spot in cui si verifica un brusco aumento di velocità nel flusso che poi va ad uniformarsi; questo fenomeno (probabilmente di natura numerica) potrebbe essere dovuto sia alla morfologia della griglia di calcolo che ai metodi numerici utilizzati.

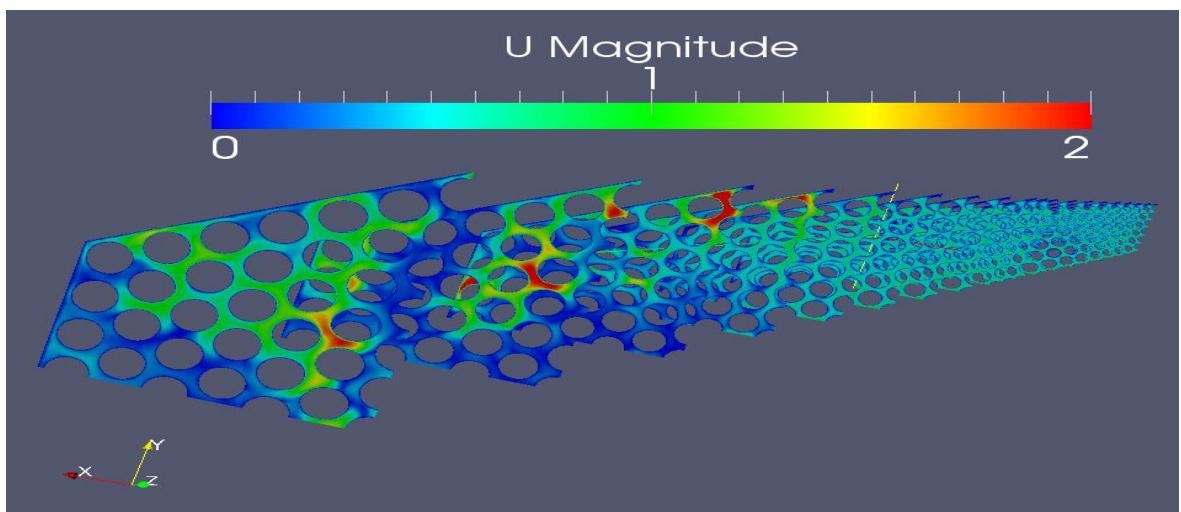


Figura 56 - Particolare del campo di velocità

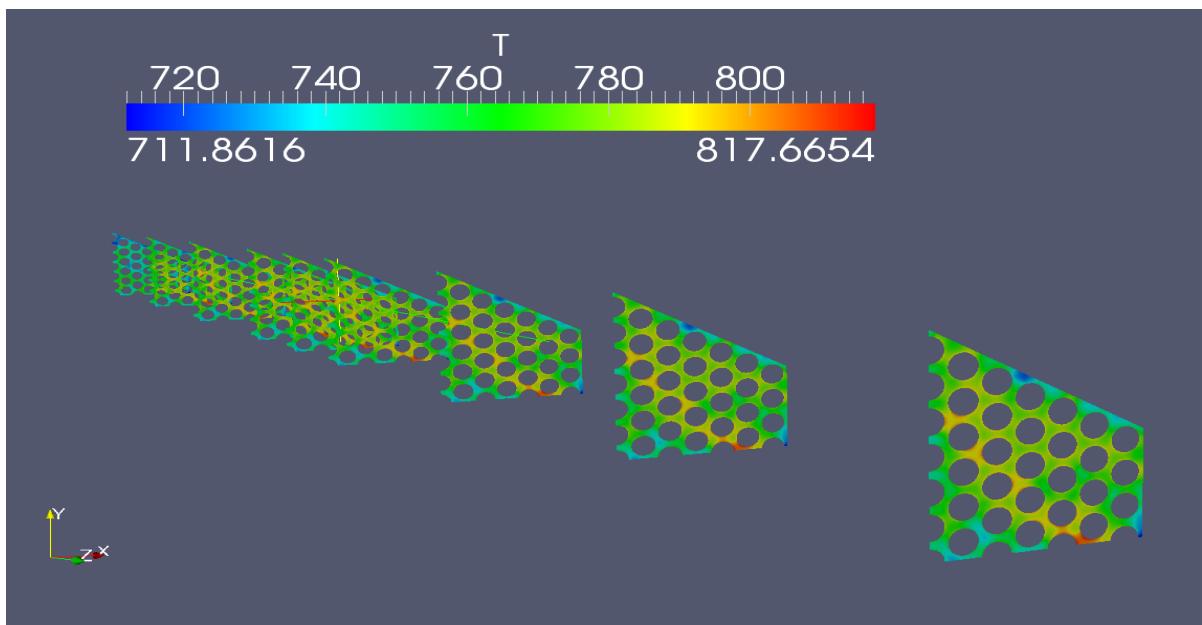


Figura 57 : Sezioni rette lungo z del campo di temperatura

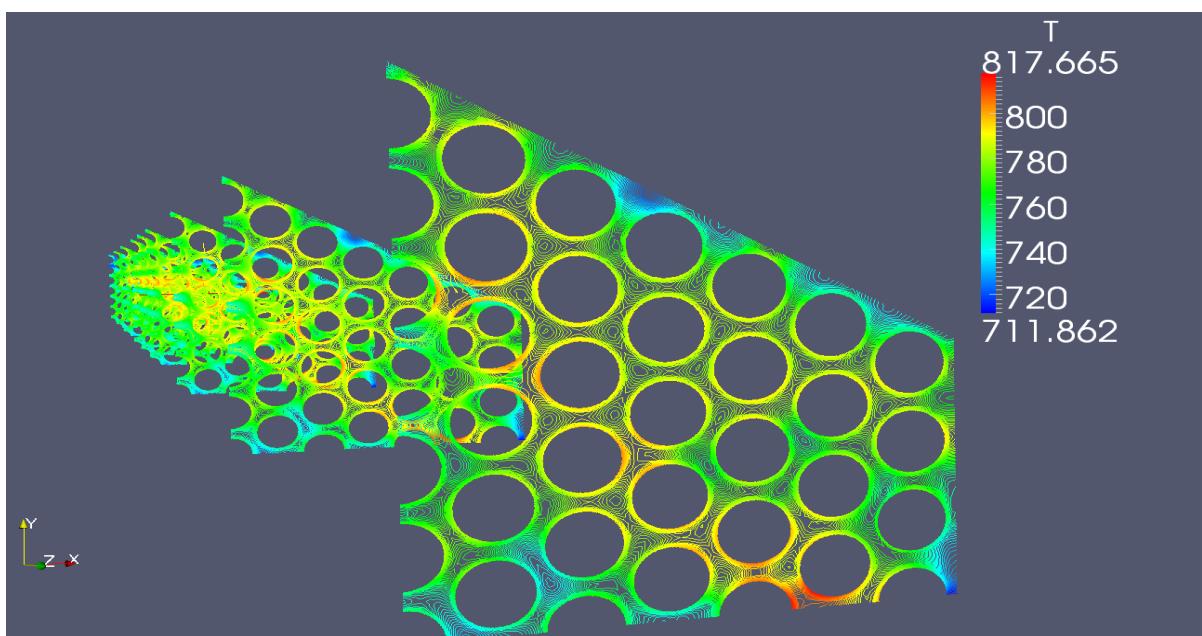
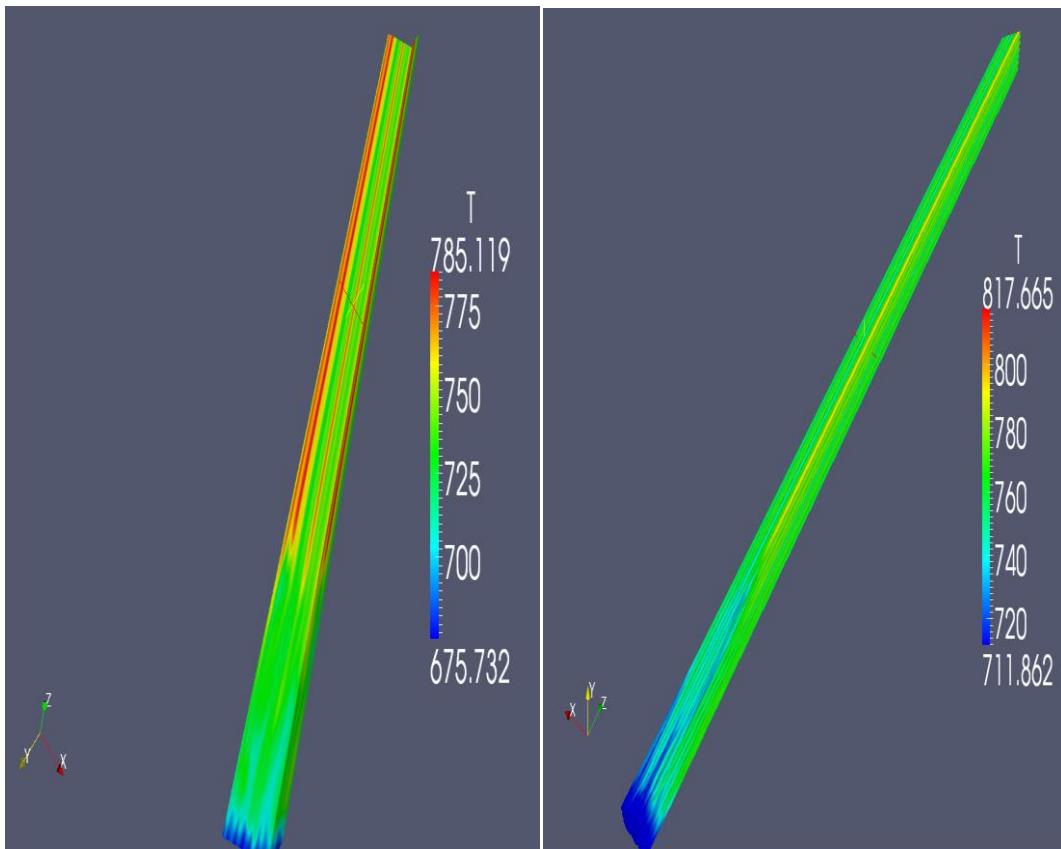
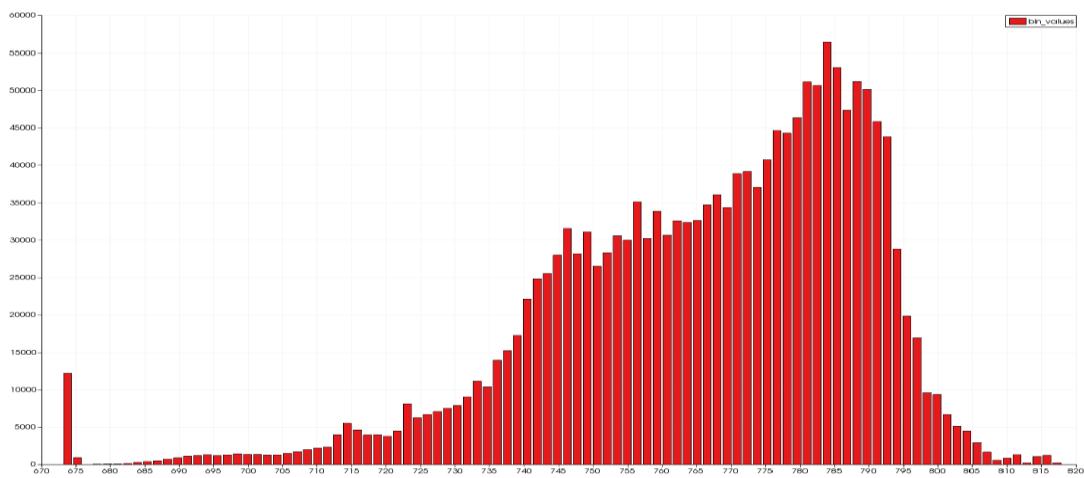


Figura 58 - Andamento delle isoterme del campo di temperatura

Riportiamo nelle fig. (58-59) i campi di temperatura sulla shell e sui pin.

**Figura 59 - Temperatura sulla Shell****Figura 60 - Temperatura lungo i PIN**

Come già fatto per le simulazioni con l'acqua ed il sodio possiamo rappresentare la distribuzione interna di temperatura al fuel assembly rappresentando il risultato sotto forma di istogramma avente in ascisse la temperatura ed in ordinate il numero di celle

**Figura 61 - Iстограмма riportante la distribuzione di temperatura all'interno del fuel assembly**

Riportiamo in fig (61) la parte del dominio fluido in cui la temperatura assume valori superiori a 780 K

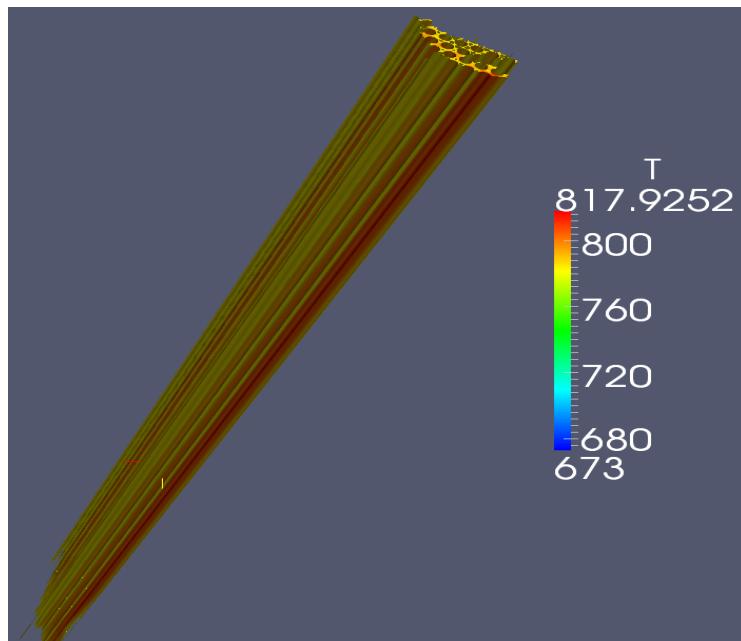


Figura 62 - Parti del dominio fluido con  $T > 780$  K

Analogamente alla simulazione con il sodio possiamo notare come la distribuzione all'interno del fluido sia molto più costante (rispetto al caso con H<sub>2</sub>O) ; anche in questo caso possiamo affermare che questo risultato (anche se di natura qualitativa) conferma l'applicabilità del codice OpenFOAM alla simulazione termo fluidodinamica dei metalli liquidi.

## Bibliografia

[7-1] <http://www.cfd-online.com/Wiki>

## CONCLUSIONI E SVILUPPI FUTURI

Al termine delle simulazioni svolte si può ragionevolmente affermare che il codice OpenFOAM sembra essere applicabile ad una tipologia particolare di problemi come quelli coinvolgenti lo scambio termico nei metalli liquidi.

In particolar modo si sono ottenuti i seguenti risultati:

Nel caso delle simulazioni con acqua si è riscontrato un buon comportamento del software infatti le simulazioni sono giunte a convergenza in tempi di calcolo ragionevoli pur non utilizzando una macchina particolarmente potente, inoltre i risultati calcolati per: la variazione di temperatura del fluido nell'attraversamento del fuel-assembly e le perdite di carico ai capi di quest'ultimo sono riscontrate in discreto accordo con i risultati calcolati per mezzo di correlazioni empiriche.

Per quanto riguarda le simulazioni con i metalli liquidi si è riscontrata una forte sensibilità del risultato del calcolo al variare del modello di turbolenza adottato in particolar modo le simulazioni eseguite con i modelli k- $\varepsilon$  e RNG k- $\varepsilon$  forniscono sia per il sodio che per il piombo una forte sottostima della differenza di temperatura agli estremi del fuel assembly; per quanto riguarda le perdite di carico invece i modelli k- $\varepsilon$  e RNG k- $\varepsilon$  per il sodio e per il piombo forniscono risultati diametralmente opposti infatti sottostimano le perdite di carico per il primo caso mentre forniscono una forte sovrastima per il secondo.

Le simulazioni eseguite con il modello k- $\omega$ SST nel caso del sodio forniscono un valore completamente errato della differenza di temperatura tuttavia calcola le perdite di carico in modo abbastanza accurato. Nel caso del piombo il modello k- $\omega$ SST non è giunto a convergenza.

In conclusione si può ragionevolmente affermare che in entrambe le simulazioni coinvolgenti i metalli liquidi il modello che ha fornito i risultati maggiormente in accordo con le formule empiriche è il modello k- $\omega$  il quale riesce a stimare sia la differenza di temperatura ingresso uscita che le perdite di carico commettendo un errore ragionevole.

Tuttavia si è osservato come, nonostante le previsioni nel su differenza di temperatura e perdite di carico siano abbastanza accurate, nelle simulazioni con il piombo il campo di velocità presenti degli spot in cui assume modulo molto elevato per poi evolvere verso una soluzione più uniforme; questo fenomeno (probabilmente di natura puramente numerica) potrebbe essere dovuto: sia alla griglia di calcolo che ai metodi numerici utilizzati e necessita di ulteriori approfondimenti.

Infine ad ulteriore conferma dell'applicabilità del codice di calcolo OpenFOAM si è riscontrato che le proprietà dei metalli liquidi (illustrate nel corso del capitolo 3) sono

state “qualitativamente” rispettate dal codice stesso; infatti si è potuto osservare come il campo di temperatura all’interno dei metalli liquidi sia notevolmente più uniforme rispetto a quello di un refrigerante tradizionale come l’acqua; dato che conferma come i metalli liquidi grazie alle loro peculiari proprietà molecolari permettano uno scambio termico all’interno del fluido molto più efficiente rispetto ad un refrigerante classico come, appunto, l’acqua.

Infine nonostante i risultati ottenuti nella presente tesi siano soddisfacenti è importante rimarcare il fatto che abbiamo iniziato solo a scalfire la superficie di un argomento così complicato ma al contempo estremamente stimolante. Infatti in aggiunta a quelli già evidenziati fra i molti altri sviluppi futuri che la presente tesi potrebbe avere citiamo:

- Implementare un’analisi in transitorio
- Indagare la stabilità numerica degli algoritmi implementati in OpenFOAM
- Compiere un’analisi più approfondita sul comportamento dei modelli di turbolenza da adottare nelle simulazioni in particolar modo i due seguenti aspetti:
  1. I modelli RANS già presenti potrebbero essere migliorati mediante un più accurato settaggio dei parametri liberi al fine di descrivere efficacemente un fluido così particolare
  2. Testare un approccio alternativo (LES?) per la simulazione della turbolenza.

**APPENDICE A****RELAZIONE COSTITUTIVA PER FLUIDI NEWTONIANI ISOTROPI**

*Def: si definiscono relazioni costitutive le relazioni matematiche che descrivono il comportamento macroscopico di un corpo continuo*

**Tensori isotropi**

*Def: si definisce tensore isotropo un tensore le cui componenti rimangono invariate per una qualunque rotazione del sistema di riferimento*

Di conseguenza ne seguono le seguenti considerazioni:

- I tensori di ordine 0 (scalari) sono tutti isotropi
- Non esistono tensori di ordine 1 (vettori) isotropi
- Il tensore delta di Kronecker  $\delta_{ij}$  e tutti i suoi multipli  $\alpha\delta_{ij}$  sono gli unici tensori isotropi del secondo ordine
- L'unico tensore isotropo del terzo ordine è l'epsilon di Ricci  $\epsilon_{ijk}$
- I tensori isotropi del quarto ordine si ottengono come combinazioni lineari di tensori isotropi del secondo ordine cioè:

$$A_{ijkl} = a\delta_{ik}\delta_{jl} + b\delta_{il}\delta_{jk} + c\delta_{ij}\delta_{kl}$$

Nel modello di fluido newtoniano il tensore  $d_{ij}$  dipende linearmente dai gradienti di velocità quindi:  $d_{ij} = A_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$

Inoltre possiamo assumere che il tensore A sia isotropo e quindi si può rappresentare come combinazione lineare di tensori isotropi del secondo ordine secondo la formula precedentemente introdotta:

$$A_{ijkl} = \mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu_1\delta_{il}\delta_{jk} + \mu_2\delta_{ij}\delta_{kl}$$

Poiché il tensore degli sforzi  $\sigma_{ij}$  è simmetrico rispetto allo cambio degli indici allora deve necessariamente esserlo anche  $d_{ij}$  e di conseguenza anche  $A_{ijkl}$  quindi:

$$A_{ijkl} = A_{jikl} \Rightarrow \mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu_1\delta_{il}\delta_{jk} + \mu_2\delta_{ij}\delta_{kl} = \mu\delta_{jk}\delta_{il} + \mu_1\delta_{jl}\delta_{ik} + \mu_2\delta_{ji}\delta_{kl}$$

Ora si rende necessario capire sotto quali condizioni questa uguaglianza è verificata

- Se  $i=j$  e  $k=l$  allora si ha  $\mu\delta_{jl}\delta_{jl} + \mu_1\delta_{jl}\delta_{jl} + \mu_2\delta_{jj}\delta_{kk} = \mu\delta_{jl}\delta_{jl} + \mu_1\delta_{jl}\delta_{jl} + \mu_2\delta_{jj}\delta_{kk}$  ovvero

$$\mu\delta_{jl}^2 + \mu_1\delta_{jl}^2 + \mu_2 = \mu\delta_{jl}^2 + \mu_1\delta_{jl}^2 + \mu_2 \Leftrightarrow \delta_{ij}^2(\mu + \mu_1) + \mu_2 = \delta_{ij}^2(\mu + \mu_1) + \mu_2$$

che è sempre verificata per ogni coppia di indici (j,l)

- Se al contrario  $i \neq j$  o  $k \neq l$  la relazione di simmetria implica  $\mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu_1\delta_{il}\delta_{jk} = \mu\delta_{jk}\delta_{il} + \mu_1\delta_{jl}\delta_{ik}$  cioè  $\delta_{il}\delta_{jk}(\mu_1 - \mu) = \delta_{il}\delta_{jk}(\mu_1 - \mu)$  che è vera per ogni possibile combinazione tra gli indici se e solo se  $\mu_1 = \mu$

Quindi dopo le considerazioni precedenti il tensore  $A_{ijkl}$  assume la seguente forma:

$$A_{ijkl} = \mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu\delta_{il}\delta_{jk} + \mu_2\delta_{ij}\delta_{kl}$$

Si può inoltre osservare che scambiandogli indici k ed l l'espressione rimane inalterata ; quindi il tensore è simmetrico anche rispetto agli indici k ed l ovvero:  $A_{ijkl} = A_{ijlk}$

Il fatto che entrambi i tensori  $d_{ij}$  ed  $A_{ijkl}$  siano simmetrici rispetto agli indici (i,j) e a quelli (k,l) implica che l'eventuale parte antisimmetrica di  $\frac{\partial u_k}{\partial x_l}$  debba essere nulla.

Scomponiamo ora il tensore gradiente di velocità in una parte simmetrica ed una antisimmetrica (operazione sempre possibile) e otteniamo

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_l} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_l} - \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = S_{kl} + E_{kl}$$

la simmetria rispetto a (i,j) ed (k,l) impone che la parte antisimmetrica  $E_{kl}$  sia nulla, pertanto si ottiene

$$\begin{aligned} d_{ij} &= A_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} = A_{ijkl} (S_{kl} + E_{kl}) = A_{ijkl} S_{kl} \\ &= \frac{1}{2} (\mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu\delta_{il}\delta_{jk} + \mu_2\delta_{ij}\delta_{kl}) \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \end{aligned}$$

Ragioniamo su come debbano essere gli indici k,l rispetto ad i,j affinché rimangano dei termini non nulli:

- $\delta_{ik}\delta_{jl} \neq 0 \Leftrightarrow i = k \text{ e } j = l$
- $\delta_{il}\delta_{jk} \neq 0 \Leftrightarrow i = l \text{ e } j = k$
- $\delta_{kl} \neq 0 \Leftrightarrow k = l = s$

Eseguendo ora la sommatoria sugli indici ripetuti (k,l) ricordando le regole dell'algebra della  $\delta$  si ottiene

$$d_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \mu_2 \delta_{ij} \frac{\partial u_s}{\partial x_s}$$

I coefficienti  $\mu$  e  $\mu_2$  variano da fluido a fluido e necessitano una determinazione sperimentale;  $\mu$  prende il nome di viscosità dinamica e  $\mu_2$  prende il nome di secondo

coefficiente di viscosità. Si può ora definire un'altra grandezza la viscosità di volume  $\mu_v = \mu_2 - \frac{2}{3}\mu$  la viscosità di volume è nulla per i gas perfetti monoatomici e per i gas poliatomici e per i fluidi assume valori molto piccoli; l'ipotesi di Stokes consiste proprio nell'assumere la viscosità di volume nulla per ottenere un legame tra i due coefficienti di viscositàcio  $\mu_2 = -\frac{2}{3}\mu$ ; pertanto:

$$d_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_s}{\partial x_s} \right)$$

**APPENDICE B****FORME ALTERNATIVE EQUAZIONE DELL'ENERGIA**

Nel corso del capitolo riguardante il modello fisico matematico si è arrivati alla equazione differenziale alle derivate parziale che descrive la variane di energia interna totale di una particella fluida nel corso del suo moto; equazione che ha la seguente forma:

$$\frac{\partial(\rho e_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e_{tot} u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( u_i \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) + \rho g_i u_i$$

Scopo di questa appendice è calcolare, facendo uso delle principali relazioni termodinamiche, le forme duali di quest'ultima aventi come variabili dinamiche l'entropia l'entalpia e la temperatura.

**Equazione energia interna**

Si consideri l'equazione della conservazione della quantità di moto moltiplicata scalarmente per U

$$\rho u_i \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j u_i \frac{\partial u_i}{\partial u_j} = -u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial d_{ij}}{\partial x_j} + \rho u_i g_i$$

E sfruttando la comoda relazione  $fd(f) = d(\frac{1}{2}f^2)$  si ottiene

$$\rho \frac{\partial \frac{1}{2} u_i^2}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial \frac{u_i^2}{2}}{\partial x_j} = -u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial d_{ij}}{\partial x_j} + \rho u_i g_i$$

Che non è altro che l'equazione di bilancio per l'energia cinetica, ricordando ora che  $e_{tot} = e + \frac{u^2}{2}$

Sottraendo alla prima equazione la seconda si ottiene l'equazione di bilancio per l'energia interna

$$\rho \frac{De}{Dt} = -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu d_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

**Equazione dell'entropia**

Riarrangiando ora l'equazione di Gibbs  $Tds = de + pdv \Rightarrow Tds = de - \frac{p}{\rho^2} d\rho$  e ricordando che è possibile effettuare il passaggio  $\frac{d}{dt} = \frac{D}{Dt}$  si ottiene la relazione  $\rho T \frac{DS}{Dt} = \rho \frac{De}{Dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt}$

Dall'equazione di continuità scritta in forma convettiva e moltiplicata per  $\frac{p}{\rho}$  si ottiene

$$\frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad \text{infine unendo le relazioni precedentemente trovate}$$

$$pT \frac{DS}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

### Equazione dell'entalpia

Sempre dall'equazione di Gibbs

$$dh = Tds + \frac{1}{\rho} dp \Rightarrow \rho \frac{Dh}{Dt} = \rho T \frac{DS}{Dt} + \frac{Dp}{Dt}$$

quindi sommando la derivata materiale della pressione all'equazione dell'entropia otteniamo la legge che regola la variazione dell'entalpia di una particella fluida durante il suo moto

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

### Equazione della temperatura

Ricordando la definizione di calore specifico a temperatura costante

$$c_p = \left( \frac{\delta Q}{dT} \right)_{p=cost} = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p=cost}$$

Dalla definizione di coefficiente di espansione termica

$$\beta = \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_{p=cost}$$

Applicando le relazione di Maxwell per i potenziali termodinamici

$$\left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T=cost} = - \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_{p=cost} = - \frac{\beta}{\rho}$$

Ricordando che è possibile esprimere l'entropia per unità di massa  $s = s(T, p)$  si ha

$$dS = dT \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p=cost} + dp \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T=cost} = dT \frac{c_p}{T} - dp \frac{\beta}{\rho}$$

Passando dal differenziale alla derivata materiale

$$\frac{Ds}{Dt} = \frac{c_p}{T} \frac{DT}{Dt} - \frac{\beta}{\rho} \frac{Dp}{Dt}$$

Ottenendo infine

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \beta T \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

Quest'ultima espressione è la forma che viene maggiormente usata all'interno dei codici di calcolo che comprendono la risoluzione di un campo di temperatura.

## APPENDICE C

## RICHIAMI SU ALCUNI TEOREMI FONDAMENTALI

## TEOREMA DEL TRASPORTO DI REYNOLDS NEL CASO DI UNA FUNZIONE SCALAR

Sia data una funzione scalare  $f(\mathbf{r}, t)$  differenziabile e definita per ogni  $\mathbf{r}$  appartenente ad  $\mathbb{R}^3$  e  $t$  appartenente ad  $\mathbb{R}^+$  consideriamo un volume dipendente dal tempo  $V_t$  avente come bordo  $S_t$  anch'esso variabile nel tempo il teorema di Reynolds afferma che

$$\frac{d}{dt} \iiint f(\mathbf{r}, t) dV = \iiint \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) \right) dV$$

In cui  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  è il campo di velocità

Per dimostrare il teorema di Reynolds dimostriamo innanzitutto il seguente teorema che stabilisce quanto vale la derivata rispetto al tempo di un integrale di volume il cui dominio di integrazione è una funzione del tempo

$$\frac{d}{dt} \iiint f(\mathbf{r}, t) dV = \iiint \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV + \iint f(\mathbf{r}_s, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}_s, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}_s) dS$$

Dove la notazione  $\mathbf{r}_s$  indica la posizione sulla superficie del volume di integrazione  $V_t$

Come prima cosa osserviamo che il primo membro a sinistra dell'uguale, essendo l'integrazione svolta rispetto alle solo variabili spaziali, è una funzione solamente del tempo quindi possiamo porre:

$$G(t) = \iiint f(\mathbf{r}, t) dV$$

Per cui

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint f(\mathbf{r}, t) dV &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{G(t + \Delta t) - G(t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{V_{t+\Delta t}} f(\mathbf{r}, t + \Delta t) dV - \int_{V_t} f(\mathbf{r}, t) dV \right) \end{aligned}$$

Ora espandiamo in serie di Taylor fino al primo ordine il volume di controllo al tempo  $t + \Delta t$  e otteniamo:  $V_{t+\Delta t} = V_t + \Delta V_t$

Grazie a quest'ultima relazione possiamo riscrivere il rapporto incrementale come:

$$\frac{G(t + \Delta t) - G(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{V_{t+\Delta t}} f(\mathbf{r}, t + \Delta t) dV - \int_{V_t} f(\mathbf{r}, t) dV \right) =$$

$$= \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{V_t} f(\mathbf{r}, t + \Delta t) dV + \int_{\Delta V_t} f(\mathbf{r}, t + \Delta t) dV - \int_{V_t} f(\mathbf{r}, t) dV \right)$$

Ora aggiungiamo e togliamo ambo i membri  $\frac{1}{\Delta t} (\int_{\Delta V_t} f(\mathbf{r}, t) dV)$  ed il rapporto incrementale diventa

$$\begin{aligned} \frac{G(t + \Delta t) - G(t)}{\Delta t} &= \int_{V_t} \frac{f(\mathbf{r}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} dV - \int_{\Delta V_t} \frac{f(\mathbf{r}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} dV = \\ &\quad + \frac{1}{\Delta t} \left( \int_{\Delta V_t} f(\mathbf{r}, t) dV \right) \end{aligned}$$

Eseguendo il passaggio al limite per  $\Delta t \rightarrow 0$  si ottiene:

per il primo termine  $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{V_t} \frac{f(\mathbf{r}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} dV = \int_{V_t} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV$

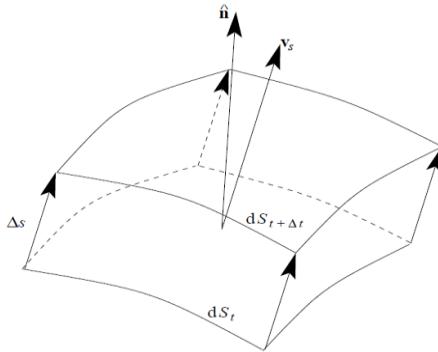
per il secondo termine  $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{\Delta V_t} \frac{f(\mathbf{r}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{\Delta V_t} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV = 0$

in quanto nelle ipotesi avevamo imposto che  $f$  fosse differenziabile ( quindi le sue derivate parziali finite ) e di conseguenza l'integrale su di un volume che tende a zero è necessariamente nullo

Analizziamo infine l'ultimo termine:

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \int_{\Delta V_t} f(\mathbf{r}, t) dV \right)$$

Facendo riferimento alla figura seguente se chiamiamo  $dS_t$  un elemento infinitesimo di superficie del contorno al tempo  $t$  e  $\mathbf{v}_s$  è la velocità di spostamento del contorno; nell'intervallo di tempo  $\Delta t$  quest'ultima avrà compiuto uno spostamento  $\Delta \mathbf{s} = \mathbf{v}_s \Delta t$  e quindi il volumetto spazzato dall'elemento di superficie nel suo moto sarà uguale a  $dV = dS \Delta t \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s$



**Figura 63 : elemento infinitesimo di superficie**

di conseguenza possiamo riscrivere l'ultimo termine come

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta V_t} f(\mathbf{r}, t) dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{S_t} \frac{1}{\Delta t} f(\mathbf{r}, t) \Delta t (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s) dS = \int_{S_t} f(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n} dS$$

Per definizione il volume materiale si muove seguendo il campo di moto quindi  $\mathbf{v}_s = \mathbf{u}(\mathbf{r}_s, t)$

Per giungere al teorema di Reynolds è sufficiente applicare il teorema della divergenza all'integrale di superficie

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint f(\mathbf{r}, t) dV &= \iiint \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV + \iint f(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \iiint \left( \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (f(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) \right) dV \end{aligned}$$

Ecco dimostrato il teorema del trasporto di Reynolds

### Caso di una funzione vettoriale

La dimostrazione svolta in precedenza si estende senza alcuna difficoltà anche al caso in cui  $f$  sia una funzione a valori vettoriali al patto di considerare una componente per volta

Consideriamo la generica componente  $f_i$

$$\frac{d}{dt} \iiint f_i dV = \iiint \left( \frac{\partial f_i}{\partial t} + \nabla \cdot (f_i \mathbf{u}) \right) dV = \iiint \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial f_i u_j}{\partial x_j} dV$$

Nell'ultimo passaggio si è fatto uso della notazione di Einstein cioè

$$\frac{\partial f_i u_j}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial f_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial f_i u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_i u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial f_i u_3}{\partial x_3}$$

Quindi estendendo il ragionamento a tutte le componenti del vettore  $f_i$  si ottiene:

$$\sum_{i=1}^3 e_i \iiint \left( \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial f_i u_j}{\partial x_j} \right) dV = \iiint \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \otimes u) \right) dV$$

In conclusione il teorema del trasporto per una funzione vettoriale assume la forma

$$\frac{d}{dt} \iiint f(r, t) dV = \iiint \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \otimes u) \right) dV$$

**NB:** si tiene a far osservare come l'ultima espressione sia una forma più generale di quella ottenuta per il caso di una funzione scalare; infatti il prodotto tensoriale  $\otimes$  nel caso in cui uno dei due fattori sia uno scalare si riduce al prodotto scalare per vettore.

### DERRIVATA MATERIALE

Come illustrato nel capitolo 2 in cui è stato presentato il modello matematico un utile approccio per descrivere la dinamica di un fluido continuo è l'utilizzo delle coordinate Euleriane le quali descrivono il moto del fluido introducendo il concetto di campo; si parlerà perciò di campo di moto.

Dimostriamo ora tramite veloci passaggi la forma che la derivata Lagrangiana assume se riscritta in coordinate Euleriane

Prima di tutto ricordiamo che in base a quanto detto precedentemente il moto del fluido è descritto ricorrendo al concetto matematico di campo e cioè

$$\varphi = \varphi(x, y, z, t)$$

Una qualunque grandezza sarà funzione, punto per punto, delle tre coordinate spaziali e di quella temporale; a questo punto possiamo introdurre il differenziale totale della velocità

$$d\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} dt + \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx + \frac{\partial \varphi}{\partial y} dy + \frac{\partial \varphi}{\partial z} dz$$

E quindi

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{dz}{dt}$$

Introducendo le componenti della velocità (  $u v w$  ) si ottiene

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + u \frac{\partial\varphi}{\partial x} + v \frac{\partial\varphi}{\partial y} + w \frac{\partial\varphi}{\partial z}$$

Quindi possiamo introdurre l'operatore derivata materiale definito come ( in notazione vettoriale )

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})$$

Analogamente in notazione indiciale

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Con  $j = 1, 2, 3$

### TEOREMA DI GAUSS

In questa sezione sarà velocemente illustrato il teorema di Gauss o della divergenza ; strumento ampliamente utilizzato nel metodo numerico dei volumi finiti.

*Def: Una calotta  $\Sigma$  si dice G-ammissibile se è regolare a pezzi, semplice ed orientabile e le sue facce  $\Sigma_k$  sono parametrizzabili mediante funzioni  $\sigma_k: R_k \rightarrow \Sigma_k$  dove  $R_k = \bar{\Omega}_k$  è la chiusura di un aperto  $\bar{\Omega}_k$  G-ammissibile nel piano.*

*Ipotesi: Sia  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un aperto G-ammissibile, e sia  $\mathbf{n}$  la normale esterna a  $\partial\Omega$ . Per ogni campo vettoriale  $\mathbf{F}$  tale che  $\mathbf{F} \in (C^1(\bar{\Omega}))^3$ , vale la relazione:*

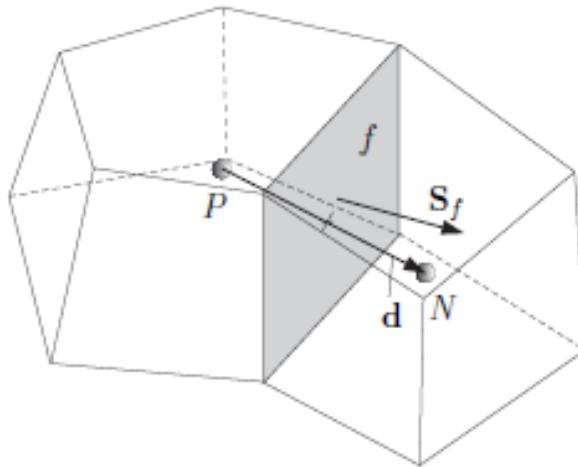
$$\int_{\Omega} \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx dy dz = \int_{\partial\Omega} F_i n_i d\sigma$$

**APPENDICE D****DISCRETIZZAZIONE DEGLI OPERATORI DIFFERENZIALI PER LA TECNICA DEI VOLUMI FINITI**

*Ipotesi: Sia  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un aperto G-ammissibile, e sia  $\mathbf{n}$  la normale esterna a  $\partial\Omega$ . Per ogni campo vettoriale  $\mathbf{F}$  tale che  $\mathbf{F} \in (C^1(\bar{\Omega}))^3$ , vale la relazione:*

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx dy dz = \int_{\partial\Omega} F_i n_i d\sigma$$

Si vuole sottolineare come il teorema della divergenza sia particolarmente adatto al metodo dei volumi finiti in quanto quest'ultimo consiste proprio nell'integrare su di un volume elementare le equazioni di governo.



**Figura 64 : Definizione della frontiera di un volumetto elemetare**

**Gradiente:**

Il gradiente può essere calcolato principalmente in due modi il primo usando il teorema di gauss cioè trasformando l'integrale di volume su di una cella in uno di superficie:

$$\int_V \vec{\nabla} \varphi dV = \int_{\partial V} \varphi \vec{n} dS = \sum S_f \varphi_f$$

Dove  $V$  e  $S$  individuano rispettivamente il volume e la superficie della cella e  $\Phi_f$  è il valore della variabile di interesse sulle facce del volumetto; oppure calcolare il gradiente di una grandezza come il rapporto incrementale della differenza tra due nodi diviso la loro distanza

$$\varphi_f = \frac{\varphi_N - \varphi_P}{|d|}$$

in questo modo si calcola il valore del gradiente normale ad una faccia  $S_f$  generica; si tiene inoltre a precisare che nel caso di celle non ortogonali bisognerà introdurre le dovute correzioni

### **Divergenza:**

Per il calcolo della divergenza di  $\phi$  integrata su di una cella si fa uso, come nel caso precedente, del teorema di gauss che trasforma in questo caso la divergenza di una grandezza nel flusso di quest'ultima attraverso la frontiera della cella:

$$\int_V \vec{V} \cdot \vec{\varphi} dV = \int_{\partial V} \vec{\varphi} \cdot \vec{n} dS = \sum S_f \cdot \varphi_f$$

### **Laplaciano:**

Per il calcolo de laplaciano prima di tutto ricordiamo che quest'ultimo è definito come la divergenza di un gradiente quindi procediamo come fatto sino adesso:

$$\int_V \vec{V} \cdot (\alpha \vec{V} \varphi) dV = \int_{\partial V} (\alpha \vec{V} \varphi) \cdot \vec{n} dS = \sum \alpha_f S_f \cdot (\vec{V} \varphi)_f$$

con

$$(\nabla \varphi)_f = \frac{\varphi_n - \varphi_P}{|d|}$$

e poi calcoliamo il valore del gradiente come spiegato in precedenza.

**Rotore:**

L'ultimo operatore spaziale che analizziamo è il rotore per discretizzare questo termine usiamo la stessa tecnica applicata nel caso del gradiente infatti il rotore può essere definito come il doppio della parte antisimmetrica della matrice gradiente di velocità

$$\vec{\nabla} \times \vec{u} = 2(\text{skew} \vec{\nabla} \vec{u})$$

**Termine sorgente:**

Il termine sorgente rappresenta la distruzione o la produzione di una variabile esso viene valutato effettuando il suo integrale sul volume della cella

$$\int_V \rho \varphi dV = \rho_p \varphi_p V_p$$

**Derivata temporale**

La derivata temporale viene integrata sul volume di una cella come segue:  $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV$

il precedente termine viene poi discretizzato semplicemente tramite un rapporto incrementale sull'intervallo  $\Delta t$  considerando le seguenti convenzioni:

- nuovo valore: il time step che stiamo risolvendo:  $\varphi^n = \varphi(t + \Delta t)$
- vecchio valore:  $\varphi^0 = \varphi(t)$
- vecchio - vecchio valore:  $\varphi^{00} = \varphi(t - \Delta t)$

Le derivate temporali possono essere discretizzate mediante due metodi:

-Eulero implicito:  $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV = \frac{(\rho \varphi V)^n - (\rho \varphi V)^0}{\Delta t}$

-Backward differencing:  $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV = \frac{3(\rho_p \varphi_p V)^n - 4(\rho_p \varphi_p V)^0 + (\rho_p \varphi_p V)^{00}}{2\Delta t}$

**Derivata temporale al secondo ordine**

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV = \frac{(\rho_p \varphi_p V)^n - 2(\rho_p \varphi_p V)^0 + (\rho_p \varphi_p V)^{00}}{\Delta t^2}$$

## APPENDICE E

### BUOYANTBOUSSINESQSIMPLEFOAM

Come già anticipato OpenFOAM è un software opensource rilasciato gratuitamente sotto licenza GNU ; pertanto dalla Free Software Foundation sono stati definiti i seguenti “diritti fondamentale” dell’utente:

- Possibilità di utilizzare il software per qualunque scopo
- Possibilità di studiare e modificare il codice sorgente a proprio piacimento
- Copiare il programma
- Modificare, possibilmente migliorandolo, il programma e dare la possibilità, a chi interessato, di usufruire dei miglioramenti apportati

Quindi in OpenFOAM è possibile avere totale accesso ai codici sorgenti ( solutori, definizione delle condizioni al contorno, creazione delle mesh ..ecc ecc). Grazie a questa possibilità in questa appendice faremo un’analisi ( di massima ) del solutore utilizzato al fine di potere utilizzare il software con una maggiore consapevolezza delle potenzialità e dei limiti ad esso collegati.

Per accedere ai solutori è necessario entrare nella cartella *solvers* fig(64)

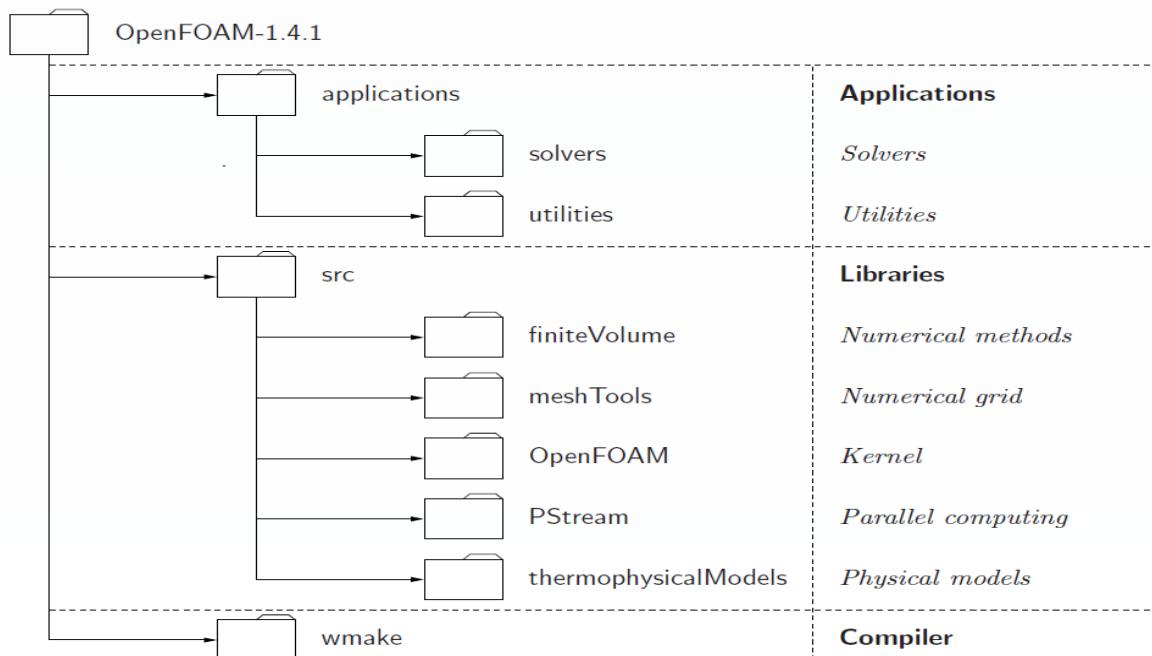


Figura 65: Struttura di OpenFOAM

Questo è possibile digitando da terminale:

*cd OpenFoam/OpenFoam 2.2.2/application/solvers*

Una volta dentro la cartella solvers è possibile selezionare il solutore desiderato; nel nostro caso:

*cd HeatTransfert/buoyantBoussinesqSimpleFoam*

all'interno di questa cartella si trovano 7 oggetti cioè:

- Una cartella denominata *Make* nella quale è presente il compilatore
- *TEqn.H*: nel quale è implementata la soluzione numerica dell'equazione dell'energia (nella forma della temperatura)
- *pEqn.H*: nel quale è contenuto il corrector step dell'algoritmo simple
- *UEqn.H*: nel quale è risolta l'equazione della quantità di moto
- *createFields.H*: permette al codice di inizializzare le condizioni iniziali ed al contorno
- *readTransportProperties.H*: legge le proprietà termo fisiche del problema
- *buoyantBoussinesqSimpleFoam.C*: contiene l'algoritmo solutore

Riportiamo il file *buoyantBoussinesqSimpleFoam*.

```
/*
=====
| OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| Operation |
| Copyright (C) 2011-2013 OpenFOAM Foundation
| Manipulation |

License
This file is part of OpenFOAM.

OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
under the terms of the GNU General Public License as published by
the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
(at your option) any later version.

OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License
along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.

Application
buoyantBoussinesqSimpleFoam

Description
Steady-state solver for buoyant, turbulent flow of incompressible fluids

Uses the Boussinesq approximation:
\f[
rho_{k} = 1 - beta(T - T_{ref})
\f]

where:
\f$ rho_{k} \f$ = the effective (driving) density
```

```

beta = thermal expansion coefficient [1/K]
T = temperature [K]
\f$ T_{ref} \f$ = reference temperature [K]

Valid when:
\f[
\frac{\beta(T - T_{ref})}{\rho_{ref}} << 1
\f]

\*-----*/
```

```

#include "fvCFD.H"
#include "singlePhaseTransportModel.H"
#include "RASModel.H"
#include "fvOptionList.H"
#include "simpleControl.H"

//*****
```

```

int main(int argc, char *argv[])
{
    #include "setRootCase.H"
    #include "createTime.H"
    #include "createMesh.H"
    #include "readGravitationalAcceleration.H"
    #include "createFields.H"
    #include "createFvOptions.H"
    #include "initContinuityErrs.H"

    simpleControl simple(mesh);

//*****
```

```

Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;
while (simple.loop())
{
    Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
    // Pressure-velocity SIMPLE corrector
    {
        #include "UEqn.H"
        #include "TEqn.H"
        #include "pEqn.H"
    }
    turbulence->correct();
    runTime.write();

    Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
    << " ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
    << nl << endl;
}

Info<< "End\n" << endl;

return 0;
}
```

```
// ****

```

Dopo una breve introduzione all'applicazione inserita come commento ( parte in blu tra // oppure /\* \*/) dopo di che il file contiene alcuni #include "file.H" comando che blocca la lettura del file corrente per leggere "file.H".

Successivamente viene definita la funzione principale di tutta la procedura

```
int main(int argc, char *argv[])
```

in cui sono inseriti i parametric

- int argc :argument count cioè il numero dei parametri usati dall'applicazione
- char \*argv[] : argoument vector il valore dei precedenti parametri

Successivamente all'interno del file sono presenti alcuni statement #include

- #include "setRootCase.H" : definisce la directory del caso
- #include "createTime.H" :crea l'istante iniziale t=0
- #include "createMesh.H" : crea la griglia di calcolo
- #include "readGravitationalAcceleration.H": legge il vettore accelerazione gravitazionale
- #include "createFields.H": legge e inizializza i campi delle variabili analizzate (U,p,T)
- #include "createFvOptions.H" : è correlato alle sorgenti
- #include "initContinuityErrs.H" : inizializza il valore degli errori di continuità che si creeranno durante il calcolo

L'insieme di queste operazioni una volta lanciata la simulazione forniscono l'output:

Create time

Create mesh for time = 0

Reading g  
Reading thermophysical properties

Reading field T

Reading field p\_rgh

Reading field U

Reading/calculating face flux field phi

Selecting incompressible transport model Newtonian  
Creating turbulence model

```
Selecting RAS turbulence model kOmegaSST
kOmegaSSTCoeffs
{
    alphaK1 0.85034;
    alphaK2 1;
    alphaOmega1 0.5;
    alphaOmega2 0.85616;
    gamma1 0.5532;
    gamma2 0.4403;
    beta1 0.075;
    beta2 0.0828;
    betaStar 0.09;
    a1 0.31;
    c1 10;
}
```

Reading field alphat

Calculating field g.h

```
SIMPLE: convergence criteria
field p_rgh tolerance 1e-05
field U tolerance 1e-06
field h tolerance 1e-06
field "(k|epsilon|omega)" tolerance 1e-06
```

Tutte le operazioni precedentemente illustrate vengono eseguite una volta solamente all'inizio della procedura; il vero e proprio time loop parte con l'istruzione:

*while (simple.loop())*

Tutte le operazioni fatte d'ora in poi verranno eseguite ad ogni timeStep

- #include "UEqn.H" risolve l'equazione della quantità di moto

```
tmp<fvVectorMatrix> UEqn
(
    fvm::div(phi, U)
    + turbulence->divDevReff(U)
    ==
    fvOptions(U)
);
UEqn().relax();
fvOptions.constrain(UEqn());
if (simple.momentumPredictor())
{
    solve
    (
        UEqn()
    ==
        fvc::reconstruct
    (

```

```

(
- ghf*fvc::snGrad(rhok)
- fvc::snGrad(p_rgh)
)*mesh.magSf()
)
);

fvOptions.correct(U);
}

```

Queste istruzioni risolvono

$$u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu_{eff} \left[ \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \left( \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \right\} = - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + g_i (1 - \beta(T - T_{ref}))$$

$$\nu_{eff} = \nu + \nu_T$$

- #include "TEqn.H" : risolve l'equazione dell'energia

```

{
alphat = turbulence->nut()/Pr;
alphat.correctBoundaryConditions();
volScalarField alphaEff("alphaEff", turbulence->nu()/Pr + alphat);
fvScalarMatrix TEqn
(
fvm::div(phi, T)
- fvm::laplacian(alphaEff, T)
==
fvOptions(T)
);
TEqn.relax();
fvOptions.constrain(TEqn);
TEqn.solve();
fvOptions.correct(T);
rhok = 1.0 - beta*(T - TRef);
}

```

Questo file risolve:

$$u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} - \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} (\alpha_{eff} T) = \dot{q}$$

con

$$\alpha_{eff} = \frac{\alpha}{Pr} + \frac{\alpha_T}{Pr_T}$$

Inoltre in base al campo di temperatura viene definita la driven density

$$\rho_k = 1 - \beta(T - T_{ref})$$

- #include "pEqn.H": in questo file sono presenti gli algoritmi che eseguono le correzioni fatte affinché il flusso rispetti la continuità

```
{
volScalarField rAU("rAU", 1.0/UEqn().A());
surfaceScalarField rAUf("Dp", fvc::interpolate(rAU));
volVectorField HbyA("HbyA", U);
HbyA = rAU*UEqn().H();
UEqn.clear();

surfaceScalarField phig(-rAUf*ghf*fvc::snGrad(rhog)*mesh.magSf());
surfaceScalarField phiHbyA
(
"phiHbyA",
(fvc::interpolate(HbyA) & mesh.Sf())
);
adjustPhi(phiHbyA, U, p_rgh);
phiHbyA += phig;
while (simple.correctNonOrthogonal())
{
fvScalarMatrix p_rghEqn
(
fvm::laplacian(rAUf, p_rgh) == fvc::div(phiHbyA)
);
p_rghEqn.setReference(pRefCell, getRefCellValue(p_rgh, pRefCell));
p_rghEqn.solve();
if (simple.finalNonOrthogonalIter())
{
// Calculate the conservative fluxes
phi = phiHbyA - p_rghEqn.flux();
// Explicitly relax pressure for momentum corrector
p_rgh.relax();
// Correct the momentum source with the pressure gradient flux
// calculated from the relaxed pressure
U = HbyA + rAU*fvc::reconstruct((phig - p_rghEqn.flux())/rAUf);
U.correctBoundaryConditions();
fvOptions.correct(U);
}
}
```

```

}

#include "continuityErrs.H"

p = p_rgh + rhok*gh;

if (p_rgh.needReference())
{
    p += dimensionedScalar
    (
        "p",
        p.dimensions(),
        pRefValue - getRefCellValue(p, pRefCell)
    );
    p_rgh = p - rhok*gh;
}
}

```

Infine al termine del calcolo dell'equazione della quantità di moto dell'energia e della pressione si effettuano le correzioni dovute alla turbolenza:

*turbulence->correct();*

Riportiamo a titolo di esempio un generico loop di una simulazione effettuata con `BuoyantBoussinesqSimpleFoam`

Time = 0.52

```

smoothSolver: Solving for Ux, Initial residual = 0.436432, Final residual = 0.0233741, No Iterations 2
smoothSolver: Solving for Uy, Initial residual = 0.439699, Final residual = 0.0234317, No Iterations 2
smoothSolver: Solving for Uz, Initial residual = 0.0746153, Final residual = 0.00264455, No Iterations 2
smoothSolver: Solving for T, Initial residual = 0.0870555, Final residual = 0.00376002, No Iterations 3
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.672005, Final residual = 0.0049275, No Iterations 3
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.0294632, Final residual = 0.000270121, No Iterations 5
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.00412884, Final residual = 4.04116e-05, No Iterations 38
time step continuity errors : sum local = 1.89389e-05, global = 4.67426e-07, cumulative = 1.63526e-06
smoothSolver: Solving for omega, Initial residual = 0.0230239, Final residual = 0.00187859, No Iterations 3
smoothSolver: Solving for k, Initial residual = 0.173613, Final residual = 0.0102363, No Iterations 3
ExecutionTime = 92.21 s ClockTime = 94 s

```

Dove si possono individuare :

- In rosso le operazioni compiute dalla parte di programma contenuto in `UEqn.H`
- In blu le operazioni eseguite da `TEqn.H`
- In nero le operazioni eseguite da `pEqn.H`
- In verde le operazioni eseguite da `continuityErrs.H` (contenuto all'interno di `pEqn.H`)
- In viola le correzioni fatte a causa del moto turbolento dovute alla presenza di `RASmodel.H` all'inizio del file `buoyantBoussinesqSimpleFoam.C`

**APPENDICE F****VALIDAZIONE FISICA DEL DOMINIO DI CALCOLO E PRIMA SIMULAZIONE FLUIDODINAMICA****Scopo prima simulazione (preliminare) in OpenFoam**

Lo scopo di questa appendice è quello di compiere una prima validazione fisica del dominio di calcolo eseguendo una prima simulazione considerando solamente il flusso dell'acqua senza scambio termico.

**CONSIDERAZIONI PRELIMINARI:**

- Scelta del modello di turbolenza: poiché siamo interessati al calcolo dei valori medi delle grandezze in gioco nell'ambito di questa tesi utilizzeremo il modello di turbolenza RANS cioè le equazioni mediate alla Reynolds ; nell'ambito RANS esistono numerosi modelli di turbolenza al fine di stimare il valore del tensore di Reynolds ( cioè il termine aggiuntivo) che compare nelle equazioni una volta mediate, i due più utilizzati sono certamente il modello  $k-\varepsilon$  e quello  $k-\omega$  che presentano naturalmente pro e contro; tuttavia visto il problema che vogliamo analizzare, caratterizzato da importanti fenomeni di interazione fluido parete ( strato limite ) è più conveniente utilizzare il modello  $k-\omega$ .
- Scelta del solutore: OpenFOAM presenta una vastissima gamma di solutori che si propongono di descrivere flussi laminari, turbolenti stazionari e non stazionari; nel nostro caso abbiamo deciso di adottare il solutore pisoFoam progettato per risolvere mediante l'algoritmo PISO flussi non stazionari e caratterizzati da fenomenologia turbolenta.

**IMPLEMENTAZIONE PRIMA SIMULAZIONE IN OPENFOAM**

In questa prima simulazione ci preoccupiamo di validare la fisicità della fluidodinamica del sistema senza considerare per ora il campo di temperatura ed i fenomeni convettivi ad esso associati. Come anticipato nel capitolo 3 un caso in OpenFOAM è costituito principalmente da tre cartelle fondamentali:

1. `O` : contiene le condizioni al contorno ed iniziali
2. `Constant`: contiene le proprietà termo fisiche e tutte le grandezze che non variano nel corso della simulazione
3. `System`: contiene tutti i file necessari alla risoluzione del problema

Come prima simulazione per la validazione fisica del dominio di calcolo ci proponiamo di compiere una simulazione concentrandosi esclusivamente sulla fluodinamica del problema;

Per l'implementazione del caso in OpenFOAM cominciamo con la definizione delle condizioni al contorno ed iniziali cioè con la creazione della cartella 0 all'interno di una cartella dedicata al caso stesso, all'interno di 0 saranno presenti i seguenti file:

- **p** e **U** variabili fisiche del problema; in questa prima simulazione p sarà settata uniforme a 155 bar mentre U è stata calcolata di primo tentativo essere nell'ordine dei 4 m/s all'inlet.
- **K,omega,nut** : questi tre parametri non sono grandezze fisiche ma devono essere inizializzate nel codice per includere gli effetti dovuti al moto turbolento;
  1. **k** e **omega** rispettivamente energia cinetica delle fluttuazioni turbolente e dissipazione specifica fanno parte del modello di turbolenza scelto e vengono risolti in due equazioni di trasporto.
  2. **Nut** è la eddy viscosity è misura l'aumento di viscosità percepito a causa dell'interazione tra i vortici presenti nel moto turbolento; essa viene calcolata sulla base dei valori di k ed omega e può essere o no inizializzata nella cartella zero a discrezione dell'utente.

Una volta inizializzati parametri in 0 si rende necessario creare una cartella **constant** nella quale verrano inseriti tutti i parametri che non variano nel corso della simulazione, dentro constant sono presenti i file:

- **RASmodel**: nel quale viene specificato il modello, appartenete alla classe RAS, di turbolenza utilizzato ( $k-\omega$  nel nostro caso)
- **transportProperties**: in questo file vengono specificate le proprietà fisiche del fluido (essendo una simulazione prettamente fluidodinamica solamente la viscosità cinematica) ed il legame costitutivo del fluido stesso che abbiamo scelto essere Newtoniano
- **turbulenceProperties**: all'interno di questo file viene specificato il tipo di simulazione della turbolenza adottato (RANS LES o DNS) nel nostro caso si è scelto RANS

Infine si crea la cartella system della quale saranno inseriti tutti i file necessari alla risoluzione numerica del problema:

- **controlDict**: file necessario per definire il solutore ,settare il tempo di inizio e fine simulazione, l'ampiezza dei timestep, il numero si time step dopo cui il risultato viene salvato, il numero di cifre tenute in memoria nel corso della simulazione ed infine il controllo diretto della stabilità numerica attraverso l'imposizione dei un limite superiore al numero di Courant.

- **fvSchemes**: all'interno di questo file sono contenute tutte le informazioni sugli schemi numerici adottati per la risoluzione delle equazioni discretizzate
- **fvSolution**: all'interno di fvSolution sono contenute le informazioni sui solutori delle equazioni e sulle tolleranze adottate nel corso della simulazione per far giungere un calcolo a convergenza
- **decomposeParDict**: file necessario solo se, si voglia far svolgere il calcolo in parallelo.

Una volta definiti tutti i precedenti parametri è possibile far partire la simulazione in OpenFOAM; come prima cosa importiamo la griglia di calcolo, creata tramite il meshatore FLUENT-ICEM, in un formato compatibile con quello di OpenFOAM digitando da terminale:

*fluent3DMeshToFoam 3D\_fa\_extruded.msh*

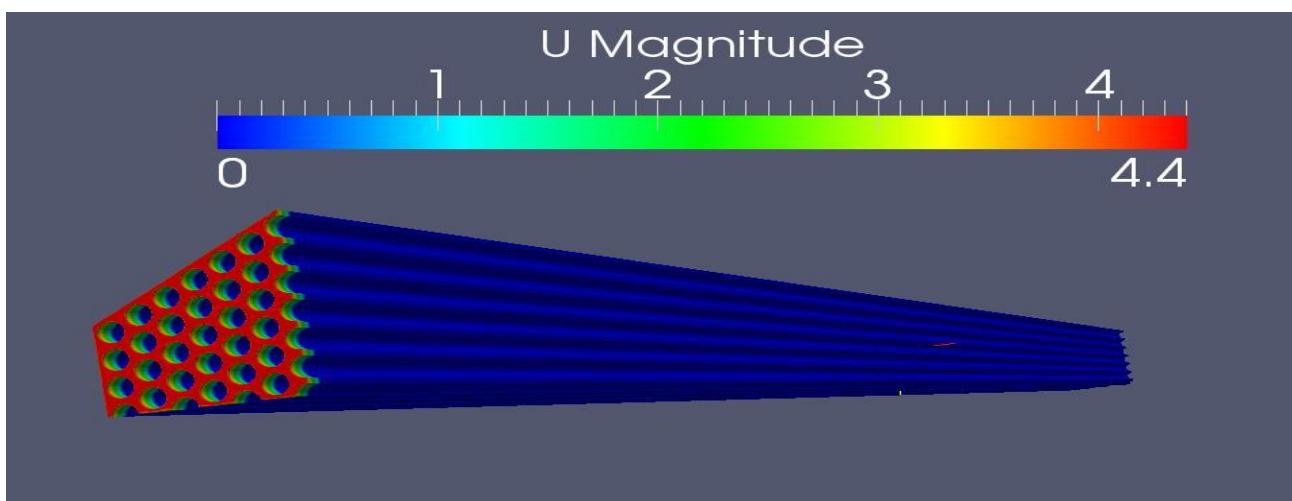
Dopo aver importato la mesh in openFoam è consigliabile lanciare il comando

*checkMesh*

il quale controlla la compatibilità e la validità della griglia importata.

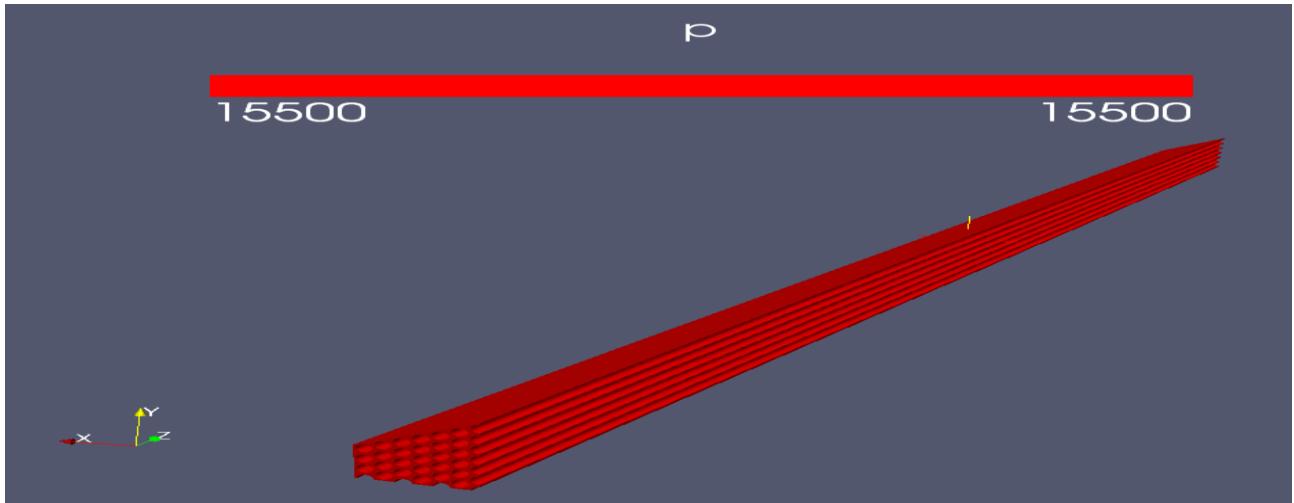
Dopo aver lanciato questi due comandi viene creato il dominio di calcolo ed inizializzate le condizioni iniziali ed al contorno sulle variabili definite precedentemente nella cartella 0.

Le condizioni iniziali sono visualizzabile tramite il tool di postProcessing Parafoam



**Figura 66 : Campo di velocità all'istante t=0**

Velocità al tempo 0: nulla in tutto il dominio tranne che nell'inlet



**Figura 67 : Campo di pressione all'istante t=0**

Pressione: non ci sono gradienti imposti agli estremi del fuel-assembly

Ora creata all'interno di openFoam la griglia di calcolo e definite le condizioni iniziali è possibile far partire la simulazione vera e propria; al fine di avere un controllo totale sulla simulazione stessa viene creato all'interno della cartella system il file controlDict:

In questo file viene specificato:

- Il solutore adottato: ( nel caso considerato pisoFoam)
- Il tempo da cui partire
- Il tempo a cui fermare la simulazione
- Il passo temporale da usare nella simulazione ( parametro fondamentale per l'accuratezza e la stabilità).
- Il numero di time-step dopo il quale viene salvato un output
- Il numero di cifre decimali conservate in memoria durante la simulazione
- Infine nelle ultime tre righe si può implementare la possibilità di variare il timestep in funzione del numero di Courant; questa funzione è di fondamentale importanza nei calcoli transitori in quanto il numero di Courant è un parametro strettamente legato alla stabilità numerica del codice stesso

## NUMERO DI COURANT ( CENNI )

Il numero di Courant definito come il rapporto adimensionale  $Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$  è una grandezza adimensionale legata strettamente ai fenomeni convettivi e rappresenta lo spazio percorso da una particella fluida nell'intervallo di tempo pari ad un time-step diviso una lunghezza caratteristica; nel nostro caso la lunghezza caratteristica potrebbe essere la lunghezza media dei lati delle cellette in cui abbiamo diviso il dominio.

La stabilità numerica impone che il numero di Courant non superi mai di troppo l'unità, fatto che può essere controllato se accade per poche cellette e per brevi intervalli di tempo mentre può portare, se si diffonde per zone più ampie dell dominio; all'istabilità; proprio per questo all'interno del file controlDict, precedentemente citato, è possibile aggiungere l'opzione che fissi un valore massimo al numero di Courant regolando di conseguenza il valore del time step in funzione della velocità locale e delle dimensioni delle mesh; nel nostro caso in valore max del numero di Courant è fissato pari a 1,5

## ESECUZIONE DELLA SIMULAZIONE

Per lanciare il solutore è necessario posizionarsi nella cartella contenente le cartelle 0, constant e system e lanciare da terminale

*pisoFoam > log &*

Dove il comando pisoFoam lancia il solutore; il simbolo > reindirizza l'output del solutore in un file di testo, che in questo caso abbiamo chiamato log, ed infine & fa eseguire l'intero processo in background. Si intende inoltre aggiungere che se si volesse visualizzare in tempo reale da terminale l'output del programma basterebbe digitare il comando:

*tail -f log*

## PARAMETRI DI CONTROLLO DELLA SIMULAZIONE

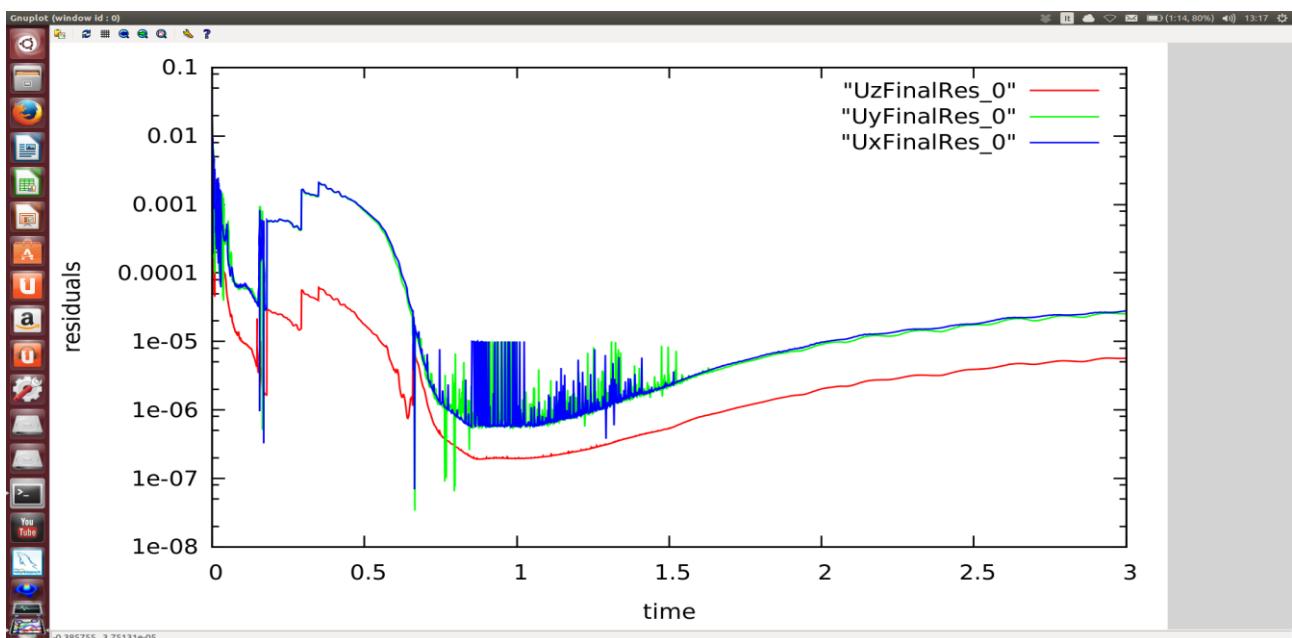
I parametri di controllo sulla simulazione (cioè: valore massimo accettabile dei residui , tipo di solutore utilizzato,etc) sono specificati nel file *fvSolution* contenuto nella cartella system:

Come anticipato in precedenza nel corso della simulazione è possibile salvare in una cartella a parte i parametri di controllo ( residui iniziali e finali delle iterazioni valori medi e massimi del numero di Courant) della simulazione stessa. Riportiamo nelle figure seguenti gli andamenti di queste grandezze plottati grazie all'utile tool di Ubuntu GNUPLOT.

Come prima cosa estraiamo i dati presenti nel file di testo log tramite **foamLog log** ; a questo punto verrà creata una cartella denominata logs all'interno della quale saranno presenti tutti i file di testo contenenti i risultati dei calcoli.

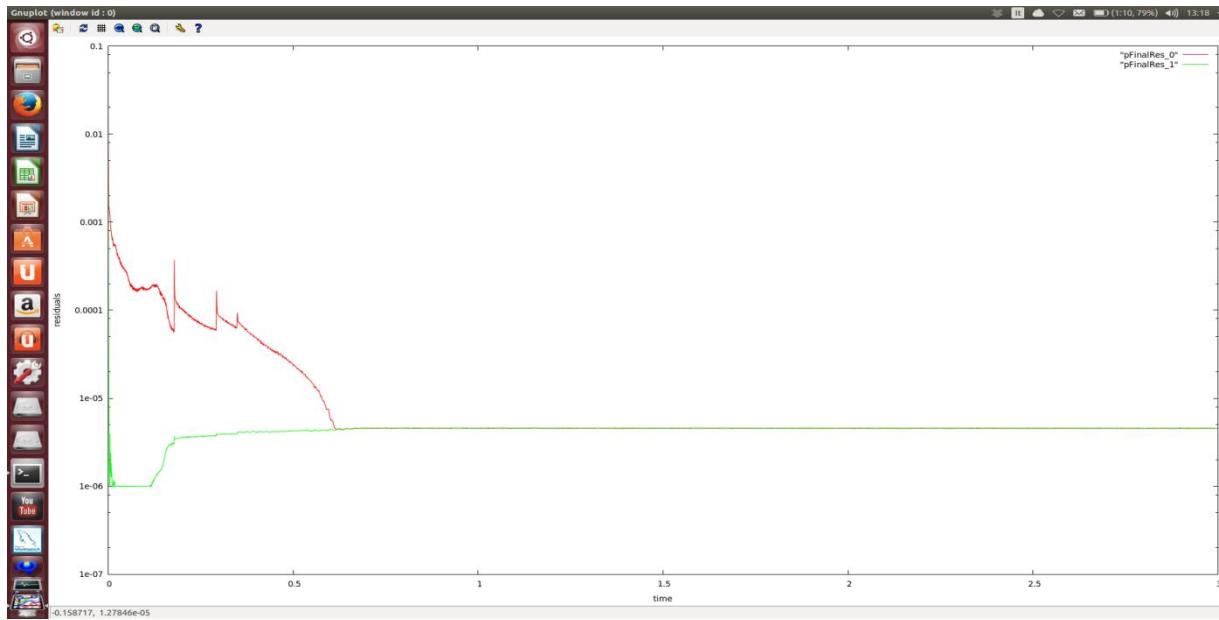
Per accertarci che la simulazione sia andata a buon fine grafichiamo l'andamento dei residui in funzione del tempo:

- Residui delle componenti del vettore velocità risultanti dalla discretizzazione dell'equazione della quantità di moto: fig 67 Si può osservare come dopo alcune oscillazioni iniziali il valore di quest'ultimi si stabilizzi in un intorno della tolleranza richiesta nel file fvSolution :



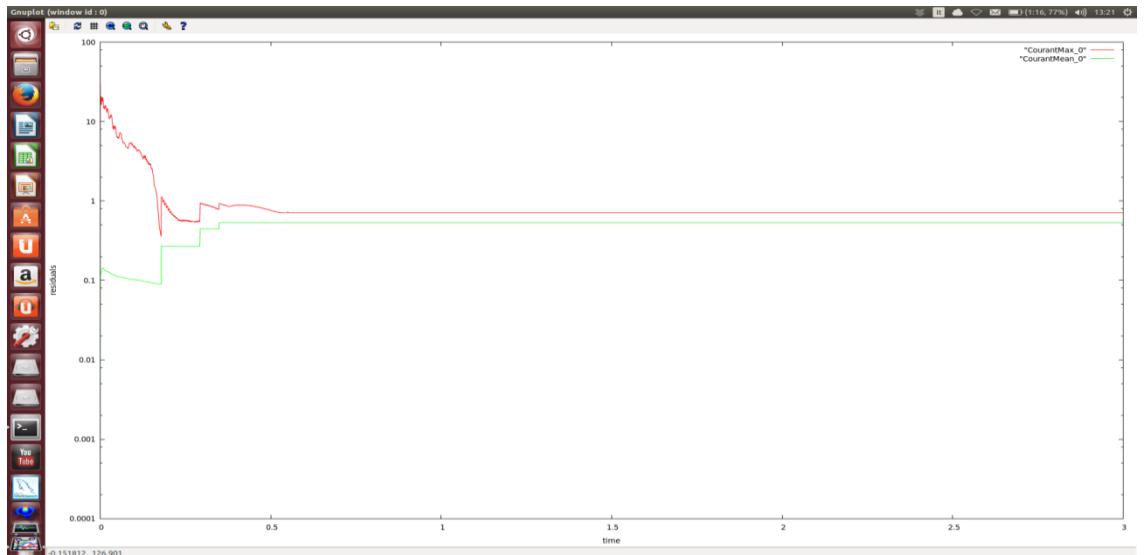
**Figura 68 : Residui componenti cartesiane della velocità**

- Residui della pressione per il primo ed il secondo loop dell'algoritmo risolutivo (fig. 68). Anche in questo caso dopo alcune oscillazioni iniziali (che rimangono comunque al di sotto di una parte su mille) il valore dei residui si attesta intorno alla tolleranza prestabilita in fvSolution.



**Figura 69 : Residui della pressione per il corrector loop**

- Infine analizziamo l'andamento del numero di Courant cioè il parametro più strettamente legato alla stabilità numerica della simulazione; in particolare verrà riportato l'andamento del valore massimo e medio di questo parametro. Anche in questo caso si può osservare come dopo alcune oscillazioni iniziali il valore max si attestи in un intorno dell'unità



**Figura 70 : Valori del numero di Courant Max e Medio**

## ANALISI DEI RISULTATI

Nel paragrafo precedente ci siamo occupati dello studio della convergenza (condizione necessaria affinché la simulazione vada a buon fine) in questa sezione invece ci concentreremo sui risultati della simulazione e sulla attendibilità di questi ultimi.

Come prima cosa assicuriamoci che la continuità venga soddisfatta infatti considerando l'equazione di continuità :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U}) = 0$$

Essendo il fluido assunto incomprimibile la derivata rispetto al tempo è pari a zero ; la parte rimanente può essere integrata sul volume di controllo e grazie al teorema di Gauss si giunge :

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U}) dV = \int_{\partial V} \rho \vec{U} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Ricordando che il fluido è incomprimibile e le sezioni di ingresso ed uscita sono le stesse si giunge alla forma  $U_{z \text{ in}} = U_{z \text{ out}}$

Nell'inlet la velocità viene imposta essere  $\vec{U} = (0,0,4.4)$  nell'outlet può essere calcolata mediante l'utilities :

*patchAverage –latestTime U OUTLET*

che restituisce come risultato

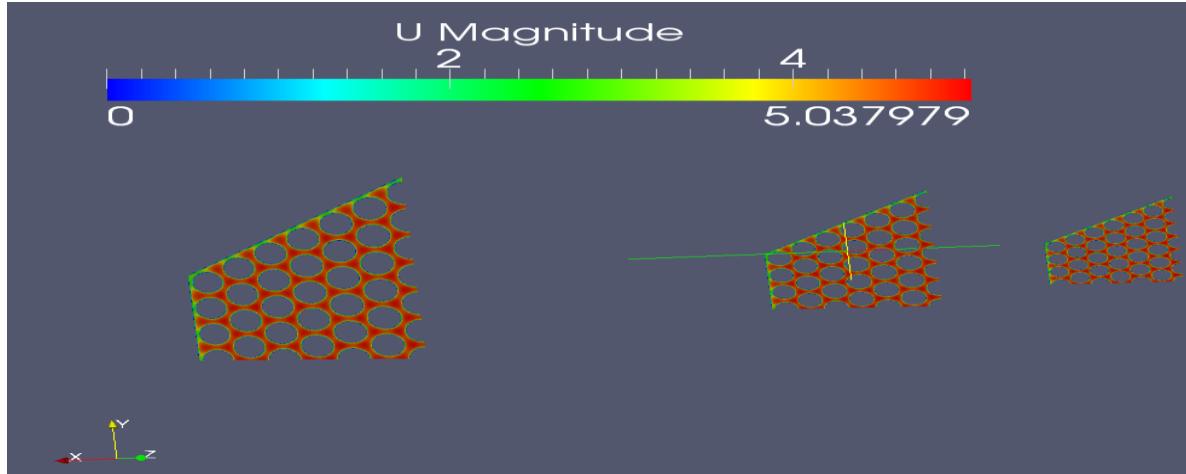
*Average of volVectorField over patch OUTLET[1] = (-0.000100574 -0.000111783 4.39999)*

Quindi come si può vedere in tab 22 la continuità risulta soddisfatta.

**Tabella 22: portata massica nell'inlet e nell'outlet e calcolo dell'errore**

M <sub>inlet</sub>	M <sub>outlet</sub>	Errore%
11 kg/s	10.975 kg/s	0.2%

Riportiamo inoltre una sezione retta del fuel assembly in cui è riportata la distribuzione del modulo del vettore velocità



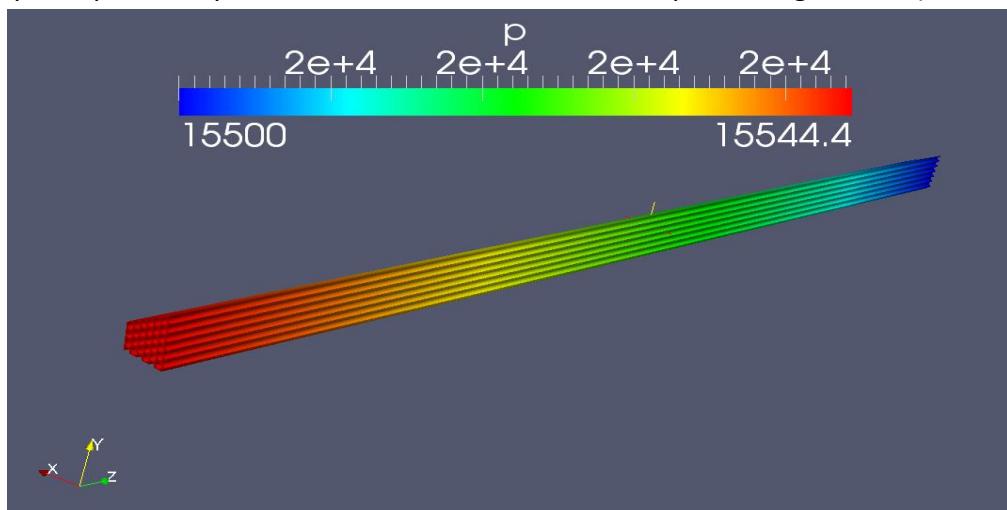
**Figura 71 : Sezione lungo z del campo di velocità**

#### CADUTA DI PRESSIONE

Attraverso utili formule empiriche è possibile calcolare la caduta di pressione teorica agli estremi del fuel assembly e confrontarla con i risultati che scaturiscono dal calcolo al fine di fare un utile confronto per rendersi conto della veridicità della simulazione.

La caduta di pressione teorica invece è possibile calcolarla direttamente dai rilustati della simulazione tramite il comando, visto precedentemente , **patchAverage** applicato sia all'inlet che all' outlet del fuelassembly.

Ci teniamo a sottolineare il fatto che openFoam utilizzi la pressione adimensionalizzata rispetto alla densità (il fluido si assume incomprimibile ed è quindi possibile portare la densità fuori e dentro l'operatore gradiente).



**Figura 72 : Campo di pressione**

**Tabella 23: Confronto pertita di carico calcolato-teorico e calcolo dell'errore relativo**

$\Delta p_{\text{calcolato}}$	$\Delta p_{\text{teorico}}$	Errore%
0.3 bar	0.26 bar	13

Quindi il calcolo fornisce un valore di perdita sovrastimato rispetto a quello fornito dalle formule empiriche; questo risultato potrebbe essere dovuto al fatto che per il calcolo delle perdite di carico si è utilizzato la correlazione di Colebrook fa riferimento a tubi cilindrici ( nel nostro caso il calcolo è stato eseguito tramite il diametro ideale equivalente ) mentre la geometria del fuel-assembly è molto più complicata e implica perdite di carico maggiori.

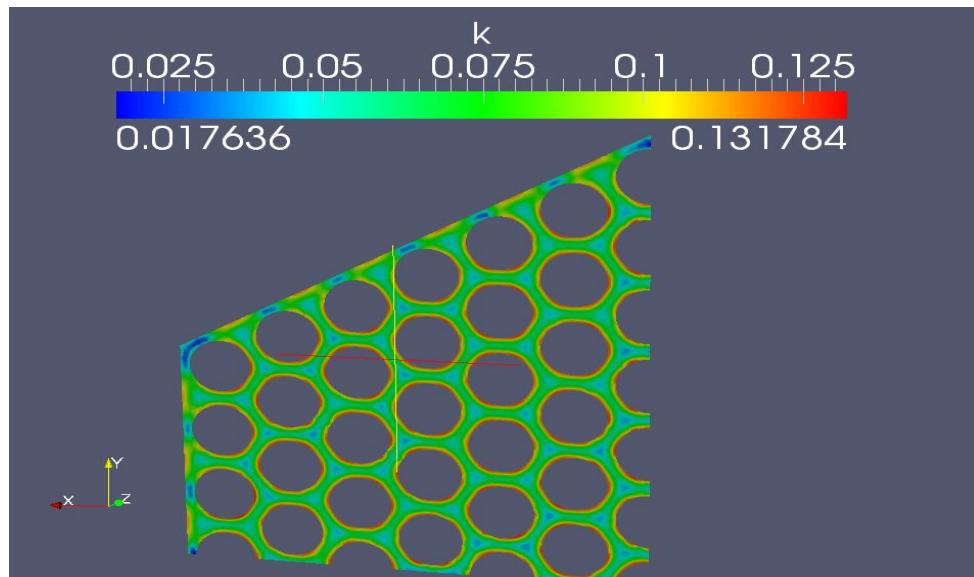
#### ALTRI PARAMETRI DELLA SIMULAZIONE

Dopo aver analizzato i due parametri più significativi cioè la conservazione della portata e la caduta di pressione agli estremi del fuel assembly riportiamo i valori di altri due parametri usati dal software per modellizzare il fenomeno della turbolenza.

**Tabella 24: Valori energia cinetica turbolenta**

$k_{\text{inlet}}$	$k_{\text{outlet}}$
$0.072 \text{ m}^2/\text{s}^2$	$0.076 \text{ m}^2/\text{s}^2$

**k energia cinetica turbolenta:**

**Figura 73: energia cinetica turbolent**

**Omega:** parametro che descrive la scala a cui avviene il fenomeno turbolento

**Tabella 25: Valori di Omega**

$\omega_{\text{inlet}}$	$\omega_{\text{outlet}}$
$2181 \text{ s}^{-1}$	$2685 \text{ s}^{-1}$