

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI NAPOLI
“FEDERICO II”



DIPARTIMENTO INGEGNERIA AEROSPAZIALE

Tesi di Dottorato di Ricerca in
INGEGNERIA AEROSPAZIALE
(XXII CICLO)

**Simulazione numerica di moti a superficie libera
mediante il metodo VOF**

Relatore:
Ch.mo Prof. Luigi de Luca

Candidato:
Ing. Giuseppe Rocco

Novembre 2009

...in memoria di Fabio.

Indice

1	Introduzione	2
1.1	Introduzione	2
1.2	Panoramica sui metodi di simulazione	5
1.3	Stato dell'arte dei metodi VOF	11
1.4	Obiettivi	15
2	Modellistica fisico-matematica	16
2.1	Introduzione	16
2.2	Equazioni di bilancio	16
2.3	Fisica dell'interfaccia	19
2.3.1	Descrizione matematica dell'interfaccia	19
2.3.2	Cinematica delle superfici materiali	23
2.3.3	Condizioni di continuità all'interfaccia	25
2.3.4	Tensione superficiale	26
2.4	Volume of Fluid Methods (VOF)	29
2.4.1	Ricostruzione	31
2.4.2	Propagazione	31
2.5	Il modello di Navier-Stokes per i flussi multifase	32
3	Modellistica numerica	34
3.1	Introduzione	34
3.2	Soluzione delle equazioni di Navier-Stokes	34

3.2.1	Il problema della pressione nelle Navier-Stokes	35
3.3	Risoluzione dell'equazione per la frazione di volume	36
3.3.1	Ricostruzione dell'interfaccia	36
3.3.2	Propagazione dell'interfaccia	37
3.4	Contributo di tensione superficiale	39
4	Il codice MultiFluids	42
4.1	Introduzione	42
4.2	Equazione di bilancio della quantità di moto	43
4.3	Ellittica di Pressione	47
4.4	Test case	49
4.4.1	Test Case 1: trasporto della frazione di volume	49
4.4.2	Test Case 2: static drop	50
4.4.3	Test Case 2: rising bubble	51
5	Liquid sheet	53
5.1	Introduzione	53
5.2	Simulazione numerica	54
5.2.1	Dominio computazionale	55
5.2.2	Condizioni iniziali ed al contorno	57
5.2.3	Lamina liquida gravitazionale	58
5.2.4	Jet-swell problem	59
5.2.5	Influenza del numero di capillarità	61
5.2.6	Influenza del numero di Stokes	61
5.3	Considerazioni conclusioni	62
6	Un'applicazione tecnologica: coating flows	64
6.1	Introduzione	64
6.2	Simulazione numerica	66
6.2.1	Dominio computazionale	66

6.2.2	Condizioni iniziali ed al contorno	67
6.3	Risultati	68
6.4	Considerazioni conclusive	69
7	Impatto di una goccia su un film di liquido	72
7.1	Introduzione	72
7.2	Considerazioni di carattere fisico	76
7.3	Modello di Josserand-Zaleski	78
7.4	Simulazioni numeriche	83
7.4.1	Dominio computazionale, condizioni iniziali ed al contorno . .	84
7.4.2	Regime di Deposition	85
7.4.3	Regime di Spreading	86
7.4.4	Regime di Spalshing	88
7.5	Spreading Factor e leggi di scaling	91
7.6	Lo splash come meccanismo di formazione di discontinuità	93
7.7	Simulazioni 3-D	96
	Bibliografia	103

Capitolo 1

Introduzione

1.1 Introduzione

In questa tesi si propone un'indagine numerica del moto di fluidi immiscibili, non reattivi, incomprimibili ed isotermi. Tali sistemi sono generalmente detti multifase e, con riferimento al loro moto, si parla di moti a superficie libera o anche di flussi multifase. I flussi a superficie libera sono presenti in numerosi fenomeni naturali ed applicazioni tecnologiche, rivestendo un ruolo di estrema importanza in varie branche della scienza, dalla fisica alla oceanografia, dall'ingegneria alla scienza dei materiali.

La simulazione numerica di flussi a superficie libera ha ricevuto un grande impulso negli ultimi anni, sia per il ruolo che essi rivestono in molte applicazioni ingegneristiche, sia per i numerosi fenomeni naturali in cui coesistono due o più fluidi immiscibili. Fin dagli anni '70 numerosi gruppi di ricerca hanno focalizzato la loro attività sulla messa a punto di metodi numerici per lo studio della dinamica delle interfacce, dando così vita ad una vasta letteratura scientifica. La simulazione numerica di flussi multifase occupa pertanto un ruolo rilevante e, unitamente alla simulazione dei flussi turbolenti, rappresenta senz'altro una delle frontiere più avanzate della fluidodinamica computazionale e, al tempo stesso, uno dei settori più

affascinanti e complessi di questa disciplina scientifica.

Caratteristica peculiare dei sistemi multifase è la presenza di una superficie di discontinuità, comunemente nota come interfaccia. Detta superficie, deformandosi, può assumere configurazioni molto complesse e subire fenomeni di instabilità e breakup. L'interfaccia, per effetto di fenomeni di natura microscopica, è sede di un campo di forze generalmente dette tensioni superficiali. Tali forze conferiscono all'interfaccia un comportamento "elastico" e, al tempo stesso, sono causa di numerosi, ed affascinanti, fenomeni naturali. La caratteristica di immiscibilità tra fluidi che, causa la formazione dell'interfaccia, ha origine a livello microscopico ed è il risultato di una discontinuità tra le forze di coesione molecolare. Tale discontinuità, a livello macroscopico, è espressa dal coefficiente di tensione superficiale che, come è ovvio aspettarsi, misura la "resistenza alla deformazione" opposta dall'interfaccia. Elevati valori di tensione superficiale esprimono dunque l'esistenza di un intenso stato tensionale superficiale. Il coefficiente di tensione superficiale dipende naturalmente da numerosi parametri: dalla presenza di elementi tensio-attivi, dalla coppia di liquidi posti a contatto e, per finire, dalla temperatura.

La fluidodinamica dei sistemi multifase è generalmente governata da effetti di tensione superficiale e dalle forze di massa. La combinazione di queste forze può dar luogo ad un'ampia varietà di fenomeni: effetto Marangoni, onde capillari e di gravità, ponti liquidi, getti liquidi, migrazione termocapillare, crescita di cristalli, fenomeni di sloshing, instabilità, breakup ed atomizzazione.

L'instabilità dell'interfaccia è, per esempio, uno dei fenomeni più affascinanti, complessi, e tecnologicamente rilevanti in ambito multifase. Infatti, il processo di atomizzazione, rilevante nell'industria della propulsione, è il risultato di una instabilità di tipo Kelvin-Helmoltz. Un esempio di applicazione tecnologica è dato dagli atomizzatori a pressione usati nei motori Diesel. Questi dispositivi trasformano un salto di pressione in energia cinetica per produrre un getto liquido che, soggetto ad instabilità, si rompe espellendo una nuvola di goccioline e, favorendo, in tal modo, il processo di combustione. Esempi di instabilità dell'interfaccia che conducono

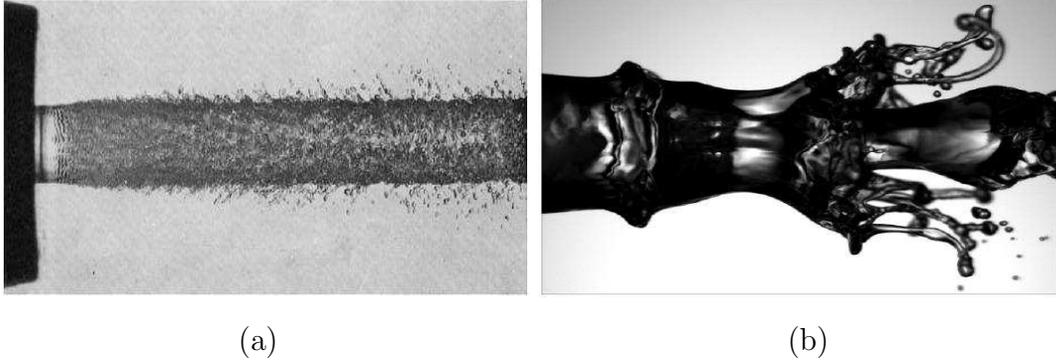


Figura 1.1: Instabilità di getti liquidi: (a) da Hoyt *et al.* [1], (b) da Marmottant *et al.* [2].

all'atomizzazione di un getto sono riportati in figura 1.1.

I flussi a superficie libera rivestono un ruolo notevole anche in ambiente marino, caratterizzato dal moto ondoso e da complessi flussi di scia. Recentemente, alcuni metodi di simulazione numerica diretta di flussi a superficie libera sono stati impiegati nella progettazione di imbarcazioni sportive al fine di determinare la cosiddetta resistenza di carena. Un altro problema molto sentito, in ambiente marino, è la formazione di bolle di cavitazione nelle regioni di bassa pressione che, incontrando forti gradienti di pressione, collassano causando seri danni alle strutture marine.

In ambito accademico, un esempio di moto a superficie libera molto studiato è costituito dall'impatto di una goccia su di una superficie solida o liquida (figura 1.2). Questo problema, diffusamente documentato in letteratura, sarà affrontato in dettaglio nel capitolo 7.

Almeno da un punto di vista formale, la simulazione numerica di un flusso multifase non è molto diversa dalla simulazione numerica di sistemi monofase. Infatti, come vedremo in seguito, le ipotesi poste condurranno ad una formulazione delle equazioni di Navier-Stokes con densità e viscosità variabili. Tuttavia, in ambito multifase, ai ben noti problemi della simulazione numerica di sistemi monofase occorre aggiungere il problema della dinamica dell'interfaccia. In letteratura esistono

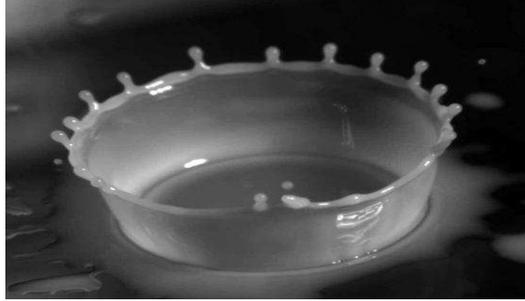


Figura 1.2: Esempio di Splash di una goccia [3].

diversi metodi di simulazione di moti a superficie libera che, nel seguente paragrafo saranno classificati in “Interface capturing methods” e “Interface tracking methods”.

1.2 Panoramica sui metodi di simulazione

La simulazione numerica di flussi multifase ha attratto l’interesse di molti gruppi di ricerca a partire dagli anni ’60. Esiste pertanto una vasta letteratura in materia. Tra i primi tentativi di simulazione numerica di moti a superficie libera, si ricorda qui il lavoro di Harlow e Welch [4] che risale al 1965. In questo lavoro gli autori propongono il noto metodo MAC (Marker And Cell), successivamente impiegato da Harlow [5] nello studio dello splash di una goccia.

A partire dai primi anni ’70 si sono sviluppati numerosi metodi e codici numerici per la simulazione di flussi in presenza d’interfaccia. Tali codici, inizialmente poco performanti, ma ricchi di idee originali, hanno dato vita ad nuova generazione di codici in grado di catturare complessi fenomeni fisici in ambito multifase.

L’enorme potenziamento delle risorse computazionali consente oggi di realizzare codici sempre più performanti che, naturalmente, richiedono uno sforzo intellettuale sempre maggiore al fine di garantire proprietà sempre più raffinate delle soluzioni numeriche. Un elenco, sicuramente non esaustivo, delle caratteristiche che un metodo di simulazione di flussi multifase deve possedere è il seguente:

- conservazione della massa;
- elevata accuratezza;
- schemi numerici locali;
- compattezza dell'interfaccia;
- robustezza topologica;
- estendibilità alle simulazioni 3-D;
- parallelizzazione.

Naturalmente non sempre è possibile soddisfare simultaneamente tutte queste caratteristiche, dunque, all'occorrenza, si dovrà trovare una giusta mediazione tra le suddette esigenze di calcolo.

In letteratura esistono numerosi metodi di simulazione numerica di flussi multi-fase. Una possibile classificazione di tali metodi è qui riportata:

- Interface capturing methods: volume of fluid, level set, phase field methods;
- Interface tracking methods: moving grid, front tracking, marker methods.

Nei capturing methods l'interfaccia è vista come una regione di forti gradienti (la densità, per esempio) che soddisfa un'equazione di pura convezione. Il principale vantaggio di questi metodi è che non occorre implementare nessun algoritmo per descrivere le variazioni topologiche dell'interfaccia che, per effetto della diffusione numerica, può risultare diffusa in una regione piuttosto ampia del mesh computazionale con una corrispondente perdita di accuratezza.

Nei tracking methods, l'interfaccia è trattata in modo esplicito, come una superficie di discontinuità che si muove attraverso la griglia computazionale. Questi metodi offrono una migliore accuratezza dei precedenti, pur essendo gravati da un

maggiore costo computazionale. I tracking methods sono di natura lagrangiana, infatti, in questi metodi, la storia delle posizioni di punti giacenti sull'interfaccia viene "tracciata" integrando l'equazione:

$$\frac{dx_i}{dt} = \underline{u}_i \quad (1.1)$$

dove \underline{u}_i è la velocità con la quale si muovono i punti dell'interfaccia.

Diversamente, i capturing methods sono di natura euleriana. Infatti, in questi metodi, la dinamica dell'interfaccia non è "seguita" esplicitamente ma, "catturata" mediante una funzione caratteristica, f , che consente di mappare il dominio computazionale. Il tipo di mapping adottato consente un'ulteriore classificazione, infatti, alcuni metodi fanno uso di una funzione di mapping continua in tutto il dominio computazionale, ottenendo, in tal modo, una formulazione globalmente continua. Una seconda classe di metodi adotta una funzione caratteristica discontinua. Tuttavia, per mesh di ampiezza finita, la funzione caratteristica non è esattamente discontinua ma esiste una regione, dell'ordine di grandezza del mesh-size, in cui essa varia in modo più o meno regolare. Tale regione definisce dunque l'interfaccia. Infine, poiché l'interfaccia è una superficie materiale, l'equazione di evoluzione per la f , nei capturing methods, è semplice conseguenza dell'invarianza lagrangiana:

$$\frac{Df}{Dt} = 0 \quad (1.2)$$

Un aspetto molto interessante di questi metodi è che la conoscenza di f consente l'uso di un unico insieme di equazioni in tutto il campo di moto adottando una cosiddetta "One-fluid formulation". Tali equazioni, lontano dall'interfaccia si riducono a quelle classiche per un singolo fluido mentre, nella "regione d'interfaccia", contengono delle appropriate ricostruzioni e funzioni delta per i termini di tensione superficiale. Come già osservato, nei Capturing methods la posizione dell'interfaccia è definita mediante una regione di transizione più o meno compatta. Va comunque detto che, in molte applicazioni, un'ampiezza di interfaccia compatta può essere mantenuta solo adottando schemi numerici che godano di proprietà di monotonia e siano caratterizzati da una bassa diffusione numerica.

Un'esposizione esaustiva delle tecniche di simulazione esula dagli scopi di questo lavoro. Tuttavia, per amore della completezza, si accenna brevemente, e solo in modo descrittivo, ad alcuni tra i più noti metodi di simulazione di moti a superficie libera.

- **Moving grid methods**

Nei metodi “moving grid” il mesh computazionale è aggiornato durante il calcolo mediante l'intergrazione nel tempo della (1.1). Un metodo a griglia mobile può essere lagrangiano se tutti i punti della griglia sono mossi oppure misto (lagrangiano-euleriano) se solo un sottoinsieme di punti del dominio computazionale viene spostato. Con tali metodi si possono avere delle soluzioni molto accurate se il problema da modellare presenta una topologia dell'interfaccia regolare, intendendo con regolare una topologia non soggetta a forti deformazioni, filamentazioni, fusioni, o breakup. Infatti, se il campo di velocità presenta intensi strati vorticosi, in base ai quali gli elementi del mesh devono distorcersi e deformarsi, s'incontrano difficoltà nella descrizione topologica ed un deterioramento della accuratezza della soluzione. Una soluzione a questo problema consiste nell'effettuare una ridiscretizzazione del dominio computazionale mantenendo la connettività iniziale oppure permettendo un cambiamento di essa. Tale operazione comporta tuttavia l'impiego di sofisticate tecniche in grado di riconoscere la topologia dell'interfaccia nonché l'insorgere di diffusione artificiale e problemi di convergenza dell'algoritmo.

- **Front tracking methods**

In questi metodi l'interfaccia è rappresentata mediante dei marker lagrangiani connessi per formare un fronte che si muove attraverso il mesh computazionale fissato a priori. Mentre il fronte si muove e si deforma, punti di interfaccia sono aggiunti, rimossi, e riconnessi se necessario. L'interfaccia, descritta con in metodi front tracking può dunque, in linea di principio, subire cambi di topologia anche molto complessi se l'algoritmo adottato per le simulazioni è in grado di prendere delle

“decisioni topologiche”. In generale questi metodi non sono conservativi, tuttavia presentano una buona conservazione di massa per interfacce di topologia regolare ed elevata densità di marker.

- **Particle-based methods**

I metodi “particle-based” sono caratterizzati dall’uso di particelle per la rappresentazione di quantità fluide macroscopiche. Le equazioni di Navier-Stokes lagrangiane, in questi metodi, sono integrate su sfere di fluido (particle) aventi proprietà come massa, quantità di moto ed energia. L’uso di tale tecnica, per la modellazione di flussi di interfaccia, è molto attrattiva in quanto garantisce una bassa diffusione numerica. Tali metodi tuttavia non hanno avuto una grande diffusione a causa della elevata richiesta di risorse computazionali.

- **Level Set methods (LS)**

I metodi level set, introdotti da Osher e Sethian [6], sono tra i più diffusi per la simulazione numerica di flussi multifase. Il principale vantaggio di questi metodi risiede nel fatto che non è richiesto nessun trattamento topologico nella descrizione dell’interfaccia. Tale superficie è rappresentata dal livello zero di una funzione $\phi(\underline{x}, t)$, definita come $\phi(\underline{x}, t) = \pm d$ dove d è la distanza con segno del punto \underline{x} dall’interfaccia.

La dinamica dell’interfaccia è descritta integrando un’equazione di evoluzione per la funzione a variazione regolare ϕ ; ed è qui che risiede il principale vantaggio di questi metodi. Infatti, la regolarità della funzione consente di ottenere soluzioni numeriche accurate usando schemi algebrici che non prevedono una ricostruzione geometrica dell’interfaccia (e.g. schemi del secondo ordine come Runge-Kutta o ENO).

Paradossalmente, il principale svantaggio dei metodi LS deriva proprio da quello che si è visto essere il principale vantaggio. Infatti, l’uso della funzione $\phi(\underline{x}, t)$ è lecito sotto il vincolo che il gradiente di tale funzione rimanga costante durante il trasporto.

Purtroppo ciò non si verifica, pertanto, alla risoluzione numerica dell'equazione per il trasporto della $\phi(\underline{x}, t)$ deve seguire una operazione di “re-inizializzazione”, o “re-distanziamento”, della $\phi(\underline{x}, t)$ che, sfortunatamente, rende il metodo globalmente non conservativo.

- **Volume Of Fluid methods (VOF)**

I metodi VOF, introdotti da Hirt e Nichols [7], costituiscono probabilmente i metodi più usati per la modellazione di flussi multifase. Il successo di questi metodi è dovuto essenzialmente alla semplicità di implementazione, alla ampia documentazione, alla robustezza topologica ed alla facilità di integrazione di numerosi modelli fisici quali effetti di tensione superficiale ed effetti dovuti a forze magnetiche.

Nei metodi VOF, la posizione dell'interfaccia è descritta mediante una funzione di Heaviside che, da un punto di vista puramente numerico, rappresenta la frazione di volume di un fluido rispetto all'altro, in ogni cella del dominio computazionale. L'adozione di una tecnica di questo tipo fa inevitabilmente perdere informazioni di carattere topologico quali, per esempio, il versore normale e la curvatura locale. Tali grandezze dovranno dunque essere determinate mediante una ricostruzione geometrica basata sulla distribuzione della frazione di volume.

La dinamica dell'interfaccia è poi descritta mediante un'equazione di trasporto puramente convettivo della frazione di volume. Il metodo si articola dunque in due fasi: algoritmo di ricostruzione, in cui si determina la topologia dell'interfaccia essendo nota la distribuzione della frazione di volume; ed algoritmo di convezione, in cui si determina la dinamica dell'interfaccia mediante la risoluzione di un'equazione del tipo 1.2.

Il metodo VOF, ugualmente al metodo LS, non richiede uno specifico trattamento dell'interfaccia. Pertanto, entrambi i metodi sono molto semplici da programmare sia in 2-D che in 3-D. La principale differenza tra i metodi VOF ed i metodi LS è che i primi conservano la massa in modo intrinseco mentre i metodi LS non posseggono questa proprietà.

Nonostante l'ampia diffusione di questi metodi non mancano comunque problematiche irrisolte. Per esempio, un problema molto sentito, nell'ambito delle simulazioni VOF, è rappresentato dalla comparsa di correnti spurie. Questo fenomeno, puramente numerico, è dovuto al calcolo approssimato della curvatura dell'interfaccia nei termini di tensione superficiale.

- **Coupled LS-VOF method (CLSVOF)**

Recenti sviluppi nell'ambito delle simulazioni di moti a superficie libera hanno portato alla realizzazione di un metodo ibrido in cui si cerca di sfruttare, in modo proficuo, le caratteristiche di conservatività del metodo VOF e di continuità del metodo LS. Tale metodo, proposto da Sussman e Puckett [8], sembra essere tra i più promettenti nell'ambito delle simulazioni numeriche di flussi in presenza d'interfaccia, sebbene gravato da una complessità computazionale maggiore rispetto ai metodi da cui deriva.

1.3 Stato dell'arte dei metodi VOF

Il metodo VOF nasce negli anni '70 grazie ai lavori di DeBar [9], di Noh e Woodward [10] e di Hirt e Nichols [7]. Questi tre lavori, basati sull'idea del trasporto convettivo della frazione di volume, differiscono solo per il tipo di ricostruzione adottata nel calcolo dei flussi numerici sull'interfaccia.

In DeBar si adotta una “piecewise linear approximation” in cui l'interfaccia è ricostruita mediante segmenti di retta orientati in base alla normale locale all'interfaccia. In Hirt e Nichols si adotta una ricostruzione dell'interfaccia mediante segmenti allineati con la griglia computazionale in funzione anche della distribuzione locale della frazione di volume. In Noh e Woodward si adotta una ricostruzione monodimensionale di tipo SLIC (Simple Line Interface Calculation) in cui, adottando un approccio di tipo splitting, l'interfaccia viene approssimata con un segmento orientato con la griglia computazionale nella direzione in cui si calcola il flusso.

Tra questi primi lavori, quello che ha riscosso il maggiore successo è stato quello di Hirt e Nichols. Questi autori hanno sviluppato il codice SOLA-VOF che ha avuto un grosso successo e numerose varianti: NASA-VOF2D [11], NASA-VOF3D [12], RIPPLE [13] e FLOW3D. Questi codici sono stati diffusamente impiegati in ambito accademico ed industriale. Per esempio, una versione modificata del codice SOLA-VOF è stata utilizzata dai ricercatori della Xerox per modellare il flusso di inchiostro negli ugelli delle stampanti.

Un contributo notevole allo studio di fenomeni di tensione superficiale viene dal lavoro di Brackbill *et al.* [14] che, nel '91, propone un metodo per modellare gli effetti della tensione superficiale, il CSF (Continuum Surface Force). Il metodo CSF si diffonde rapidamente nella comunità scientifica e viene adottato da numerosi gruppi di ricerca.

Nel '93, Richards *et al.* [15] propongono una simulazione numerica del moto stazionario di un getto liquido assialsimmetrico in un ambiente quiescente. Questo lavoro è stato realizzato implementando il CSF in una variante del codice SOLA-VOF. Gli stessi autori, nel '94 utilizzano il codice SOLA-VOF per la simulazione numerica del breakup del getto [16], e, nel '95, completano questo ciclo di ricerche applicando il codice SOLA-VOF allo studio della formazione di gocce [17].

Il codice RIPPLE, proposto da Kothe e Mjolsness nel '92, rappresenta, per l'epoca, un sostanziale miglioramento delle caratteristiche del codice SOLA-VOF. Sebbene nel codice RIPPLE siano impiegati gli stessi schemi di ricostruzione adottati da Hirt e Nichols, gli autori sostengono che l'implementazione del modello CSF garantisce una buona accuratezza nella descrizione dell'interfaccia.

Nell'ambito dei metodi VOF, nel '93, LaFaurie *et al.* [18] propongono il codice SURFER per la simulazione dei flussi multifase incomprimibili. Questo codice risolve le equazioni di Navier-Stokes alle differenze finite su griglie staggerate con uno schema esplicito. L'incompressibilità essendo garantita dall'impiego di un solver multigrid per l'equazione ellittica della pressione. L'originalità di questo lavoro risiede nell'introduzione di un tensore degli sforzi capillari per la modellazione degli

effetti della tensione superficiale. Gli autori agivano, in tal modo, il calcolo esplicito della curvatura dell'interfaccia che, nei metodi VOF è un'operazione piuttosto critica. Questa tecnica verrà in seguito denominata CSS (Continuum Surface Stress) in chiaro antagonismo al metodo CSF.

Negli anni '90 le ricerche, in ambito VOF, si sono focalizzate principalmente sui metodi geometrici di ricostruzione dell'interfaccia. Molti autori, tra cui Parker, Youngs, Pilliod e Puckett, hanno fornito contributi importanti in tale ambito, proponendo schemi di ricostruzione dell'interfaccia di tipo High-Order.

Nel '91 Puckett [19] propone il metodo LVIRA (Least Squares Volume-of-fluid Interface Algorithm) per la ricostruzione High-Order (secondo ordine) dell'interfaccia.

Nel '92 Parker e Youngs [20] propongono un metodo geometrico molto intuitivo per la ricostruzione dell'interfaccia mediante segmenti. Tale algoritmo, che appartiene alla classe dei metodi PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation), consiste nella determinazione della pendenza della retta che approssima l'interfaccia mediante una media pesata delle frazioni di volume. Un esempio delle tecniche di ricostruzione geometrica adottate in passato, fino al metodo proposto da Parker e Youngs è riportato in figura 1.3.

Sempre nello stesso anno Pilliod [21] propone il metodo ELVIRA (Efficient Least Squares Volume-of-fluid Interface Algorithm) per la ricostruzione High-Order dell'interfaccia. Questo metodo è sostanzialmente una variante del metodo LVIRA. Per una più ampia discussione dei questi algoritmi di ricostruzione si rimanda al lavoro di Pilliod e Puckett [22].

Nel 2002 Renardy e Renardy [23] propongono il metodo PROST (Parabolic Reconstruction Of Surface Tension) per la ricostruzione dell'interfaccia al secondo ordine. In questo metodo l'interfaccia viene ricostruita mediante elementi di parabola e la curvatura è dunque calcolata in maniera analitica, dalla parabola interpolante. Gli autori testano il loro metodo sul classico problema di una goccia sferica in assenza di gravità e dimostrano come il metodo sia in grado di ridurre le correnti parassite

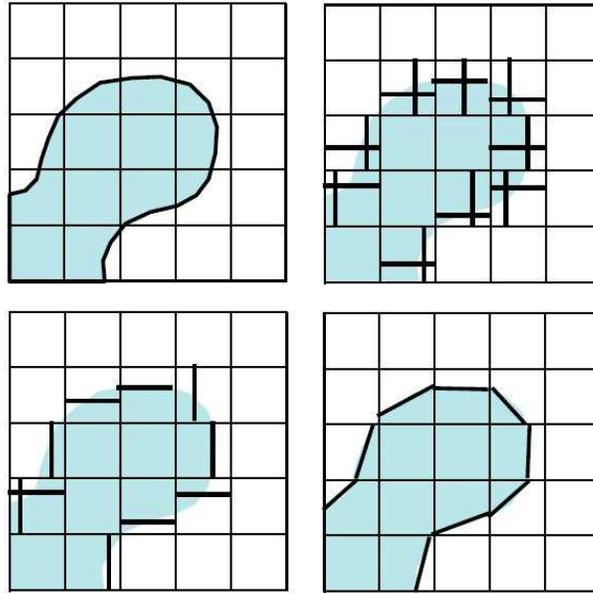


Figura 1.3: Esempi di ricostruzione dell'interfaccia.

allo zero macchina. Tuttavia, nonostante i risultati senz'altro ottimali ottenuti dagli autori, il metodo soffre di un elevato costo computazionale e di una non immediata codifica e, pertanto, rimane dominio quasi esclusivo dei suoi autori.

Nel 2003 Scardovelli e Zaleski [24] propongono un nuovo algoritmo di ricostruzione basato sull'idea di minimizzare un funzionale che descrive un'approssimazione mediante un segmento di retta o mediante un arco di cerchio. In questo lavoro gli autori propongono anche un metodo ibrido Lagrangiano-Euleriano per il trattamento della convezione. Gli autori confrontano i loro risultati con numerosi altri metodi disponibili in letteratura e mostrano come la combinazione del metodo Lagrangiano-Euleriano, con la ricostruzione ai minimi quadrati fornisca ottimi risultati.

Nel 2003 Ausilia et al. [25] un interessante schema di convezione che conserva esattamente la massa. In estrema sintesi, si tratta di un algoritmo Euleriano in una direzione e Lagrangiano nell'altra. Gli autori osservano che questo schema non

mostra fenomeni si overshoots o undershoots ossia la frazione di volume rimane sempre confinata tra 0 e 1.

1.4 Obiettivi

L'obiettivo dell'attività di ricerca, documentata in questa tesi, è la simulazione numerica del moto a superficie libera di fluidi incomprimibili e non reattivi. Lo strumento di calcolo adottato è il codice *MultiFluids* realizzato dall'autore di questa tesi.

Il codice realizzato è stato impiegato per la simulazione di diversi problemi fisici: rising bubble, drop impact, liquid sheet. Tali problemi non solo costituiscono dei test case fondamentali nell'ambito della simulazione multifase, ma rappresentano anche delle applicazioni in cui coesistono fenomeni fisici che hanno una notevole rilevanza in ambito industriale.

Al fine di rendere il più possibile autonomo questo lavoro, i capitoli 2 e 3 hanno un carattere fortemente numerico. In questi capitoli viene presentata la modellazione matematica e numerica alla base della progettazione del codice *MultiFluids*. L'architettura del codice è descritta più in dettaglio nel capitolo 4. I risultati delle simulazioni numeriche sono riportati nei capitoli 5, 6, 7.

Capitolo 2

Modellistica fisico-matematica

2.1 Introduzione

In questo capitolo vengono richiamati i concetti fondamentali della modellistica matematica dei flussi multifase e si fornisce un'interpretazione del metodo VOF basata su considerazioni di cinematica dei sistemi continui.

Nella prima parte di questo capitolo, al fine di rendere il più possibile autonomo questo lavoro, si richiama il modello di Navier-Stokes e si propongono alcune definizioni di cinematica dei continui e di geometria differenziale. In tale ambito si analizzano anche le condizioni di continuità all'interfaccia tra fluidi immiscibili.

Nella seconda parte del capitolo si presenta una breve descrizione del metodo VOF e si riportano le equazioni che costituiscono il modello matematico adottato per progettazione del codice *MultiFluids*.

2.2 Equazioni di bilancio

Il modello matematico che descrive il moto di un fluido deriva dai principi della meccanica dei continui: ipotesi del continuo, conservazione della massa e bilancio della quantità di moto. In base al principio di conservazione della massa si può

affermare che, fissato un volume di controllo V , la massa contenuta in esso varia nel tempo solo per effetto di flussi di massa attraverso la frontiera, S . Questa considerazione si esprime, in forma integrale, con la seguente equazione:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dv = - \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \quad (2.1)$$

essendo il volume di controllo fissato nello spazio, la derivata temporale a primo membro si può portare sotto il segno d'integrale. Inoltre, supponendo il campo di velocità derivabile, ed applicando il teorema di Gauss, si ottiene la seguente:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dv = 0$$

da cui la forma differenziale:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.2)$$

che esprime la conservazione della massa.

L'equazione di bilancio della quantità di moto deriva direttamente dalla seconda legge della dinamica ed esprime il fatto che, in un fissato volume di controllo, la variazione della quantità di moto è dovuta all'azione delle risultanti delle forze esterne. Possiamo dunque scrivere:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dv = - \int_S \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ds + \int_V \rho \mathbf{F} dv + \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} ds \quad (2.3)$$

dove il primo integrale a secondo membro rappresenta il flusso convettivo di quantità di moto, \mathbf{F} è un campo vettoriale che rappresenta le forze di volume agenti sul fluido e \mathbf{T} è il tensore degli sforzi che esprime le forze superficiali. In maniera analoga a quanto fatto per l'equazione di continuità si può porre in forma differenziale l'equazione di bilancio della quantità di moto, ottenendo:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (2.4)$$

ove il tensore degli sforzi, in un fluido Newtoniano, è legato linearmente al tensore della deformazione \mathbf{D} secondo la relazione costitutiva:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (2.5)$$

ove p è la pressione, \mathbf{I} il tensore unitario, μ il coefficiente di viscosità dinamica e $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)$ è la parte simmetrica del gradiente di velocità e λ il secondo coefficiente di viscosità, generalmente trascurabile. Sostituendo dunque l'espressione del tensore degli sforzi nella (2.4) si ottiene l'equazione di bilancio della quantità di moto:

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) - \nabla p + \rho\mathbf{F} + \nabla \cdot (2\mu\mathbf{D})$$

Si osservi che essendo:

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla \cdot (\rho\mathbf{u})$$

ed utilizzando l'equazione di bilancio della massa, si ottiene:

$$\rho\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho\mathbf{F} + \nabla \cdot (2\mu\mathbf{D}) \quad (2.6)$$

Restringendo inoltre l'interesse a fluidi incomprimibili ed isotermi, ove μ è costante, si ricavano facilmente le equazioni di Navier-Stokes:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.7)$$

$$\rho\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho\mathbf{F} + \mu\nabla^2\mathbf{u} \quad (2.8)$$

Le (2.7)-(2.8), opportunamente chiuse mediante condizioni iniziali ed al contorno, forniscono un modello matematico dotato di buone capacità predittive. Sfortunatamente, l'analisi teorico-funzionale non sempre è in grado di garantire se e quando, almeno in linea di principio, questa capacità predittiva sussiste. Problematiche relative alle condizioni di chiusura delle equazioni di Navier-Stokes esulano gli scopi di questi brevi richiami. Qui ci si limita solo ad osservare che, per gli obiettivi di questa tesi, il modello di Navier-Stokes sarà considerato chiuso se le condizioni iniziali ed al contorno garantiscono l'esistenza ed unicità della soluzione. Tali condizioni, non del tutto arbitrarie, devono rispettare dei vincoli di carattere differenziale ed integrale. A tal proposito si osserva che, per valori abbastanza bassi del numero di Reynolds (flussi laminari), e per forze di massa sufficientemente regolari, una buona condizione

di chiusura delle (2.7)-(2.8) è garantita da condizioni iniziali del tipo:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_o(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (2.9)$$

purchè risulti $\nabla \cdot \mathbf{u}_o = 0$, e da condizioni al contorno:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_B(\mathbf{x}, t) \quad \forall \mathbf{x} \in S \quad (2.10)$$

purchè la funzione \mathbf{u}_B sia regolare e rispetti il vincolo integrale di compatibilità:

$$\int_S \mathbf{u}_B \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (2.11)$$

2.3 Fisica dell'interfaccia

L'origine dell'immiscibilità, che dà luogo alla formazione dell'interfaccia, è dovuta ad una discontinuità delle forze di coesione molecolare. Queste interazioni, di natura coulombiana, si manifestano su scale microscopiche che, essendo di diversi ordini di grandezza inferiori a quelle tipiche della meccanica dei continui, non sono risolte in modo diretto. La modellazione matematica di queste interazioni, su scala macroscopica, avviene pertanto introducendo un campo di sforzi superficiali, la tensione superficiale. Dunque, nel presente contesto, l'interfaccia tra due fluidi immiscibili è modellata come una discontinuità di contatto attraverso cui le proprietà chimico-fisiche del sistema (densità e viscosità) variano in modo discontinuo.

2.3.1 Descrizione matematica dell'interfaccia

Nella simulazione numerica dei flussi multifase si assume che l'interfaccia sia una superficie dotata di buone caratteristiche di regolarità. In altri termini, in quest'ambito, l'interfaccia non è una superficie fisica, ma una superficie matematica regolare ossia almeno di classe C^1 . L'ipotesi che l'interfaccia sia una superficie regolare è legata alla esigenza di calcolare il versore normale. Tuttavia, più in generale, per l'esistenza della curvatura, necessaria per il calcolo degli effetti della

tensione superficiale, è opportuno ipotizzare che tale superficie sia anche di classe C^2 .

Dunque, posto che l'interfaccia sia una superficie matematica, esistono numerose vie per descrivere analiticamente tale superficie. Ad esempio, in problemi bidimensionali, si può adottare una rappresentazione esplicita del tipo $y = h(x, t)$, in letteratura nota come “height function”. Immaginando, in tal modo, che la superficie matematica, descritta da questa equazione, divida lo spazio in due sottospazi ciascuno occupato da una fase, figura 2.1. Questa rappresentazione esplicita dell'in-

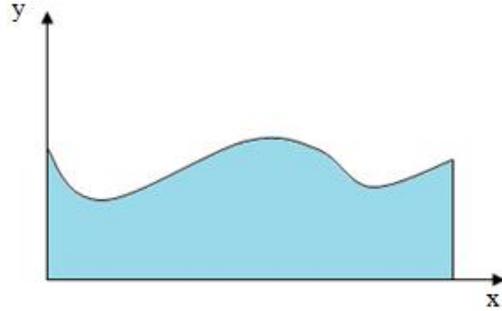


Figura 2.1: Descrizione dell'interfaccia mediante height function.

terfaccia è particolarmente utile in numerose modellazioni matematiche, specie in problemi bidimensionali. In tal caso, l'interfaccia non è altro che il grafico di una funzione:

$$y = h(x, t) \quad (2.12)$$

da cui, supponendo valide le suddette ipotesi di regolarità, si può calcolare la normale:

$$\mathbf{n} = \frac{-\partial h / \partial x, 1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2}} \quad (2.13)$$

e la curvatura:

$$k = \frac{-\partial^2 h / \partial^2 x}{\left(1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right)^{3/2}} \quad (2.14)$$

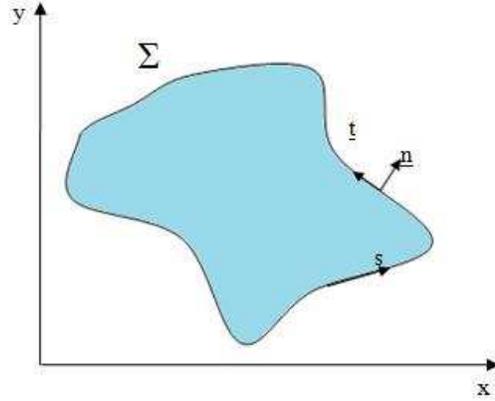


Figura 2.2: Descrizione parametrica dell'interfaccia.

Una rappresentazione alternativa dell'interfaccia, sempre in due dimensioni, è quella parametrica. Infatti, con riferimento alla figura 2.2, e introducendo un parametro s , che chiamiamo ascissa curvilinea, si può descrivere la curva mediante la funzione vettoriale:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(s) \quad (2.15)$$

da cui il versore tangente:

$$\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{x}}{ds} \quad (2.16)$$

mentre il versore normale può essere definito a partire dal versore tangente mediante una rotazione di questo verso l'esterno. Infine, si può ulteriormente osservare che il versore normale e quello tangente sono legati mediante la relazione:

$$\frac{d\mathbf{t}}{ds} = -k\mathbf{n} \quad (2.17)$$

Le suddette descrizioni analitiche dell'interfaccia sono molto utili nell'ambito della geometria differenziale, ma di scarso interesse nelle simulazioni numeriche oggetto di questa tesi. Nel presente contesto risulta più comodo definire l'interfaccia in modo implicito mediante una funzione caratteristica come le level set function o le funzioni di Heaviside. Nel primo caso, con riferimento alla figura 2.3, ove si riportano le linee

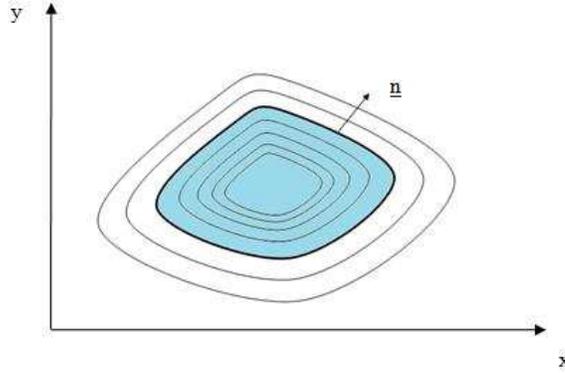


Figura 2.3: Descrizione dell'interfaccia mediante funzioni level set.

di livello della funzione $F(x, y)$, l'interfaccia sarà definita come il livello zero della funzione:

$$F(x, y) = 0 \quad (2.18)$$

Essendo, la funzione $F(x, y)$, definita come la distanza dall'interfaccia di un generico punto (x, y) . L'uso delle funzioni level set consente un immediato calcolo del versore normale mediante la relazione:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \quad (2.19)$$

da cui poi è possibile calcolare la curvatura come divergenza della normale:

$$k = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2.20)$$

Questa maniera di descrivere l'interfaccia tra due fluidi è intrinsecamente connessa al metodo level set, tuttavia, nel presente contesto ha invece interesse introdurre la descrizione matematica dell'interfaccia mediante funzioni di Heaviside. Dunque, con riferimento alla figura 2.4, s'introduce la funzione $H(x, y)$ che assume valore zero in una fase e valore 1 nell'altra fase. L'interfaccia pertanto sarà descritta dal luogo dei punti di discontinuità della funzione H . Formalmente tale funzione si definisce come integrale, esteso a tutto il dominio di definizione, D , del prodotto di funzioni

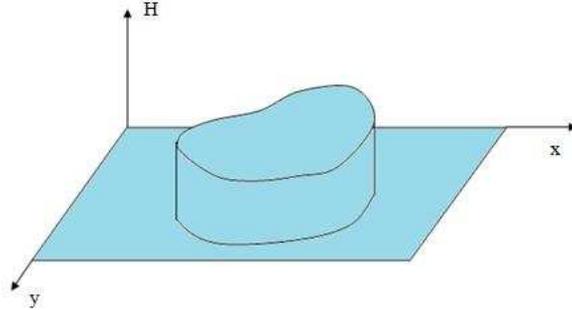


Figura 2.4: Descrizione dell'interfaccia mediante funzioni di Heaviside.

di Dirac:

$$H(x, y) = \int_D \delta(x - x')\delta(y - y')ds' \quad (2.21)$$

da cui, applicando l'operatore gradiente e sviluppando, si ottiene la definizione della normale all'interfaccia:

$$\underline{\nabla} H = -\mathbf{n}\delta_s \quad (2.22)$$

Si vuole in fine osservare che, le ipotesi di regolarità qui poste sono necessarie ai fini di una descrizione analitica dell'interfaccia, ciò non preclude tuttavia l'esistenza di situazioni fisiche molto critiche ove le suddette ipotesi non sono verificate. Ad esempio quale che sia la descrizione matematica adottata per l'interfaccia, in presenza di fenomeni di breakup certo non si potranno definire localmente, nel punto di rottura dell'interfaccia, i versori normale e tangente, né tanto meno la curvatura, che, nel punto di rottura tende addirittura ad infinito. Queste difficoltà, che da un punto di vista analitico sono notevoli, vengono superate nella simulazione numerica dal fatto che l'interfaccia, in senso numerico, è sempre una superficie diffusa in una regione più o meno compatta del mesh computazionale.

2.3.2 Cinematica delle superfici materiali

In questa sezione s'introduce in modo rigoroso l'equazione di evoluzione dell'interfaccia che è alla base del metodo VOF. Tale equazione, come già accennato, sarà

ricavata applicando le condizioni di invarianza lagrangiana delle superfici materiali. Infatti, l'interfaccia tra due fluidi, se non avvengono fenomeni di rottura, è proprio una superficie materiale. Consideriamo pertanto due fluidi immiscibili che riempiono interamente un dominio Ω dello spazio, e sia Σ l'interfaccia tra i due fluidi. Come visto nel precedente paragrafo, tale superficie può essere descritta, in forma implicita, mediante una funzione del tipo:

$$f(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.23)$$

ove \mathbf{x} è il vettore posizione di un generico punto Σ , mentre nella dipendenza temporale è insita la possibilità di deformazione della superficie. Le ipotesi alla base della meccanica dei continui, richiedono che in ogni punto $\mathbf{x} \in \Sigma$:

- il flusso di massa attraverso Σ sia nullo;
- i due fluidi rimangono in contatto in ogni istante del moto.

In base a queste ipotesi, ogni particella materiale $P \in \Sigma$ ha la componente normale della velocità pari proprio alla velocità della superficie Σ nella direzione normale ad essa, in termini matematici:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = V_n \quad (2.24)$$

Consideriamo dunque un punto $P \in \Sigma$, adottando la descrizione lagrangiana del moto di P , ovvero la sua traiettoria sarà data da:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p(t) \quad (2.25)$$

la relazione 2.23 si potrà dunque scrivere come:

$$f(\mathbf{x}_p(t), t) = 0 \quad (2.26)$$

che, derivata rispetto al tempo, fornisce:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_p}{\partial t} = 0 \quad (2.27)$$

da cui, in base alle ipotesi poste, si ricava l'equazione cercata:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \underline{V} \cdot \nabla f = 0 \quad (2.28)$$

tale relazione, come già anticipato, non fa altro che esprimere l'invarianza lagrangiana delle superfici materiali.

Nei metodi VOF si sceglie, tra infinite f , una funzione di Heaviside. In particolare la funzione scelta nel metodo VOF, la frazione di volume, esprime la frazione di volume di un fluido relativamente all'altro in ogni cella del dominio computazionale. Quest'ultima considerazione ha un interesse esclusivamente computazionale ma, in generale, la funzione potrebbe esprimere un qualunque invariante del moto, ad esempio la densità stessa del fluido.

2.3.3 Condizioni di continuità all'interfaccia

In questo paragrafo s'intende indagare sulle condizioni di continuità cinematica all'interfaccia tra due fluidi incompressibili ed immiscibili. Si consideri dunque un volume di controllo attraversato da un'interfaccia in un dato istante e si supponga, almeno inizialmente, che gli effetti della tensione superficiale siano trascurabili, figura 2.5. Sfruttando la condizione di indivergenza si può dimostrare che la componente

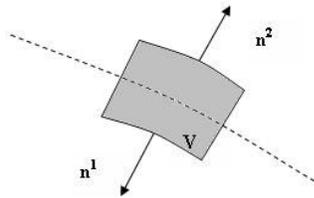


Figura 2.5: Deformazione dell'interfaccia.

normale della velocità all'interfaccia è continua. Infatti, essendo:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \lim_{\text{mis}(V) \rightarrow 0} \frac{1}{\text{mis}(V)} \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \quad (2.29)$$

da cui, essendo $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ si ottiene $u_n^1 = u_n^2$. Per quanto attiene alla componente tangenziale, si ipotizza la continuità in virtù delle ipotesi del continuo. In definitiva è lecito assumere che la velocità, attraverso l'interfaccia sia continua:

$$\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^2 = [\mathbf{u}]_i = 0 \quad (2.30)$$

Per quanto attiene alla conservazione della quantità di moto possiamo osservare che, in assenza di tensione superficiale, il flusso diffusivo di quantità di moto è anch'esso continuo attraverso una discontinuità non attraversata da flusso di massa. Pertanto otteniamo:

$$[-pI + 2\mu D]_i \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.31)$$

che, proiettata in direzione normale e tangenziale all'interfaccia:

$$[-p + 2\mu \mathbf{n} \cdot D \cdot \mathbf{n}]_i = 0 \quad (2.32)$$

$$[\mu \mathbf{t} \cdot D \cdot \mathbf{n}]_i = 0 \quad (2.33)$$

esprime la continuità degli sforzi normali e tangenziali.

Le condizioni appena ricavate sono valide solo nel caso in cui gli effetti della tensione superficiale siano trascurabili. Infatti, come si vedrà nel prossimo paragrafo, tali effetti comportano un salto di pressione attraverso l'interfaccia e, nel caso in cui, la tensione superficiale non sia uniforme lungo l'interfaccia, anche una discontinuità negli sforzi tangenziali.

2.3.4 Tensione superficiale

In questo paragrafo si analizzano i fenomeni meccanici che hanno sede sull'interfaccia che separa due fluidi in presenza di tensione superficiale. In particolare si mostrerà che, la condizione di continuità degli sforzi normali e tangenziali non è più valida in presenza di fenomeni meccanici riconducibili alla tensione superficiale.

La tensione superficiale, da un punto di vista meccanico è definita come la forza, per unità di lunghezza, necessaria a bilanciare il salto di pressione che s'instaura

all'interfaccia. Da un punto di vista microscopico, in presenza di interfaccia tra due mezzi, le azioni attrattive tra le molecole di un liquido (le forze di coesione) fanno sì che le molecole dello strato superficiale siano soggette ad una forza risultante non nulla che tende a farle spostare verso l'interno. Tali particelle tendono dunque a sfuggire dalla superficie limite del liquido che, di conseguenza, tende ad assumere l'estensione minima. Da un punto di vista energetico, le molecole sulla superficie possiedono un'energia potenziale superiore a quella delle molecole all'interno del liquido sicché, se si vuole aumentare la estensione della superficie libera, occorre spendere un'energia. In quest'ottica la tensione superficiale può essere intesa come il lavoro, per unità di superficie, necessario per deformare l'interfaccia tra due fluidi.

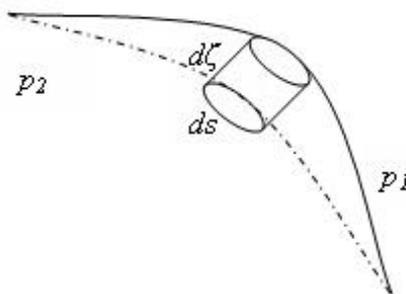


Figura 2.6: Deformazione dell'interfaccia.

Consideriamo, all'uopo, un sistema costituito da due fluidi immiscibili in condizione di equilibrio alle pressioni p_1 e p_2 . Supponiamo inoltre che l'interfaccia subisca una deformazione infinitesima $d\zeta$ in direzione normale ad essa 2.6. In queste ipotesi il lavoro elementare compiuto dalle forze di pressione sull'elemento di superficie ds sarà dato da:

$$(p_2 - p_1)dsd\zeta \quad (2.34)$$

a questo termine va aggiunto il lavoro compiuto dalla tensione superficiale che tiene

conto della deformazione della superficie:

$$(p_2 - p_1)dsd\zeta - \sigma\delta s \quad (2.35)$$

ove σ è la tensione superficiale e δs è la variazione dell'area dell'elemento di superficie ds dato da:

$$\delta s = \int_S d\zeta \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) df \quad (2.36)$$

Integrando a tutta la superficie materiale otteniamo:

$$\int_S \left\{ (p_2 - p_1) - \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right\} dsd\zeta = 0 \quad (2.37)$$

Siccome questa equazione è valida per ogni superficie S , si deduce che la funzione integranda deve essere nulla, quindi:

$$(p_2 - p_1) - \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = 0 \quad (2.38)$$

che è la nota formula di Laplace. Da questa relazione si comprende che se entrambi i raggi di curvatura sono positivi allora $p_2 - p_1 > 0$ e quindi la pressione è maggiore dal lato della concavità. Se inoltre i raggi di curvatura sono entrambi infiniti, allora l'interfaccia è piana e si recupera la condizione di continuità degli sforzi normali.

La modellistica qui esposta rappresenta una situazione molto semplice. Più complessa è la situazione se l'interfaccia separa due fluidi viscosi in movimento. In questo caso, sulla superficie di separazione tra i due fluidi, oltre alle forze di pressione occorre tener in conto gli sforzi tangenziali e la tensione superficiale.

$$[-pI + 2\mu D]_i \cdot \mathbf{n} = \sigma k \mathbf{n} + \nabla_i \sigma \quad (2.39)$$

che, proiettata in direzione normale e tangenziale fornisce:

$$[-p + 2\mu D \cdot \mathbf{n}]_i = \sigma k \quad (2.40)$$

$$[2\mu \mathbf{t} \cdot D \cdot \mathbf{n}]_i = \mathbf{t} \cdot \nabla_s \sigma \quad (2.41)$$

Si osservi, in fine, che questa condizione può essere soddisfatta solo da fluidi viscosi. In verità in molti casi è lecito ammettere che la tensione superficiale sia costante lungo l'interfaccia, recuperando, in tal modo, la condizione di continuità degli sforzi tangenziali.

2.4 Volume of Fluid Methods (VOF)

Come già osservato, nei metodi VOF, piuttosto che tracciare l'interfaccia tra i due fluidi, si determina l'evoluzione della frazione di fluido in ogni cella del dominio computazionale. Per questa ragione, spesse volte, in questo ambito, si parla di volume-tracking-methods. Consideriamo dunque un sistema multifase costituito da 2 fluidi incompressibili e non reagenti. Nel seguito distinguiamo i due fluidi con la dizione fluido 0 e fluido 1. La distribuzione spaziale dei fluidi sarà data da una funzione di Heaviside $f(x, y)$ che assume il valore 1 nei punti occupati dal fluido 1 ed il valore 0 altrove.

La funzione f è detta frazione di volume e, discretizzata, esprime la frazione del fluido 1 nel fluido 0 in ciascuna cella del dominio computazionale (figura 2.7). Tale

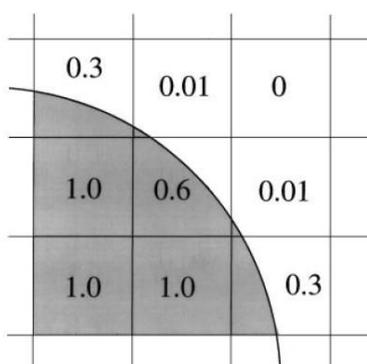


Figura 2.7: Distribuzione della frazione di volume

funzione deve rispettare rigorosamente il vincolo: $0 \leq f \leq 1$. Tuttavia, nella pratica computazionale, per questioni numeriche, si possono verificare degli overshoot o

undershoot sicchè la f può attingere a valori che non hanno significato fisico. Per limitare questo effetto, puramente numerico, si è tal volta costretti a filtrare la f nel seguente modo:

$$f(i, j) = \min(1, \max(f(i, j), 0))$$

L'equazione 2.28 costituisce l'elemento fondamentale del metodo VOF perchè, accoppiata alle equazioni di Navier-Stoke, consente di descrivere l'evoluzione della fase fluida presa in considerazione. Il metodo VOF è stato applicato ad un'ampia classe di moti, e, allo stato attuale, può essere considerato uno dei più affidabili, robusti, e semplici metodi di simulazione numerica dei flussi multifase. In conclusione, in questo paragrafo si riportano, in sintesi, le principali caratteristiche del metodo VOF:

- Il metodo VOF, basato sulla discretizzazione della 2.28 in forma conservativa, conserva la massa di ciascun fluido in modo naturale.
- Formalmente l'implementazione della 2.28, in un codice Navier-Stokes, è analoga alla implementazione dell'equazione del trasporto puramente convettivo di uno scalare passivo.
- Nessuno speciale trattamento è richiesto per descrivere la rottura, la ricomposizione, o qualunque variazione topologica dell'interfaccia.
- La semplicità di programmazione del metodo consente facilmente di estendere codici 2-D a codici 3-D.
- Gli schemi numerici impiegati per risolvere la (2.14) sono locali. Per questa ragione risulta relativamente semplice parallelizzare un generico codice VOF.

Come detto, i metodi VOF si articolano in due fasi: ricostruzione e propagazione dell'interfaccia. Nelle due sezioni che seguono si descrivono brevemente le problematiche relative alla ricostruzione ed alla propagazione.

2.4.1 Ricostruzione

L'obiettivo della ricostruzione è di individuare, in ogni cella del dominio computazionale, un'approssimazione dell'interfaccia. In letteratura esistono numerosi approcci al problema, tra questi, il più rudimentale è il metodo SLIC proposto da Noh e Woodward [10]. Questo metodo ricostruisce l'interfaccia con segmenti orientati solo in senso orizzontale o verticale rispetto alla cella computazionale. Tale ricostruzione sebbene non sia continua e ben lontana dalla topologia reale dell'interfaccia, è stata adottata da Hirt Nichols [7] nella realizzazione del codice SOLA-VOF. Questo metodo, piuttosto brutale, si mostra inefficace anche con campi di moto piuttosto semplici come traslazione rigida o rotazione rigida. Una tecnica di ricostruzione più accurata è la PLIC (Piecewise Linear Interpolation Construction) che fa uso di segmenti opportunamente orientati in ogni cella. Sebbene anche questo tipo di ricostruzione non è continua, i risultati ottenuti sono abbastanza buoni specie su griglie molto fitte e per curvature dell'interfaccia non troppo grandi. In letteratura esistono numerosi esempi di algoritmo di tipo PLIC, proposti da vari autori, tra questi, un esempio che ha avuto molto successo è quello proposto da Parker e Youngs [20].

2.4.2 Propagazione

Il secondo step del metodo VOF consiste nella propagazione dell'interfaccia, ossia la risoluzione dell'equazione 2.28, noto il campo di velocità e la configurazione iniziale della f . A tal proposito si può adottare un algoritmo di split, che aggiorna i valori della f al passo $n+1$ risolvendo la 2.28 prima in una direzione, poi nell'altra mentre, per il calcolo dei flussi numerici si adotta uno schema lagrangiano. In definitiva, l'algoritmo di split richiede due passi per determinare la nuova distribuzione della frazione di volume. Questo metodo è del primo ordine, tuttavia la procedura può essere resa del secondo ordine semplicemente alternando le direzioni di convezione ad ogni time step.

2.5 Il modello di Navier-Stokes per i flussi multifase

Nella modellistica dei flussi incompressibili multifase occorre tener conto degli effetti gravitazionali e della tensione superficiale. Pertanto, l'equazione di bilancio della quantità di moto diventa:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \sigma k \delta_s \mathbf{n}$$

ove \mathbf{g} è l'accelerazione gravitazionale, σ la tensione superficiale, k la curvatura dell'interfaccia e δ_S la funzione di Dirac. Il moto di un siffatto sistema è retto dunque dalle equazione di Navier-Stokes in cui la densità e la viscosità sono variabili formalmente incognite. Tali incognite sono direttamente riconducibili all'equazione per la frazione di volume. Infatti, la densità e la viscosità delle particelle sono “attaccate” ad esse, pertanto, descritte da una equazione analoga a quella per la frazione di volume, quindi esprimibili come:

$$\rho = \rho_1 f + (1 - f) \rho_0 \quad (2.42)$$

$$\mu = \mu_1 f + (1 - f) \mu_0 \quad (2.43)$$

ove ρ_0 , ρ_1 , μ_0 e μ_1 sono rispettivamente le densità e viscosità dei fluidi 1 e 0. Dunque, da quanto emerso nei precedenti paragrafi, si comprende che la simulazione numerica dei flussi multifase comporta la scrittura di un sistema di 4 equazioni nelle 4 incognite u, v, p, f in cui le equazioni di Navier-Stokes vengono accoppiate all'equazione del trasporto della frazione di volume.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.44)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \sigma k \delta_s \mathbf{n} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) = 0 \quad (2.46)$$

ove le densità e viscosità sono legate alla frazione di volume.

La soluzione numerica di questo sistema di equazioni, con opportune condizioni iniziali ed al contorno, costituisce il modello fisico-matematico alla base del metodo VOF e, al tempo stesso, costituisce la struttura matematica su cui si basa il codice *MultiFluids*.

Capitolo 3

Modellistica numerica

3.1 Introduzione

In questo capitolo si descrive il metodo adottato per risolvere le equazioni che reggono il moto di un sistema multifase, incomprimibile ed isoterma. Come già osservato nel precedente capitolo tali equazioni costituiscono un sistema differenziale di carattere predittivo, la cui soluzione consente di determinare la dinamica dell'interfaccia. In questo capitolo, almeno brevemente, sono poste le basi concettuali per la progettazione di un codice numerico di tipo VOF.

Nel paragrafo 2, per amore della completezza, si riporta una breve descrizione del projection method ed alcune considerazioni teoriche sul significato della pressione nei flussi incomprimibili. Nel paragrafo 3 si trattano gli schemi numerici adottati per la risoluzione dell'equazione di trasporto dell'interfaccia. Infine, nel paragrafo 4, si accenna brevemente all'implementazione del metodo CSF nel codice *MultiFluids*.

3.2 Soluzione delle equazioni di Navier-Stokes

Per la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes, nel codice *MultiFluids* si implementa un metodo di proiezione. In questo metodo il campo di velocità al passo

$n+1$ viene calcolato mediante due step. Nel primo step si calcola un campo di velocità intermedio, che non soddisfa la condizione di indivergenza mentre, nel secondo step, tale campo viene corretto in modo da risultare indivergente. Per illustrare quanto detto, consideriamo l'equazione di bilancio della quantità di moto nel caso di sistema ad un solo fluido (il caso di sistemi multifase si ottiene come immediata generalizzazione):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.1)$$

eliminando il gradiente di pressione dalla 3.1 si considera il campo approssimato \mathbf{u}^* :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} = -\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.2)$$

tale campo ha lo stesso rotore del campo \mathbf{u} . Tuttavia quest'ultimo è indivergente mentre il primo non lo è. Si osservi inoltre che i due campi differiscono a meno del gradiente della pressione:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \rho \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} \quad (3.3)$$

questa relazione suggerisce dunque che il campo di velocità \mathbf{u} può essere inteso come correzione del campo \mathbf{u}^* , essendo la pressione il termine correttivo del campo \mathbf{u}^* . Tale parametro, nei flussi incompressibili dipende solo dal campo di velocità. Infatti, applicando l'operatore di divergenza alla 3.3 si ottiene l'equazione ellittica che lega la pressione al campo \mathbf{u}^* :

$$\nabla^2 p = \nabla \cdot \left(\rho \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} \right) \quad (3.4)$$

In definitiva l'algoritmo di calcolo qui adottato consiste nella risoluzione della 3.2 per calcolare il campo di velocità intermedio, \mathbf{u}^* , successivamente nella determinazione del campo di pressione mediante la 3.4, ed infine nella correzione 3.3.

3.2.1 Il problema della pressione nelle Navier-Stokes

Particolare attenzione merita la variabile pressione nello studio dei campi incompressibili. Nel regime di moto compressibile, la pressione è una variabile termodinamica legata alla temperatura ed alla densità mentre, in regime incompressibile ed

isotermo la densità e la temperatura non variano. Ciò conduce all'improbabile paradosso che i gradienti di pressione siano sempre nulli in tale regime. Questo paradosso si supera facilmente riconsiderando il ruolo della pressione in regime incomprimibile. Infatti, in tale regime, la pressione perde il significato di variabile termodinamica ed acquista un significato più propriamente matematico (moltiplicatore di Lagrange). In altri termini, la pressione che compare nei modelli di flusso incomprimibile non è una funzione termodinamica, ma una variabile puramente meccanica. Ha senso dunque considerare la pressione alla stregua di una variabile ausiliaria e, pertanto, non occorre, anzi è fonte di errore, assegnare condizioni al contorno a tale grandezza. Oltretutto l'equazione 3.4 prova che il campo di pressione è legato al campo di velocità e, pertanto, l'assegnazione di condizioni al contorno ad entrambe le variabili non è lecita.

3.3 Risoluzione dell'equazione per la frazione di volume

Un aspetto fondamentale del metodo VOF è la risoluzione dell'equazione per la frazione di volume. Come già anticipato nel precedente capitolo, quest'aspetto del metodo può essere suddiviso in due fasi: ricostruzione e propagazione dell'interfaccia. In questa sezione si illustrano brevemente gli aspetti numerici relativi ai suddetti problemi.

3.3.1 Ricostruzione dell'interfaccia

Come già anticipato, la ricostruzione di un'interfaccia è un problema puramente geometrico e consiste nel determinare, in ogni cella del dominio computazionale, un segmento di retta che approssima l'interfaccia, essendo nota la frazione di volume. A tal proposito esistono in letteratura numerosi metodi. Una trattazione esaustiva di tali metodi esula gli scopi di questo paragrafo in cui, solo brevemente, si vuole

osservare che l'algoritmo PLIC, riconducibile ai lavori di Parker e Youngs [1], è il più diffuso e, pertanto, è implementato nel codice *MultiFluids*. Nel metodo di Parker e Youngs, la pendenza della retta approssimante è calcolata come gradiente della frazione di volume secondo la relazione:

$$\mathbf{m} = \nabla f \quad (3.5)$$

Per una accurata esposizione del metodo si rimanda al lavoro di Pilliod e Puckett [2], in questa sede si vuole solo osservare che l'uso della 3.5 presenta una notevole criticità derivante dal fatto che la funzione f è discontinua sull'interfaccia. Nel codice *MultiFluids* questo problema viene parzialmente superato filtrando la frazione di volume prima di derivarla. L'operazione di filtro è definita nel lavoro di LaFaurier et al. [3] ed ha lo scopo di smorzare la discontinuità della f .

3.3.2 Propagazione dell'interfaccia

In questa sezione si vuole descrivere lo schema numerico adottato per risoluzione dell'equazione di trasporto dell'interfaccia. Tale equazione è risolta con un algoritmo di tipo splitting ed i flussi numerici sono calcolati con uno schema lagrangiano proposto in [4]. Questo schema, in modo sintetico, aggiorna la frazione di volume al passo $n+1$ calcolando 3 contributi di flusso dalle celle adiacenti, dunque:

$$f^{n+1}(i, j) = \phi^-(i, j) + \phi^o(i, j) + \phi^+(i, j) \quad (3.6)$$

ove ϕ^- è il flusso proveniente dalla cella $(i - 1, j)$, ϕ^+ è il flusso proveniente dalla cella $(i + 1, j)$, mentre ϕ^o è la frazione di volume inizialmente presente nella cella (i, j) .

Con riferimento ad un problema bidimensionale, consideriamo l'equazione per il trasporto dello scalare scritta nella forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}f) = 0 \quad (3.7)$$

integrando tale equazione in un volume di controllo $\Omega_{i,j}$ e nell'intervallo temporale $[0, \tau]$ otteniamo:

$$\int_0^\tau \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial f}{\partial t} d\Omega dt = - \int_0^\tau \int_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot (\mathbf{u}f) d\Omega dt$$

che, applicando il teorema di Gauss, diventa:

$$\int_0^\tau \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial f}{\partial t} d\Omega dt = - \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}} (f\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS dt$$

scambiando gli integrali a primo membro, e svolgendo l'integrale temporale, otteniamo:

$$\int_{\Omega_{i,j}} (f^\tau - f^0) d\Omega = - \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}} (f\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS dt$$

che, in un approccio di tipo splitting, diventa:

$$\int_{\Omega_{i,j}} (f^\tau - f^*) + (f^* - f^0) d\Omega = - \sum_{l=1}^2 \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}^l} (f^{l-1}\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}^l) dS_l dt$$

dove con l si indica la direzione in cui si sta splittando l'equazione. Consideriamo dunque l'equazione splittata nella direzione x :

$$\int_{\Omega_{i,j}} (f^* - f^0) d\Omega = - \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}^1} f^0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}^l dS_l dt \quad (3.8)$$

dove f^0 e f^* rappresentano rispettivamente il valore della frazione di volume all'inizio ed alla fine del primo step d'integrazione. Ora, svolgendo l'integrale di volume a primo membro:

$$h^2(f^* - f^0) = - \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}^1} f^0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}^l dS_l dt \quad (3.9)$$

dunque, l'incognita f^* sarà data da:

$$f^* = f^0 - \frac{1}{h^2} \int_0^\tau \int_{\partial\Omega_{i,j}^1} f^0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}^l dS_l dt \quad (3.10)$$

L'integrale di superficie a secondo membro di questa equazione è valutato sulle facce verticali della celletta:

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}^1} f^0(x_{i+1/2}, t) u dS_l = \int_{\Delta y} f^0(x_{i+1/2}, t) u(x_{i+1/2}) dy$$

Ora, essendo u costante sulle facce del volumetto di controllo, e ponendo:

$$\int_{\Delta y} f^0(x, t) dy = hF(x, t)$$

si ricava:

$$\int_{\partial\Omega_{i,j}^1} f^0(x_{i+1/2}, t) u dS_l = F(x_{i+1/2}, t) u(x_{i+1/2}, t) - F(x_{i-1/2}, t) u(x_{i-1/2}, t)$$

sostituendo queste espressioni si ottiene:

$$f^* = f^0 - \frac{1}{h} \left[\int_0^\tau F(x_{i+1/2}, t) u(x_{i+1/2}, t) dt - \int_0^\tau F(x_{i-1/2}, t) u(x_{i-1/2}, t) dt \right] \quad (3.11)$$

ove il termine:

$$\phi^+ = \int_0^\tau F(x_{i+1/2}, t) u(x_{i+1/2}, t) dt \quad (3.12)$$

rappresenta il volume di fluido che esce dalla i -esima cella dalla faccia di destra, mentre il termine

$$\phi^- = \int_0^\tau F(x_{i-1/2}, t) u(x_{i-1/2}, t) dt \quad (3.13)$$

è il volume di fluido che entra nella i -esima celletta dalla faccia di sinistra. In fine, il termine f^0 rappresenta il volume di fluido inizialmente presente nella celletta. Evidentemente il problema dell'aggiornamento della frazione di volume consiste proprio nella determinazione dei due integrali che ci danno i valori di ϕ^- e ϕ^+ . Per il calcolo di questi due integrali si adotta lo schema lagrangiano proposto in [xx].

3.4 Contributo di tensione superficiale

La modellistica del termine di tensione superficiale è probabilmente l'aspetto più critico del metodo VOF. In questa sezione si descrive il metodo CSF che, senza dubbio, è tra più diffusi in letteratura. In questo metodo, proposto da Brackbill et. al [xx] nel 1991, l'interfaccia tra due fluidi è vista come una regione di transizione in cui, in ogni punto è definita una densità di forza proporzionale alla curvatura. Il modello interpreta la tensione superficiale come una forza che varia in modo

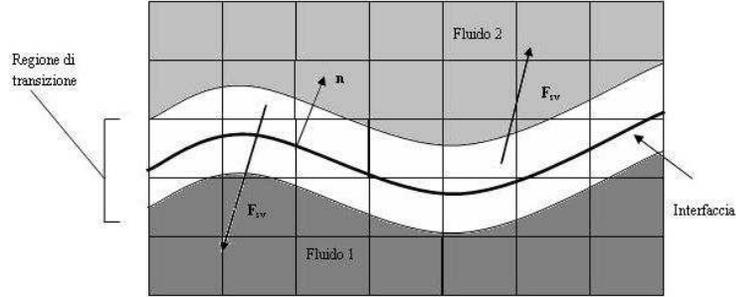


Figura 3.1: Regione di transizione del modello CSF.

continuo attraverso la regione di transizione piuttosto che un termine singolare delle equazioni di Navier-Stokes. L'ipotesi alla base di questa formulazione è che gli effetti della tensione superficiale agiscono solo in direzione normale all'interfaccia o, in altri termini, gli sforzi tangenziali sono continui attraverso l'interfaccia (si osservi che in questa ipotesi il coefficiente di tensione superficiale non può che essere costante lungo l'interfaccia). Dunque, gli effetti della tensione superficiale si estrinsecano attraverso una forza per unità di area data da:

$$\mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s) = \sigma k(\mathbf{x}_s) \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_s) \quad (3.14)$$

Considerando dunque un sistema costituito da due fluidi, che indichiamo con fluido 1 e fluido 2. Come già osservato, la distribuzione spaziale dei fluidi è data da una funzione di Heaviside $f(\mathbf{x})$. Questa descrizione contiene un aspetto molto critico da gestire nella pratica computazionale: la discontinuità. Per ovviare a questa difficoltà, con riferimento alla figura 3.1, si può sostituire la funzione di Heaviside con una funzione $f(\mathbf{x})$ che sia regolare in una regione di spessore h dello stesso ordine di grandezza del mesh computazionale. La suddetta regione sostituisce, nella pratica computazionale, l'interfaccia. Definita la regione di transizione occorre definire una forza di volume \mathbf{F}_v in ogni punto della regione di transizione. Tale forza deve fornire una corretta valutazione della forza superficiale quando $h \rightarrow 0$, dunque deve

essere definita nel seguente modo:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} \mathbf{F}_v(x) dV = \int_{\Delta S} \mathbf{F}_s(x) dS \quad (3.15)$$

con il vincolo che sia nulla al di fuori della regione di transizione:

$$\mathbf{F}_v(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.16)$$

Al fine di individuare un'espressione della \mathbf{F}_v si può introdurre una funzione $f(\mathbf{x})$ che “addolcisca” la discontinuità. La funzione cercata sarà la convoluzione della Heaviside:

$$\tilde{c}(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^3} \int_V c(\mathbf{x}') \zeta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}' \quad (3.17)$$

ove alla funzione ζ si richiede di essere normalizzata:

$$\int_V \zeta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}' = h^3 \quad (3.18)$$

a supporto compatto:

$$\zeta(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{per} \quad |\mathbf{x}| \geq h \quad (3.19)$$

derivabile e monotona. La principale caratteristica della funzione qui definita è la consistenza, cioè che tenda alla funzione $f(x)$ al tendere di h a zero:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \quad (3.20)$$

Nella pratica computazionale, nel codice *MultiFluids* questa operazione di convoluzione è sostituita con un'operazione di filtro della frazione di volume che smorza effettivamente la discontinuità. Dunque, introducendo la funzione $\tilde{f}(\mathbf{x})$ si ricava l'espressione per la forza di volume da inserire nelle equazioni di Navier-Stokes:

$$\mathbf{F}_v(\mathbf{x}) = \sigma k(\mathbf{x}) \frac{\nabla \tilde{f}(\mathbf{x})}{[f]} \quad (3.21)$$

Capitolo 4

Il codice MultiFluids

4.1 Introduzione

In questo capitolo vengono introdotti alcuni ingredienti fondamentali per la progettazione del codice *MultiFluids*. Tale codice, strumento principale della presente ricerca, risolve le equazioni di Navier-Stokes mediante il projection method.

Nel codice *MultiFluids*, per la discretizzazione delle equazioni, si implementa uno schema alle differenze finite su mesh staggerati alla Harlow-Welsch[]; mentre, per l'integrazione temporale si adotta il classico metodo di Eulero del primo ordine o, in alternativa, il metodo di Runge-Kutta del quarto ordine.

In questo capitolo, per amore della completezza, si riportano alcuni aspetti salienti del processo di discretizzazione. In particolare, nei paragrafi 2 e 3 si presentano rispettivamente gli schemi numerici adottati per discretizzare l'equazione di bilancio della quantità di moto e l'ellittica di pressione.

Alla fine di questo capitolo sono brevemente riportati i risultati di alcuni test case condotti sul codice. Questi test case sono stati sviluppati essenzialmente per valutare la capacità del codice di fornire risultati in linea con lo stato dell'arte. I risultati ottenuti dai suddetti test sono in buon accordo qualitativo e quantitativo con la letteratura.

Allo stato attuale, il codice è sviluppato in una versione 2-D e 3-D. Quest'ultima tuttavia è ancora in fase di test. Si prevede inoltre un'estensione del codice a problemi assial-simmetrici.

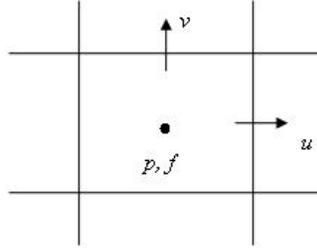


Figura 4.1: Esempio di griglia staggerata alla Harlow-Welsch.

4.2 Equazione di bilancio della quantità di moto

L'obiettivo della discretizzazione numerica è quello di sostituire lo spazio funzionale, ove è definita la soluzione esatta del problema differenziale, con uno spazio vettoriale di dimensione finita, ove è possibile ricercare la soluzione in forma numerica o, per meglio dire, approssimata. La risoluzione numerica delle equazioni di Navier-Stokes, si articola essenzialmente in tre fasi:

- discretizzazione del dominio computazionale;
- discretizzazione delle equazioni;
- risoluzione numerica delle equazioni discretizzate.

In merito alla prima fase del processo di discretizzazione, nel codice *MultiFluids* si è adottato l'approccio staggerato alla Harlow-Welsch. In questo metodo di discretizzazione, le incognite del problema (u, v, p, f) sono valutate in punti differenti del mesh computazionale, come risulta dalla figura 4.1. Quest'approccio, grazie al

semplice artificio dello staggering, offre la possibilità di valutare le derivate spaziali al secondo ordine.

Come già osservato nel precedente capitolo, nella risoluzione numerica delle equazioni della fluidodinamica mediante il projection method, occorre risolvere in sequenza le equazioni:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} = -\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) + \nabla \cdot 2\mu \mathbf{D} + \mathbf{F}_s \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (4.2)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \rho \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} \quad (4.3)$$

In questa sede, con riferimento all'equazione 4.1 si discretizzano singolarmente i vari termini del secondo membro.

- **Termine convettivo**

Nel codice *MultiFlids*, il termine convettivo viene discretizzato in modo esplicito, adottando schemi del secondo ordine. Per esempio, con riferimento al contributo di questo termine nell'equazione di bilancio della quantità di moto lungo la direzione x , e con riferimento alla figura 4.2, si ha:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} u^2 &\simeq \left(\frac{1}{4} \frac{(u_{i,j+1} + u_{i,j})^2 - (u_{i,j-1} + u_{i,j})^2}{\Delta x} \right)^n \\ \frac{\partial}{\partial y} uv &\simeq \left(\frac{1}{4} \frac{(u_{i+1,j} + u_{i,j})(v_{i,j+1} + v_{i,j}) - (u_{i,j} + u_{i-1,j})(v_{i-1,j} + v_{i-1,j+1})}{\Delta y} \right)^n \end{aligned}$$

La densità, che compare nella 4.1, assume un valore ben definito in ogni cella del domino computazionale non attraversata dall'interfaccia ma, nelle celle d'interfaccia, occorre effettuare una ricostruzione numerica di tale parametro. Dunque, con riferimento alla figura 4.2, si può calcolare il valore medio della f sulla faccia est della celletta (i, j) :

$$\tilde{f}_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} + f_{i,j}}{2}$$

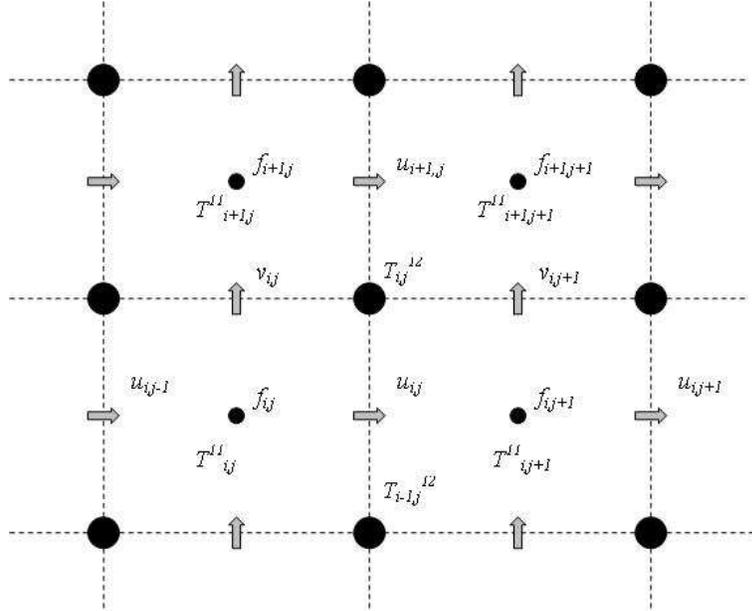


Figura 4.2: Staggering del tensore degli sforzi.

da cui il valore di densità su tale faccia:

$$\rho_{i,j} = \rho_1 \tilde{f}_{i,j} + (1 - \tilde{f}_{i,j}) \rho_0 \quad (4.4)$$

essendo ρ_0 e ρ_1 rispettivamente le densità dei fluidi 0 ed 1. Una formula del tutto analoga descrive il contributo del termine convettivo nell'equazione di bilancio della quantità di moto nella direzione y .

- **Termine viscoso**

Particolarmente interessante, nella progettazione del codice *MultiFluids*, è la discretizzazione dei termini viscosi. Infatti, come si evince dall'equazione 4.1, il contributo degli sforzi viscosi non è espresso mediante l'operatore laplaciano come accade in genere. In questo caso, essendo la viscosità una variabile costante in ogni fase, ma in generale diversa da una fase all'altra, non può essere portata fuori dall'operatore di divergenza e, pertanto, deve essere considerata a tutti gli effetti

come una funzione della posizione e del tempo. Tale funzione assumerà un valore esatto in entrambe le fasi ma sull'interfaccia dovrà essere ricostruita.

Inoltre, al fine di valutare tutte le derivate spaziali della 4.1 nello stesso punto del mesh computazionale, ottenendo così una discretizzazione al secondo ordine, occorre introdurre uno staggering anche per il tensore degli sforzi. Dunque, come risulta dalla figura 4.2, le componenti diagonali del tensore degli sforzi (T^{ii}) sono valutate nel centro della cella. Diversamente, quelle extra-diagonale (T^{ij}) sono valutate nell'angolo in alto a destra. La discretizzazione del tensore deve dunque tener conto dello staggering adottato per il tensore \mathbf{T} . dunque, con riferimento al calcolo della componente x degli sforzi viscosi:

$$\frac{\partial T^{11}}{\partial x} + \frac{\partial T^{12}}{\partial y} \simeq \frac{T_{i,j+1}^{11} - T_{i,j}^{11}}{\Delta x} + \frac{T_{i,j}^{12} - T_{i-1,j}^{12}}{\Delta y}$$

dove:

$$T_{i,j}^{11} \simeq 2\mu_{i,j}^{11} \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta x} \right), \quad T_{i,j}^{12} \simeq \mu_{i,j}^{12} \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta x} \right)$$

con $\mu_{i,j}^{11}$ calcolata nel centro della cella (i, j):

$$\mu_{i,j}^{11} = \mu_1 f_{i,j} + (1 - f_{i,j})\mu_0$$

mentre $\mu_{i,j}^{12}$ è calcolata nel vertice nord-est della cella (i, j):

$$\mu_{i,j}^{12} = \mu_1 \tilde{f}_{i,j} + (1 - \tilde{f}_{i,j})\mu_0$$

essendo μ_0 e μ_1 rispettivamente le viscosità dei fluidi 0 ed 1 ed $\tilde{f}_{i,j}$ il valore medio di f valutato nel vertice nord-est della cella e dato da:

$$\tilde{f}_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} + f_{i,j} + f_{i+1,j} + f_{i+1,j+1}}{4}$$

- **Termine di tensione superficiale**

Per la discretizzazione del contributo di tensione superficiale, che compare nell'equazione 4.1, nel codice *MultiFluids* sono implementati i modelli CSS e CSF.

In questa sede, e solo come esempio, si riporta una breve descrizione della discretizzazione del termine di tensione superficiale mediante il modello CSF. Dunque, esplicitando \mathbf{F}_s , si ha:

$$\mathbf{F}_s = \sigma k \mathbf{n} \quad (4.5)$$

dove la normale \mathbf{n} è calcolata come gradiente della frazione di volume e la curvatura k come divergenza della normale. In particolare, per il calcolo della normale occorre prima filtrare la funzione f , che presenta una discontinuità sull'interfaccia, e poi calcolare le derivate. L'operazione di filtro ha lo scopo di smorzare la discontinuità della frazione di volume e viene eseguita utilizzando il filtro proposto in LaFaurier *et.al* []. Dunque, una volta filtrata la frazione di volume, si calcolano le componenti della normale all'interfaccia:

$$(n_x)_{i,j} = \frac{\bar{f}_{i,j+1} - \bar{f}_{i,j}}{\Delta x} \quad (4.6)$$

$$(n_y)_{i,j} = \frac{\bar{f}_{i+1,j} - \bar{f}_{i,j}}{\Delta y} \quad (4.7)$$

dove con \bar{f} si indica la frazione di volume filtrata. Queste componenti della normale sono valutate rispettivamente sulla faccia est e sulla faccia nord della cella computazionale e sono utilizzate per il calcolo della curvatura secondo la seguente definizione:

$$k_{i,j} = (\nabla \cdot \mathbf{n})_{i,j} = \left(\frac{\partial n_x}{\partial x} \right)_{i,j} + \left(\frac{\partial n_y}{\partial y} \right)_{i,j}$$

La curvatura, così calcolata, è valutata nel centro della cella. Dunque, mediante la 4.5 si calcola il contributo di tensione superficiale nel centro della cella computazionale, che, una volta interpolato, fornisce il valore desiderato sulle facce nord ed est della cella.

4.3 Ellittica di Pressione

Nel metodo adottato per risolvere il sistema 4.1-4.3, l'equazione ellittica per la pressione serve a garantire il vincolo di indivergenza del campo di velocità. Dunque,

la risoluzione numerica di questa equazione costituisce sicuramente la fase più critica dell'intero processo computazionale. Nel codice *MultiFluids* l'equazione ?? è discretizzata con un approccio alle differenze finite. Dunque, discretizzando gli operatori di divergenza e di gradiente si ottiene la seguente espressione alle differenze finite:

$$\left(\frac{p_e - p_c}{\rho_e} - \frac{p_c - p_o}{\rho_o} \right)_{ij} + \left(\frac{p_n - p_c}{\rho_n} - \frac{p_c - p_s}{\rho_s} \right)_{ij} = \Delta ((u_e^* - u_o^*) + (u_n^* - u_s^*))_{ij}$$

ove Δ è il passo di discretizzazione spaziale, supposto uguale in direzione x ed y. Mentre, con p_e, p_o, p_s, p_n e p_c si indicano rispettivamente, le pressioni nelle celle est, ovest, sud, nord e centrale, analogo discorso per le velocità. Accorpendo i termini il primo membro si pone nella forma:

$$A_e p_e + A_o p_o + A_n p_n + A_s p_s - (A_e + A_o + A_n + A_s) p_c \quad (4.8)$$

dove i coefficienti hanno le seguenti espressioni

$$A_e = \frac{1}{\rho_e}, \quad A_o = \frac{1}{\rho_o}, \quad A_n = \frac{1}{\rho_n}, \quad A_s = \frac{1}{\rho_s} \quad (4.9)$$

e rappresentano i valori della ρ sulle facce del volume di controllo ricostruiti mediante la 4.4. Scrivendo la (4.8) per ogni cella del volume di controllo si ottiene un sistema di equazioni lineari con matrice ellittica del tipo:

$$\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{q} \quad (4.10)$$

dove \underline{x} rappresenta il vettore delle pressioni incognite. La risoluzione del sistema 4.10, nel codice *MultiFluids*, è eseguita mediante un algoritmo SOR.

L'assegnazione delle condizioni al contorno per l'equazione ellittica di pressione è un punto molto critico del processo di calcolo. Bisogna infatti tener presente che, in virtù dello staggering delle variabili, tali condizioni non sono affatto richieste. È infatti possibile dimostrare che il sistema 4.10 va risolto semplicemente modificando il termine noto a secondo membro. Oltretutto, tale sistema, nel caso di condizioni al contorno alla Dirichlet, è a dominanza diagonale debole mentre nel caso di condizioni

tutte alla Neumann la dominanza diagonale si perde. Nel caso di condizioni alla Neumann la matrice \underline{A} risulta essere addirittura singolare, la qual cosa, in base a noti teoremi di algebra lineare, implica che affinché il sistema (4.10) ammetta soluzioni si deve verificare l'uguaglianza dei ranghi della matrice dei coefficienti e della matrice completa. L'assegnazione di condizioni alla Neumann può dunque risultare una scelta molto critica per un processo computazionale.

4.4 Test case

In questa sezione, in modo molto breve, si riportano alcuni dei test case più significativi eseguiti sul codice *MultiFluids*. Nel primo test case si intende verificare la bontà dello schema numerico adottato per la soluzione dell'equazione per il trasporto della frazione di volume. Nel secondo test case si verificano gli effetti delle correnti spurie e l'uso della funzione filtro che, smorzando la discontinuità all'interfaccia, riduce anche le correnti spurie. Infine, nel terzo test case, si riporta una prima applicazione del codice ad un problema fisico concreto: il problema della rising bubble.

4.4.1 Test Case 1: trasporto della frazione di volume

In questo test case si intende verificare la bontà degli schemi numerici adottati per risolvere l'equazione per il trasporto convettivo della frazione di volume. In particolare si ha interesse a verificare che la diffusione numerica sia contenuta e che lo schema numerico adottato sia effettivamente conservativo; verificando inoltre che la deformazione della shape, soggetta ad un moto rigido sia piccola, al limite trascurabile.

Il test case consiste dunque nella risoluzione dell'equazione per la f su di un mesh uniforme con 100x100 celle computazionali, con un campo di velocità assegnato. Come velocità si sceglie di assegnare una rotazione rigida rispetto al centro del dominio computazionale. Un dettaglio del campo di velocità è riportato in figura

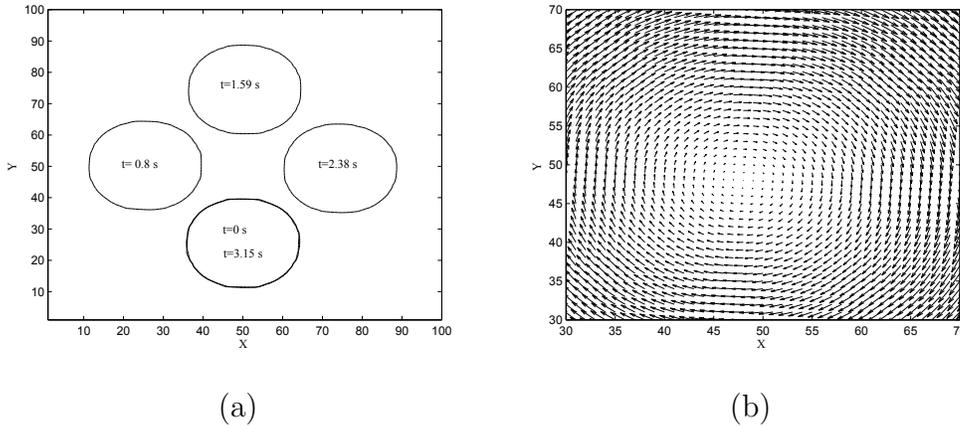


Figura 4.3: Test case per il trasporto della frazione di volume. Shape della goccia in vari istanti (a), dettaglio del campo di velocità (b)

4.3(b). La frazione di volume viene assegnata in modo da costruire una shape inizialmente circolare con centro nella cella (50,25).

La figura 4.3(a) mostra la shape della goccia agli istanti $t = 0.0, 0.8, 1.59, 2.38, 3.15\text{ s}$. Come si evince da tale figura la soluzione all'istante $t = 3.15\text{ s}$ è praticamente sovrapposta alla condizione iniziale. Inoltre, la variazione della frazione di volume, in questo test case, risulta praticamente prossima allo zero macchina. I risultati qui ottenuti, sebbene qualitativi, sono comunque incoraggianti e consentono l'implementazione del codice *MultiFluids* a problemi fisici concreti.

4.4.2 Test Case 2: static drop

Questo test case ha l'obiettivo di evidenziare l'effetto delle correnti spurie (figura 4.4) dovute al calcolo approssimato della curvatura dell'interfaccia. Si considera pertanto una goccia di forma circolare in un ambiente quiescente sotto la sola azione della tensione superficiale e della pressione ambiente. Il problema è ben documentato in letteratura, in particolare in questa simulazione si è testato il modello CSF adottando gli stessi parametri fisici di Renardy *et al.* [23]. I risultati hanno messo

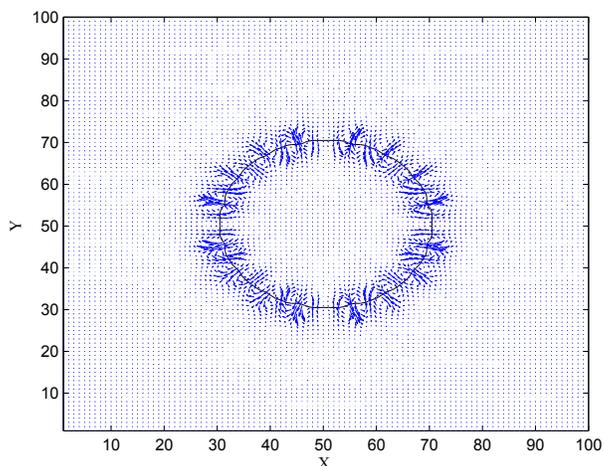


Figura 4.4: Correnti spurie.

in evidenza che l'utilizzo del filtro proposto da LaFaurier *et al.* [18] riduce il valore assoluto delle correnti spurie.

4.4.3 Test Case 2: rising bubble

In questa seconda applicazione si è semplicemente cercato di riprodurre un risultato ben noto in letteratura. In particolare si è scelto un lavoro proposto da Sussman *et al.* [26], in cui si testano alcuni schemi numerici sul classico problema di una rising bubble, ossia una bolla che, per effetto di forze di galleggiamento, risale in un fluido. I risultati ottenuti, riportati, in figura 4.5, mostrano un buon accordo con il lavoro preso in considerazione.

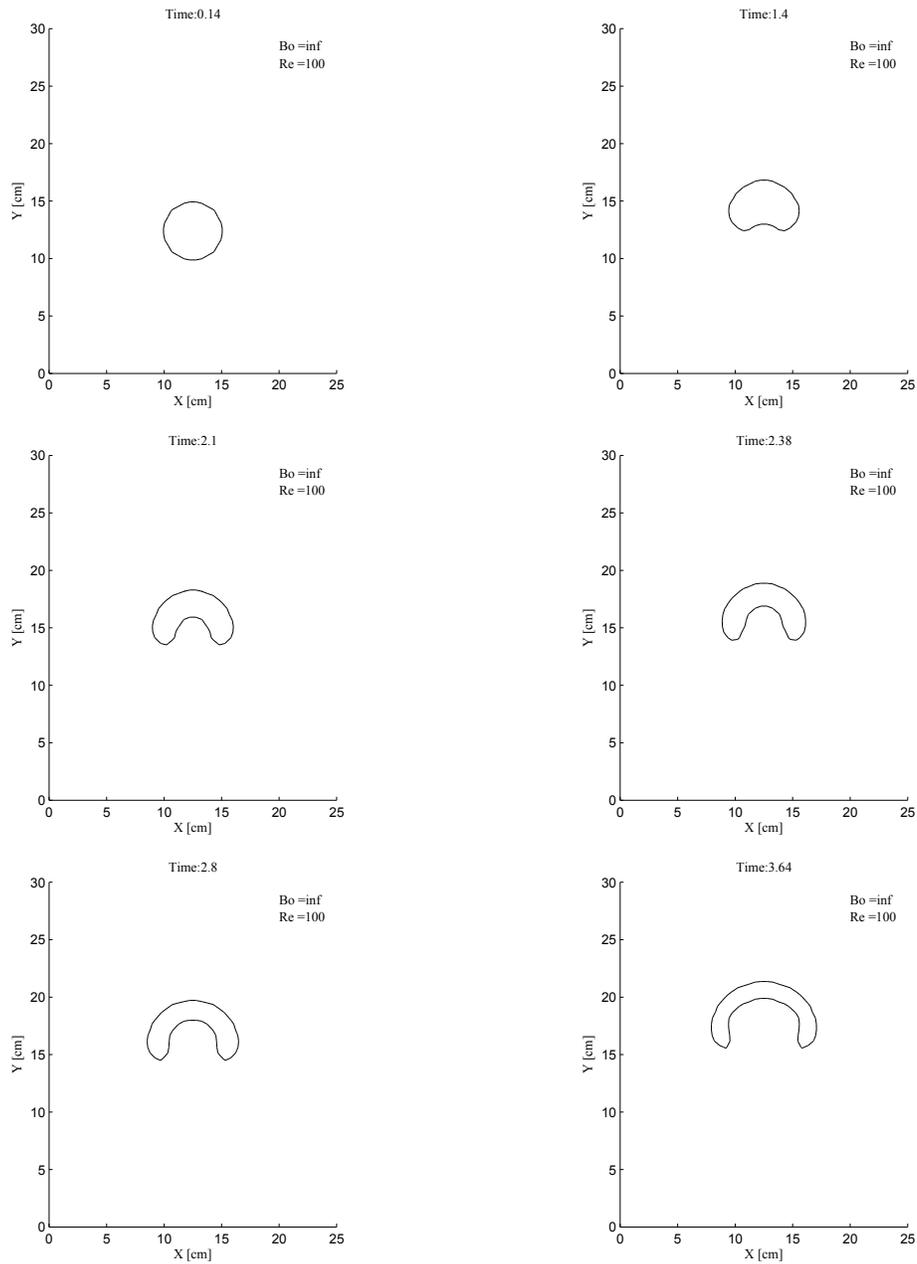


Figura 4.5: Evoluzione di una Rising Bubble con $Re=100$, $Bo=\infty$ e con rapporto di densità di 5/1.

Capitolo 5

Liquid sheet

5.1 Introduzione

In questo capitolo si propone una simulazione numerica del campo di moto prodotto da una lamina liquida bidimensionale, iniettata verticalmente in un ambiente gassoso inizialmente quiescente. Tale simulazione ha lo scopo di determinare la shape stazionaria che assume la lamina sotto l'azione di effetti viscosi, gravitazionali e di tensione superficiale.

Il campo di moto di un getto liquido laminare iniettato da un ugello circolare (round jet), o rettangolare (liquid sheet), in un ambiente gassoso è stato studiato diffusamente negli ultimi anni. Tuttavia, una simulazione numerica diretta di questo problema è ancora mancante in letteratura e, pertanto, nella presente indagine si ha interesse ad analizzare le potenzialità del metodo VOF di simulare la dinamica della lamina in vari regimi di moto.

Da una interpretazione fisica del problema risulta chiaro che la lamina, a causa degli effetti gravitazionali, è soggetta ad una contrazione lungo la direzione verticale mentre, in assenza di effetti gravitazionali, ed a bassi numeri di Reynolds, la lamina subisce un'espansione (die-swell effect). Un ulteriore contributo alla dinamica della lamina viene dagli effetti di tensione superficiale che, conferendo alla lamina

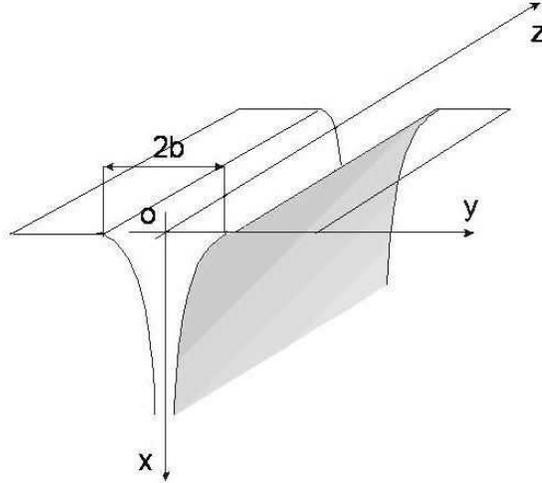


Figura 5.1: Esempio di lamina liquida eiettata da uno slot rettangolare.

una sorta di “elasticità superficiale” si oppongono alla contrazione dovuta agli effetti gravitazionali. Per una più accurata esposizione della fisica di un getto liquido stazionario si rimanda al lavoro di Georgious *et al.* [27], in questa sede si ha interesse a verificare che il codice *MultiFluids* sia in grado di “catturare” la complessa fenomenologia appena descritta.

Fra i vari contributi proposti in letteratura, due accurati riferimenti per la simulazione numerica sono rappresentati dai lavori di de Luca e Costa [28] e di Richards *et al.* [15]. Nel primo la simulazione è eseguita mediante un metodo di Ortogonal Boundary-Fitted Coordinate Transformation, mentre nel secondo lavoro si applica il metodo VOF per simulare la shape di un round jet iniettato in un ambiente liquido inizialmente quiescente.

5.2 Simulazione numerica

Un esempio del problema qui posto è riportato in figura 5.1. Tale figura mostra un getto stazionario d’acqua uscente da uno slot rettangolare, in un ambiente gassoso

	$Re \ll 1$	$Re \approx 1$	$Re \gg 1$
$St \ll 1$	Viscoso	Viscoso-Inerziale	Inerziale
$St \approx 1$	Viscoso-Gravitazionale	Viscoso-Inerziale-Gravitazionale	Inerziale
$St \gg 1$	Gravitazionale	Gravitazionale	Gravitazionale-Inerziale

Tabella 5.1: Regimi di moto.

(aria) inizialmente quiescente. L'ampiezza dello slot è $2b$ mentre, lungo la direzione z , lo slot è idealmente infinito così da poter considerare il problema bidimensionale. Il getto, così prodotto, assume la classica conformazione di una lamina liquida.

I parametri adimensionali che governano il moto della lamina sono il numero di Reynolds (Re), il numero di Stokes (St) e il numero di Capillary (Ca):

$$Re = \frac{2bU\rho_l}{\mu_l}, \quad St = \frac{4b^2g\rho_l}{U\mu_l}, \quad Ca = \frac{U\mu_l}{\sigma} \quad (5.1)$$

dove ρ_l e μ_l sono rispettivamente la densità e la viscosità dell'acqua, U è la velocità media di inflow e σ è il coefficiente di tensione superficiale.

Nell'intento di favorire l'interpretazione dei risultati, in tabella 5.1 si propone una classificazione dei regimi di moto al variare del numero di Reynolds e di Stokes. Per esempio, come si evince dalla tabella 5.1, la lamina ad elevati valori del Reynolds e del numero di Stokes, si troverà nel regime Inerziale-Gravitazionale mentre, a bassi numeri di Reynolds e di Stokes, la sarà in regime Viscoso. Il numero di capillarità, in questa classificazione, rappresenta un parametro aggiuntivo per ogni uno dei regimi qui riportati. Si osservi infine che nelle figure che seguono il riferimento cartesiano (x, y) denota rispettivamente le coordinate assiali e laterali adimensionalizzate rispetto alla semiampiezza dello slot.

5.2.1 Dominio computazionale

Un dettaglio del dominio computazionale è riportato in figura 5.2. Il moto, supposto simmetrico rispetto al piano di simmetria dello slot (piano x-z in figura

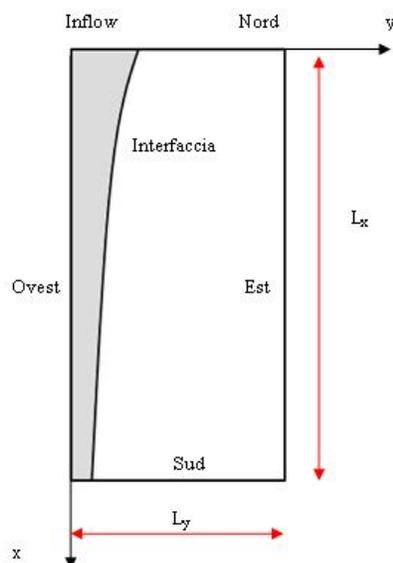


Figura 5.2: Dominio computazionale.

5.1), è risolto solo nel semispazio $y > 0$ del dominio fisico. Con tale ipotesi il dominio computazionale si riduce al rettangolo limitato dal piano di simmetria ad ovest, dalla parete nord ove è anche collocato lo slot, e da contorni aperti ad est e sud, figura 5.2. Le dimensioni del dominio computazionale dipendono naturalmente dall'ampiezza dello slot. Le prove numeriche eseguite mostrano che una lunghezza assiale $L_x = 30b$ ed una dimensione normale alla lamina $L_y = 10b$ sono sufficienti per ottenere un flusso completamente sviluppato e, al tempo stesso, limitare gli effetti spuri delle condizioni al contorno.

Per quanto attiene alla risoluzione spaziale, occorre mediare tra l'esigenza di ottenere una buona accuratezza e la necessità di eseguire i calcoli in tempi accettabili. Pertanto, una griglia uniforme con un passo di discretizzazione spaziale pari a $b/10$, determinato mediante varie prove numeriche, sembra risultare il compromesso ottimale tra suddette esigenze. Adottando questo passo spaziale per la discretizzazione si ottiene dunque una griglia con 300×100 celle computazionali.

5.2.2 Condizioni iniziali ed al contorno

Le condizioni iniziali prescritte per queste simulazioni prevedono una shape inizialmente rettangolare per la lamina, un profilo di velocità iniziale alla Poseuille per la componente u della velocità, ed una velocità (componenti u e v) nulla nella fase gassosa (ambiente inizialmente quiescente).

Per quel che concerne le condizioni al contorno, si adotta un profilo di Poiseuille per modellare le condizioni di inflow dell'ugello. Inoltre, sulla frontiera ovest (figura 5.2) del dominio computazionale, al fine di riprodurre la simmetria fisica del problema, si adotta una condizione di derivata normale nulla per la frazione di volume e per la componente assiale della velocità, u . La componente laterale v è posta pari a zero su questa frontiera:

$$\frac{\partial f}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad v = 0$$

Il trattamento delle condizioni al contorno sulle frontiere est e sud del dominio computazionale è ben più complesso. Infatti, per tener in conto l'ingresso di aria nel dominio computazionale dalla frontiera est (entrainment), effetto che si verifica durante lo spreading di un getto, una condizione al contorno di dominio aperto è stata adottata. Tale condizione consiste nell'ipotizzare nulle le derivate normali di entrambe le componenti di velocità e la frazione di volume:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad f = 0$$

In outflow, al fine di sopprimere indesiderati effetti numerici di backflow, si adotta, per la componente assiale della velocità, una condizione al contorno di tipo Neumann modificata. Tale modifica consiste nell'uso di una condizione omogenea di Neumann se la velocità, valutata nella penultima cella del dominio computazionale è uscente dal dominio mentre, se la suddetta velocità è entrante (backflow), si adotta una condizione di tipo Dirichlet e la velocità di outflow è posta paria a zero. Infine, per u ed f si adottano condizioni di derivata normale nulla:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{se} \quad u_{sud} > 0, \quad u = 0 \quad \text{se} \quad u_{sud} < 0$$

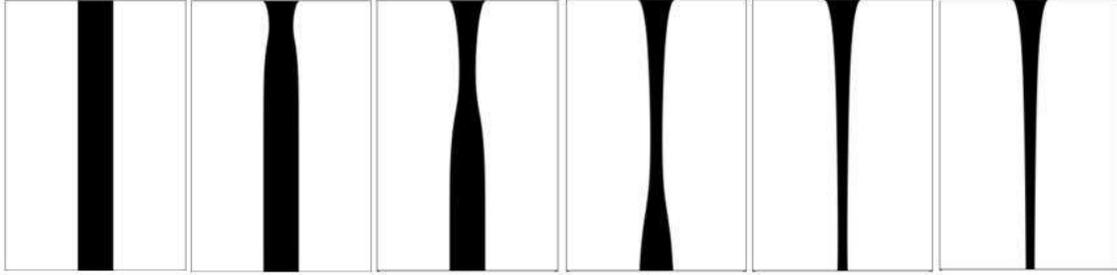


Figura 5.3: Evoluzione della condizione iniziale verso la shape stazionaria. Il primo frame rappresenta la condizione iniziale, i successivi frames riportano la soluzione ogni 10000 time steps.

$$\frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial n} = 0,$$

5.2.3 Lamina liquida gravitazionale

In questa sezione si riportano i risultati delle simulazioni condotte in regime Inerziale-Gravitazionale ed in assenza di effetti di tensione superficiale. Con l'intento di confrontare i risultati con la letteratura [28], si è scelto di simulare il moto della lamina a $Re = 50$, $St = 25$ e $Ca = \infty$.

La figura 5.3 mostra la shape della lamina durante la fase transitoria. Come si evince da questa figura, durante la fase transitoria, la lamina si contrae in prossimità dello slot. Tale contrazione si propaga poi in direzione downstream fino a raggiungere la shape stazionaria dopo circa 50000 integrazioni temporali.

Nella figura 5.4(a) si riporta la shape stazionaria della sheet (linea continua), insieme alla soluzione analitica, o torricelliana (linea tratteggiata). La simulazione mostra che, in questo regime, la lamina si contrae e tende asintoticamente alla soluzione torricelliana. La soluzione numerica ottenuta appare più contratta di quella analitica nel near field, questo fatto è in buon accordo con i risultati già noti in letteratura [28]. La maggiore contrazione della soluzione numerica rispetto a quella torricelliana può essere spiegata osservando che all'uscita dallo slot, le condizioni di

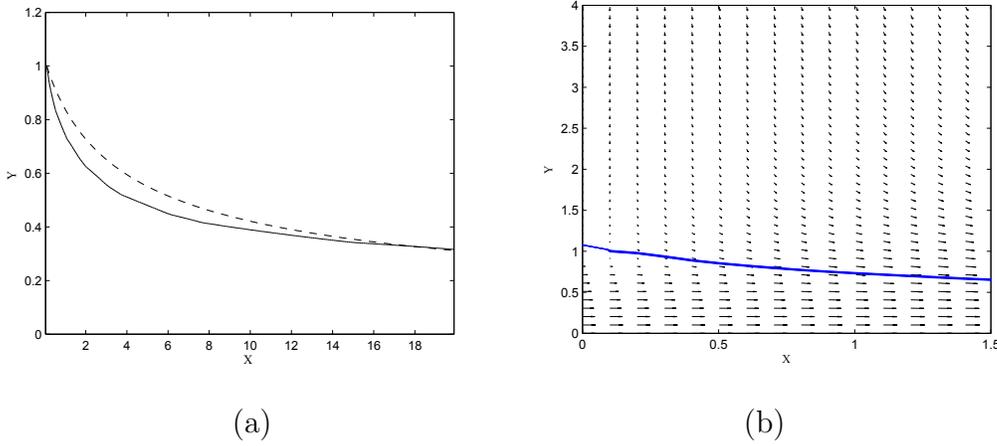


Figura 5.4: Interfaccia e campo di velocità per $Re = 50$, $St = 25$ e $Ca = \infty$. (a) Soluzione numerica (—), soluzione torricelliana (- - -); (b) interfaccia (—), campo di velocità (\rightarrow).

aderenza del fluido alla parete sono bruscamente rimosse. L'interazione del getto liquido con l'ambiente gassoso, e non più con la parete, dà luogo ad uno shear che accelera il flusso in direzione streamwise e, di conseguenza, una più intensa contrazione della lamina.

La figura 5.4(b) mostra un dettaglio del campo di velocità e dell'interfaccia (linea continua) tra la lamina liquida e l'ambiente gassoso, in prossimità dello slot. Tale figura mette in evidenza il non parallelismo del moto, infatti, come si evince dalla figura, i profili di velocità 5.4(b) dipendono oltre che della direzione assiale x , anche da quella laterale y .

5.2.4 Jet-swell problem

In questa sezione si analizza un problema noto in letteratura come die-swellng, o anche jet-swellng. La fenomenologia in questione è ben più complessa di quella riprodotta nella sezione precedente e consiste in un rigonfiamento della lamina (swelling) piuttosto evidente. Generalmente questo fenomeno si presenta a bassi

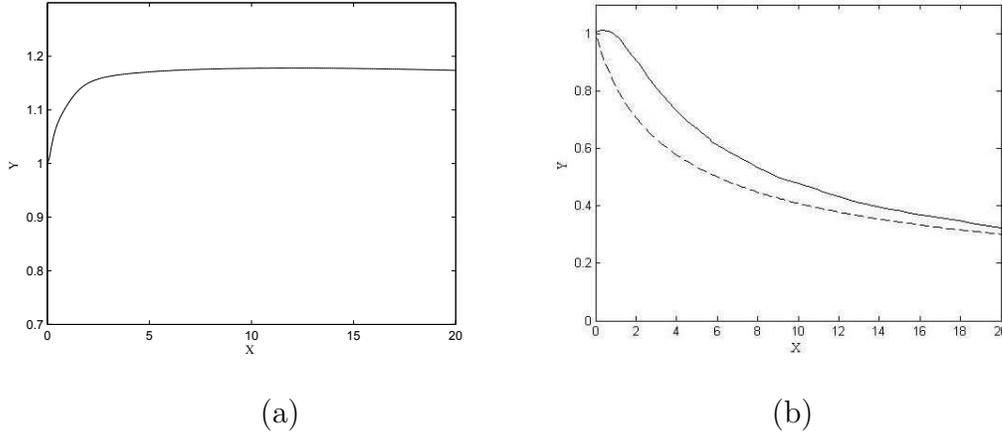


Figura 5.5: Profili di interfaccia calcolati per $Ca = \infty$. (a) $Re = 4$, $St = 0$; (b) $Re = 2$, $St = 1$ soluzione numerica (—), soluzione torricelliana (- - -).

valori del numero di Stokes. In questo caso infatti il moto è governato quasi esclusivamente da forze inerziali e viscosi.

Una simulazione del moto della lamina, in regime Viscoso-Inerziale, eseguita a $Re = 4$ e $St = 0$, è riportata in figura 5.5 (a). In questo regime, in assenza degli effetti gravitazionali, la lamina esibisce un notevole rigonfiamento (swelling) dovuto agli effetti viscosi. In accordo con Nickell *et al.* [29] la lamina tende ad un rapporto di espansione asintotico pari a 1.19. La figura 5.5 (b) mostra invece il classico diesweel calcolato a $Re = 2$ e $St = 1$ (linea continua). Questa simulazione si riferisce al regime Inerziale-Viscoso-Gravitazionale in cui la lamina esibisce uno swelling solo nella regione del near field. Tale comportamento è dovuto ad una combinazione di elevati effetti viscosi e bassa gravità. Successivamente, in direzione downstream la gravità produce una contrazione della lamina che, pertanto, tende asintoticamente alla soluzione torricelliana (linea tratteggiata).

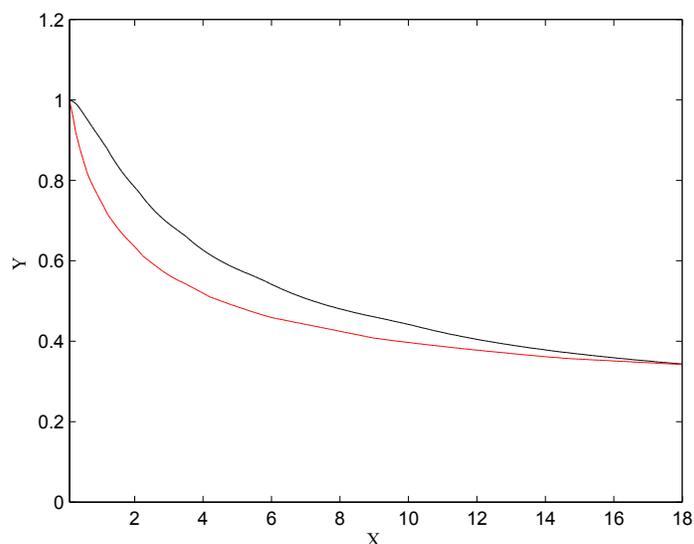


Figura 5.6: Profili di interfaccia calcolati a $Re = 50$, $St = 25$. $Ca = \infty$ (—), $Ca = 10^{-2}$ (—).

5.2.5 Influenza del numero di capillarità

Nella figura 5.6 si propone una comparazione tra la shape della lamina con e senza gli effetti della tensione superficiale. Le simulazioni sono condotte a $Re = 50$ e $St = 25$. Inoltre, per tener in conto gli effetti della tensione superficiale, si effettua una simulazione a $Ca = 10^{-2}$. In questa figura si può osservare che la lamina, in assenza di tensione superficiale (linea rossa) appare più contratta di quella calcolata includendo gli effetti della tensione superficiale (linea nera). Dunque, come atteso, gli effetti della tensione superficiale, in regime gravitazionale, riducono la contrazione della lamina.

5.2.6 Influenza del numero di Stokes

L'effetto del numero di Stokes sulla shape della lamina è analizzato in questa sezione. Le simulazioni qui proposte sono state condotte ad elevati numeri di

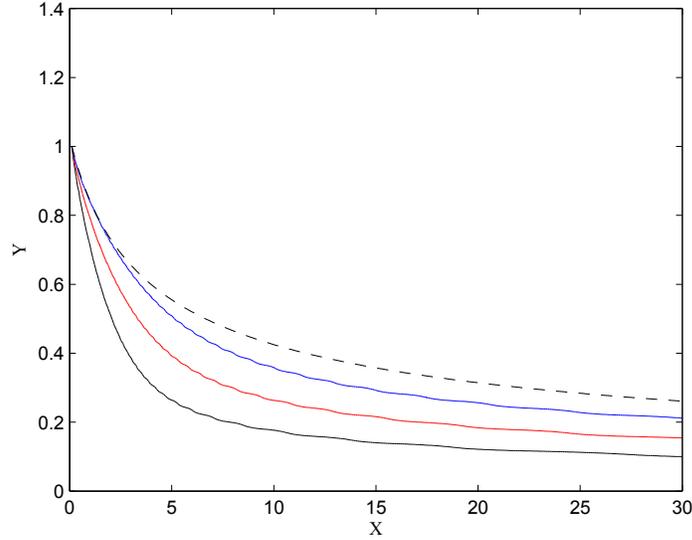


Figura 5.7: Effetto del numero di Stokes calcolato per $Re=200$ e $Ca=\infty$. Soluzione torricelliana (- - -), $St=400$ (—), $St=800$ (—), $St=2000$ (—).

Reynolds ed di Stokes, così da poter considerare la lamina in regime Inerziale-Gravitazionale. In questo regime, come da precedenti considerazioni, il getto subisce un contrazione in direzione downstream e, come si evince dalla figura 5.7, la contrazione della lamina aumenta al crescere del numero di Stokes. Questo comportamento esprime il fatto che, al crescere del numero di Stokes gli effetti gravitazionali sono via, via crescenti e tendono ad accelerare sempre più la lamina che, per soddisfare l'equazione di continuità, non può che restringersi sempre più.

5.3 Considerazioni conclusioni

Si conclude questo capitolo osservando brevemente che le simulazioni condotte con il codice *Multifluids* risultano in buon accordo con i risultati noti in letteratura. La presente simulazione, ancora mancante nella letteratura VOF, ha messo in evidenza la capacità del codice di catturare un complesso fenomeno come il die-swell,

nonchè gli effetti di una forza singolare, quale quella di tensione superficiale, sulla shape della lamina.

Capitolo 6

Un'applicazione tecnologica: coating flows

6.1 Introduzione

In questo capitolo si propone un'indagine numerica del moto di una lamina soggetta ad una accelerazione in direzione ortogonale al suo piano di simmetria. Questo tipo di problema è noto in letteratura come “Moving Liquid Sheet” e trova numerose applicazioni industriali nell'ambito delle tecnologie di coating. Tali tecnologie hanno una larga diffusione nei settori della stereolitografia, metallurgia, elettronica, applicazioni di rivestimenti anticorrosivi o fotosensibili e, per finire, nei sistemi avanzati di verniciatura.

Per un accurata esposizione di tali processi si rimanda al lavoro di Weinstein *et al.* [30], nel presente contesto ci si limita solo ad osservare che per processi di coating s'intendono quei processi industriali impiegati nel rivestimento di un substrato mobile mediante una lamina liquida che cade verticalmente sul substrato [31]. In questo caso, la lamina liquida è iniettata da un ugello fisso mentre il substrato scorre sotto la lamina. Si può anche tuttavia pensare ad un'applicazione diversa. Per esempio, come riportato nella figura 6.1, si può immaginare una lamina liquida

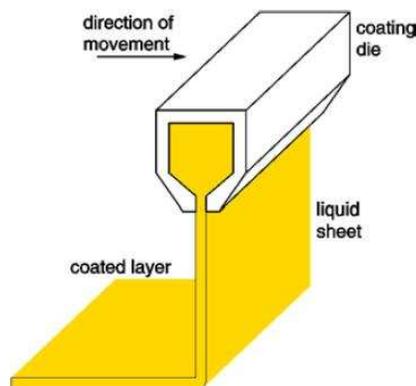


Figura 6.1: Esempio di processo di coating [31].

che trasla in direzione normale al suo piano di simmetria, con una prescritta legge di accelerazione, rivestendo un substrato che, in questo caso, rimane fisso. Al fine di ottenere uno spessore uniforme di rivestimento è assolutamente necessario che la portata di liquido e la velocità di traslazione dell'ugello siano costanti. Tale spessore dipende infatti da questi parametri mediante la relazione:

$$D = \frac{Q}{V_c} \quad (6.1)$$

ove con Q si indica la portata e con V_c la velocità di traslazione dell'ugello. In particolare nei processi industriali, il moto dell'ugello consiste in una fase iniziale di accelerazione, in cui si raggiunge una desiderata velocità di coating, una fase a velocità costante, durante la quale si riveste il substrato, in modo uniforme, ed una fase finale di decelerazione.

In questa applicazione il comportamento della lamina è piuttosto complesso. Infatti, durante la fase di accelerazione, la lamina è soggetta ad un campo di forze inerziali che la deflettono rispetto al suo piano di simmetria. Inoltre, per effetto di instabilità inerziali, si può anche innescare un moto oscillatorio della lamina. Questi effetti, sicuramente indesiderati nei processi industriali, vanno limitati mediante opportune leggi di accelerazione dell'ugello.

La dinamica della lamina, soggetta a forze di tipo inerziali, è dunque oggetto di questo capitolo che, pertanto, rappresenta un contributo sicuramente originale nell'ambito della letteratura VOF.

6.2 Simulazione numerica

Al pari del precedente capitolo, in questa applicazione si considera un ugello bidimensionale di larghezza $b = 4mm$ da cui fuoriesce un liquido, con portata uniforme per unità di lunghezza pari a $Q = 1000mm^2/s$. L'ugello è inoltre in moto con una prescritta legge di accelerazione. Al fine di confrontare i risultati qui ottenuti con la letteratura Gilio *et al.* [32], si adottano leggi di accelerazione di tipo sinusoidale e polinomiali, del secondo e quarto ordine. Da tali leggi è chiaramente possibile, mediante integrazione, determinare le velocità e la legge oraria dello slot. Un esempio è riportato in figura 6.2. Le leggi di accelerazione vengono specificate con l'obiettivo di raggiungere desiderate velocità di coating (velocità costane con la quale trasla la lamina durante la fase di rivestimento), corsa di accelerazione (spazio percorso durante l'accelerazione) e durata della fase di accelerazione.

Le proprietà fisico-chimiche del liquido esercitano naturalmente una forte influenza sul comportamento della lamina, quindi, al fine di comparare i nostri risultati con la letteratura, i parametri fisici adottati per il liquido sono gli stessi di quelli adottati da Gilio *et al.* [31],[32].

6.2.1 Dominio computazionale

Un esempio del problema fisico qui analizzato è riportato in figura 6.1. In questa applicazione, diversamente dal precedente capitolo, non si può sfruttare nessuna condizione di simmetria, dunque, il dominio computazionale sarà un rettangolo limitato a nord da una moving wall, di cui si esporrà in seguito il significato, ed a sud, est, ed ovest da una frontiere aperte.

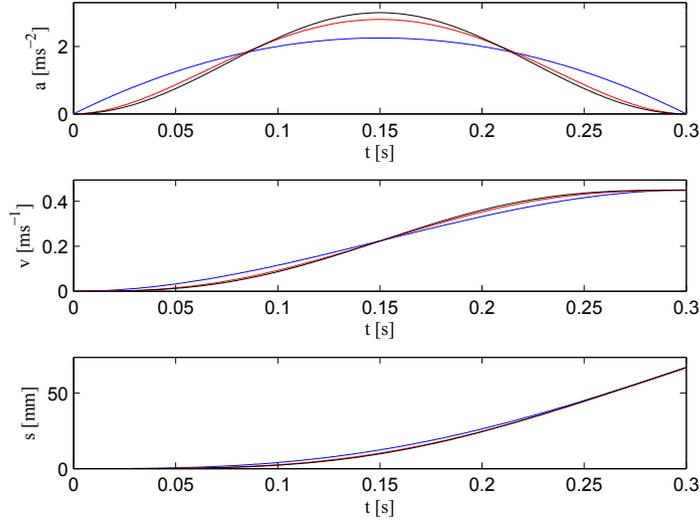


Figura 6.2: Accelerazione, velocità e legge oraria. (—) polinomiale del quarto ordine, (—) polinomiale del secondo ordine, (—) sinusoidale.

Le dimensioni laterali dell' dominio computazionale dipendono naturalmente dall'accelerazione dell'ugello. In base alle leggi di accelerazione qui adottate, si assumono dunque $Ly = 240mm$ ed $Lx = 32mm$. Esperimenti numerici condotti con differenti dimensioni del dominio computazionale confermano che queste dimensioni sono accettabili relativamente all'interferenza delle condizioni al contorno sulla soluzione. Infine, come risoluzione spaziale del dominio si assume un mesh uniforme a passo costante pari a $b/5$.

6.2.2 Condizioni iniziali ed al contorno

Le condizioni iniziali adottate per questa simulazione sono trattate in modo analogo al precedente capitolo. Si suppone dunque che la lamina abbia inizialmente una shape rettangolare e che sia in moto con una velocità di caduta pari a quella di inflow, in un ambiente gassoso supposto inizialmente in quiete.

Per quel che concerne le condizioni al contorno, si assume una condizione di open boundary per le frontiere sud, est ed ovest. Tali condizioni si impongono prescrivendo l'annullamento della derivata normale delle componenti u e v di velocità. Ben più complesso è il trattamento delle condizioni al contorno sulla parete nord, ove è presente lo slot di inflow. Su tale contorno, al fine di modellare il moto dell'ugello, si implementano condizioni di "moving wall" assegnando una velocità di traslazione orizzontale alla parete nord. Tale velocità sarà direttamente determinata integrando la prescritta legge di accelerazione. Dunque, nota la velocità di traslazione della parete nord, occorre determinare la posizione dell'ugello ove imporre le condizioni di inflow per la f , la frazione di volume è infatti pari ad 1 nelle celle di inflow e pari a zero nelle celle di parete. Questo problema è stato risolto, nelle presenti simulazioni, risolvendo una equazione di trasporto monodimensionale per la frazione di volume sulla frontiera nord:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (6.2)$$

ove con U si indica appunto la velocità di traslazione dell'ugello, determinata, come detto, mediante integrazione della legge di accelerazione adottata.

6.3 Risultati

Il risultato più interessante di queste simulazioni è rappresentato dalla dinamica instazionaria della lamina. La figura 6.3 riporta una serie di istantanee della shape della lamina prese a diversi istanti di tempo. Tale figura si riferisce alla legge di accelerazione di tipo sinusoidale e, come atteso, evidenzia che la lamina si deflette durante la fase transitoria.

La figura 6.4 mostra la deflessione della lamina, misurata sulla frontiera sud del dominio computazionale, per varie leggi di accelerazione e con la stessa velocità di coating e lunghezza di accelerazione. Da tale figura si evince che l'istante in cui è presente la massima deflessione, non coincide con quello di massima accelerazione (0.15s). La deflessione massima della lamina appare dunque significativamente pos-

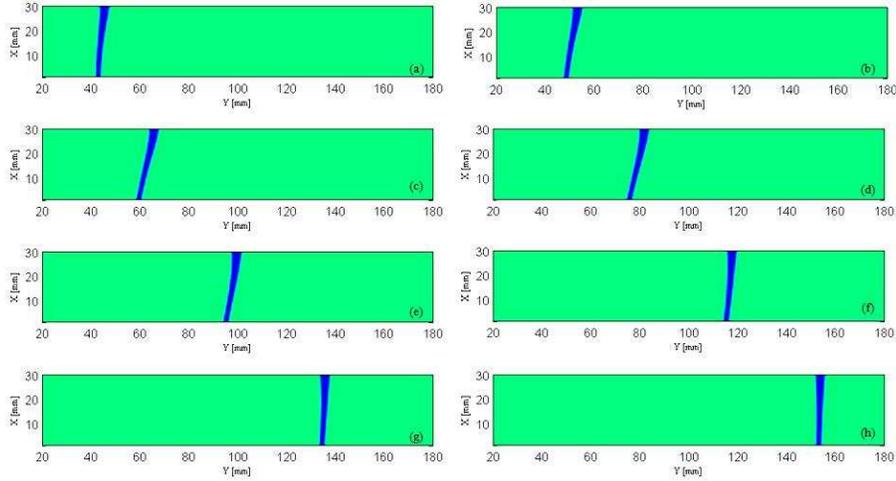


Figura 6.3: Deflessione della lamina durante la fase transitoria per legge di accelerazione sinusoidale con $V_c = 0.45m/s$, $a_l = 0.0671m$, $t_a = 0.3s$. (a) $t=0.12s$, (b) $t=0.16s$, (c) $t=0.20s$, (d) $t=0.24s$, (e) $t=0.28s$, (f) $t=0.32s$, (g) $t=0.36s$, (h) $t=0.40s$.

tipicata ed anche l'istante in cui la deflessione scompare è posticipato, per cui la lamina risulta ancora deflessa dopo che l'accelerazione dell'ugello si è estinta. In fine, in accordo con i risultati noti in letteratura [32], la figura 6.4 mostra che la risposta transitoria della lamina è poco sensibile alla legge di accelerazione imposta.

La figura 6.5 mostra la risposta transitoria della lamina soggetta ad una legge d'accelerazione di tipo sinusoidale, ma con diverse velocità di coating e lunghezze d'accelerazione. Tale figura mostra un'evidente dipendenza della risposta transitoria della lamina da questi parametri. In particolare, come ci si aspettava, la deflessione della lamina aumenta notevolmente alla aumentare dei suddetti parametri.

6.4 Considerazioni conclusive

In questo capitolo, con l'intento di esplorare una possibile applicazione industriale del codice *MultiFluids*, si è analizzata, mediante simulazione numerica diretta, la dinamica di una lamina liquida soggetta ad un campo di forze inerziali.

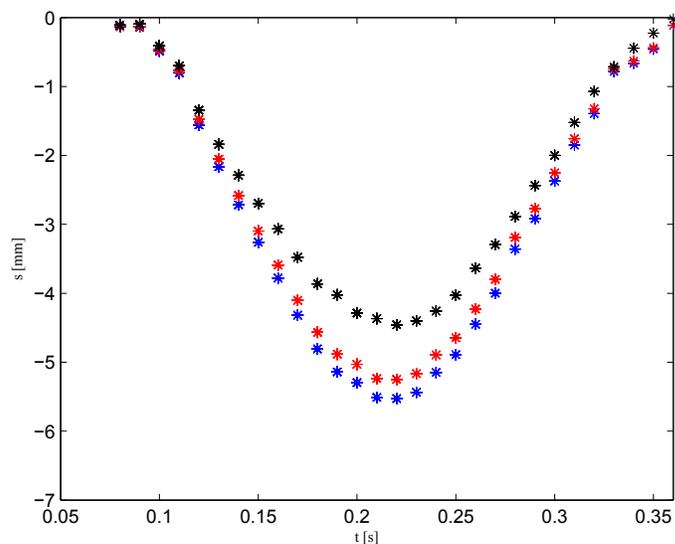


Figura 6.4: Deflessione della lamina durante la fase transitoria per diverse leggi di accelerazione con $V_c = 0.45m/s$, $a_l = 0.0671m$, $t_a = 0.3s$: (*) polinomiale del quarto ordine, (*) polinomiale del secondo ordine, (*) sinusoidale.

Tali simulazioni, in accordo con la letteratura, hanno messo in evidenza che la deflessione della lamina non è molto sensibile alla legge di accelerazione imposta ma risulta fortemente dipendente da parametri quali la velocità di coating e la corsa di accelerazione dell'ugello.

I risultati qui presentati, da un lato dimostrano la capacità del codice di “catturare” una complessa fenomenologia e, dall'altro, rappresentano un contributo sicuramente originale nella letteratura dei metodi VOF, ancora carente sotto il profilo delle applicazioni industriali.

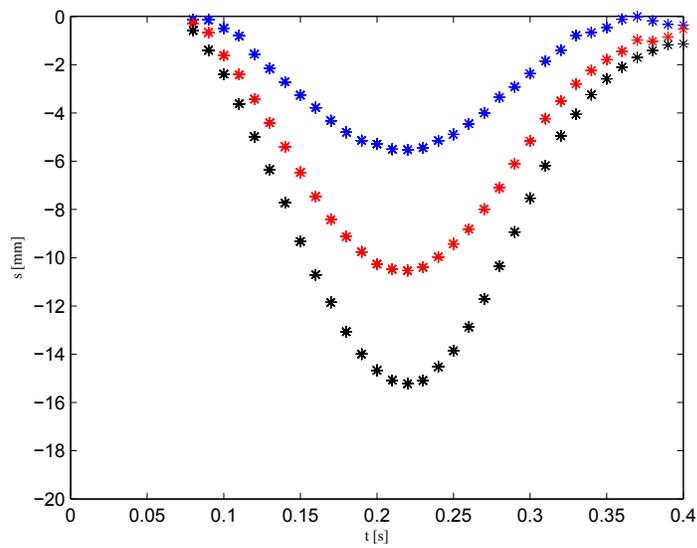


Figura 6.5: Deflessione della lamina soggetta ad accelerazione sinusoidale ma con diverse velocità di coating e corsa di accelerazione: (*) $V_c = 1.05m/s$, $a_l = 0.1565m$, (*) $V_c = 0.75m/s$, $a_l = 0.1117m$, (*) $V_c = 0.45m/s$, $a_l = 0.0671m$,.

Capitolo 7

Impatto di una goccia su un film di liquido

7.1 Introduzione

In questo capitolo si presenta uno studio numerico dell'impatto di una goccia su un sottile film di liquido. Il fenomeno ha una notevole rilevanza in natura e nelle applicazioni ingegneristiche. Alcuni esempi in cui si verificano fenomeni d'impatto di gocce si possono trovare nelle tecnologie delle stampanti a getto d'inchiostro, negli atomizzatori di carburante, nei sistemi di spray cooling, nei fenomeni di crescita di ghiaccio sulle ali degli aeromobili, ed infine nello studio dell'impatto di meteoriti.

Lo splash di una goccia ha da sempre esercitato un particolare fascino sui ricercatori. Uno dei primi ad investigare tale fenomeno, ed a presentare numerose ed affascinanti immagini fotografiche nei suoi pioneristici lavori, è stato Worthington [33], nel 1908. Successivamente, negli anni '50, Edgerton mise appunto una tecnica fotografica in grado di catturare immagini ad alta risoluzione di fenomeni impulsivi e, una delle immagini prodotta da lui ottenuta è divenuta un'icona mondiale ed è riportata in figura 7.1. Oggi, dopo oltre 100 anni dagli studi pioneristici di Worthington, il fenomeno è ben lontano da una completa comprensione e continua

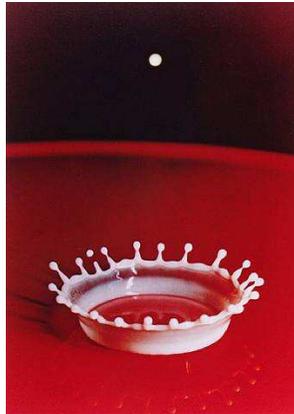


Figura 7.1: Splash di una goccia di latte, Edgerton [34].

ad attrarre l'interesse di fisici, matematici ed ingegneri. La sequenza di eventi che seguono la collisione di una goccia dipende non solo dalla forma e dalla velocità della goccia, ma anche dalle proprietà fisico-chimiche del fluido e dalla superficie su cui la goccia collide. Il fenomeno può quindi presentarsi in un'ampia varietà di forme: la goccia può avere una forma sferica o pseudo-ellittica al momento dell'impatto; può aver luogo su una superficie solida o liquida e, in quest'ultimo caso, lo strato di liquido può essere sottile come un film o profondo. Inoltre, l'impatto può essere normale o obliquo; può avvenire nel vuoto o in presenza di un fluido ambiente. Da questa breve disamina emerge chiaro che l'impatto di una goccia può presentarsi in un'ampia, e molto complessa, fenomenologia. Tuttavia, almeno in modo qualitativo, e sotto certe condizioni, si può osservare che in seguito alla collisione di una goccia si assiste alla formazione di una struttura di forma cilindrica che si protende verso l'esterno, una vera e propria liquid sheet cilindrica. Tale struttura, generalmente detta corona, presenta una complessa dinamica ed è oggetto di numerose indagini numeriche e sperimentali.

I parametri adimensionali che governano il fenomeno in questione sono il numero di Weber (We), il numero di Reynolds (Re), il numero di Ohnesorge (Oh), il numero di Froude (Fr) e il rapporto adimensionale tra lo spessore del film liquido ed il

diametro della goccia.

$$We = \frac{\rho DU^2}{\sigma}, \quad Re = \frac{\rho DU}{\mu}, \quad Oh = \frac{\mu}{(\rho\sigma D)^{1/2}},$$

$$Fr = \frac{U^2}{gD}, \quad H = \frac{h}{D}$$

dove U e D rappresentano rispettivamente la velocità d'impatto ed il diametro della goccia mentre ρ , μ e σ denotano, rispettivamente, la densità, la viscosità e la tensione superficiale della goccia.

Il fenomeno di collisione di una goccia su una superficie liquida o solida è dunque oggetto di interesse di numerosi gruppi di ricerca. Molti aspetti del fenomeno sono ben compresi, tuttavia rimangono alcune questioni ancora oscure. Al fine di decifrare gli aspetti più sfuggenti di questo fenomeno sono stati proposti numerosi esperimenti e modelli sia numerici che teorici. Tali modelli costituiscono quindi una vasta, e rigorosa, letteratura. A tal proposito si osserva che Oguz e Prosperetti (cita), assumendo il flusso assialsimmetrico ed irrotazionale, conducono una simulazione numerica che mette in evidenza il fenomeno dell'entrapment di aria nel cratere formato dall'impatto della goccia.

Yarin e Weiss [38], nel 1995, propongono un lavoro teorico-sperimentale in cui s'indaga la dinamica di un treno di gocce che collide su una superficie solida. In questo lavoro vengono affrontati diversi aspetti del fenomeno, in particolare, adottando un modello quasi monodimensionale, gli autori forniscono una spiegazione della natura dello splashing in termini di un nuovo tipo di discontinuità cinematica.

Ancora nel 1999, Weiss e Yarin [39] propongono una simulazione numerica dell'impatto di una singola goccia su una superficie di liquido, trascurando gli effetti della viscosità ma includendo gli effetti della tensione superficiale e della forza gravitazionale. Questi autori, nelle loro simulazioni, osservano il fenomeno dell'entrapment di aria ma solo a basse velocità di impatto. Loro osservano anche, sotto opportune condizioni, la formazione di una struttura di tipo getto che si protende dalla base della goccia verso l'ambiente circostante, la corona. Gli autori inoltre anal-

izzano le condizioni di formazione della corona correlando il fenomeno al numero di Weber.

Thoroddsen [41], nel 2002, propone uno studio sperimentale molto accurato sui primi istanti della collisione. L'autore osserva un particolare tipo di corona (Ejecta Sheet) che si sviluppa nei primissimi istanti e che può subire un fenomeno di arrotolamento su se stessa anche molto intenso. Thoroddsen mette inoltre in evidenza, mediante l'uso di traccianti fluorescenti, che la sheet si forma con il liquido presente nel sottostante layer e non con il liquido della goccia. In questo lavoro l'autore osserva inoltre che la presenza dell'aria non influenza il fenomeno di formazione della sheet.

Il metodo VOF costituisce senz'altro un valido strumento d'indagine numerica in questo settore e, pertanto, è stato adottato da numerosi autori. Reiber *et al.* [42], nel 1999, effettuano una simulazione numerica diretta dell'fenomeno dello splashing risolvendo le equazioni di Navier-Stokes in 3-D con il metodo VOF. L'obiettivo del loro lavoro era quello di studiare i meccanismi d'instabilità della lamina che conduce alla formazione di cuspidi e gocce secondarie.

Nel 2003, Josserand *et al.* [43] propongono una simulazione numerica diretta dell'impatto di una goccia su un film dello stesso liquido utilizzando una versione assialsimmetrica del codice numerico SURFER. Gli autori sostengono le simulazioni numeriche con una formulazione teorica della dinamica della lamina liquida proponendo un modello teorico-predittivo che consente di distinguere i regimi di deposition e di splashing.

Nikolopoulos *et al.* [44], nel 2004, hanno simulato, mediante un codice VOF assialsimmetrico, l'impatto di una goccia su un film sottile dello stesso liquido. In questo lavoro gli autori propongono un'analisi quantitativa misurando le caratteristiche geometriche della corona.

In fine, i risultati numerici ottenuti da vari autori mostrano un buon accordo con i lavori sperimentali e sottolineano la potenzialità dei metodi VOF di predire la dinamica d'impatto.



Figura 7.2: Esempio di formazione del getto di Worthington.

7.2 Considerazioni di carattere fisico

In questa sezione si riportano alcune considerazioni sulla fisica dell'impatto di una goccia su una superficie liquida. Generalmente, questo tipo di fenomeno è caratterizzato da elevati valori del numero di Froude e , pertanto, almeno nei primi istanti dell'impatto, gli effetti della forza gravitazionale sono trascurabili. In altri termini, gli effetti gravitazionali influenzano sicuramente la dinamica della corona ma solo su scale temporali molto grandi. Un ulteriore effetto sicuramente trascurabile, nel range di velocità qui considerate, è quello della comprimibilità.

Il meccanismo di sviluppo ed instabilità della corona, conseguente alla collisione di una goccia su un film liquido, è il risultato di una complessa sequenza di eventi. Nei primi istanti successivi all'impatto si assiste alla formazione di una liquid sheet di forma cilindrica che viene proiettata fuori dal layer e verso l'ambiente gassoso. Tale struttura è sita alla base della goccia e costituisce l'elemento di raccordo tra la shape indisturbata della goccia ed il layer anch'esso indisturbato. Inizialmente la sheet presenta una buona simmetria cilindrica ed il suo bordo superiore è orlato da un cosiddetto rim di spessore maggiore rispetto alla sheet. Successivamente, la simmetria cilindrica della sheet si rompe con un meccanismo di instabilità lineare. A questa fase di instabilità lineare, segue una dinamica non lineare che porta allo

sviluppo di strutture fluidodinamiche, in letteratura note come *finger*. Tali strutture sono dei veri e propri getti protesi verso l'ambiente gassoso. In fine, in seguito al breakup dei getti una serie di gocce secondarie vengono emesse nell'ambiente gassoso, figura 7.5. Edgerton [34], nei suoi lavori, evidenzia la simmetria assiale della *sheet* che emerge dall'impatto. Tuttavia, come ampiamente provato da Degan *et al.* [3], tale regolarità non solo non è ovvia, ma è anche una rara eccezione e compare solo in un ristretto range di parametri.

La caratteristica principale che differenzia l'impatto di una goccia su uno strato profondo da quello su strato sottile è che nel primo caso si assiste alla formazione di un cratere le cui pareti recedono sotto l'azione impulsiva dell'impatto. In questa fase il moto è dominato essenzialmente dalle forze inerziali. Successivamente, per effetto delle forze di tensione superficiale, le pareti del cratere invertono il loro moto richiudendo il cratere. In questo fenomeno, e sotto opportune condizioni, è possibile assistere alla formazione del getto di Worthington visibile nella figura 7.2.

Come già anticipato, in questo capitolo si focalizza l'attenzione sull'impatto normale di una goccia su un sottile film liquido. Per questo fenomeno le osservazioni sperimentali mostrano che a velocità di impatto molto piccole la goccia si spalma dolcemente in modo quasi assialsimmetrico. Rioboo [45] definiscono questo regime di moto come *Deposition*. Un esempio di impatto su superficie solida in regime di *deposition* è riportato nella figura 7.3. Incrementando la velocità d'impatto, si



Figura 7.3: Formazione della corona a $Re=3.36$ e $We=88$ tratta da [45].

assiste alla formazione di una lamina liquida che ha una struttura di tipo cilindrica non necessariamente assialsimmetrica. Tale lamina si propaga in direzione radiale

e cresce in altezza ma rimane tutto sommato compatta o, in altri termini, non è soggetta a fenomeni di breakup, figura 7.4. A tale regime si mota si dà il nome di spreading. In fine, a velocità d'impatto sufficientemente elevate si assiste alla for-



Figura 7.4: Formazione della corona a $Re=676$ e $We=428$ tratta da [3].

mazione di una lamina cilindrica che, evolvendo, subisce un fenomeno d'instabilità e dà luogo alla formazione di finger da cui si distaccano numerose gocce secondarie. In letteratura, questo tipo di impatto è definito con il termine Splash, figura 7.5.

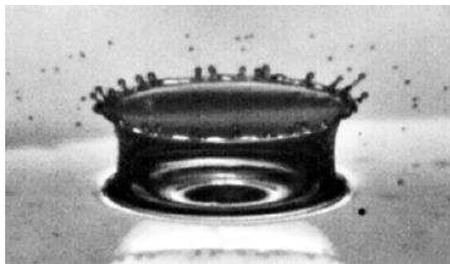


Figura 7.5: Esempio di splash a $Re=1354$ e $We=874$ tratta da [3].

7.3 Modello di Josserand-Zaleski

Il modello di Josserand-Zaleski [43], formulato in coordinate assialsimmetriche, viene qui riformulato in coordinate cartesiane e, come risultato rilevante, si deriva

una similitudine delle leggi di scaling qui ottenute con quelle già formulate in [43]. Questo risultato suggerisce dunque la possibilità di eseguire simulazioni bidimensionali piane e confrontarne i risultati con quelle assialsimmetriche proposte in [43].

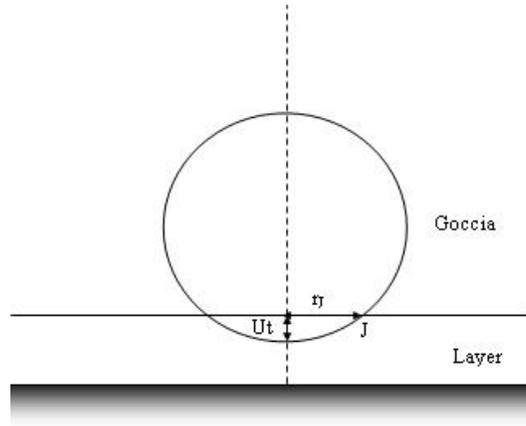


Figura 7.6: Schema dell'impatto.

Dunque, con l'intento di modellare i primi istanti del fenomeno di collisione di una goccia bidimensionale piana su di un sottile strato di liquido, consideriamo la figura 7.6. Il modello proposto in questa sezione si basa sull'ipotesi che, nei primissimi istanti successivi all'impatto, il layer, ed anche la goccia, rimangono quasi del tutto imperturbati. La collisione di fatti è infatti un fenomeno impulsivo e, nei primi istanti, è molto intensa e localizzata nella regione ove la goccia ed il layer si fondono. Nella figura 7.6, il punto d'intersezione tra la goccia ed il layer, idealmente imperturbati, è rappresentato dal punto J, e, la distanza di tale punto dal diametro verticale della goccia è data da:

$$r_J(t) \simeq (DUt)^{1/2} \quad (7.1)$$

dove U è la velocità d'impatto e D il diametro della goccia. Dunque, con riferimento alla figura 7.6, e trascurando, almeno inizialmente gli effetti della viscosità, possiamo osservare che il fenomeno presenta due scale spaziali, una orizzontale, l_o ,

che ha come ordine di grandezza $r_J(t)$ ed una verticale, l_v , che chiaramente è data dalla penetrazione della goccia nel layer all'istante t . Tale scala è dunque pari a Ut . La distanza, $r_K(t)$, dal diametro verticale della goccia alla quale si assiste alla formazione del getto è, naturalmente, dell'ordine di grandezza della scala orizzontale. Si può dunque porre:

$$r_K(t) \simeq C(DUt)^{1/2} \quad (7.2)$$

dove C è una costante unitaria. Questo, almeno in linea di principio, consente di porre $r_J = r_K$. Lo spessore del getto, e_J , ha invece una dimensione che è nell'ordine di grandezza della scala verticale:

$$e_J = Ut \quad (7.3)$$

Considerando che il liquido nel layer, ad una distanza $|r| \gg r_J$, è imperturbato, possiamo calcolare la velocità nel getto da un semplice bilancio di massa. Infatti, indicato con q la massa per unità di tempo e di spessore addotta dalla goccia al layer:

$$q = \rho U r_K \quad (7.4)$$

ed osservando che questa deve essere uguale a quella che defluisce attraverso il getto:

$$q = \rho e_J v_J \quad (7.5)$$

ove v_J è la velocità del fluido nel getto, si ottiene la seguente espressione:

$$v_J \simeq U(t/\tau)^{-1/2} \quad (7.6)$$

dove $\tau = D/U$ è la scala temporale.

Bisogna tuttavia osservare che gli effetti della tensione superficiale tendono ad ostacolare la formazione del getto. Questo effetto, studiato da Taylor e da Culick, può essere quantizzato introducendo una velocità di recessione, detta anche velocità di Taylor-Culick:

$$v_C \simeq \left(\frac{2\sigma}{\rho e_J} \right)^{1/2} \quad (7.7)$$

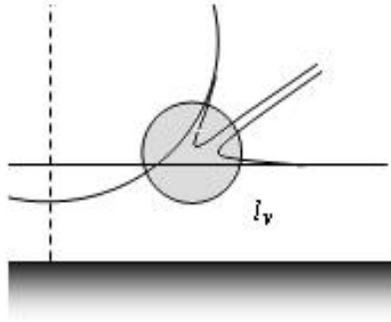


Figura 7.7: Regione viscosa.

da cui, sostituendo l'espressione di e_J , si ottiene:

$$v_C \simeq (t/\tau)^{-1/2} U W e^{-1/2} \quad (7.8)$$

Dunque, se $v_C < v_J$ il getto si sviluppa ma, se $v_C > v_J$ il getto non può formarsi. Pertanto una condizione necessaria per la formazione del getto, in assenza di effetti viscosi, è che il numero di Weber sia sufficientemente grande.

Naturalmente il criterio qui formulato risulta incompleto perchè non tiene conto degli effetti viscosi. Tali effetti possono essere introdotti, in questo modello, mediante una scala spaziale degli effetti viscosi, l_ν che, da considerazioni dimensionali, risulta avere ordine $(\nu t)^{1/2}$ e definisce la regione viscosa evidenziata in figura 7.7, alla base del getto ove, nei primissimi istanti successivi all'impatto, si sviluppa una forte vorticità. L'analisi della dinamica di questa regione presenta una sorprendente caratteristica di scaling, infatti, sia la scala viscosa l_ν che la distanza $r_J(t)$ dipendono dalla radice quadrata del tempo. Ritornando ora al meccanismo di formazione del getto, si può osservare che questi ha spessore $e_J = l_\nu$, quindi, applicando nuovamente il bilancio di massa tra il fluido che dalla goccia entra nel layer e quello che defluisce nella sheet:

$$q = \rho v_J (\nu t)^{1/2} = \rho U (U D t)^{1/2} \quad (7.9)$$

si ricava:

$$v_J = Re^{1/2}U \quad (7.10)$$

con considerazioni analoghe si arriva alla espressione della velocità di Taylor-Culik:

$$v_C = U(t/\tau)^{-1/4}We^{-1/2}Re^{1/4} \quad (7.11)$$

dunque, la condizione di formazione del getto ora implica che:

$$(t/\tau)^{1/2}WeRe^{1/2} > 1 \quad (7.12)$$

questa condizione fornisce un tempo t_J dopo il quale il getto può formarsi:

$$t_J \simeq \tau K_c^4 We^{-2} Re^{-1} \quad (7.13)$$

ove K_c è una costante che tiene conto delle approssimazioni fatte. In verità il getto si può formare anche molto rapidamente se $t_J < \tau$ purchè accada:

$$We^{1/2}Re^{1/4} > K_c \quad (7.14)$$

che, come è noto, rappresenta la legge di Sommerfeld.

Un'ulteriore previsione sulla dinamica del fenomeno può essere fatta introducendo uno scaling per il potenziale della velocità nella regione non viscosa:

$$\phi(t/\tau, X, Y) = UD(t/\tau)^n f(X, Y) \quad (7.15)$$

dove $X = 1 - x/r_J$ e $Y = y/r_J$, ed n è un esponente da determinare. Analogamente per la pressione, in detta regione, si ha:

$$p(t/\tau, X, Y) = \rho U^2 (t/\tau)^m g(X, Y) \quad (7.16)$$

da cui, mediante semplici considerazioni, si può determinare la legge di scaling delle pressioni massime:

$$p_{max} \simeq \rho U^2 (t/\tau)^{-1/2} g((t/\tau)^{-1/2}, 0) \quad (7.17)$$

$$p_{max} \simeq \rho U^2 (t/\tau)^{-1/2} g((Re)^{-1/2}, 0) \quad (7.18)$$

Dunque, nel modello proposto il moto è ovunque non viscoso tranne che nella regione del nec ove sono confinati forti effetti viscosi che determinano le dimensioni del getto nonché le condizioni di formazione del getto stesso.

La teoria qui proposta cade tuttavia in contraddizione con i risultati di Yarin-Weiss [38] perchè, come anche evidenziato da Josserand e Zaleski, il modello qui sviluppato suggerisce che il getto sia sempre presente anche per un tempo t arbitrariamente piccolo e con uno spessore infinitesimo.

7.4 Simulazioni numeriche

In questa sezione si riportano i risultati delle simulazioni numeriche condotte nei regimi di deposition, spreading e splashing. Tali simulazioni, condotte con il codice *MultiFluids*, hanno come riferimento il lavoro di Josserand e Zaleski. In questo lavoro gli autori propongono una modellistica assialsimmetrica per il fenomeno d'impatto su di un sottile strato di liquido. Le presenti simulazioni sono tuttavia eseguite adottando una modellistica bidimensionale piana del problema che, come messo in evidenza anche da Lesser *et al.* [35] e da Field *et al.* [36] per il caso di impatto in regime comprimibile, e da Howinson *et al.* [37] per il regime incomprimibile, presenta una forte analogia con la modellistica assialsimmetrica. Dunque, in letteratura, l'analogia tra il problema assialsimmetrico e quello bidimensionale piano sembra essere ben consolidata specie nel regime di splashing. D'altra parte il fenomeno in questione non è certo assialsimmetrico, infatti, come discusso da Deegan *et al.* [3], e come mostrato in figura 7.4, l'instabilità che si sviluppa sulla corona determina, il più delle volte, una asimmetria delle strutture fluidodinamiche.

Seguendo dunque l'analogia, e con riferimento alla figura 7.8, si consideri un dominio bidimensionale piano nel quale una goccia circolare di diametro D , densità ρ_l e viscosità μ_l , collide con velocità U , su un film dello stesso liquido di spessore h , in un ambiente inizialmente quiescente.

I parametri adimensionali che governano il fenomeno in questione sono i numeri

D	2 mm	h	0.3 mm
$L_x=L_y$	7 mm	Δt	10^{-8} s
$N_x = N_y$	60-120-240-480	U	10.0 m/s
ρ_g	2.0 kg/m ³	ρ_l	1000 kg/m ³
μ_g	$5 \cdot 10^{-4}$ Ns/m ²	$\mu_l (Re = 40)$	$5 \cdot 10^{-1}$ Ns/m ²
$\mu_l (Re = 100)$	$2 \cdot 10^{-1}$ Ns/m ²	$\mu_l (Re = 1000)$	$2 \cdot 10^{-2}$ Ns/m ²

Tabella 7.1: Parametri delle simulazioni.

di Reynolds e di Weber, lo spessore adimensionale del layer $H = h/D$ ed i rapporti di densità e viscosità tra i due fluidi, ρ_g/ρ_l e μ_g/μ_l . Tali parametri sono riportati in tabella 7.1. Infine, un ulteriore parametro, utile nella descrizione del fenomeno, è la scala temporale del fenomeno stesso definita come: $\tau = D/U$.

7.4.1 Dominio computazionale, condizioni iniziali ed al contorno

Con riferimento alla figura 7.8, il moto è assunto essere simmetrico rispetto al diametro verticale della goccia. Il dominio computazionale è dunque il quadrato limitato da una condizione al contorno di simmetria lungo l'asse Y e da condizioni al contorno di parete sulle frontiere nord, sud ed est. L'accuratezza numerica dei risultati è stata stimata utilizzando diverse griglie computazionali, da una meno fitta (con 60x60 celle computazionali), ad una molto fitta con (480x480 celle computazionali). L'analisi della grid indipendente mostra che i risultati ottenuti hanno una buona accuratezza già sulla griglia con 240x240 celle computazionali. Tuttavia, specie con riferimento al regime di splashing, caratterizzato da complessi fenomeni di breakup, alcuni dei risultati riportati sono relativi al mesh con 480x480 celle computazionali. In merito alle condizioni iniziali si adotta una condizione di velocità nulla nel layer e nell'ambiente gassoso all'istante iniziale. La goccia è invece animata

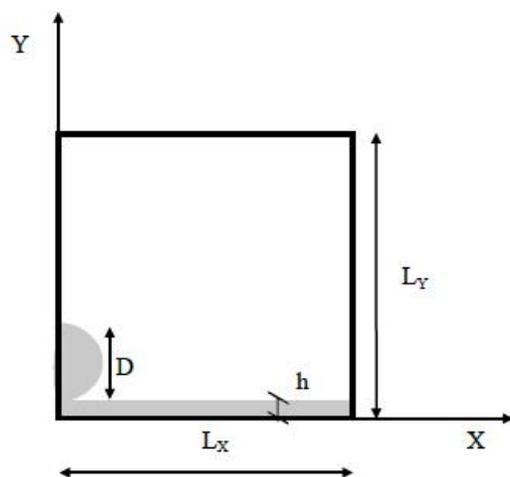


Figura 7.8: Dominio fisico.

da una velocità U diretta ortogonalmente alla superficie del layer. Inoltre, come già osservato, gli effetti della gravità sono trascurati in questa analisi e la simulazione ha inizio con la goccia posta in contatto con il layer come risulta dalla figura 7.8. In questo istante, il tempo adimensionalizzato rispetto alla scala temporale, t/τ , è posto pari a zero.

7.4.2 Regime di Deposition

La figura 7.9 mostra il risultato della simulazione nel regime di deposition ($Re = 40$, $We = 8000$), negli istanti $t/\tau = 0.1, 0.2, 0.5, 0.7$. Come già anticipato, in questo regime si assiste ad una “delicata deposizione” della goccia sul layer senza la formazione di una sheet. In particolare, come si evince dalla figura 7.9 la collisione della goccia crea una sorta di onda che si propaga sulla superficie del layer. Un interessante fenomeno, osservabile in questo regime, è l'intrappolamento di microbolle di fluido ambiente tra il layer e la goccia.

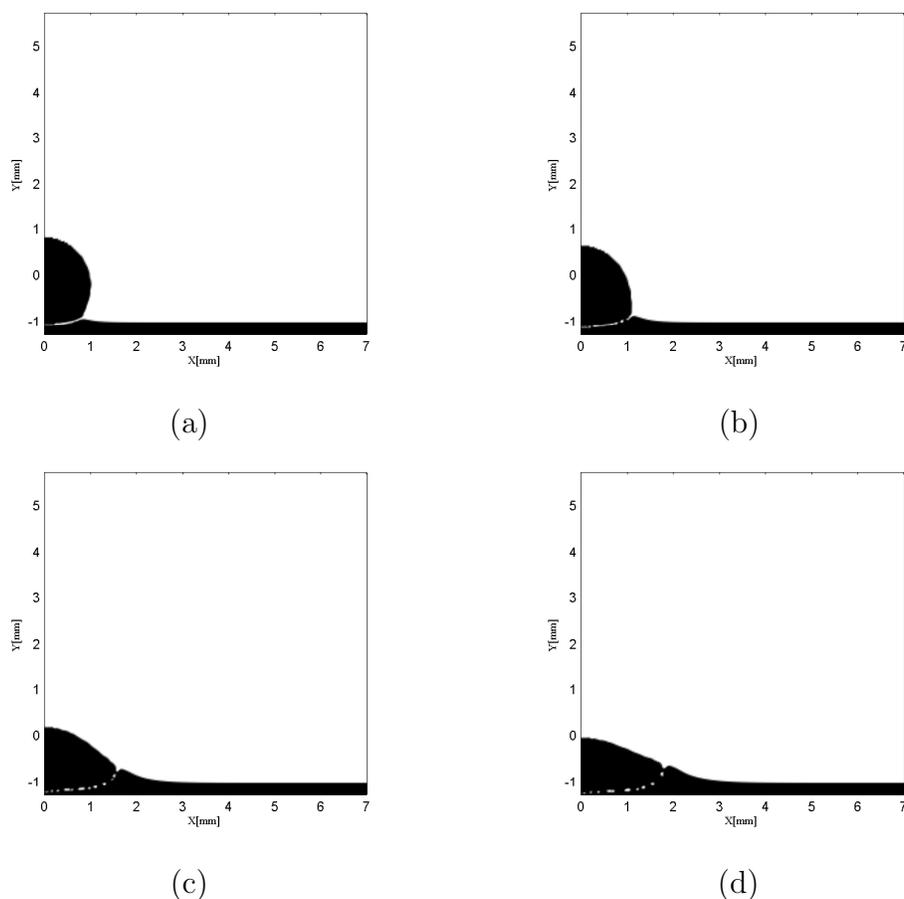


Figura 7.9: Deposition della goccia calcolata per $Re = 40$ e $We = 8000$ in vari istanti di tempo: (a) $t/\tau = 0.1$; (b) $t/\tau = 0.2$; (c) $t/\tau = 0.5$; (d) $t/\tau = 0.7$.

7.4.3 Regime di Spreading

La figura 7.10 mostra il risultato delle simulazioni nel regime di spreading ($Re = 100$, $We = 8000$). In questo regime si osserva la formazione di una sheet all'istante $t/\tau = 0.2$. Nei successivi istanti di tempo la sheet cresce e si propaga sulla superficie del layer allontanandosi dalla regione d'impatto.

In accordo con la letteratura la sheet rimane coerente e non si verificano fenomeni di breakup. Nella figura 7.10 è inoltre possibile notare che anche in questo regime si

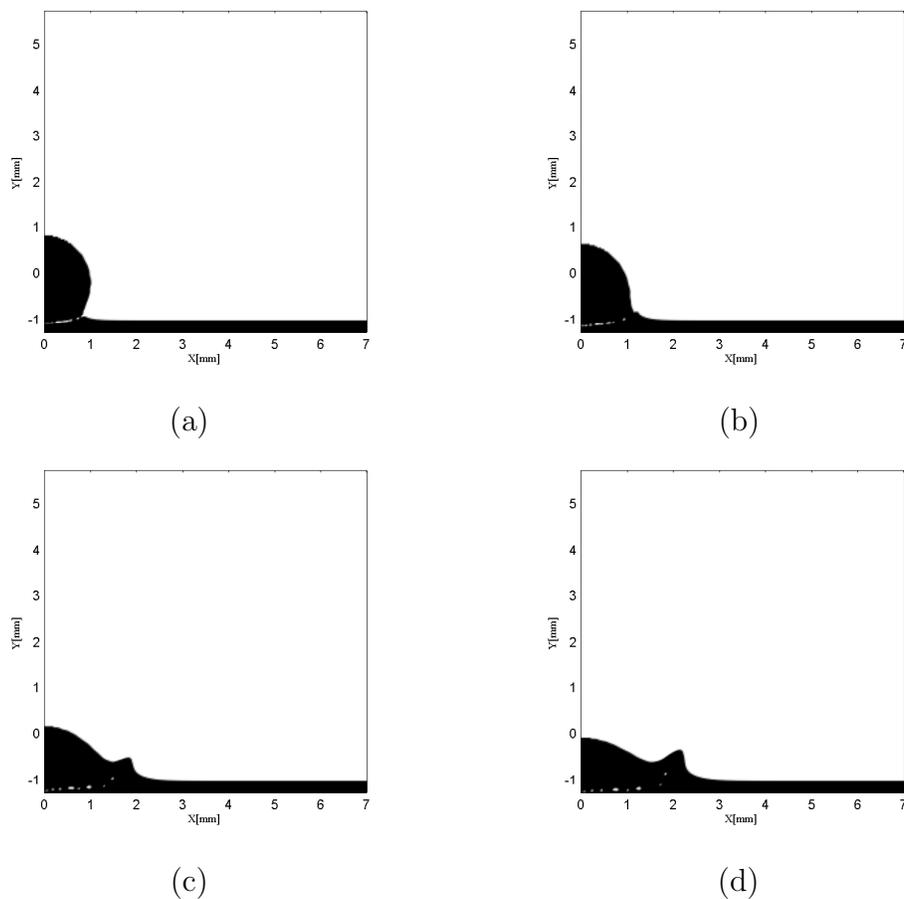


Figura 7.10: Spreading della goccia calcolata per $Re = 100$ e $We = 8000$ in vari istanti di tempo: (a) $t/\tau = 0.1$; (b) $t/\tau = 0.2$; (c) $t/\tau = 0.5$; (d) $t/\tau = 0.7$.

verifica l'intrappolamento di microbolle di fluido ambiente tra la goccia ed il layer. Seguendo la traccia lasciata dalle microbolle si comprende che la sheet è costituita in parte dal fluido proveniente dalla goccia ed in parte da fluido proveniente dal layer. In definitiva, la dinamica dell'impatto, in questo regime, si differenzia da quella in regime di deposition proprio in virtù della formazione della sheet che, tuttavia, non subisce fenomeni di breakup.

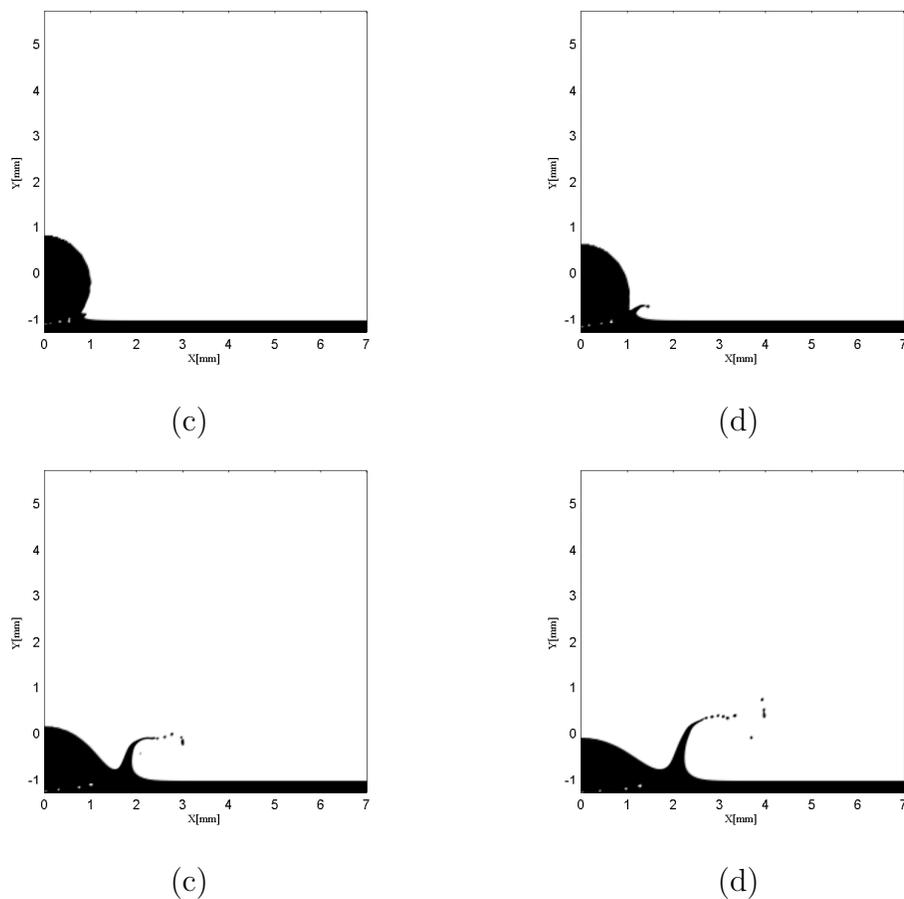


Figura 7.11: Splashing della goccia calcolata per $Re = 1000$ e $We = 8000$ in vari istanti di tempo: (a) $t/\tau = 0.1$; (b) $t/\tau = 0.2$; (c) $t/\tau = 0.5$; (d) $t/\tau = 0.7$.

7.4.4 Regime di Spalshing

I risultati sicuramente più interessanti vengono dalla simulazione numerica in regime di splashing. Le simulazioni riportate in figura 7.11 si riferiscono dunque a tale regime ove i numeri di Reynolds e di Weber sono rispettivamente $Re = 1000$ e $We = 8000$. Come si evince dalla tale figura 7.11, in questo regime si assiste alla formazione e crescita di un getto che si propaga sul pelo libero del layer e subisce un'instabilità che dà luogo alla formazione di goccioline secondarie. In particolare, la

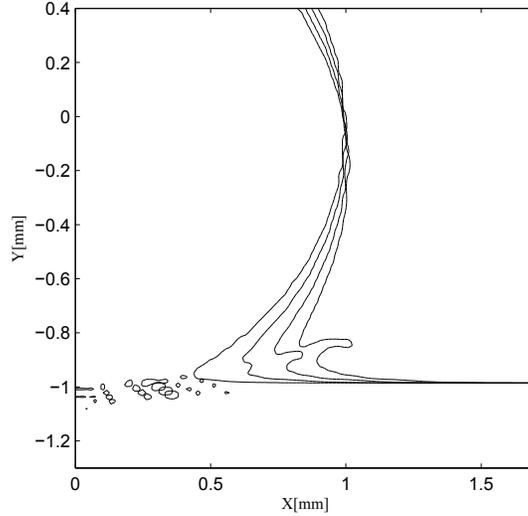


Figura 7.12: Formazione del getto negli istanti di tempo: (a) $t/\tau = 0.025$; (b) $t/\tau = 0.05$; (c) $t/\tau = 0.075$; (d) $t/\tau = 0.1$.

formazione del getto avviene nei primissimi istanti successivi all'impatto, infatti, già all'istante $t/\tau = 0.1$ è possibile osservare il getto, che all'istante $t/\tau = 0.2$, subisce il fenomeno di primo breakup con conseguente distacco di una gocciolina secondaria. Negli istanti successivi al primo breakup il getto continua a crescere in estensione e subisce ulteriori breakup che danno luogo alla formazione di molte goccioline secondarie. Il fenomeno dell'intrappolamento di microbolle di fluido ambiente è presente anche in questo regime sebbene meno evidente dei precedenti casi.

Una dettagliata descrizione della formazione e della dinamica del getto, nei primissimi istanti successivi alla collisione, è riportata nella figura 7.12. Al fine di ottenere una maggiore risoluzione spaziale, tale figura è stata ottenuta con una simulazione eseguita su un mesh di 480×480 celle computazionali. Da tale figura si evince che il getto che si forma nei primissimi istanti successivi alla collisione è orientato principalmente in direzione orizzontale, la struttura che si sviluppa è sicuramente simile a quelle note come Ejecta sheet, analizzate da Thoroddsen [41]. Successivamente,

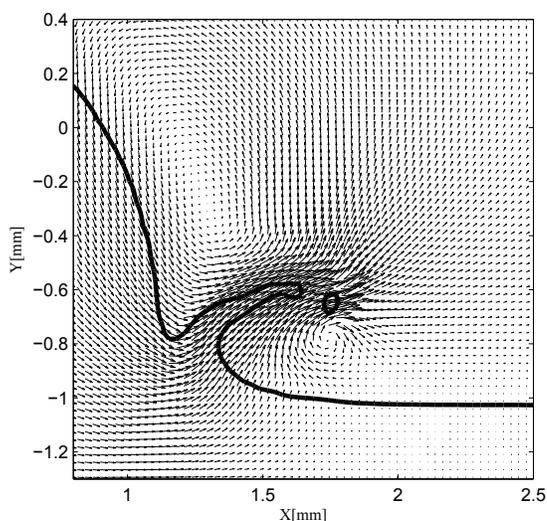


Figura 7.13: Dettaglio del breakup all'istante $t/\tau = 0.25$.

come evidenziato da Deegan *et al.* [3], la sheet si sviluppa come una Peregrine sheet che al suo estremo superiore presenta ancora una Ejecta sheet, figura 7.11.

In figura 7.13 si mostra un dettaglio del campo di velocità e della shape all'istante $t/\tau = 0.25$. Da tale figura è evidente che nel campo di moto, in una regione molto prossima al getto, si produce una vorticità che, unitamente alla tensione superficiale, determina l'inclinazione e la tendenza ad arrotolarsi della sheet. Nella figura risulta anche evidente il Break-up della prima gocciolina e la classica conformazione a bulbo del rim della sheet.

La figura 7.14 mostra il campo di pressione in vari istanti di tempo. Da tale figura si evince che il layer rimane praticamente imperturbato dalla collisione. Fisicamente è come se il layer rappresentasse una sorta di “muro d'acqua” che ostacola la propagazione della perturbazione. Tale comportamento determina la formazione della sheet che, in quest'ottica, rappresenta l'unica possibilità di deflusso per il fluido addotto dalla goccia al layer.

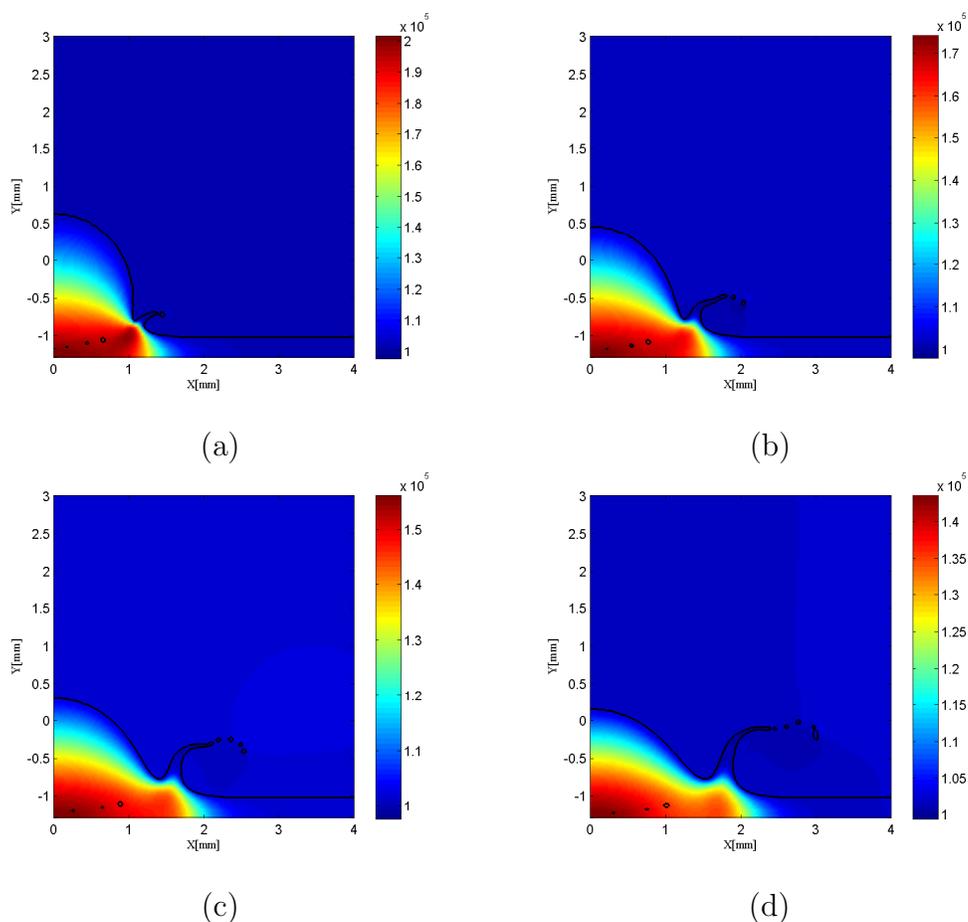


Figura 7.14: Campo di pressione in vari istanti di tempo: (a) $t/\tau = 0.2$; (b) $t/\tau = 0.3$; (c) $t/\tau = 0.4$; (d) $t/\tau = 0.5$.

7.5 Spreading Factor e leggi di scaling

In questa sezione, i risultati numerici ottenuti con il codice *MultiFluids* sono confrontati con le leggi di scaling proposte da Josserand e Zaleski. Un aspetto particolarmente interessante di questo confronto è l'analisi della dinamica della sheet.

In figura 7.15 si riporta un confronto tra il cosiddetto spreading factor analitico (linea continua), dato dalla legge di scaling 7.2, e quello numerico (in blu). Quest'ultimo è determinato come distanza adimensionalizzata, rispetto al diametro della

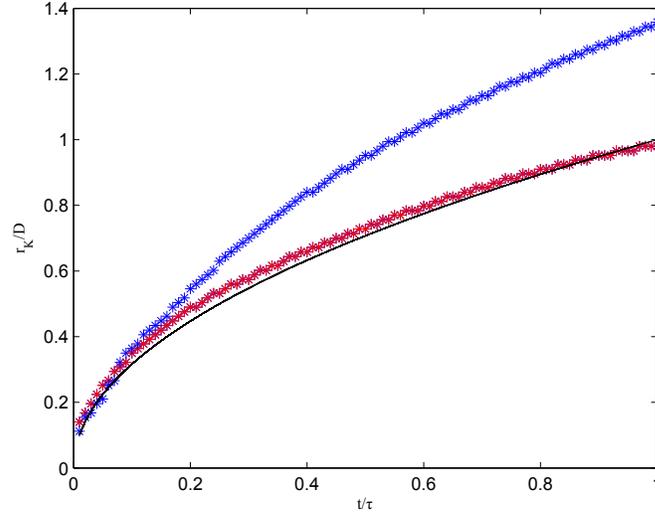


Figura 7.15: Propagazione della sheet. Spreading Factor analitico (—), spreading factor numerico (*), posizione del picco della u (*).

goccia, della base della corona dal piano di simmetria della goccia al variare del tempo e, pertanto, tiene conto del moto la sheet sul layer. Come si evince dalla figura, e come ci si aspettava, i risultati numerici seguono la legge di scaling solo nei primissimi istanti di tempo. Successivamente, quando si sviluppa il getto, i risultati numerici si discostano in modo considerevole da quelli analitici pur crescendo con un andamento piuttosto simile. Nella stessa figura si riporta anche la posizione, adimensionalizzata rispetto al diametro della goccia, del picco della componente orizzontale di velocità valutata lungo la linea media del layer (in rosso). Sorprendentemente tale figura mostra che questo picco di velocità segue con buon accordo la legge di scaling 7.2 anche per tempi molto lunghi rispetto agli istanti di formazione del getto.

In figura 7.16 si riporta un confronto tra l'andamento temporale del picco di pressione adimensionalizzato rispetto a ρU^2 (in blu), ed il fattore di scaling $(t/\tau)^{-1/2}$ che compare nella 7.17. L'analisi di questo risultato mostra un buon accordo tra

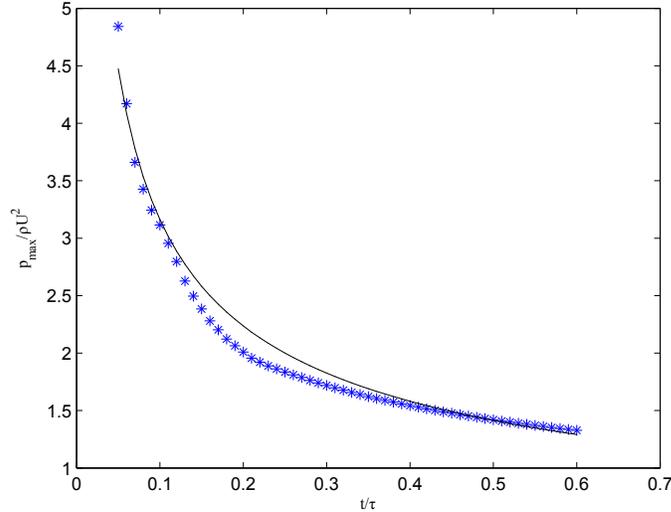


Figura 7.16: Decadimento del picco di pressione per $Re=1000$ e $We=8000$. (—) legge di scaling, (*) risultati numerici.

la presenti simulazioni e la relazione 7.17. L'accordo tra le simulazioni numeriche e le leggi di scaling è eccellente sia nei primi istanti temporali che per tempi lunghi. Tuttavia, i risultati numerici si discostano dalla legge di scaling in un intorno dell'istante temporale $t/\tau = 0.2$, cioè nell'istante di massima crescita del getto. Si conclude infine che il decadimento temporale del picco di pressione segue, in buona approssimazione, la legge di scaling 7.17.

7.6 Lo splash come meccanismo di formazione di discontinuità

In questa sezione, partendo dal risultato espresso dalla figura 7.14, si propone un confronto dei risultati numerici con il modello proposto da Yarin e Weiss [38]. Questi autori propongono una modellistica quasi-monodimensionale nella quale il meccanismo di formazione del getto viene ricondotto alla presenza di una discontinuità

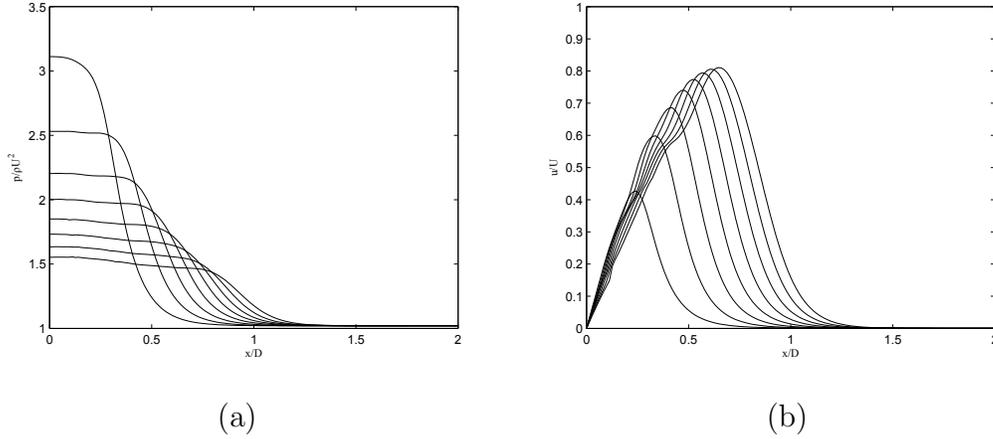


Figura 7.17: Pressione (a) e velocità (b) adimensionalizzate, lungo la linea media del layer. Le curve sono riportate in vari istanti temporali a partire dall'istante $t/\tau = 0.05$ e con un passo temporale pari a 0.05.

cinematica che presenta molti aspetti di uno “shock”. Tale discontinuità s’identifica con la sheet e, come evidenziato da Yarine e Weiss, in regime incomprimibile, può esistere solo in presenza di un pozzo.

Un’ulteriore conferma di quest’idea viene dalla figura 7.17 in cui si riportano gli andamenti della pressione (a) e della componente orizzontale della velocità (b) lungo la linea media del layer in vari istanti di tempo ed adimensionalizzate rispetto a ρU^2 ed U . In particolare dal grafico della pressione si evince che solo la regione immediatamente sotto la goccia risulta interessata dal fenomeno d’impatto. Infatti, come risulta da tale figura, la pressione si mantiene approssimativamente costante rispetto ad x/D , pur subendo un brusco calo solo in corrispondenza della posizione della sheet. Questo andamento, come si evince dalla figura, è seguito ad ogni istante di tempo pur avendo, la pressione massima, una considerevole diminuzione rispetto al tempo. Dal grafico della velocità si evince che questa ha un andamento inizialmente crescente rispetto ad x/D ad ogni istante temporale, raggiunto il valore massimo, la velocità subisce una brusca diminuzione fino a raggiungere il valore 0. La figura

7.17 evidenzia dunque tendenza del layer a rimanere quasi del tutto imperturbato dalla collisione della goccia e la similitudine esistente tra questo fenomeno e quello di propagazione di uno “shock”.

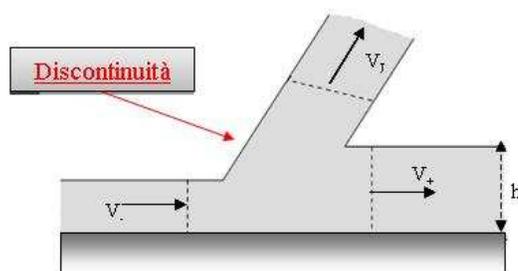


Figura 7.18: Moto della discontinuità.

La velocità di propagazione della discontinuità è indagata da Yarin e Weiss ed è associata proprio al moto della sheet. Detta velocità, con riferimento alla figura 7.18, viene espressa, nel modello di Yarin e Weiss, dalla seguente relazione:

$$V_d = \frac{V_+ + V_-}{2} \quad (7.19)$$

dove V_+ e V_- rappresentano la velocità in un punto immediatamente a valle ed immediatamente a monte della discontinuità e valutate lungo la linea media del Layer. Dunque, il problema principale nella stima numerica della V_d è quello di identificare la posizione della discontinuità ove valutare V_+ e V_- . Una buona stima di detta posizione deriva dalla posizione del punto di massimo della componente verticale di velocità.

In figura 7.19 si riporta, in forma adimensionalizzata rispetto alla velocità di impatto U , un confronto tra la velocità di avanzamento della discontinuità (in blu), calcolata numericamente stimando V_+ e V_- nella relazione 7.19 e la velocità di avanzamento della sheet (linea continua), calcolata come derivata temporale della legge di scaling 7.2. Da tale figura si evince un ottimo accordo tra la velocità calcolata numericamente e la legge di scaling per tempi $t/\tau > 0.5$. Questo suggerisce

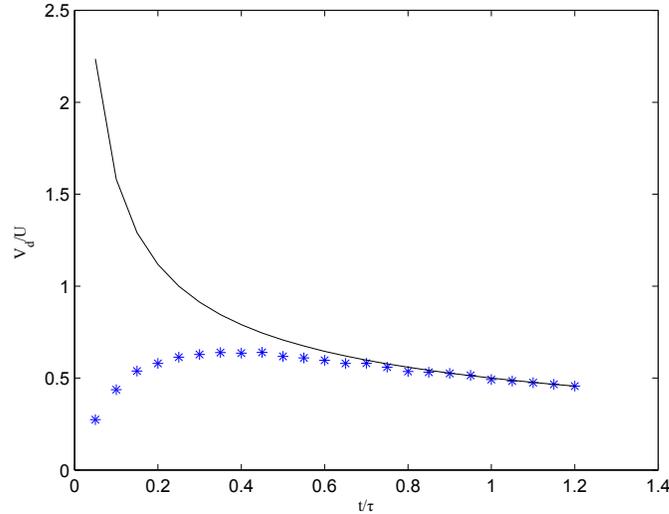


Figura 7.19: Velocità di avanzamento della discontinuità.

che la velocità della discontinuità, per tempi sufficientemente lunghi, segue bene la legge di scaling proposta da Josserand e Zaleski. Per tempi $t/\tau < 0.5$ l'accordo tra la legge di scaling e la legge proposta da Yarin e Weiss non è buono, ma ciò è dovuto al fatto che in questi istanti il problema in questione non può essere analizzato con il modello quasi-monodimensionale di Yarin e Weiss, perchè, difatti, il moto è fortemente 2-D.

7.7 Simulazioni 3-D

In questa sezione si riporta un risultato qualitativo recentemente ottenuto. Le simulazioni qui proposte riguardano la simulazione tridimensionale dell'impatto di una goccia in regime di deposition, il numero di Reynolds è infatti molto piccolo e pari a 4.5. Fatto rilevante di queste simulazioni è che la versione 3-D del codice *MultiFluids* fornisce un risultato, almeno qualitativamente buono. Un ulteriore aspetto, molto sentito, nelle simulazioni tridimensionali, è il costo computazionale. Infatti,

le presenti simulazioni sono eseguite su mesh uniformi con 90^3 celle computazionali. Nonostante ciò, il codice ha fornito risultati in tempi assolutamente non proibitivi, nell'ordine di circa due giorni di simulazione continua.

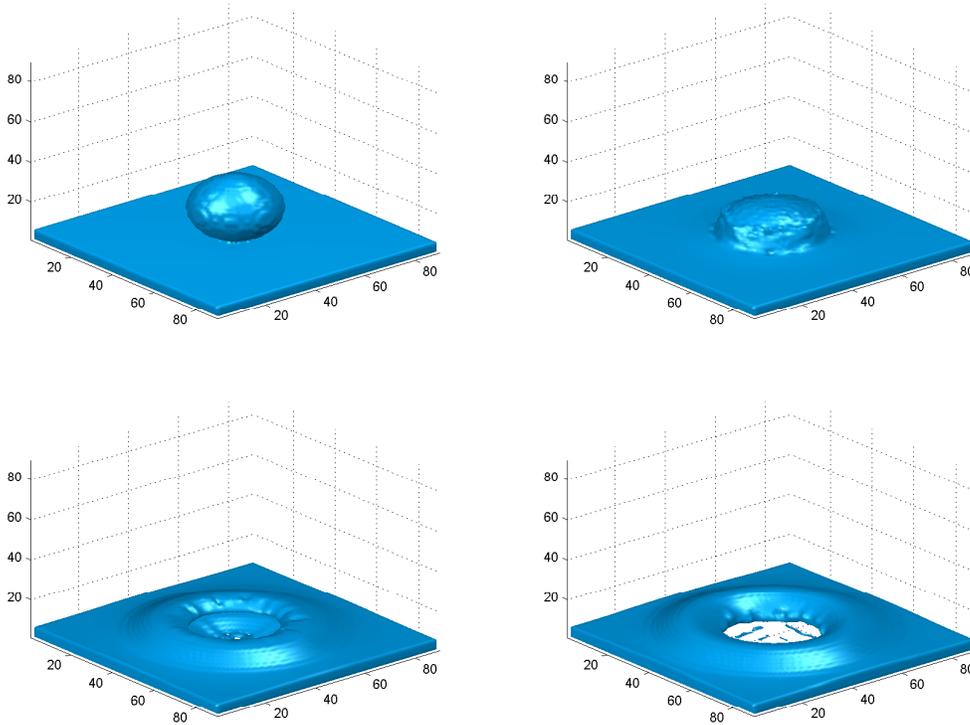


Figura 7.20: Deposition 3-D 729000 celle computazionali, $Re=4.5$.

Conclusioni

L'attività di ricerca, documentata in questa tesi, ha avuto come oggetto lo studio del moto a superficie libera. Tali moti hanno da sempre esercitato un particolare fascino sui ricercatori del settore in quanto presentano una straordinaria ricorrenza nei fenomeni naturali, e sono di notevole importanza per le applicazioni ingegneristiche e per la fisica di base.

Questa di ricerca si è articolata in tre fasi ben distinte. Nella prima fase, di indagine bibliografica, si sono presi in conto risultati noti in letteratura, individuando il metodo VOF come ideale per gli obiettivi prefissi da questa ricerca. Nella seconda fase, di natura puramente numerica, è stato progettato e testato il codice *MultiFluids*. In fine si sono indagati vari fenomeni di moto a superficie liquida.

I risultati numerici qui ottenuti sono in buon accordo con la letteratura specialistica e sono originali in quanto, hanno testato il metodo VOF in condizioni di simulazione particolarmente critiche e non ancora esplorate in letteratura.

In particolare, per la prima volta in letteratura, è stato studiato il moto di una liquid sheet gravitazionale con il metodo VOF. La simulazione ha messo in evidenza la capacità del codice di catturare un complesso fenomeno come il die-swell, nonchè gli effetti di una forza singolare, quale quella di tensione superficiale.

Nell'ambito delle applicazioni industriali, si è analizzato il problema delle moving sheet, ancora mancante nella letteratura VOF. Tali simulazioni hanno messo in

evidenza che la deflessione della lamina non è molto sensibile alla legge di accelerazione imposta ma risulta fortemente dipendente da parametri quali la velocità di coating e la corsa di accelerazione dell'ugello. I risultati qui presentati, da un lato dimostrano la capacità del codice di "catturare" una complessa fenomenologia e, dall'altro, rappresentano un contributo sicuramente originale nella letteratura dei metodi VOF, ancora carente sotto il profilo delle applicazioni industriali.

In fine, nella terza applicazione qui proposta, si è analizzato il modo prodotto dall'impatto di una goccia su un sottile film liquido. In quest'ambito si è proposta e validata una similitudine tra le simulazioni bidimensionali piane ed assialsimmetriche. Le simulazioni condotte trovano un ottimo accordo con le leggi di scaling note in letteratura, inoltre, tali simulazioni, hanno permesso di mettere in luce la fisica dello splashing e di ricondurre la dinamica della corona ad un meccanismo di formazione di discontinuità. Quest'ultimo risultato è particolarmente interessante nella modellazione del splashing ed è in pieno accordo con i più autorevoli lavori in letteratura.

Ringraziamenti

Con sentimento di profonda gratitudine desidero ringraziare i mie genitori che hanno compreso e sempre sostenuto tutti miei sforzi. In particolare desidero ringraziare Isis, per il sorriso che ha e per l'amore che sente per me.

Questa tesi è senza dubbio ricca di idee e contributi che testimoniano l'impegno del Prof. de Luca che ha sostenuto, visionato, e reso possibile la mia crescita professionale. A lui va il mio particolare ringraziamento. Colgo l'occasione per ringraziare il Prof. Coppola per i suoi numerosi suggerimenti, e la collaborazione che si è costruita in questi 3 anni di dottorato. Un ringraziamento particolare lo devo al Prof. Philip Yecko della Montclair University (New Jersey, USA) per i suoi suggerimenti e per l'entusiasmo con cui ha apprezzato il mio lavoro.

Bibliografia

- [1] J. W. Hoyt and J Taylor. Waves on water jets. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 83, pp. 119-127, 1977.
- [2] P. Marmottant and E Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 498, pp. 73-112, 2004.
- [3] R. D. Deegan, P. Brunet and J. Eggers. Complexities of Spalishing. *Nonlinearity*, vol. 21, pp. C1-C11, 2008.
- [4] F.H.Harlow and J.E.Welch. Numerical calculations of time-dependent viscous incompressible flow with a free surface. *Physics of Fluids*, Vol. 8, No. 12, pp. 2182-2189, 1965.
- [5] F.H.Harlow and J. P. Shannon. The splash of a liquid droplet. *Journal of Applied Physics*, Vol. 38, 3855.
- [6] S.Osher and J.A. Sethian. Front propagating with curvature-dependent-speed: Algorithms based on hamilton-Jacobi formulation. *Journal Of Computational Physics*, Vol. 79, No. 1, p. 12, 1988.
- [7] C.W.Hirt and B.D.Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the dynamics of free boundaries. *Journal Of Computational Physics*, Vol. 39, pp. 201-225, 1981.
- [8] M. Sussmann and E. G. Puckett. A coupled level set and Volume-Of-Fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flow. *Journal Of Computational Physics*, Vol. 162, pp. 301-337, 2000.
- [9] R. DeBar. Fundamentals of the KRAKEN code. *Technical Report*, UCIR-760,LLNL, 1974.
- [10] W.F. Noh and P.R. Woodward. SLIC (Simple Line Interface calculation). *Lecture Notes in Physics*. *Springer-Verlag, New York/Berlin*, Vol. 59, p. 330, 1976.
- [11] M.D. Torrey, L.D. Cloutman, R.C. Mjolsness and C.W. Hirt. NASA-VOF2D: a computer program for incompressible flows with free surfaces. *Technical Report LA-10612-MS, Los Alamos National Laboratory*, December 1985.

-
- [12] M.D. Torrey, R.C. Mjolsness and L.R. Stein. NASA-VOF3D: a three-dimensional computer program for incompressible flows with free surfaces. *Technical Report LA-11009-MS, Los Alamos National Laboratory*, July 1987.
- [13] D.B.Kothe and R.C.Mjolsness. Ripple: A new model for incompressible flows with free surfaces. *AIAA Journal*, Vol. 30, pp. 2694-2700, 1992.
- [14] J. U. Brackbill, D. B. Kothe and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension, *Journal of Computational Physics*, Vol. 100, pp. 335-354, 1992.
- [15] J. R. Richards, A. N. Beris and Abrham M. Lenhoff. Steady laminar flow of liquid-liquid jets at high Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, Vol. 5, No. 7, pp. 1703-1717, 1993.
- [16] J. R. Richards, Abrham M. Lenhoff and A. N. Beris. Dynamic of breakup of liquid-liquid jets. *Physics of Fluids*, Vol. 6, No. 8, pp. 2640-2654, 1994.
- [17] J. R. Richards, A. N. Beris and Abrham M. Lenhoff. Drop formation in liquid-liquid systems before and after jetting. *Physics of Fluids*, Vol. 7, No. 11, pp. 2617-2630, 1995.
- [18] B. LaFaurie, C. Nardone, R.Scardovelli, S.Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flow with SURFER. *Journal of Computational Physics*, (113):134-147, 1993.
- [19] E.G.Puckett. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with application to computing shock wave refraction. *Journal of Computational Physics*, pp. 933-938, 1991.
- [20] B.J. Parker, D.L. Youngs. Two and three dimensional simulation of fluid flow with material interface. *technical Report 01/92, UK Atomic Weapons Establishment, Aldermaston, Berkshire*, February (1992).
- [21] J. E. Pilliod. An analysis of piecewise linear interface reconstruction algorithms for volume-of-fluid methods. *M. S. Thesis, University of California, Davis.*. September 1992.
- [22] J. E. Pilliod, E.G.Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithm for tracking material interface. *Proceeding of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Davis, CS*, (199) pp. 465-501, 2004.
- [23] Y. Renardy and M. Renardy. PROST: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of Computational Physics*, Vol. 183, pp. 400-421, 2002.
- [24] R. Scardovelli and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection *International Journal for Numerical Methods in Fluid*. (41):251-274, 2003.

- [25] E. Ausilia, S. Manservini, R. Scardovelli, S. Zaleski. A geometrical area preserving Volume-Of-Fluid advection methods. *Journal of Computational Physics*, (192):355-364, 2003.
- [26] M.Sussman, P.Smereka, and S.Osher. A level set approach for computing solution to incompressible two phase flow. *Journal Of Computational Physics*, (114):146-159, 1994.
- [27] G. C. Georgiou, T. C. Papanastasiou and Wilkes. Laminar Newtonian jets at high reynolds number and high surface tension. *AIChE Journal*, Vol. 39, No. 9, pp. 1559-1562, 1988.
- [28] L. de Luca and M. Costa. Two-dimensional flow of a liquid sheet under gravity. *Computers & Fluids*, Vol. 24, No. 4, pp. 401-414, 1995.
- [29] R. E. Nickell, R. I. Tanner and B. Caswell. The Solution of Viscous Incompressible Jet and Free-Surface Flows Using Finite-Element Methods. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 65, pp. 189, 1974.
- [30] S. J. Weinstein and Ruschak. Coating flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 36, pp. 29-53, 2004.
- [31] M. Gilio, F. Al-Bender and J. -P. Kruth. The dynamics of moving sheet of liquid, part I: derivation of the 2D equations of motion. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 24, pp. 555-571, 2005.
- [32] M. Gilio, F. Al-Bender and J. -P. Kruth. The dynamics of moving sheet of liquid, part II: experiments. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 24, pp. 572-585, 2005.
- [33] A. M. Worthington. A Study of Splashes. *London: Longmans, Green, and Co*, pp.1-129, 1908.
- [34] H. E. Edgerton. Stopping time: the photographs of Harold Edgerton. *New York, Abrams*, 1977.
- [35] M. B. Lesser. Analytical solution of liquid-drop impact problem. *Proceeding of Royal Society of London*, vol. A 377, pp. 289-308, 1981.
- [36] J. E. Field, M.B. Lesser and Dear. Studies of two-dimensional liquid-wedge impact and their relevance to liquid-drop impact problem. *Proceeding of Royal Society of London*, vol. A 401, pp. 225-249, 1985.
- [37] S. D. Howison, J. R. Ockendon, J. M. Oliver, R. Purvis and F. T. Smith. Droplet impact on a thin fluid layer. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 542, pp. 1-23, 2005.
- [38] A. L. Yarin and D. A. Weiss. Impact of drops on solid surface: self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 283, pp. 141-173, 1995.

-
- [39] D. A. Weiss and A. L. Yarin. Single drop impact onto liquid film: neck distortion, jetting, tiny bubble entrainment, and crown formation. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 385, pp. 229-254, 1999.
- [40] A. L. Yarin. Drop Impact Dynamics: Spalishing, Spreading, Reciding, Bouncing... *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 38, pp. 159-192, 2006.
- [41] S. T. Thoroddsen. The ejecta sheet generated by the impact of a drop. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 451, pp. 373-381, 2002.
- [42] M. Reiber and A. Frohn. A numerical study on the mechanism of splashing. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 20, pp. 455-461, 1999.
- [43] C. Josserand and S. Zaleski. Droplet splashing on a thin liquid film. *Physics of Fluids*, vol. 15, No. 6, pp. 1650-1657, 2003.
- [44] N. Nikolopoulos, A. Theodorakakos, G. Bergeles. Normal impingement of a droplet onto a wall film: a numerical investigation. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 26, pp. 119-132, 2004.
- [45] N. Nikolopoulos, A. Theodorakakos, G. Bergeles. Experimental investigation of splash and crown formation during single drop impact on wetted surface. *Experiments in fluids*, vol. 33, pp. 648-652, 2003.