Capitolo 1

Formulazione matematica dei modelli di sottogriglia

Nella presente tesi viene utilizzato un approccio di tipo “large-eddy” per simulare numericamente la turbolenza. Questo tipo di approccio risolve direttamente le grandi scale della turbolenza e modellizza le scale più piccole di una certa dimensione utilizzando vari modelli di subgrid. Le grandi scale vengono separate dalle piccole tramite un’operazione di filtraggio. Nel nostro caso il filtro è applicato in maniera implicita tramite la discretizzazione dello spazio fisico su di una griglia di calcolo.

1.1 L’operazione di filtraggio

Le equazioni di Navier-Stokes vengono filtrate nei sottodomini C_i dello spazio computazionale tali che

$$\bigcup_{i=1}^{N} C_i = \Omega$$

dove Ω è l’intero dominio di calcolo.

Il filtraggio di una funzione $f(\underline{X},t)$ con $\underline{X} = \underline{X}(x,y,z)$ corrisponde all’integrale di convoluzione $\overline{f}(\underline{X},t)$ dato da

$$\overline{f}(\underline{X},t) = \int_{C_i} f(\underline{X}',t) \cdot G(\underline{X}' - \underline{X}) d\underline{X}'$$

dove $G(\underline{X}' - \underline{X})$ è la funzione filtro normalizzata per cui si ha $\int_{C_i} G(\underline{X}) d\underline{X} = 1$.

In questa studio si è adottato un filtro normalizzato *top-hat* applicato implicitamente alle equazioni derivate dalla discretizzazione ai volumi finiti nello spazio fisico, cioè per una generica funzione $f(\underline{X},t)$ si ha

$$\overline{f}(\underline{X},t) = \frac{1}{\overline{\Delta}_1 \cdot \overline{\Delta}_2 \cdot \overline{\Delta}_3} \int_{C_i} f(\underline{X}',t) d\underline{X}' \tag{1.1}$$

in cui le grandezze $\overline{\Delta}_1$, $\overline{\Delta}_2$, $\overline{\Delta}_3$ costituiscono le lunghezze dei lati della cella C_i considerata.

1.2 Equazioni del moto per fluido incomprimibile

In questo paragrafo vengono riportate le equazioni che descrivono il moto di un fluido incomprimibile (si utilizza la notazione di sommatoria sugli indici ripetuti):

- Equazione di continuità in massa

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{1.2}$$

- Equazione di bilancio della quantità di moto

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i \cdot u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_i} + 2\nu \cdot \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.3}$$

con

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \tag{1.4}$$

in cui u_i è la i-esima componente della velocità, ρ la densità, p la pressione ed S_{ij} il tensore di velocità di deformazione.

1.3 Equazioni del moto filtrate per fluido incomprimibile

Sfruttando le seguenti proprietà dei filtri

$$\overline{f + g} = \overline{f} + \overline{g} \tag{1.5}$$

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial x} \tag{1.6}$$

le equazioni del moto possono essere riscritte nella maniera seguente:

- Equazione di continuità in massa

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_j} = 0 \tag{1.7}$$

- Equazione di bilancio della quantità di moto

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{u_i\cdot u_j}\right)}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}+2\nu\cdot\frac{\partial \overline{S}_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.8}$$

con

$$\overline{S}_{ij}=\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.9}$$

Introducendo il tensore degli sforzi di subgrid τ_{ij} definito come

$$\tau_{ij}=\overline{u_i\cdot u_j}-\overline{u}_i\cdot\overline{u}_j \tag{1.10}$$

l'equazione di bilancio della quantità di moto diventa

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{u}_i\cdot\overline{u}_j\right)}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}+2\nu\cdot\frac{\partial \overline{S}_{ij}}{\partial x_j}-\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.11}$$

Come si vede l'equazione 1.11 è formalmente identica all'equazione di bilancio della quantità di moto non filtrata ad eccezione del solo termine τ_{ij} che descrive gli effetti delle piccole scale, cioè le scale non risolte direttamente perché più piccole delle dimensioni del filtro usato, sulle grandi scale. Per chiudere il problema è necessario introdurre un modello per τ_{ij}.

1.4 I modelli di subgrid

I modelli utilizzati nelle simulazioni LES ed analizzati in questa tesi sono il modello di Smagorinsky, il modello dinamico (DSM) ed il modello dinamico misto a due parametri (DTM).

1.4.1 Il modello di Smagorinsky

Questo modello prende il nome dal sui inventore che nel 1963 lo introdusse (rif. [17]). Il tensore degli sforzi di subgrid viene modellizzato nella maniera seguente:

$$\tau_{ij}-\frac{\delta_{ij}}{3}\cdot\tau_{kk}=-2\cdot C\cdot\overline{\Delta}^2\cdot\left|\overline{S}\right|\cdot\overline{S}_{ij} \tag{1.12}$$

in cui $\overline{\Delta}$ è la dimensione del filtro, definita come $\overline{\Delta}=\sqrt[3]{\overline{\Delta}_1\cdot\overline{\Delta}_2\cdot\overline{\Delta}_3}$, $\left|\overline{S}\right|$ è la norma del tensore velocità di deformazione filtrato, cioè $\left|\overline{S}\right|=\sqrt{2\cdot\overline{S}_{ij}\cdot\overline{S}_{ij}}$, e C è una costante assegnata a priori, di solito compresa fra 0.1 e 0.17, a seconda del particolare problema fisico in esame.

Questo modello parte dal presupposto che le piccole scale siano puramente dissipative. La dissipazione che forniscono cambia al variare di C, per cui il tensore di subgrid risulta approssimato da un'espressione formalmente simile al termine viscoso; ponendo infatti $\nu_s = C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot \left|\overline{S}\right|$ l'equazione di bilancio della quantità di moto filtrata diventa

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{u}_i \cdot \overline{u}_j\right)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + 2 \cdot (\nu + \nu_s) \cdot \frac{\partial \overline{S}_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.13}$$

che risulta perfettamente identica alla rispettiva equazione non filtrata ad eccezione del termine viscoso in cui alla viscosità fisica ν è aggiunta la viscosità di subgrid scale ν_s.

I limiti di questo modello sono molti; il più evidente consiste nel fatto che la costante C è invariante in ogni punto del dominio e ad ogni istante, il che non ha riscontri dal punto di vista fisico, ed è difficile da "settare". Essendo C sempre positiva infatti, i termini di piccola scala non possono che essere dissipativi, cioè l'energia di deformazione $\varepsilon = \tau_{ij} \cdot \overline{S}_{ij}$ è sempre negativa, per cui non ci può essere *backscatter*, ossia passaggio di energia dalle piccole alle grandi scale.
Come si può vedere dalla 1.12 gli assi principali del tensore degli sforzi di subgrid e del tensore velocità di deformazione risultano paralleli, ma nella maggior parte dei casi ciò non si verifica. Inoltre τ_{ij} è nullo solo se sono nulle tutte le sue componenti, caso questo assai raro, il che descrive un comportamento non corretto del flusso soprattutto in presenza di pareti solide o di flusso laminare.

1.4.2 Il modello dinamico (DSM)

Un notevole miglioramento rispetto al modello di Smagorinsky è scaturito dall'introduzione del modello dinamico (rif. [6]). Tale cambiamento riguarda la costante C; il suo valore non deve più essere fissato a priori ma viene calcolato dinamicamente sfruttando un'identità algebrica dimostrata da Germano (introdotta più avanti). Il tensore di subgrid viene modellizzato nello stesso modo proposto da Smagorinsky:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \cdot \tau_{kk} = -2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot \left|\overline{S}\right| \cdot \overline{S}_{ij} \tag{1.14}$$

Per procedere al calcolo di C si applica alle equazioni di bilancio della quantità di moto un secondo filtro (indicato con il segno"^"), detto filtro di test, di dimensioni maggiori rispetto al filtro già utilizzato. In questo modo nelle equazioni compare un nuovo termine detto tensore degli sforzi di subtest dato da

$$T_{ij} = \widehat{\overline{u_i \cdot u_j}} - \hat{\overline{u}}_i \cdot \hat{\overline{u}}_j \tag{1.15}$$

che viene modellizzato analogamente al tensore degli sforzi di subgrid, cioè

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \cdot T_{kk} = -2 \cdot C \cdot \hat{\Delta}^2 \cdot \left|\hat{\overline{S}}\right| \cdot \hat{\overline{S}}_{ij} \tag{1.16}$$

supponendo che C sia la stessa per entrambi i tensori. Il termine $\hat{\Delta}$ indica la dimensione del filtro test, $\hat{\overline{S}}$ il tensore velocità di deformazione filtrato due volte ed $\left|\hat{\overline{S}}\right|$ la sua norma. Sia $\hat{\Delta}$ che $\left|\hat{\overline{S}}\right|$ sono calcolato in modo analogo al precedente

In base alla già citata identità di Germano , ossia

$$D_{ij} = \widehat{\overline{u}_i \cdot \overline{u}_j} - \hat{\overline{u}}_i \cdot \hat{\overline{u}}_j = T_{ij} - \hat{\tau}_{ij} \tag{1.17}$$

si riesce a determinare localmente e ad ogni passo temporale il valore della costante C. Infatti, sostituendo i valori di τ_{ij} e T_{ij} nell'identità si ottiene

$$D_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} D_{kk} = -2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot M_{ij} \tag{1.18}$$

con

$$M_{ij} = \frac{\hat{\Delta}^2}{\overline{\Delta}^2} \cdot \left|\hat{\overline{S}}\right| \cdot \hat{\overline{S}}_{ij} - \widehat{\left|\overline{S}\right| \cdot \overline{S}_{ij}} \tag{1.19}$$

in cui D_{ij} ed M_{ij} sono noti.

Dal momento che i tensori in gioco sono tutti simmetrici, l'equazione corrisponde a 6 equazioni scalari nell'unica incognita C, che viene calcolata, come proposto da Lilly (rif. [10]), minimizzando il quadrato dell'errore definito da

$$Q = \left(\left(D_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} D_{kk} \right) + 2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot M_{ij} \right)^2 \tag{1.20}$$

Viene quindi posta la condizione

$$\frac{\partial Q}{\partial C} = 0 \tag{1.21}$$

da cui

$$C = -\frac{\left(D_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} D_{kk} \right) \cdot M_{ij}}{2 \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot M_{ij} \cdot M_{ij}} \tag{1.22}$$

Grazie al modello dinamico si è ovviato al difetto di fissare C a priori, motivo per cui adesso la costante non è più invariante ma dipende sia dalla posizione che dall'istante t in cui viene calcolata, cioè $C = C(\underline{X}, t)$. A differenza del modello di Smagorinsky quindi, la costante può assumere anche valori negativi o nulli, per cui è reso possibile il passaggio di energia dalla

piccole alle grandi scale ed inoltre il comportamento asintotico è simulato in maniera corretta sia in presenza di pareti solide che di flusso di tipo laminare.
Tuttavia restano alcuni difetti che il modello mantiene inevitabilmente per il fatto che il tensore di subgrid è stato modellizzato nella stessa maniera proposta da Smagorinsky, primo fra tutti il parallelismo fra degli assi principali dei tensori di subgrid e velocità di deformazione. Oltre a questo difetto comune al precedente modello, il modello dinamico presenta alcuni problemi peculiari dovuti alla procedura di calcolo di C. Tali difetti consistono in forti oscillazioni del valore della costante che non hanno riscontro dal punto di vista fisico e che possono talvolta portare all'instabilità numerica del problema. La viscosità globale infatti può diventare negativa in presenza di elevati picchi negativi di C superiori in valore assoluto alla viscosità del fluido, per cui è necessaria un'operazione di "clippaggio".

1.4.3 Il modello dinamico misto a due parametri (DTM)

Come detto nel precedente paragrafo il problema del modello dinamico classico (DSM) era essenzialmente legato al fatto che il tensore degli sforzi di subgrid aveva la stessa forma di quello introdotto da Smagorinsky. Nel 1993 Zang et al. (rif. [19]) hanno introdotto un nuovo modello, detto modello dinamico misto (DMM), in cui il tensore τ_{ij} è stato modellizzato aggiungendo a 1.14 un ulteriore termine, sulla base di quello proposto da Bardina nel 1984 (rif. [2]):

$$\tau_{ij}^{*} = -2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^{2} \cdot \left|\overline{S}\right| \cdot \overline{S}_{ij} + L_{ij}^{m\,*} \tag{1.23}$$

dove, per semplicità, è stato introdotto l'asterisco ad abbreviare la notazione completa, cioè, indicando con A una generica grandezza tensoriale si ha $A_{ij}^{*} = A_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \cdot A_{kk}$ (d'ora in poi si utilizzerà questa convenzione).

Nella 1.23 il termine

$$L_{ij}^{m} = \overline{\overline{u}_i \cdot \overline{u}_j} - \overline{\overline{u}}_i \cdot \overline{\overline{u}}_j \tag{1.24}$$

è il tensore di Leonard modificato, noto in funzione delle scale risolte. Utilizzando la stessa procedura dinamica descritta in precedenza si calcola il parametro C: si applica il filtro test e si modellizza il tensore di subtest analogamente a quello di subgrid, cioè:

$$T_{ij}^{*} = -2 \cdot C \cdot \hat{\Delta}^{2} \cdot \left|\hat{\overline{S}}\right| \cdot \hat{\overline{S}}_{ij} + L_{ij}^{t\,*} \tag{1.25}$$

dove

$$L_{ij}^{t} = \widehat{\overline{\overline{u}_i \cdot \overline{u}_j}} - \hat{\overline{\overline{u}}}_i \cdot \hat{\overline{\overline{u}}}_j \tag{1.26}$$

è un tensore analogo al tensore di Leonard modificato e C è la stessa di 1.23.

Sempre utilizzando l'identità di Germano 1.17, in cui si introducono $\hat{\tau}_{ij}$ e T_{ij} modellizzati come descritto in 1.23 e 1.26 e minimizzando del quadrato dell'errore si ottiene

$$C = -\frac{\left(\left(D_{ij}^{\ *}\right) - \left(H_{ij}^{\ *}\right)\right)M_{ij}}{2\overline{\Delta}^2 M_{ij} M_{ij}} \tag{1.27}$$

con

$$H_{ij}^{\ *} = \left(L_{ij}^{t\ *}\right) - \left(\widehat{L_{ij}^{m\ *}}\right) \tag{1.28}$$

Con l'introduzione del tensore di Leonard modificato i problemi di instabilità numerica sono meno rilevanti in quanto le oscillazioni ed i valori negativi della costante C risultano meno marcati poiché il tensore di Leonard simula naturalmente il passaggio di energia dalle piccole alle grandi scale. Da notare è anche il fatto che il parallelismo fra gli assi principali del tensore degli sforzi di subgrid e il tensore velocità di deformazione non è più presente.
Pur essendo migliore del modello precedente (DSM), il modello dinamico misto mantiene, seppur in modo meno evidente, una certa instabilità numerica.
Ulteriori miglioramenti nella modellizzazione di τ_{ij} sono stati introdotti da Salvetti e Banerjee (rif. [15]. La formulazione del loro modello si basa sulle seguenti osservazioni: la velocità può essere scomposta in questo modo:

$$u_i = \overline{u}_i + u_i' \tag{1.29}$$

in cui $\overline{u}_i$ è la velocità filtrata, ossia quella direttamente simulata, e u_i' è la componente fluttuante dovuta alle scale più piccole del filtro utilizzato; sostituendo tale scrittura nel tensore degli sforzi di subgrid definito dalla 1.10 si ottiene

$$\tau_{ij} = L_{ij}^m + C_{ij}^m + R_{ij}^m \tag{1.30}$$

dove il tensore di Leonard già citato si può trovare direttamente in quanto funzione di grandezze risolte, C_{ij}^m è un termine misto che ha la forma seguente

$$C_{ij}^m = \overline{u_i' \cdot \overline{u}_j} + \overline{\overline{u}_i \cdot u'_j} - \overline{u'}_i \cdot \overline{\overline{u}}_j - \overline{\overline{u}}_i \cdot \overline{u'}_j \tag{1.31}$$

ed R_{ij}^m è il termine in cui compaiono esclusivamente gli effetti delle scale non risolte, ossia

$$R_{ij}^m = \overline{u_i' \cdot u_j'} - \overline{u'}_i \cdot \overline{u'}_j \tag{1.32}$$

I tensori L_{ij}^m e C_{ij}^m risultano diversi da zero, in quanto il filtro, agendo nello spazio fisico, permette la sovrapposizione delle scale di turbolenza non risolte a quelle risolte. Supponendo quindi di poter approssimare R_{ij}^m con il modello di Smagorinsky si intuisce che il modello dinamico, essendo basato sullo stesso modello (Smagorinsky appunto), tratta tutti i tensori allo stesso modo, mentre il modello dinamico misto (vedi 1.23) suppone C_{ij}^m nullo. I modelli descritti precedentemente sembrano trattare in maniera non corretta il termine misto. Salvetti e Banerjee hanno focalizzato l'attenzione su questo aspetto ed hanno introdotto il modello dinamico misto a due parametri. Esso si basa sulle seguenti ipotesi:

- C_{ij}^m è proporzionale L_{ij}^m
- R_{ij}^m è descritto dal modello di Smagorinsky

La 1.30 quindi diventa

$$\tau_{ij}^{\ *} = -2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot \left|\overline{S}\right| \cdot \overline{S}_{ij} + K \cdot L_{ij}^{m\,*} \tag{1.33}$$

in cui compaiono due parametri che vengono calcolati in maniera dinamica seguendo una procedura simile a quella utilizzata nel DSM e nel DMM. In questo caso il tensore di subtest diventa:

$$T_{ij}^{\ *} = -2 \cdot C \cdot \hat{\Delta}^2 \cdot \left|\hat{\overline{S}}\right| \cdot \hat{\overline{S}}_{ij} + K \cdot L_{ij}^{t\,*} \tag{1.34}$$

e l'identità di Germano assume la seguente espressione:

$$D_{ij}^{\ *} = -2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot M_{ij} + K \cdot H_{ij}^{\ *} \tag{1.35}$$

con M_{ij} dato dalla 1.19 ed

$$H_{ij} = L_{ij}^{t\,*} - \widehat{L_{ij}^{m\,*}} \tag{1.36}$$

Il passo successivo consiste nello scrivere l'espressione del quadrato dell'errore

$$Q = \left(D_{ij}^{\ *} + 2 \cdot C \cdot \overline{\Delta}^2 \cdot M_{ij} - K \cdot H_{ij}^{\ *}\right)^2 \tag{1.37}$$

Allo stesso modo si procede alla minimizzazione ricavando così le due costanti cercate C e K, cioè si impongono le condizioni

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial C} = 0 \\ \dfrac{\partial Q}{\partial K} = 0 \end{cases} \tag{1.37}$$

ottenendo i due parametri

$$K = \frac{\left(D_{ij}^{\ *} \cdot M_{ij}\right) \cdot \left(H_{ij}^{\ *} \cdot M_{ij}\right) - \left(H_{ij}^{\ *} \cdot D_{ij}^{\ *}\right) \cdot \left(M_{ij} \cdot M_{ij}\right)}{\left(H_{ij}^{\ *} \cdot M_{ij}\right)^2 - \left(H_{ij}^{\ *}\right)^2 \cdot \left(M_{ij} \cdot M_{ij}\right)} \tag{1.38}$$

$$C = -\frac{H_{ij}^{*} \cdot M_{ij} \cdot K - H_{ij}^{*} \cdot M_{ij}}{2\overline{\Delta}^{2} M_{ij} M_{ij}} \tag{1.43}$$

Si osserva che ponendo $K = 0$ si ottiene nuovamente la 1.22 (DSM), mentre per $K = 1$ si ha la 1.27 (DMM).

Il DTM conserva tutti i pregi dei modelli dinamici già visti; in più esso presenta minori oscillazioni del parametro C e quindi una migliore stabilità numerica e descrive in modo più accurato il tensore degli sforzi di subgrid nelle zone del campo in cui in termini connessi con il tensore di Leonard sono importanti.