

Modelli e simulazione LES di correnti turbolente e applicazione alla combustione

A. Abbà, C. Cercignani, L. Valdetaro

Dipartimento di Matematica "F. Brioschi", Politecnico di Milano, Milano

Sommario.

Le finalità della presente ricerca sono l'analisi e sviluppo di modelli per la simulazione numerica di correnti turbolente incompressibili e di fluidi turbolenti reagenti, mediante la tecnica della Large Eddy Simulation (LES).

La prima parte dell'articolo è dedicata all'analisi, sulla base di test a priori, di diversi modelli di turbolenza per correnti incompressibili in assenza di reazioni chimiche. I modelli vengono valutati mediante test a priori avvalendoci di risultati provenienti da simulazioni numeriche dirette di turbolenza omogenea isotropa a Reynolds 1000 e di uno strato limite turbolento tridimensionale.

Nella seconda parte si troveranno invece le descrizioni delle equazioni e del metodo numerico utilizzato per la simulazione di correnti turbolente in presenza di reazioni chimiche secondo differenti approcci: il metodo dello scalare conservato, per reazioni chimiche veloci in fiamme di diffusione; l'approccio a fronte di fiamma per flussi premiscelati; equazioni di conservazione delle specie chimiche per reazioni complesse, a più passi e non in equilibrio. Per ognuno di questi vengono formulati nuovi modelli basati sui modelli dinamici presentati nella prima parte, e vengono presentati i risultati delle simulazioni numeriche.

Abstract.

In this paper we present an analysis of the most recent models for the Large Eddy Simulation of incompressible turbulence and of turbulent reacting flows.

In the first part we make an a priori test of the models by using the results from a Direct Numerical Simulation (DNS) of homogeneous isotropic turbulence at Reynolds 1000 and from a DNS of a three-dimensional turbulent rotating boundary layer. We also develop a new anisotropic model and we analyze its features.

In the second part we consider turbulent reacting flows: we present the different approaches to their modeling: the conserved scalar method, suitable for fast chemical reactions in diffusion flames; the flame front approach for premixed flows; and transport-diffusion for chemical species in non equilibrium complex reaction flows. For each of these we present results of numerical simulations based on our extension of recent LES dynamic model.

1 Modellistica della turbolenza

1.1 La Large Eddy Simulation

In una corrente turbolenta sono presenti strutture caratterizzate da un'ampia gamma di scale, comprendenti le scale più grandi, dipendenti dalla geometria della regione in

cui si studia il fluido, fino alle scale più piccole, dove dominano i fenomeni dissipativi, e che sono dell'ordine $Re^{-3/4}$ (Re è il numero di Reynolds della corrente).

Una simulazione numerica diretta (DNS) deve essere in grado di rappresentare tutte le strutture presenti in una corrente; quindi la griglia di calcolo, su cui vengono discretizzate le equazioni di Navier-Stokes che descrivono il fluido, deve avere una spaziatura inferiore alle più piccole scale dissipative. Inoltre anche la discretizzazione temporale delle equazioni deve essere tale da poter catturare le più elevate frequenze associate alle scale più piccole. Ci si rende allora conto che la DNS è per ora una tecnica limitata a correnti semplici e a numeri di Reynolds bassi.

Opposta alla DNS è la tecnica RANS (Reynolds Average Navier-Stokes equations) che risolve numericamente le equazioni mediate, risultando molto più economica dal punto di vista computazionale. Questa tecnica fornisce però informazioni sulla sola corrente media e stazionaria. Inoltre in essa è necessario l'utilizzo di modelli di turbolenza che devono rappresentare l'influenza di tutte le strutture turbolente sulla corrente media. Questi modelli non sono assolutamente generali, e se un modello, per esempio, rappresenta bene una corrente vicino ad una parete risulta inadeguato per una scia turbolenta.

Una via di mezzo tra le due tecniche precedenti è la Large Eddy Simulation (LES) che risolve direttamente le strutture più grandi della turbolenza e modella solo le strutture più piccole. Le strutture a livello delle scale dissipative sono indipendenti dalla corrente media ed hanno un carattere universale. Di conseguenza anche i modelli di turbolenza hanno carattere generale e non vanno calibrati sul tipo di corrente media. Questa tecnica permette quindi di ottenere anche informazioni locali ed istantanee sui fenomeni turbolenti di una corrente, in geometrie più complesse, a numeri di Reynolds maggiori e con un grande risparmio di risorse di calcolo rispetto alla DNS. Lo studio dei modelli utilizzati in questa tecnica è molto interessante perchè richiede la comprensione del comportamento delle strutture non risolte, dette anche sottogriglia (SGS) perchè di scala inferiore alla griglia di calcolo, e della loro interazione con le scale risolte.

A tal fine vengono in seguito presentati i risultati di test a priori svolti per valutare il comportamento di alcuni modelli SGS, successivamente confrontati anche nelle simulazioni numeriche di alcune correnti fluide incompressibili in geometrie semplici.

1.2 Gli sforzi sottogriglia

Una corrente fluida instazionaria e incompressibile è descritta dalle equazioni di Navier-Stokes per la conservazione della massa e della quantità di moto

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j}$$

qui espresse in coordinate cartesiane ortogonali ed in forma adimensionale. Nelle equazioni u_i rappresenta la i -esima componente del vettore velocità $\mathbf{u}$, p è la pressione e Re il numero di Reynolds della corrente.

Volendo utilizzare la tecnica della Large Eddy Simulation è necessario applicare alle equazioni di Navier-Stokes un filtro al fine di separare le scale risolte da quelle non risolte. Una quantità filtrata $\bar{f}$ è definita da

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \int_D f(\mathbf{x}') \bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \bar{\Delta}) d\mathbf{x}'$$

dove D è l'intero dominio, $\bar{G}$ è la funzione di filtro e $\bar{\Delta}$ è l'ampiezza del filtro medesimo.

Se le equazioni vengono discretizzate numericamente con uno schema alle differenze finite, solitamente il filtraggio viene applicato in modo implicito utilizzando un filtro tipo box-filter coincidente con la griglia di calcolo.

Se invece viene utilizzato un metodo spettrale per la soluzione numerica delle equazioni, è necessario applicare esplicitamente un filtro sharp-cutoff definito nello spazio di Fourier da

$$\hat{G}(k) = \int_D \bar{G}(\mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}'} d\mathbf{x}' = \begin{cases} 1 & \text{if } |\mathbf{k}| < \pi/\bar{\Delta} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

dove $\hat{G}$ è il coefficiente complesso di $\bar{G}$, e $\bar{\Delta}$ corrisponde al numero d'onda della più piccola scala risolta. Ai filtri nello spazio fisico, come il box-filter, è associata una parziale sovrapposizione tra le scale risolte e quelle non risolte, mentre con il filtro cut-off la separazione è netta. Nella formulazione dei modelli di turbolenza sottogriglia bisognerà quindi tenere presente queste caratteristiche dei diversi tipi di filtraggio.

Le equazioni filtrate risultano

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}_i} &= 0 \\ \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} &= - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \overline{line} x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_i \partial x_j} \end{aligned}$$

L'effetto delle scale non risolte è contenuto nel tensore degli sforzi sottogriglia (SGS)

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$$

che dovrà essere modellato. $\bar{\mathbf{u}}$ rappresenta il campo di velocità risolto (filtrato con un filtro di ampiezza $\bar{\Delta}$).

Gli sforzi SGS vengono scomposti in tre termini

$$\tau_{ij} = \mathcal{L}_{ij} + C_{ij} + \mathcal{R}_{ij}.$$

Il tensore di Leonard $\mathcal{L}_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ rappresenta il contributo alle scale SGS dell'interazione tra le scale risolte. Se viene usato un filtro cutoff nello spazio di Fourier questo termine coincide con l'errore di aliasing.

Il termine misto $C_{ij} = \overline{\bar{u}_i u'_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ rappresenta l'interazione tra le scale risolte e le non risolte, mentre il tensore degli sforzi di Reynolds SGS $\mathcal{R}_{ij} = \overline{u'_i u'_j}$ rappresenta l'interazione tra le scale non risolte.

Nelle successive sezioni illustreremo alcuni modelli presi in considerazione per gli sforzi SGS.

1.2.1 Il modello dinamico

La procedura dinamica per modellare il tensore τ_{ij} è stata introdotta da Germano et al. [8]. Questa si basa sull'ipotesi di similitudine di scale all'interno del range inerziale dello spettro di energia turbolenta. Introducendo un secondo filtro, detto test, di ampiezza $\tilde{\Delta}$ maggiore di $\overline{\Delta}$, si ottiene un tensore di sforzi subtest

$$T_{ij} = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i}} \widetilde{\overline{u_j}}.$$

T_{ij} e τ_{ij} son poi legati agli sforzi turbolenti risolti L_{ij} dalla relazione di Germano

$$L_{ij} = T_{ij} - \tilde{\tau}_{ij} = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i}} \widetilde{\overline{u_j}}.$$

Le parti anisotrope di entrambi i tensori T_{ij} e τ_{ij} sono modellate con il modello di Smagorinsky

$$\begin{aligned} \tau_{ij} - (\delta_{ij}/3) \sum_k \tau_{kk} &= -2C \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \sum_k C \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S}_{kk} \\ T_{ij} - (\delta_{ij}/3) \sum_k T_{kk} &= -2C \tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \sum_k C \tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{kk} \end{aligned}$$

dove $\overline{S}_{ij}$ è il tensore velocità di deformazione delle scale risolte

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right)$$

e $\tilde{S}_{ij}$ è il tensore velocità di deformazione delle scale subtest

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u_j}}{\partial x_i} \right)$$

Nelle simulazioni numeriche la parte isotropa del tensore degli sforzi SGS viene solitamente inglobata nel termine di pressione.

Sostituendo le espressioni per τ_{ij} e T_{ij} nella relazione di Germano si ottengono 5 equazioni nel coefficiente incognito C . Minimizzando l'errore ai minimi quadrati [12] si può determinare dinamicamente il coefficiente di Smagorinsky

$$C = \frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{kl} M_{kl}}$$

dove

$$M_{ij} = \overline{\Delta}^2 \left(|\widetilde{\overline{S}}| \widetilde{\overline{S}}_{ij} \right) - \tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij}$$

Il modello dinamico descritto ha costituito un balzo significativo per la tecnica LES perchè il calcolo dinamico del coefficiente di Smagorinsky permette di rappresentare meglio i fenomeni locali e non stazionari della corrente. Al modello sono ancora però intrinsecamente legati alcuni difetti:

- il coefficiente C , funzione dello spazio e del tempo, può assumere anche valori negativi; ciò è positivo perchè si può rappresentare meglio il fenomeno del backscatter; talvolta è però necessario limitare i valori negativi al fine di evitare instabilità numeriche;
- sempre al fine di evitare instabilità numeriche, il coefficiente deve essere mediato nello spazio (nelle direzioni di omogeneità della corrente) e/o nel tempo;
- il modello di Smagorinsky è basato su un'ipotesi di isotropia delle scale non risolte, il cui contributo può quindi essere rappresentato con una viscosità turbolenta isotropa $\nu_\tau = C\bar{\Delta}^2|\bar{S}|$; questa ipotesi viene estesa anche al modello di Germano, col risultato che il tensore degli sforzi SGS viene scorrettamente forzato all'allineamento con il tensore velocità di deformazione delle scale risolte; inoltre l'ipotesi di isotropia delle piccole scale non è realistica poichè anche in turbolenza omogenea e isotropa sono presenti strutture dette *worms* che provocano localmente uno scostamento dalla condizione isotropa.

1.2.2 Il modello anisotropo

Per ovviare in parte ai limiti del modello dinamico illustrato è stato formulato un modello dinamico anisotropo [3]:

$$\tau_{ij} - (\delta_{ij}/3) \sum_k \tau_{kk} = -2 \sum_{r,s} B_{ijrs} \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{rs} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \sum_{k,r,s} B_{kkrs} \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{rs}$$

Il tensore B_{ijrs} del quarto ordine assume la forma

$$B_{ijrs} = \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta} a_{i\alpha} a_{j\beta} a_{r\alpha} a_{s\beta}$$

dove $a_{i\alpha}$ sono le componenti dei versori $\mathbf{a}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) di una terna da determinare che gode della proprietà $\mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a}^T$, dove $\mathbf{a}^T$ è la matrice trasposta. $C_{\alpha\beta} = C_{\beta\alpha}$ sono gli elementi di una matrice simmetrica 3×3 che sostituisce il coefficiente C del modello isotropo. Anche in questo caso il coefficiente $C_{\alpha\beta}$ è variabile nello spazio e nel tempo. La matrice di trasformazione $a_{i\alpha}$ definisce un sistema di riferimento locale in cui il tensore B_{ijrs} viene ridotto a diagonale rispetto a due indici. Si sottolinea il fatto che, affinché l'invarianza Galileiana sia rispettata, la matrice $\mathbf{a}$ non deve dipendere esplicitamente dalla velocità ma dalle sue derivate spaziali.

Il tensore $C_{\alpha\beta}$ è da determinare secondo la procedura dinamica:

$$C_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{a}^T (L - \frac{1}{3} I \text{Tr} L) \mathbf{a} \big|_{\alpha\beta}}{Q_{\alpha\beta}}$$

dove

$$Q_{\alpha\beta} \equiv -2 \sum_{r,s} a_{r\alpha} a_{s\beta} \left[\widetilde{\bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{rs}} - \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{rs} \right].$$

In seguito è stata utilizzata la terna

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\boldsymbol{\omega}}{|\boldsymbol{\omega}|}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u}}{|\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u}|}, \quad \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2, \quad \boldsymbol{\omega} \equiv \nabla \times \mathbf{u}.$$

ma in diverse prove è stato verificato che i risultati sono insensibili alla scelta della terna.

1.2.3 I modelli dinamici misti

Un'altro modo di superare il problema associato al modello dinamico è modellare parte del contributo delle scale SGS utilizzando le più piccole scale risolte.

A tal fine Liu et al. [17] hanno proposto un modello in cui la parte a similitudine di scala viene assunta proporzionale agli sforzi turbolenti risolti L_{ij} :

$$\tau_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \tau_{kk} = K \left(L_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k L_{kk} \right) - 2C\overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \left(\overline{S}_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \overline{S}_{kk} \right)$$

Sempre Liu et al. [17] hanno dimostrato, sulla base di un test *a priori*, che, qualora si faccia uso di una discretizzazione alle differenze finite con filtraggio nello spazio fisico, il backscatter è rappresentato principalmente dal termine di Leonard e dal termine incrociato.

Seguendo queste indicazioni, Salvetti e Banerjee [16] hanno formulato un modello in cui il termine misto è assunto proporzionale al tensore di Leonard modificato

$$\mathcal{L}_{ij}^m = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}.$$

In questo modello il tensore degli sforzi sottogriglia è definito da

$$\tau_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \tau_{kk} = K \left(\mathcal{L}_{ij}^m - \delta_{ij}/3 \sum_k \mathcal{L}_{kk}^m \right) - 2C\overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \left(\overline{S}_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \overline{S}_{kk} \right)$$

dove i coefficienti K e C vengono determinati dinamicamente.

Se viene utilizzato un filtro cutoff nello spazio di Fourier il termine di Leonard modificato coincide con l'errore di aliasing [20]. In tal caso la precedente definizione viene sostituita da [17] $\mathcal{L}_{ij}^m = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}$.

Consideriamo inoltre un'altro modello misto, dove la parte dissipativa è assegnata alla funzione di struttura del secondo ordine [14]

$$F_2(\mathbf{r}) = \left\langle |\mathbf{v}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - \mathbf{v}(\mathbf{x})|^2 \right\rangle$$

$$\tau_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \tau_{kk} = K \left(\mathcal{L}_{ij}^m - \delta_{ij}/3 \sum_k \mathcal{L}_{kk}^m \right) - C\overline{F}_2 \left(\overline{S}_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \overline{S}_{kk} \right).$$

1.3 Il test a priori per turbolenza omogenea e isotropa

Il test a priori è stato svolto su un campo ottenuto dalla DNS con metodo pseudo-spettrale di una corrente turbolenta omogenea ed isotropa a $Re = 1000$ (gentilmente concessa dal Prof. M. Meneguzzi). La DNS è stata condotta con una risoluzione pari a 512^3 punti.

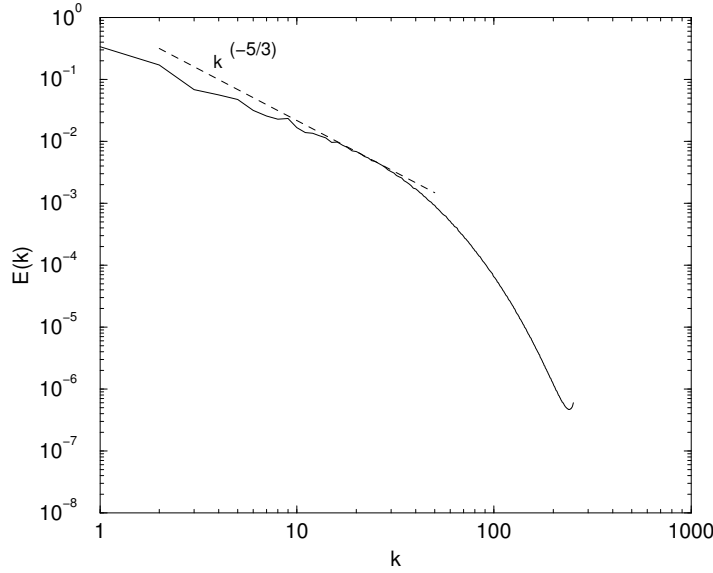


Figura 1: *Spettro di energia per la DNS a $Re = 1000$*

Un campo di turbolenza omogenea ed isotropa presenta localmente regioni ad intensa vorticità concentrata in strutture filamentose fortemente anisotrope (worms); pertanto si presta adeguatamente allo studio delle prestazioni dei modelli sottogriglia.

In fig.1 è rappresentato lo spettro di energia del campo. Il test è stato condotto filtrando a differenti ampiezze. Il filtro utilizzato è del tipo cutoff nello spazio di Fourier.

Le quantità SGS vengono confrontate con quelle esatte valutando un coefficiente di correlazione. Per due generiche quantità a e b , questo è definito da

$$\Psi(a, b) = \frac{\langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle}{\sqrt{(\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2)(\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2)}}$$

dove $\langle \rangle$ indica una media nello spazio

$$\langle a \rangle = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{i,j,k} a_{ijk}$$

Viene presentato anche il coefficiente di correlazione tra quantità all'interno dei worms: in questo caso la sommatoria è estesa ai punti in cui la vorticità supera un certo valore soglia (1% del valore massimo).

Un'altra interessante quantità da analizzare è l'angolo medio α compreso tra due tensori A e B

$$\alpha = \left\langle \arccos \sqrt{\frac{[Tr(A * B)]^2}{Tr(A * A)Tr(B * B)}} \right\rangle.$$

Se due tensori sono proporzionali tra loro $\alpha = 0$, mentre se essi sono completamente scorrelati l'angolo è di 90 gradi.

Inoltre, poichè nella teoria della similitudine di scala le scale risolte e le non risolte hanno un comportamento simile, presentiamo uno studio anche per il tensore degli sforzi risolti L_{ij} .

1.3.1 Risultati

Innanzitutto consideriamo la correlazione tra il tensore degli sforzi SGS modellati e quelli calcolati esattamente sui risultati della DNS.

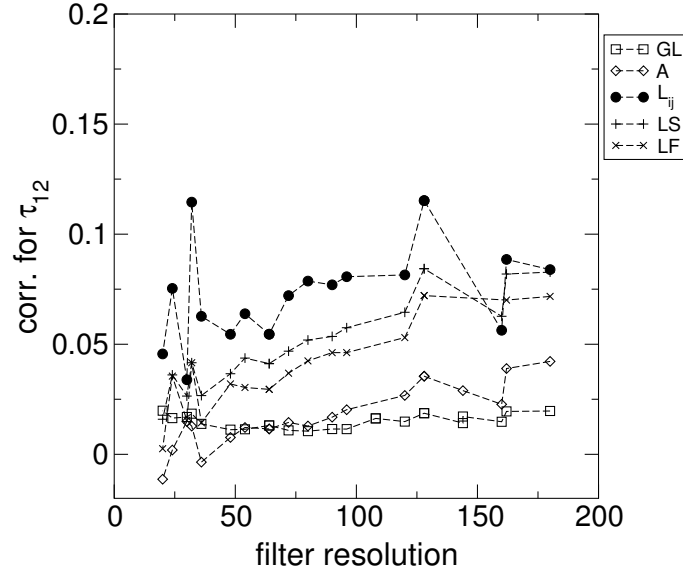


Figura 2: Coefficiente di correlazione per τ_{12} in funzione della risoluzione del filtro. La risoluzione del filtro corrisponde al numero d'onda a cui il cutoff è applicato. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Méttais et al. [14].

In fig.2 è rappresentato il coefficiente di correlazione per la componente τ_{12} in funzione del numero d'onda del filtro cutoff. Risulta evidente che i valori del coefficiente sono molto bassi, in particolare per il modello di Salvetti et al. decisamente inferiore a quello da loro determinato in un test a priori [16]. Questo è dovuto al tipo di filtro utilizzato: essi hanno utilizzato un filtro nello spazio fisico con una sovrapposizione tra scale risolte e non risolte, e quindi le quantità SGS modellate risultano meglio correlate a quelle esatte rispetto a quando viene utilizzato un filtro cutoff che impone una netta distinzione tra scale risolte e non risolte.

In fig.3 è rappresentato il medesimo coefficiente valutato solo all'interno dei worms. I valori sono superiori a quelli della figura precedente; questo significa che all'interno di queste strutture le quantità SGS modellate sono maggiormente correlate alle esatte

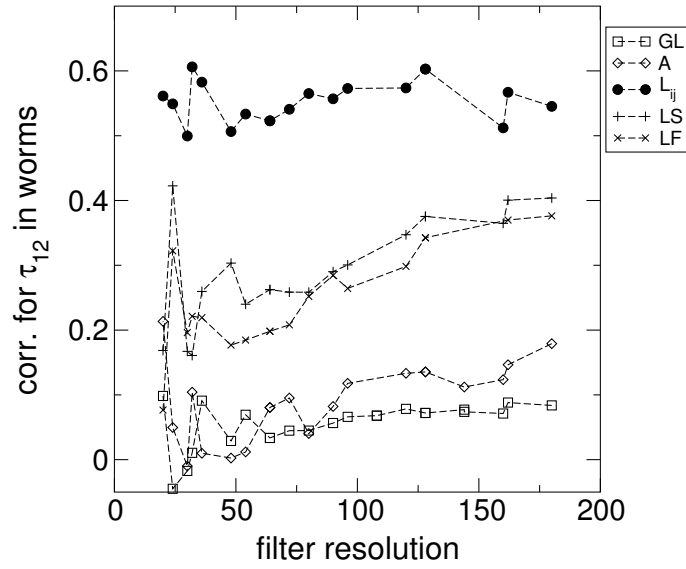


Figura 3: Coefficiente di correlazione per τ_{12} valutato nei worms in funzione della risoluzione del filtro. La risoluzione del filtro corrisponde al numero d'onda a cui il cutoff è applicato. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

di quanto avviene al di fuori. Dal grafico risulta che le prestazioni di tutti i modelli peggiorano col diminuire della risoluzione. In particolare quello col coefficiente più basso è il modello dinamico isotropo, probabilmente perchè il tensore degli sforzi modellati è forzato all'allineamento col tensore di velocità di deformazione. È molto interessante invece il comportamento del tensore degli sforzi turbolenti risolti L_{ij} : questi sono ben correlati agli sforzi SGS esatti ed il valore del coefficiente non decresce al diminuire della risoluzione. Questo spiega perchè quei modelli che dipendono esplicitamente da L_{ij} mostrano una elevata correlazione.

In fig.4 e 5 è rappresentato l'angolo medio tra i tensori degli sforzi SGS modellati ed esatti, valutato rispettivamente su tutto il campo e all'interno dei worms. Tra le due figure non troviamo differenze significative: tutti i modelli danno valori compresi tra 60 e 70 gradi, mentre ci si sarebbe aspettati valori vicini a 0 gradi. Il valore più basso è dato dal tensore L_{ij} , mentre il comportamento peggiore corrisponde al modello dinamico isotropo.

In fig.6 e fig.7 è rappresentato l'angolo tra i tensori degli sforzi SGS e velocità di deformazione. Questo è un dato significativo perchè nei modelli a viscosità turbolenta i due tensori τ_{ij} e $\bar{S}_{ij}$ sono assunti proporzionali uno all'altro, quindi l'angolo è nullo (come nel caso del modello dinamico isotropo). I risultati della DNS mostrano che l'angolo deve essere circa 70 gradi, quindi la suddetta ipotesi di proporzionalità non è corretta, anche se i due tensori non sono completamente scorrelati. Anche in questo caso vediamo che non ci sono differenze significative tra l'angolo valutato su tutto il volume o solo nei worms. Il tensore L_{ij} riproduce adeguatamente il comportamento degli sforzi esatti, mentre tra i modelli quello anisotropo si avvicina di più al valore

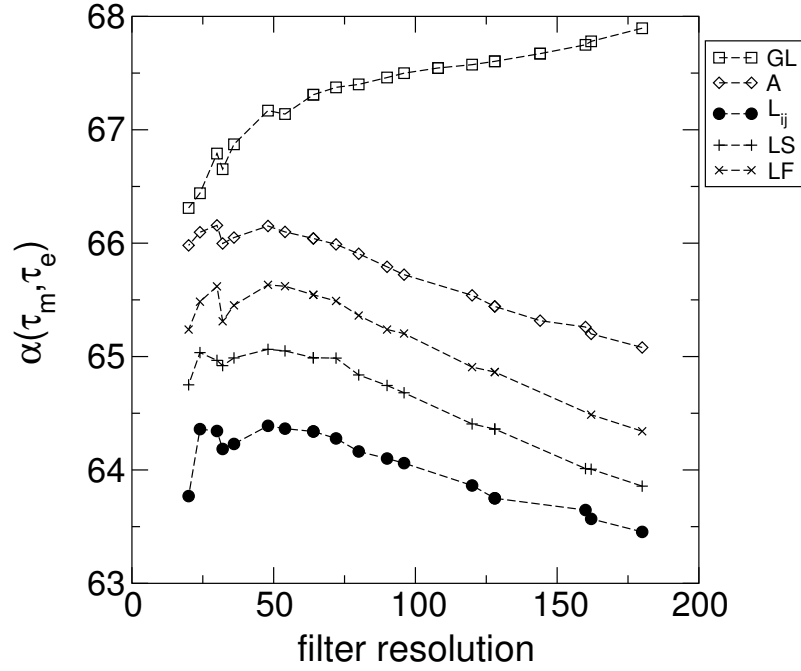


Figura 4: Angolo medio tra il tensore degli sforzi modellati e quello degli sforzi esatti in funzione della risoluzione del filtro. La risoluzione del filtro corrisponde al numero d'onda a cui il cutoff è applicato. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

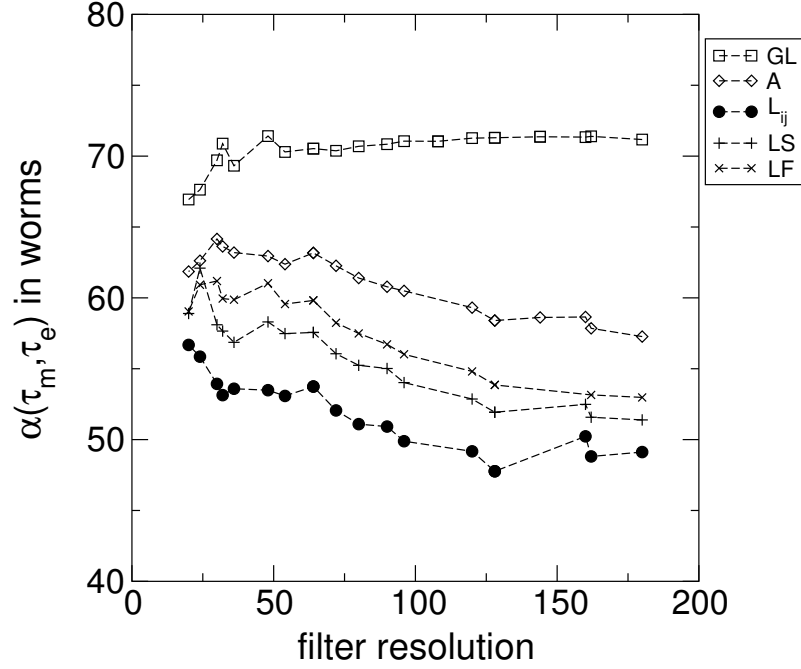


Figura 5: Angolo medio tra il tensore degli sforzi modellati e quello degli sforzi esatti valutato nei worms in funzione della risoluzione del filtro. La risoluzione del filtro corrisponde al numero d'onda a cui il cutoff è applicato. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

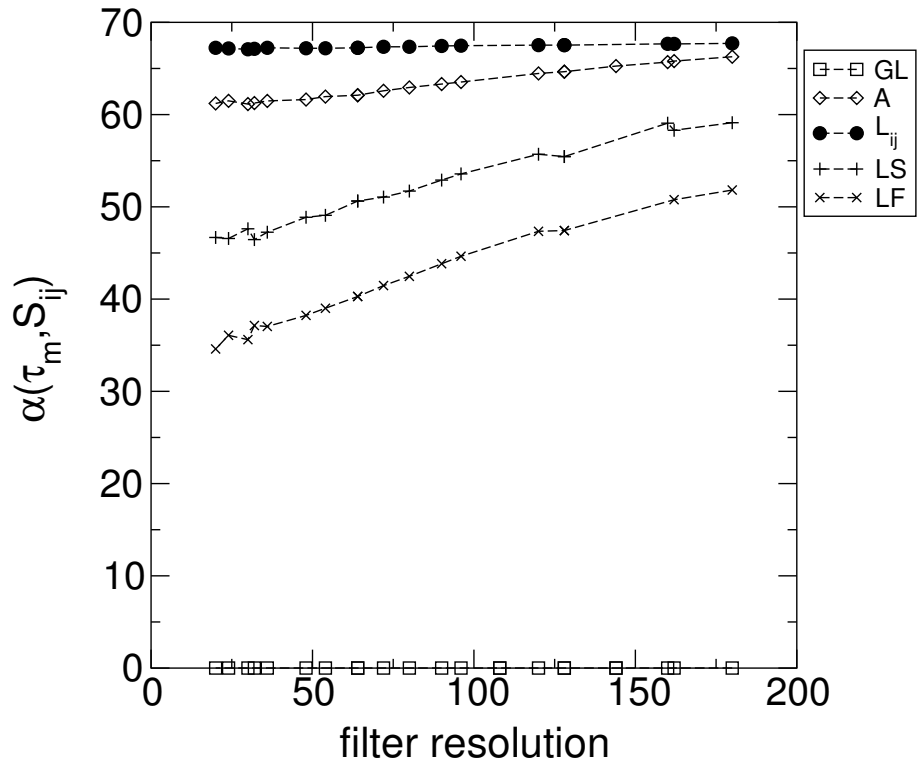


Figura 6: Angolo medio tra il tensore degli sforzi τ_{ij} e il tensore velocità di deformazione S_{ij} . GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

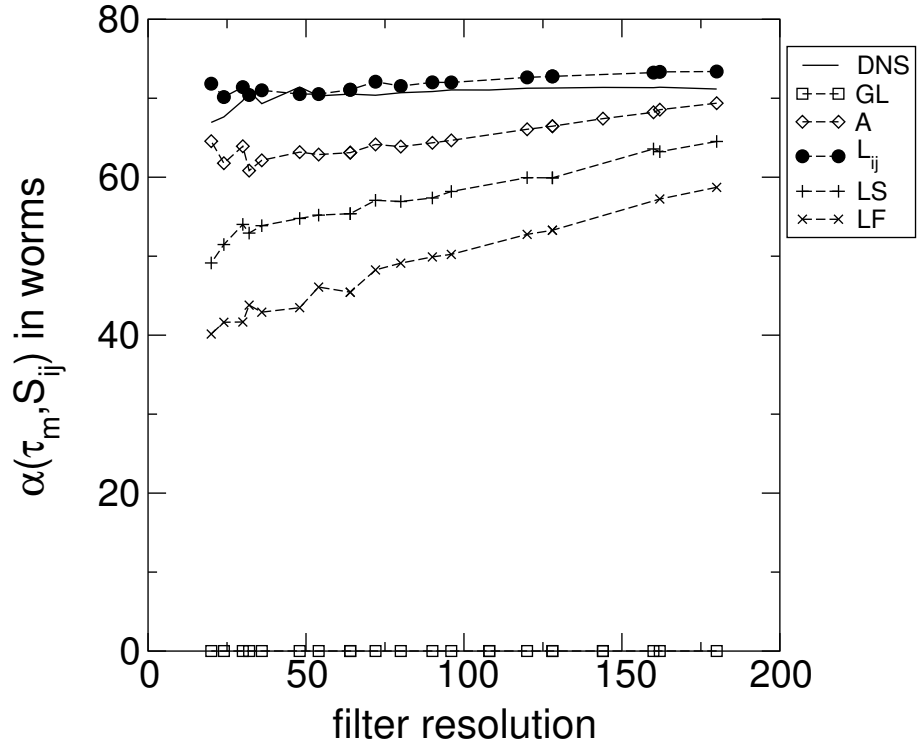


Figura 7: Angolo medio tra il tensore degli sforzi τ_{ij} e il tensore velocità di deformazione S_{ij} valutato nei worms. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

corretto, probabilmente perchè gli altri modelli contengono esplicitamente il tensore $\bar{S}_{ij}$.

Confrontiamo ora la dissipazione di energia sottogriglia

$$\epsilon_{SGS} = \langle \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \rangle$$

per i diversi modelli con i valori previsti dalla DNS.

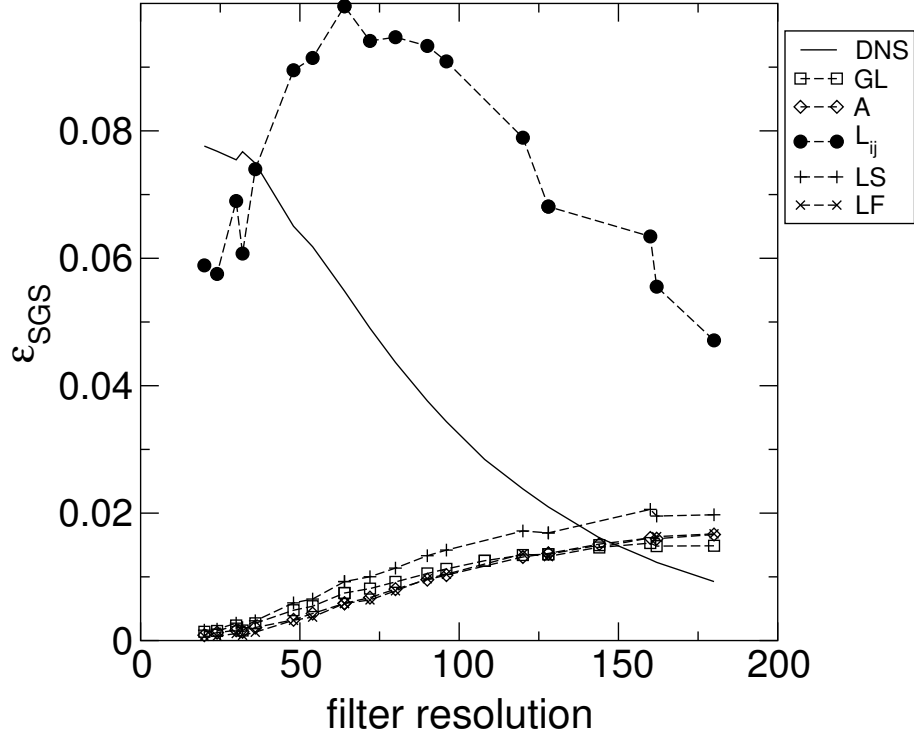


Figura 8: Dissipazione SGS. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

In fig.8 si può notare che i modelli hanno un comportamento molto diverso da quello richiesto dalla DNS: la dissipazione dovrebbe aumentare col diminuire della risoluzione spaziale, mentre i modelli hanno una tendenza opposta, con un valore di dissipazione assolutamente inadeguato in corrispondenza delle scale tipiche di una LES. Osserviamo invece che il tensore degli sforzi risolti alle maggiori ampiezze di filtro presenta un livello di dissipazione vicino a quello previsto.

I modelli non hanno solo un carattere dissipativo, pertanto analizziamo anche il forward ed il backward scatter (corrispondente alla cascata inversa di energia), definiti rispettivamente come:

$$\epsilon^+ = \left\langle \frac{\epsilon_{SGS} + |\epsilon_{SGS}|}{2} \right\rangle$$

$$\epsilon^- = \left\langle \frac{\epsilon_{SGS} - |\epsilon_{SGS}|}{2} \right\rangle$$

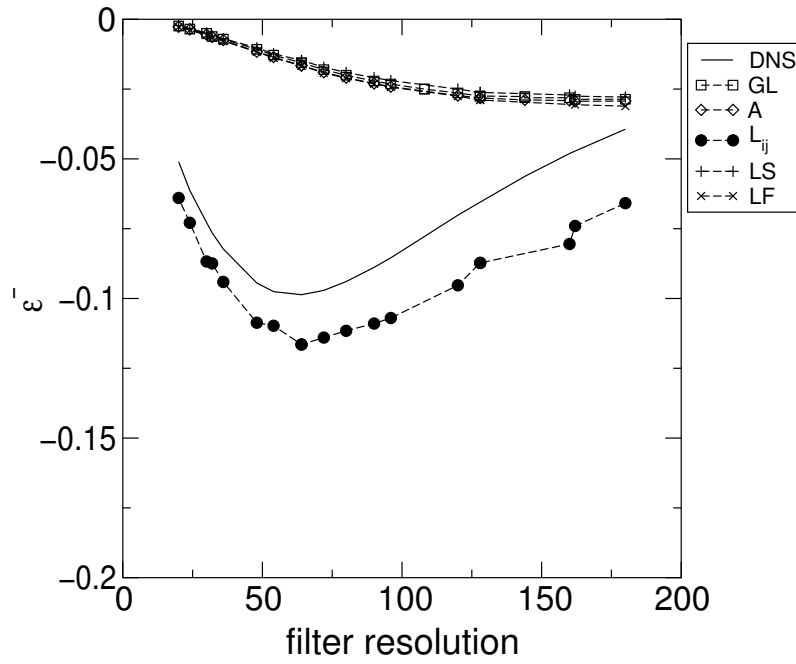


Figura 9: *Backward scatter*. *GL*: modello dinamico di Germano-Lilly. *A*: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. *LS*: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. *LF*: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

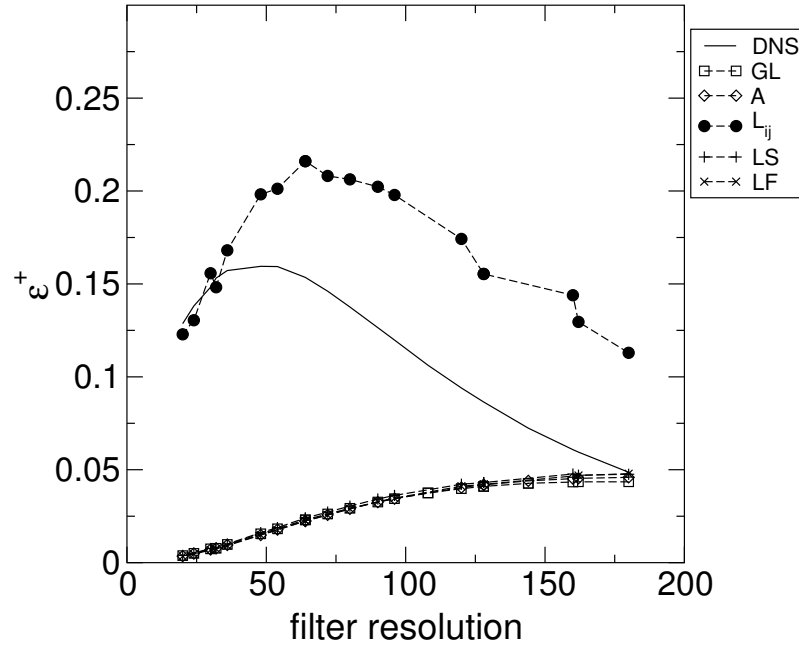


Figura 10: *Forward scatter*. *GL*: modello dinamico di Germano-Lilly. *A*: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. *LS*: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. *LF*: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].

I risultati sono riportati nelle figure 9 e 10, dove i modelli presentano il medesimo comportamento riscontrato per la dissipazione SGS.

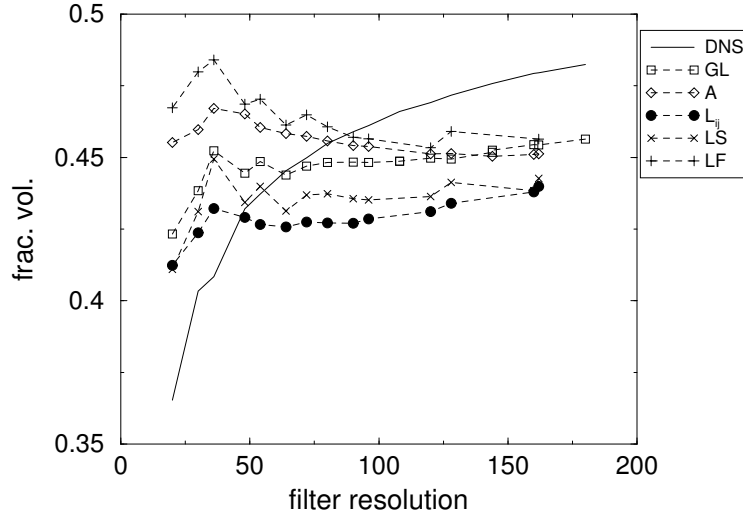


Figura 11: *Frazione di volume in cui si manifesta il backward scatter. GL: modello dinamico di Germano-Lilly. A: modello anisotropo [3]. L_{ij} : tensore degli sforzi turbolenti risolti. LS: modello dinamico misto di Salvetti et al. [16]. LF: modello dinamico misto di Mètais et al. [14].*

Nella figura 11 presentiamo la frazione di volume in cui si verifica il backscatter. Dalla DNS risulta che la frazione di volume in cui il backscatter si manifesta deve diminuire all'aumentare dell'ampiezza del filtro, mentre ai modelli corrisponde un valore che è essenzialmente indipendente dalla risoluzione.

1.3.2 Conclusioni

La prima osservazione da compiere confrontando i risultati del presente test a priori con quelli di altri presentati in letteratura [16] è che all'uso del filtro cutoff corrispondono per tutti i modelli correlazioni molto più basse di quando viene utilizzato un filtro nello spazio fisico. Quindi sembra che parte dei risultati soddisfacenti presentati in letteratura per i modelli misti sia dovuto alla sovrapposizione tra scale risolte e non risolte che corrisponde all'uso di un filtro nello spazio fisico.

Confrontando gli sforzi sottogriglia si può concludere che le migliori correlazioni sono fornite dai modelli dinamici misti, mentre il modello anisotropo presenta una più corretta orientazione del tensore τ_{ij} .

Per quanto riguarda gli aspetti energetici, tutti i modelli non sono sufficientemente dissipativi, soprattutto a basse risoluzioni.

È molto interessante invece il comportamento del tensore L_{ij} : esso è ben correlato con gli sforzi SGS calcolati, e, specialmente alle basse risoluzioni, rappresenta correttamente la dissipazione sottogriglia.

1.4 Il test a priori per una corrente anisotropa

Nelle simulazioni numeriche di interesse ingegneristico, in configurazioni complesse, per cui bisogna utilizzare tecniche di discretizzazione nello spazio che non siano di tipo spettrale, è necessario applicare il filtraggio nello spazio fisico. I filtri nello spazio fisico presentano caratteristiche ben diverse da quelle dei filtri cutoff, con una sovrapposizione tra le scale risolte e non risolte che viene vantaggiosamente sfruttata dai modelli sottogriglia dinamici misti. Inoltre le correnti di interesse pratico sono fortemente inhomogenee ed anisotrope, spesso anche a livello delle scale non risolte, ed è molto importante che i modelli sottogriglia sappiano rappresentare adeguatamente queste caratteristiche. Per questi motivi si è pensato di compiere un test *a priori* in uno strato limite turbolento tridimensionale ed in equilibrio [2] [22] [18].

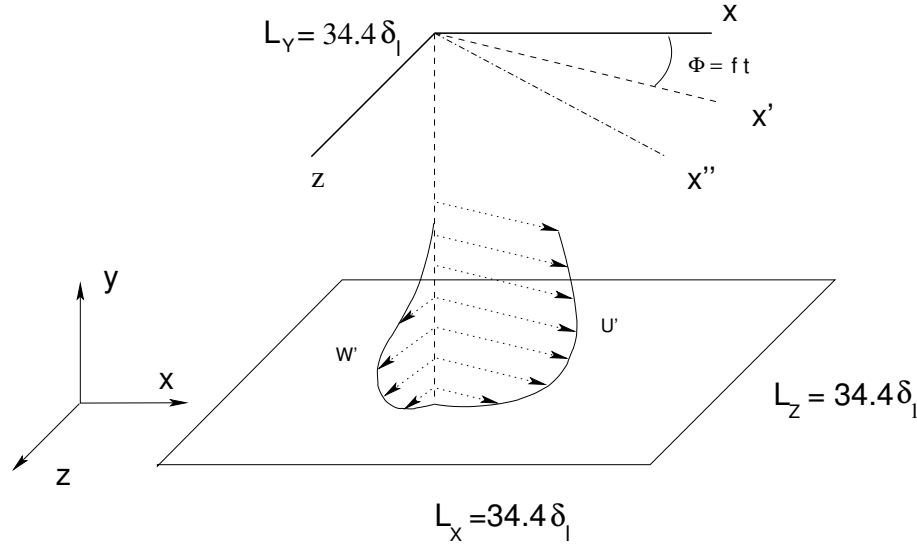


Figura 12: *Rappresentazione schematica dello strato limite 3-D [18] utilizzato per il test a priori. L_x, L_y, L_z : dimensioni del dominio di calcolo; $\delta_l = \sqrt{2\nu/f}$ è lo spessore equivalente dello strato limite laminare.*

Lo strato limite viene generato su una parete piana infinita, da una corrente esterna il cui vettore velocità ha ampiezza costante U_0 ma ruota in un piano parallelo alla parete con frequenza angolare costante f (fig. 12) [18]. La corrente considerata è statisticamente omogenea in piani paralleli alla parete, pertanto in queste direzioni di omogeneità, possono essere imposte condizioni al contorno cicliche. La corrente media è tridimensionale, e le quantità turbolente statistiche, opportunamente adimensionalizzate, in un sistema di riferimento ruotante con frequenza angolare f , dipendono solo dal numero di Reynolds e dalla distanza dalla parete. La semplicità, unita alla forte anisotropia, rende questa corrente un test molto interessante per i modelli sottogriglia.

Il campo di velocità utilizzato per il test è stato ottenuto da una simulazione diretta compiuta con un codice di calcolo misto spettrale-differenze finite gentilmente concesso dall'Ing. G. Passoni del DIAR del politecnico di Milano. Il numero di Reynolds della corrente è $Re_{\delta_l} = \frac{U_0\delta_l}{\nu} = 767$ basato sulla velocità esterna U_0 e sullo spessore

dello strato limite laminare $\delta_l = \sqrt{2\nu/f}$. Il numero di Reynolds equivalente basato sulla velocità d'attrito a parete è $Re_\tau = 914$.

Per ottenere il campo di velocità filtrato a livello della griglia LES, viene applicato un filtro cutoff nelle direzioni di omogeneità della corrente, eliminando in questo modo gli errori numerici legati all'operazione di filtraggio. Nella direzione perpendicolare alla parete, la griglia non è uniforme, quindi è necessario utilizzare un filtro nello spazio fisico. In tale direzione è stato utilizzato un filtro compatto tipo Padé, con il quale l'operazione di derivazione è commutabile:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial x} = \bar{\frac{\partial f}{\partial x}}$$

Poichè la discretizzazione alle differenze finite è applicata al campo di velocità filtrato, le quantità $\bar{u}$ sono collocate sulla griglia della DNS e non della LES, eliminando in questo modo gli errori di commutazione tra gli operatori di discretizzazione e differenziazione [10].

Nel test a priori è necessario applicare ulteriori filtri al campo di velocità $\bar{u}$. A tale scopo sono stati utilizzati filtri compatti in tutte le direzioni. Infatti, volendo valutare il comportamento dei modelli pensando ad applicazioni in geometrie complesse, è necessario utilizzare filtri nello spazio fisico.

Sono stati analizzati i comportamenti dei modelli dinamico isotropo [8], dinamico misto di Salvetti et al. [16], a similarità di scala di Bardina et al. [6], ed i modelli anisotropo [3].

Infine consideriamo anche la versione a similarità di scala [2] modello anisotropo descritto nel paragrafo 2.2.2:

$$\tau_{ij} - \delta_{ij}/3 \sum_k \tau_{kk} = \left(\mathcal{L}_{ij}^m - \delta_{ij}/3 \sum_k \mathcal{L}_{kk}^m \right) - 2 \sum_{r,s} B_{ijrs} \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \left(\bar{S}_{rs} - \delta_{rs}/3 \sum_k \bar{S}_{kk} \right)$$

dove il tensore B_{ijrs} viene determinato come descritto nel paragrafo 2.2.2.

Nel seguito con $\langle \rangle$ si intendono quantità mediate in direzioni parallele alla parete.

1.4.1 Risultati

Consideriamo innanzitutto gli aspetti energetici.

In figura 13 è rappresentata la dissipazione sottogriglia calcolata per gli sforzi SGS esatti e per quelli modellati. Si può notare che il modello a similarità di scala è poco dissipativo. Gli altri modelli catturano abbastanza bene il valore di picco. Lontano dalla parete, mentre il modello anisotropo e il modello dinamico misto non sono abbastanza dissipativi, al contrario il modello anisotropo misto presenta un esubero di dissipazione.

Osservando la fig.14 appare evidente che i modelli a similarità di scala e il modello di Salvetti e Banerjee sono poco dissipativi. Il modello anisotropo presenta un elevato livello di forward scatter vicino alla parete, ma lontano da essa i valori sono troppo bassi.

Per quanto riguarda il grafico del backward scatter (fig.15) il modello anisotropo presenta valori elevati a parete, fatto che potrebbe essere causa di instabilità numeriche durante una simulazione numerica.

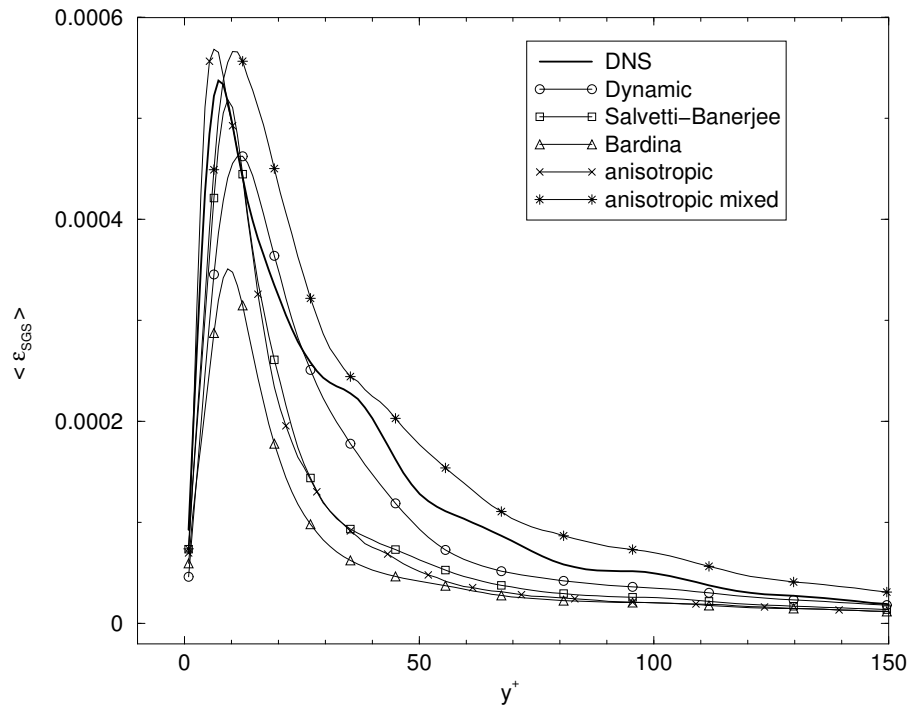


Figura 13: Dissipazione sottogriglia media ϵ_{SGS} in funzione della distanza dalla parete.

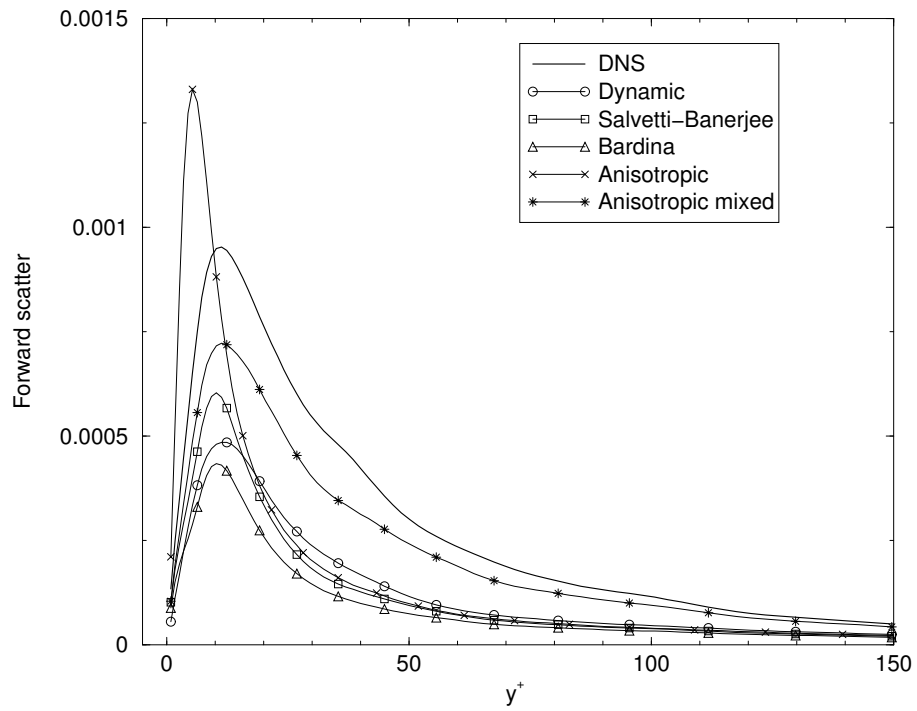


Figura 14: Forward scatter sottogriglia medio ϵ^- in funzione della distanza dalla parete.

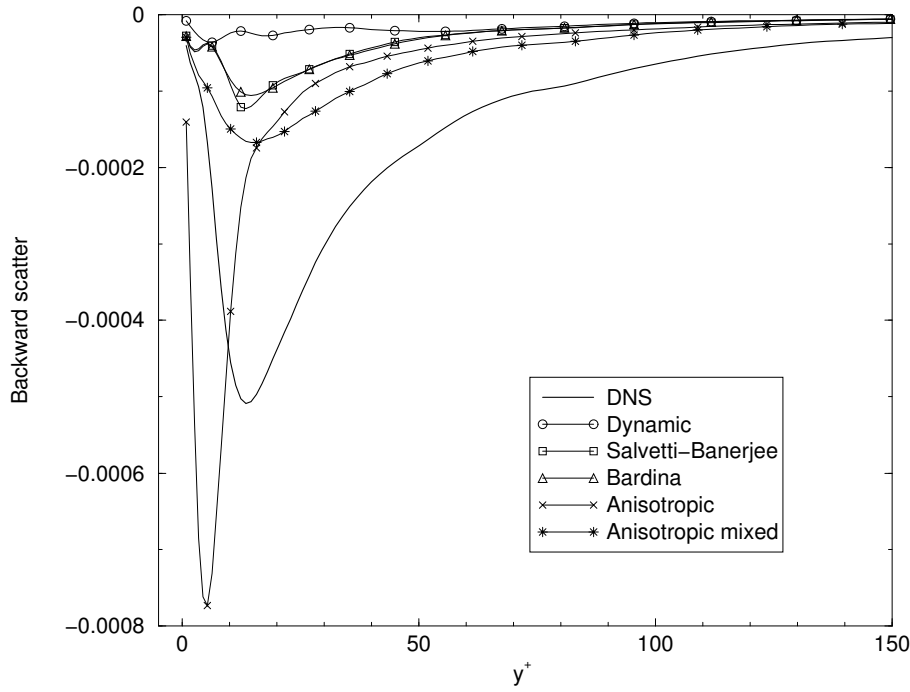


Figura 15: *Backward scatter sottogriglia medio ϵ^- in funzione della distanza dalla parete.*

I risultati migliori sono ottenuti con il modello anisotropo misto, sia per il forward, sia per il backward scatter.

E' stato anche calcolato il trasferimento complessivo di energia cinetica sottogriglia, differenza tra un termine di trasporto nella forma di divergenza e la dissipazione ϵ_{sgs} :

$$T_{sgs} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i} \overline{\tau_{ij}}) - \epsilon_{sgs}.$$

Il trasferimento sottogriglia medio $\langle T_{sgs} \rangle$ è riportato nella figura 16. Esso rappresenta l'effetto delle scale SGS sull'evoluzione dell'energia cinetica media associata alle scale risolte. L'azione del termine $\langle T_{sgs} \rangle$ consiste nel ridistribuire l'energia tra regioni diverse dello spazio fisico e tra scale diverse nello spazio dei numeri d'onda. La figura 16 mostra che l'effetto delle scale SGS è quello di trasferire l'energia prodotta nello strato limite verso la parete, dove la dissipazione molecolare è massima. Tale azione si intensifica al crescere dell'ampiezza del filtro. Tutti i modelli riproducono correttamente l'andamento qualitativo di $\langle T_{sgs} \rangle$. Fa eccezione il modello anisotropo, che, in corrispondenza del substrato viscoso, prevede un drenaggio di energia non reale. La curva relativa al modello anisotropo, inoltre, è caratterizzata da un notevole livello di rumore, dovuto alle fluttuazioni spaziali delle componenti C_{ij} del tensore viscosità turbolenta. Nel modello anisotropo misto il compito del modello è distribuito tra il tensore di Leonard modificato, che rappresenta la parte risolta degli sforzi SGS, ed un termine a viscosità turbolenta tensoriale. Ciò permette di ottenere vicino alla parete previsioni più corrette, e di attenuare le fluttuazioni delle componenti C_{ij} .

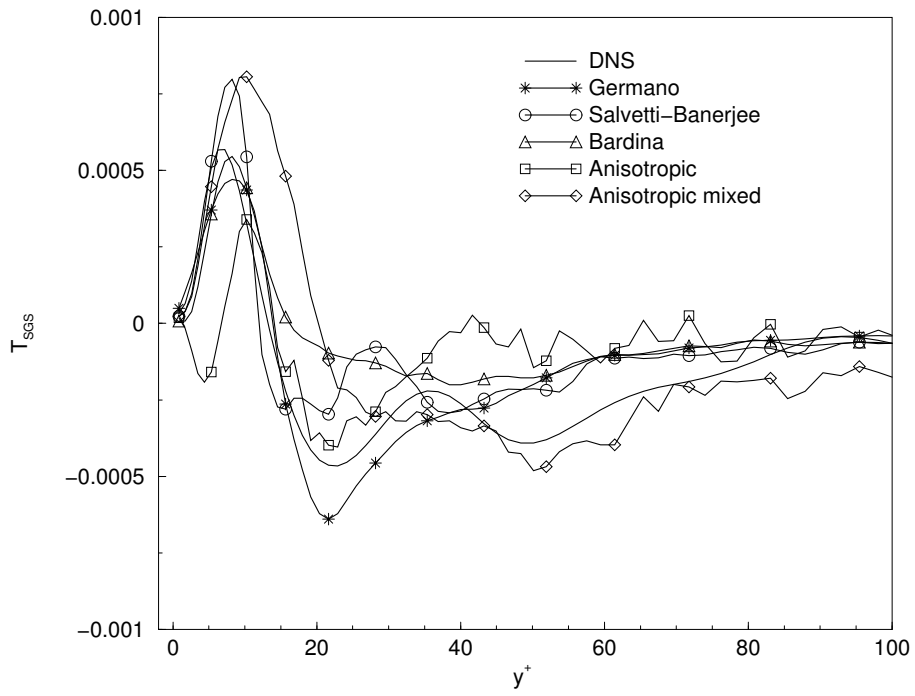


Figura 16: Trasferimento complessivo medio di energia sottogriglia in funzione della distanza dalla parete.

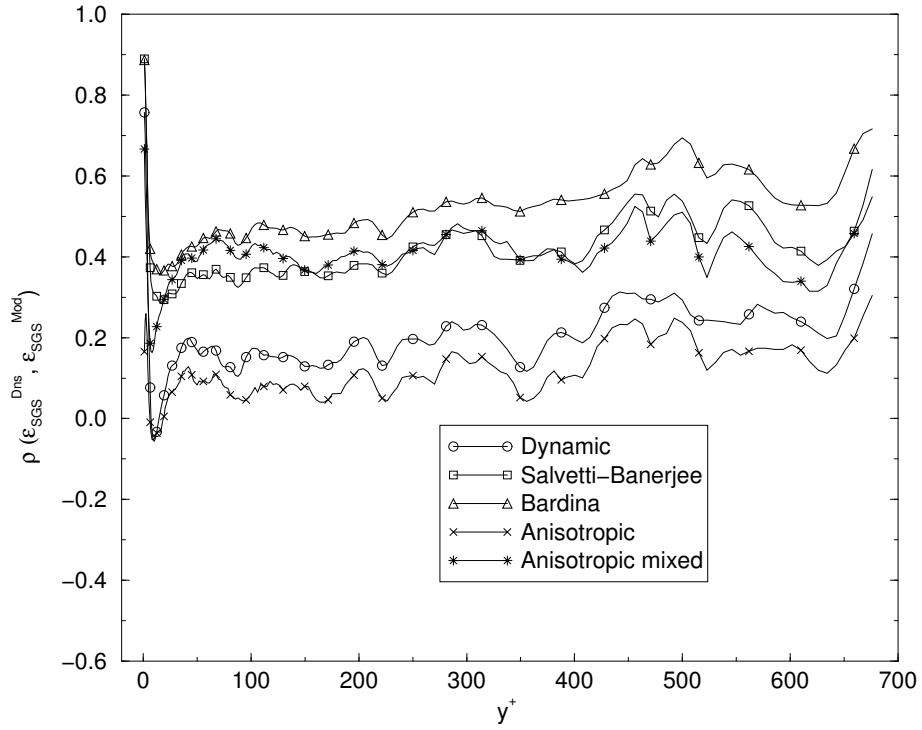


Figura 17: Coefficiente di correlazione tra la dissipazione sottogriglia esatta ϵ^{DNS} e quella modellata ϵ^{Mod} in funzione della distanza dalla parete.

L'analisi dei coefficienti di correlazione tra la dissipazione sottogriglia degli sforzi esatti e quella fornita dai modelli (fig. 17) fornisce informazioni più dettagliate sul comportamento locale. I bassi valori di coefficiente di correlazione ottenuti per il modello dinamico ed il modello anisotropo significano che localmente la dissipazione è mal rappresentata. Un comportamento locale migliore è fornito dai modelli che utilizzano almeno in parte l'ipotesi di similarità di scala.

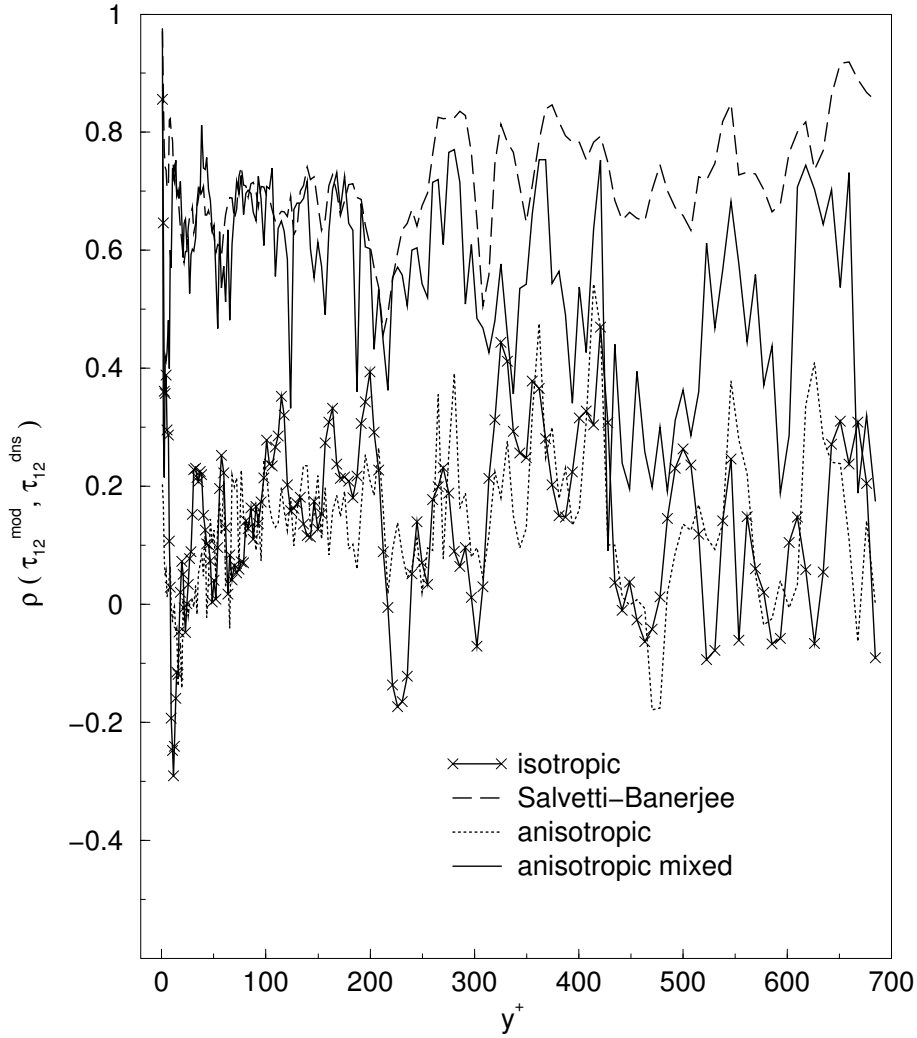


Figura 18: Coefficiente di correlazione tra gli sforzi sottogriglia esatti e quelli modellati in funzione della distanza dalla parete.

Si può sostenere la medesima affermazione anche a proposito della correlazione tra le componenti del tensore degli sforzi modellati e calcolati sulla base della DNS (fig. 18).

La figura 19 mostra la funzione densità di probabilità (pdf) della dissipazione sottogriglia in corrispondenza del piano di massima produzione di energia turbolenta, posto a $y^+ = 20$. Le pdf sono state normalizzate in modo che la probabilità totale risulti unitaria. Alla risoluzione più bassa è maggiormente evidente l'asimmetria di tutte

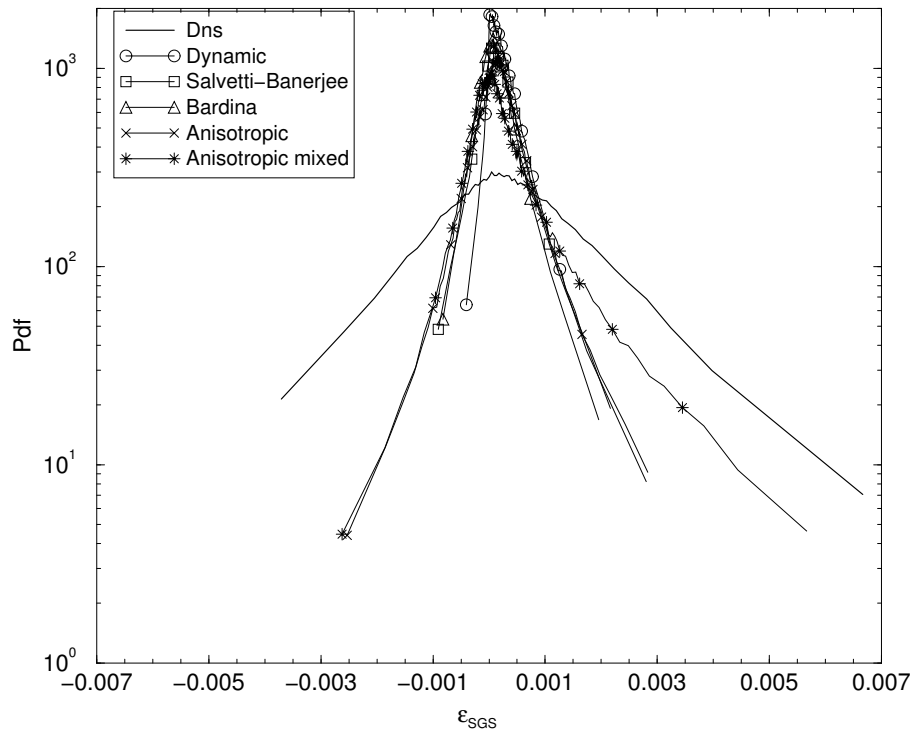


Figura 19: *Funzione della densità di probabilità della dissipazione sottogriglia.*

le pdf rispetto al valore più probabile $\epsilon \approx 0$, in particolare per il modello di Germano, che conferma così il suo carattere prevalentemente dissipativo. Tutti i modelli presentano un'elevata concentrazione di eventi attorno al valore $\epsilon = 0$, diversamente dalla distribuzione ottenuta dalla DNS, a cui corrisponde una curva più aperta con code più alte. Più prossimo alla distribuzione corretta, soprattutto sulle code, è l'andamento ottenuto dal modello anisotropo misto.

1.4.2 Conclusioni

Il flusso diretto di energia, dalle grandi alle piccole scale (forward scatter), e quello inverso (backward scatter) sono stati sottostimati da tutti i modelli. Il modello dinamico di Germano et al. si è dimostrato sostanzialmente dissipativo, per il quale il fenomeno del backward scatter è di importanza relativamente marginale, mentre il modello anisotropo non ha saputo localizzare correttamente gli scambi energetici più intensi, fornendo previsioni anche qualitativamente non corrette sul trasferimento di energia medio operato dalle scale sottogriglia in prossimità della parete.

Il tensore degli sforzi SGS, la divergenza di tale tensore e la dissipazione sottogriglia ottenuti dai diversi modelli sono stati confrontati con i risultati esatti anche a livello locale, calcolandone il coefficiente di correlazione in funzione della distanza dalla parete. All'esterno del substrato viscoso il coefficiente di correlazione è risultato molto piccolo o addirittura nullo per i modelli a viscosità turbolenta, in accordo con i numerosi risultati ottenuti in precedenza dall'analisi *a priori* di dati provenienti da

DNS. Le correlazioni più elevate sono state ottenute con il modello di Bardina e con quello di Salvetti *et al.*, con un valore prossimo a 0,5 ottenuto in corrispondenza della risoluzione più alta considerata. Per il modello anisotropo misto i risultati ottenuti sembrerebbero indicare che le fluttuazioni spaziali degli elementi del tensore viscosità turbolenta distruggono parte della correlazione che esiste tra il tensore di Leonard modificato, calcolato esplicitamente nel modello, e il tensore sforzi SGS esatti. Tale effetto è più evidente nel caso della divergenza del tensore degli sforzi SGS, ed è particolarmente importante, poiché quest'ultimo termine interviene direttamente nelle equazioni LES che governano l'evoluzione delle grandi scale di moto.

L'esame dell'allineamento relativo tra il tensore degli sforzi SGS esatti ed il tensore ottenuto dall'applicazione dei diversi modelli ha mostrato che le orientazioni dei due tensori sono pressoché scorrelate dove è maggiore la produzione di energia turbolenta. La stessa analisi è stata condotta in corrispondenza delle regioni dello strato limite caratterizzate da intensa vorticità. Il modello di Bardina e i modelli misti hanno fornito, in questo caso, previsioni sensibilmente migliori, mostrando di rappresentare in modo più accurato, rispetto ai modelli a viscosità turbolenta, le interazioni tra i moti sottogriglia e le strutture deterministiche che si organizzano dove la vorticità è più intensa.

Il calcolo esplicito della parte risolta del tensore degli sforzi SGS permette al modello di Bardina e ai modelli misti di utilizzare informazioni relative alle più piccole scale di moto risolte. Il test a priori ha mostrato che l'uso di queste informazioni permette di riprodurre la struttura locale degli sforzi SGS e del trasferimento di energia in modo più accurato rispetto ai modelli a viscosità turbolenta.

I risultati relativi agli scambi energetici medi mostrano che il modello anisotropo misto fornisce le previsioni migliori sul forward scatter e sul backward scatter. Alla risoluzione più bassa considerata, l'andamento della dissipazione sottogriglia ottenuto con questo modello è molto prossimo a quello esatto. Alla stessa risoluzione il modello di Bardina e quello di Salvetti *et al.* localizzano gli scambi energetici più intensi in una regione considerevolmente più limitata rispetto a quella indicata dai dati esatti, prevedendo una diminuzione troppo veloce della dissipazione $\langle \epsilon_{sgs} \rangle$ con il crescere della distanza dalla parete. Gli stessi modelli presentano, però, correlazioni più elevate di quelle ottenute dal modello anisotropo misto, in particolare quando si considera la divergenza del tensore degli sforzi SGS. Come si è già avuto modo di osservare, le correlazioni ottenute dal modello anisotropo misto risentono probabilmente delle fluttuazioni spaziali dei coefficienti del termine a viscosità turbolenta. Si ricorderà che il calcolo di tali coefficienti si basa sull'assunzione che essi siano uniformi nello spazio, e che possano, pertanto, essere estratti dall'argomento del test filter. Appare allora interessante, in un test a priori futuro, valutare se le fluttuazioni si riducono, e in quale misura, rinunciando a questa approssimazione e calcolando i coefficienti del modello come soluzione di un'equazione implicita.

2 La simulazione numerica di flussi reagenti

Per quanto riguarda la simulazione numerica di flussi reagenti si è lavorato in parallelo su diversi fronti:

- approccio a scalare conservato, adatto alla simulazione di reazioni chimiche in equilibrio, ad un passo ed infinitamente veloci per fiamme di diffusione;
- approccio a fronte di fiamma per reazioni chimiche veloci in flussi premiscelati;
- soluzione delle equazioni di conservazione delle specie chimiche per reazioni complesse, a più passi e non in equilibrio.

2.1 Approccio a scalare conservato

Si è trattato innanzitutto di definire le equazioni necessarie per simulare un flusso reagente. Poiché l'intento di questa ricerca è soprattutto quello di studiare l'effetto della fluidodinamica sulla cinetica chimica, si è scelto di introdurre delle ipotesi semplificative che riducessero la complessità del fenomeno chimico.

Le equazioni che descrivono l'evoluzione di un flusso reagente sono:

- **conservazione della massa**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0$$

dove ρ è la densità e u_j è la j-esima componente del vettore velocità $\mathbf{u}$

- **conservazione della quantità di moto** ($i=1,2,3$)

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i$$

dove p è la pressione, F_i una forza di volume e τ_{ij} il tensore degli sforzi viscosi. Per un fluido newtoniano τ_{ij} è dato da

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

con μ viscosità molecolare (la parte isotropa del tensore degli sforzi viene considerata inglobata nel termine di pressione)

- **conservazione della specie chimica k** ($k = 1, \dots, N$)

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \Phi_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k$$

dove Y_k rappresenta la frazione di massa della specie chimica k , Φ_j^k il flusso per diffusione molecolare della specie k , e $\dot{\omega}_k$ il termine sorgente (velocità di produzione di massa per unità di volume).

Scegliendo di attenerci a flussi di specie binarie (ossidante + reagente) la legge di Fick permette di esprimere

$$\Phi_j^k = -\rho \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$$

dove $\mathcal{D}_k$ è il coefficiente di diffusione molecolare della specie k

- **conservazione dell'entalpia statica** $h = e + p/\rho$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{q}_r - k \frac{\partial T}{\partial x_j} + \Phi_j^h \right) + \Psi$$

dove $\mathbf{q}_r$ il flusso di calore per radiazione, k il coefficiente di conducibilità termica, Ψ la dissipazione in calore dell'energia cinetica molecolare e Φ_j^h denota il flusso per diffusione molecolare dell'entalpia

$$\Phi_j^h = - \sum_{k=1}^N \rho \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} h_k.$$

L'entalpia è definita da

$$h = \sum_{k=1}^N (Y_k h_k) = \sum_{k=1}^N \left(Y_k \delta h_k^0 + Y_k \int_{T_0}^T c_{p,k} dT \right)$$

dove δh_k^0 è l'entalpia di formazione e $c_{p,k}$ il calore specifico a pressione costante della specie k .

- **equazione di stato**

$$p = \rho R T$$

con R costante dei gas.

A questo punto abbiamo a disposizione un sistema di $(N + 5)$ equazioni nelle $(N + 5)$ incognite N specie chimiche, velocità, pressione e temperatura (l'equazione di conservazione della massa è linearmente dipendente da quelle delle specie chimiche). La soluzione di questo sistema, abbinata ad una accurata soluzione delle problematiche fluidodinamiche, ha un costo oneroso. Introduciamo pertanto una serie di ipotesi semplificative che permettano di ridurre il sistema.

- Innanzitutto assumiamo di limitare le simulazioni a bassi numeri di Mach ($M < 0.2$) per cui il termine di pressione nell'equazione dell'entalpia viene trascurato.
- Numero di Damkolher $Da = \tau_t / \tau_c$ (rapporto tra un tempo caratteristico della turbolenza ed il tempo caratteristico della combustione) grande e numero di Karlovitz $Ka = \tau_c / \tau_k$ (rapporto tra il tempo caratteristico della reazione chimica ed il tempo associato alla scala di Kolmogorov della turbolenza) minore di uno. In queste ipotesi la reazione chimica è molto più veloce di quanto viene rappresentato del campo fluidodinamico. Pertanto può essere considerato valido il limite di Burke e Schumann [19] di reazione chimica infinitamente veloce.
- Il termine Ψ dovuto al calore prodotto dagli sforzi viscosi è trascurabile rispetto al calore rilasciato dalla combustione.
- Il coefficiente di diffusione molecolare $\mathcal{D}$ viene assunto uguale per tutte le specie.
- Le pareti sono adiabatiche.

- L'effetto dell'irraggiamento è trascurabile.
- Vengono trascurate le forze di volume.
- Numero di Lewis $Le = \frac{k}{\rho c_p \mathcal{D}}$ assunto unitario per tutte le specie (dove c_p è il calore specifico a pressione costante per la miscela $c_p = \sum_{k=1}^N Y_k c_{p,k}$).

Sviluppiamo il gradiente dell'entalpia:

$$\begin{aligned}\nabla h &= \sum_{k=1}^N (h_k \nabla Y_k + Y_k \nabla h_k) = \\ \sum_{k=1}^N \left(h_k \nabla Y_k + Y_k \frac{\partial h_k}{\partial T} \nabla T \right) &= \sum_{k=1}^N (h_k \nabla Y_k + Y_k c_{p,k} \nabla T) = \sum_{k=1}^N (h_k \nabla Y_k) + c_p \nabla T\end{aligned}$$

da cui si ricava

$$k \nabla T = \frac{k}{c_p} \left[\nabla h - \sum_{k=1}^N (h_k \nabla Y_k) \right].$$

Utilizzando l'ipotesi di numero di Lewis unitario, la somma del termine di conduzione termica e di diffusione molecolare si riduce a

$$k \nabla T + \sum_{k=1}^N \rho \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} h_k = \frac{k}{c_p} \left[\nabla h - \sum_{k=1}^N (h_k \nabla Y_k) \right] + \sum_{k=1}^N \rho \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} h_k = \rho \mathcal{D} \nabla h$$

L'equazione per l'entalpia si riduce allora a

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right).$$

Consideriamo ora le equazioni degli elementi chimici. Esprimiamo le frazioni di massa degli elementi Z_i in funzione delle specie chimiche

$$Z_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} \frac{W_j^e}{W_j} Y_j$$

dove a_{ij} è il numero di atomi dell'elemento i -esimo contenuti nella specie j -esima, W_i^e è il peso atomico dell'elemento i -esimo e W_j il peso molecolare della specie j -esima. Combinando linearmente le equazioni per le specie si può ottenere l'equazione per gli NE elementi ($i = 1, \dots, NE$)

$$\frac{\partial(\rho Z_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Z_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial Z_i}{\partial x_j} \right) + \Psi_i$$

Il termine sorgente

$$\Psi_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} \frac{W_i^e}{W_j} \omega_j$$

è nullo poichè le reazioni chimiche conservano la massa degli elementi.

A questo punto le equazioni per gli elementi e quelle di conservazione dell'entalpia possono essere ridotte ad una sola equazione della variabile di Schwab-Zeldovich Z

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Z)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)$$

dove

$$Z = \frac{h - h_o}{h_f - h_o} = \frac{Z_i - Z_{io}}{Z_{if} - Z_{io}}$$

Con i pedici o e f si intendono le quantità relative rispettivamente agli ingressi di ossidante (dove $Z = 0$) e di combustibile (dove $Z = 1$). Quindi il problema è stato notevolmente semplificato poichè le frazioni di massa degli elementi e l'entalpia possono essere determinati risolvendo una sola equazione nello scalare Z priva del termine sorgente. Lo scalare Z rappresenta la frazione di miscela locale. Infatti la frazione di massa proveniente dall'ingresso di combustibile è

$$\sum_{i=1}^{NE} Z Z_{if} = Z \sum_{i=1}^{NE} Z_{if} = Z.$$

Vediamo ora come è possibile esprimere la temperatura in funzione della variabile Z . Riprendiamo le equazioni di conservazione delle specie nella forma

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial \Phi_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k$$

Nell'ipotesi di reazione a uno step si ottiene il legame tra specie chimiche e scalare Z

$$Y = Y_o(1 - Z) + \nu_o W_o \frac{c_p}{Q} \left[Z(T_f - T_o) + (T_o - T) \right]$$

per l'ossidante, e

$$Y = Y_f Z + \nu_f W_f \frac{c_p}{Q} \left[Z(T_f - T_o) + (T_o - T) \right]$$

per il combustibile. Nel caso limite di reazione infinitamente veloce, i termini sorgenti $\dot{\omega}_k$ sono nulli eccetto sulla superficie della fiamma dove Z assume il valore stechiometrico. Pertanto al di fuori della superficie di fiamma la diffusione delle specie è dovuta al solo miscelamento e si ottiene un legame lineare tra la distribuzione delle specie chimiche e Z

$$Y = Y_o(1 - Z/Z_{st})$$

per l'ossidante, e

$$Y = Y_f(Z - Z_{st})/(1 - Z_{st})$$

per il combustibile.

Analogamente si ha una equazione per la temperatura

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = - \frac{\partial \Phi_T^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T$$

Nel caso di reazione infinitamente veloce l'equazione ha come soluzione

$$T = T_o + (T_f - T_o)Z - \frac{q_0/c_p}{W_f \nu_f} Y_f Z$$

per il lato ossidante, e

$$T = T_o + (T_f - T_o)Z - \frac{q_0/c_p}{W_o \nu_o} Y_o (1 - Z)$$

per il lato combustibile. ν_k sono i coefficienti stechiometrici della specie k , mentre q_0 rappresenta il calore specifico di reazione

$$q_0 = \sum_{k=1}^N \delta h_k \nu_k W_k$$

2.2 Il limite di chimica infinitamente veloce

Le precedenti relazioni assumono una forma semplice nel limite di reazioni chimiche infinitamente veloci. In questo limite, infatti, la conoscenza di Z è sufficiente per determinare tutte le altre quantità :

$$\begin{aligned} Z < Z_{st} : \quad Y_F &= 0 & T < &= T_f + \frac{q_0/c_p}{\mathcal{M}_F \nu_F} Y_{F,0} Z \\ Y_O &= Y_{O,0} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) \\ Z > Z_{st} : \quad Y_O &= 0 & T > &= T_f + \frac{q_0/c_p}{\mathcal{M}_O \nu_O} Y_{O,0} (1 - Z) \\ Y_F &= Y_{F,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \end{aligned} \quad (1)$$

dove Z_{st} è determinato dalla condizione

$$Y_F(Z_{st}) = Y_O(Z_{st}) = 0$$

da cui:

$$Z_{st} = \frac{1}{\Phi + 1} \quad \Phi = \frac{\nu_O \mathcal{M}_O}{\nu_F \mathcal{M}_F}$$

2.3 Metodo numerico

Le equazioni sopra riportate sono discretizzate nello spazio mediante uno schema alle differenze finite centrate del 2° ordine su una griglia staggered. Le variabili pressione, densità e scalare Z sono collocate al centro della cella, mentre le 3 diverse componenti della velocità sono collocate rispettivamente nel centro della faccia a cui sono perpendicolari. Per il momento viene trattata una griglia di discretizzazione cartesiana ortogonale.

Nel tempo la soluzione viene fatta avanzare secondo il metodo delle Proiezioni combinato con uno schema Runge-Kutta esplicito a tre passi.

Riportiamo la discretizzazione temporale delle equazioni trattate in forma adimensionale.

Innanzitutto viene risolta l'equazione per lo scalare Z

$$\frac{Z^k - Z^{k-1}}{\Delta t} = \left(-C_{(Z)}^{k-2} + D_{(Z)}^{k-2} \right) \beta_k + \left(-C_{(Z)}^{k-1} + D_{(Z)}^{k-1} \right) \alpha_k$$

Con l'apice k si indicano le quantità calcolate al sottopasso k ($k = 1, 2, 3$) dello schema Runge-Kutta, all'interno del passo temporale n . Al sottopasso $k = 1$ le quantità con apice $k - 1$ corrispondono a quelle calcolate al passo temporale $n - 1$ con $k = 3$. Δt è il passo temporale di avanzamento della soluzione.

$C_{(Z)}$ e $D_{(Z)}$ rappresentano i termini convettivo e diffusivo dell'equazione

$$C_{(Z)}^k = u_j^k \frac{\partial Z^k}{\partial x_j}$$

$$D_{(Z)}^k = \frac{1}{\rho^k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial Z^k}{\partial x_j} \right)$$

dove Re e Pr sono rispettivamente i numeri di Reynolds e di Prandtl della corrente.

β_k e α_k sono i coefficienti richiesti dallo schema Runge-Kutta

$$\alpha_1 = \frac{8}{15} \quad \alpha_2 = \frac{5}{12} \quad \alpha_3 = \frac{3}{4}$$

$$\beta_1 = 0 \quad \beta_2 = -\frac{17}{60} \quad \beta_3 = -\frac{5}{12}.$$

Successivamente viene determinata la densità sfruttando l'ipotesi di reazione infinitamente veloce e bassi numeri di Mach

$$\rho^k = \frac{P_0}{[(0.5 - |Z^k - 0.5|) T_1 + T_0] R}$$

con T_1 e T_0 rispettivamente le temperature di attivazione e in ingresso, mentre P_0 è una pressione di riferimento (nel caso di condotto aperto è quella ambiente).

Vengono poi risolte le equazioni per il campo di velocità e pressione.

Ad ogni sottopasso di Runge-Kutta viene calcolato un termine provvisorio $(\rho \mathbf{u})^*$ eliminando il termine di pressione dall'equazione della quantità di moto

$$\frac{(\rho u_i)^* - (\rho u_i)^{k-1}}{\Delta t} = \left(-C_{(u_i)}^{k-2} + D_{(u_i)}^{k-2} \right) \beta_k + \left(-C_{(u_i)}^{k-1} + D_{(u_i)}^{k-1} \right) \alpha_k$$

dove

$$C_{(u_i)}^k = \frac{\partial (\rho^k u_i^k u_j^k)}{\partial x_j}$$

$$D_{(u_i)}^k = \frac{\partial \tau_{ij}^k}{\partial x_j}$$

Questo termine provvisorio $(\rho \mathbf{u})^*$ viene poi corretto con il termine di pressione

$$\frac{(\rho u_i)^k - (\rho u_i)^*}{\Delta t} = -\frac{\partial p^k}{\partial x_i}.$$

Seguendo il Metodo delle Proiezioni la pressione p_k^n viene calcolata mediante la divergenza della formula precedente

$$\nabla^2 p^k = \frac{1}{(\alpha_k + \beta_k)\Delta t} \left(\frac{\partial(\rho u_j)^*}{\partial x_j} + \frac{\rho^k - \rho^{k-1}}{(\alpha_k + \beta_k)\Delta t} \right).$$

L'utilizzo delle equazioni così discretizzate per un fluido reagente si è rivelato però fallimentare. Infatti nell'equazione di Poisson per la pressione è contenuto un termine inversamente proporzionale al quadrato del passo temporale; per passi temporali piccoli questo termine diventa molto grande, portando ad un mal condizionamento del sistema numerico risolvendo l'equazione della pressione. Il problema è risolvibile con l'approccio illustrato nel paragrafo successivo.

2.4 Il limite per bassi numeri di Mach

In generale ad un processo di combustione corrispondono un incremento di energia termica e cinetica, variazioni di pressione, temperatura e densità e propagazione di onde sonore. Trattando correnti a basso numero di Mach M si assume che l'influenza di ogni singola onda sonora sul campo fluidodinamico e chimico sia ininfluenza. Diventa però importante considerare l'effetto cumulativo di queste onde sul campo risolto. Questo può essere fatto senza risolvere esplicitamente queste onde sonore, seguendo la tecnica suggerita da [13].

Consideriamo le equazioni che descrivono una corrente instazionaria comprimibile in presenza di reazioni chimiche nella forma adimensionale:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{M^2} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial \Phi_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \\ \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} &= \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{M^2}{Re} \frac{\partial(u_i \tau_{ij})}{\partial x_j} \end{aligned}$$

in cui è stato assunto $Le = 1$.

Introduciamo uno sviluppo in serie in funzione di M per le variabili del problema

$$p = p_0 + Mp_1 + M^2 p_2 + O(M^3)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + M\mathbf{u}_1 + O(M^2)$$

$$\rho = \rho_0 + M\rho_1 + O(M^2)$$

$$Z = Z_0 + MZ_1 + O(M^2)$$

Introduciamo queste quantità nelle equazioni di conservazione per il fluido comprimibile, trascurando i termini di ordine $O(M^1)$ e $O(M^2)$, raccogliendo ed eguagliando a zero i termini con uguale potenza di M .

Dalle equazioni della conservazione della massa di ordine M^{-2} , M^{-1} e M^0 si ottiene

$$\nabla p_0 = 0$$

$$\nabla p_1 = 0$$

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 u_{0j})}{\partial x_j} = 0$$

quindi p_0 e p_1 dipendono solo dal tempo, pertanto $p_0 = P_0$ pressione di riferimento.

L'equazione della quantità di moto all'ordine M^0 diventa

$$\frac{\partial(\rho_0 u_{0j})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 u_{0j} u_{0i})}{\partial x_j} + \frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \tau_0 = 0$$

Introducendo l'espansione nell'equazione dell'entalpia e considerando che l'energia cinetica è inferiore all'energia termica di un fattore M^2 per bassi numeri di Mach, si ottiene

$$\frac{\partial(\rho_0 h_0)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 u_{0j} h_0)}{\partial x_j} = \frac{\partial p_0}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right).$$

Introduciamo l'espansione per le variabili anche nell'equazione del calore

$$\rho h = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p + M^2 \frac{\rho u^2}{2} + Q \sum_{k=1}^N \delta h_k^0 \rho Y_k$$

e considerando i termini all'ordine $O(M^0)$, si ottiene la relazione

$$\rho_0 h_0 = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_0 + Q \sum_{k=1}^N \delta h_k^0 \rho_0 Y_{0k}.$$

Sostituiamo questa relazione nell'equazione dell'entalpia all'ordine 0

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial p_0}{\partial t} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{\partial(u_{0j} p_0)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) - QDa\omega^h$$

dove

$$\omega^h = \sum_{k=1}^N \delta h_k^0 \omega_k$$

Definiamo

$$H_0 = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_0$$

la parte puramente statica e non reattiva dell'entalpia. La relazione precedente si trasforma

$$\frac{\partial(u_{0j} H_0)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial p_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) - QDa\omega^h$$

Infine si giunge ad una condizione cui deve soddisfare il campo di velocità

$$\frac{\partial u_{0j}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\gamma P_0} \left[\frac{dP_0}{dt} - (\gamma - 1) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) + QDa\omega^h \rho_0 \right].$$

Di questa condizione deve essere tenuto conto nella soluzione dell'equazione di Poisson per la pressione definita nel paragrafo precedente. Nel caso di combustione in condotto aperto P_0 eguaglia la pressione ambiente ed è costante nel tempo.

2.4.1 Simulazione numerica di una fiamma laminare

Il codice di calcolo risolvete le equazioni in forma adimensionale per un flusso reagente nelle ipotesi semplificative esposte nei paragrafi precedenti e per bassi numeri di Mach, è stato provato per una fiamma di diffusione laminare. Al fine di limitare gli oneri computazionali è stata considerata una fiamma laminare a bassi numeri di Reynolds e con variazioni di temperatura, associate alle reazioni chimiche, non eccessive. Non avendo a disposizione dati numerici o sperimentali con cui confrontare i risultati della simulazione, la valutazione del comportamento del codice ha per il momento un carattere puramente qualitativo. Ci si riserva di effettuare nel futuro più immediato un'analisi più approfondita di ulteriori risultati numerici ottenuti.

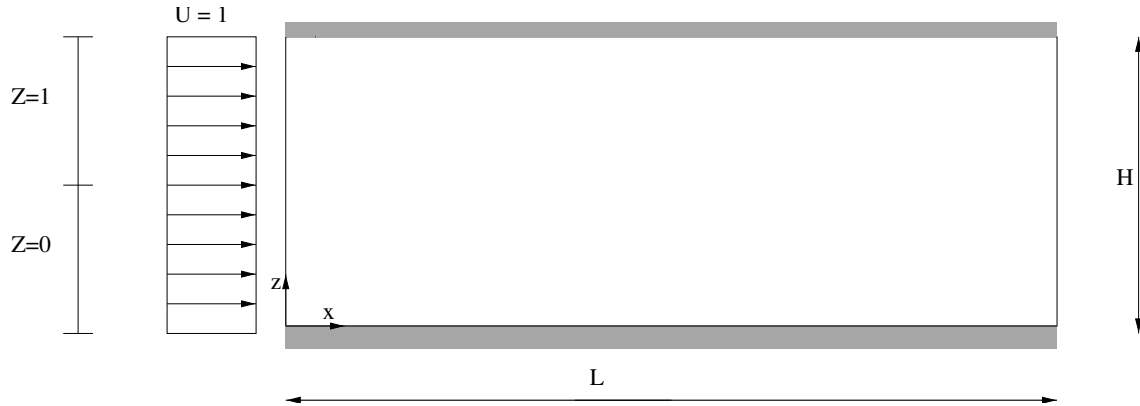


Figura 20: Schema di una fiamma di diffusione laminare in un canale piano.

In fig. 20 è schematicamente rappresentata la fiamma di diffusione simulata. Si tratta della corrente in un canale piano tra due pareti indefinite poste rispettivamente alla coordinata adimensionale $z = -1$ e $z = +1$. In questo canale viene immesso un flusso con velocità longitudinale costante $U = 1$. Il numero di Reynolds della corrente è $Re = U\delta/\nu = 50$ dove $\delta = 1$ è la semialtezza del canale e ν è la viscosità cinematica. Il canale è lungo $L = 12\delta$. In corrispondenza della sezione di ingresso viene imposta la variabile di Schwab-Zeldovich $Z = 0$ per $-1 \leq z \leq 0$ (corrispondente all'immissione di ossidante) e $Z = 1$ per $0 \leq z \leq 1$ (corrispondente all'immissione di combustibile), mentre sulla pressione è assegnata una condizione al contorno di Neumann. Ossidante e combustibile hanno pari densità $\rho = 1$. Alle pareti la velocità deve rispettare una condizione di no-slip, mentre per la pressione e per la variabile Z vengono imposte

derivate nulle in direzione normale alla parete. Sulla sezione di uscita la pressione è imposta pari ad una pressione di riferimento $p_0 = 86100$, e tutte le altre variabili sono assunte con derivata longitudinale nulla.

In ogni istante la densità viene determinata in funzione della pressione di riferimento p_0 mediante l'equazione di stato dei gas

$$\rho = \frac{p_0}{[(0.5 - |Z - 0.5|) C_1 + C_0] R}$$

dove la funzione tra parentesi al denominatore rappresenta il legame lineare tra temperatura e scalare Z nell'ipotesi di Burke e Schumann, $R = 287$ è la costante dei gas, $C_0 = 300^\circ K$ e $C_1 = 500^\circ K$.

La simulazione è stata effettuata utilizzando una griglia di calcolo con 90 punti in direzione longitudinale x e 72 in direzione normale alla parete z . Il calcolo, a partire da condizioni iniziali fittizie, è stato protratto fino al raggiungimento della condizione stazionaria.

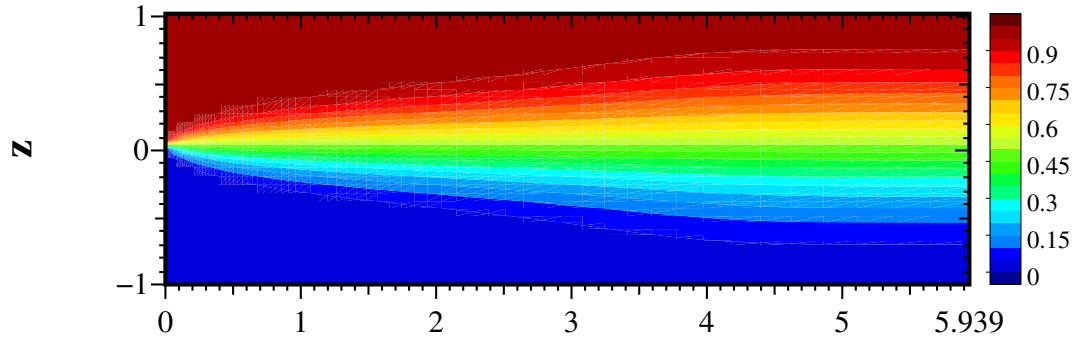


Figura 21: Curve di livello per la variabile Z nella fiamma di diffusione laminare.

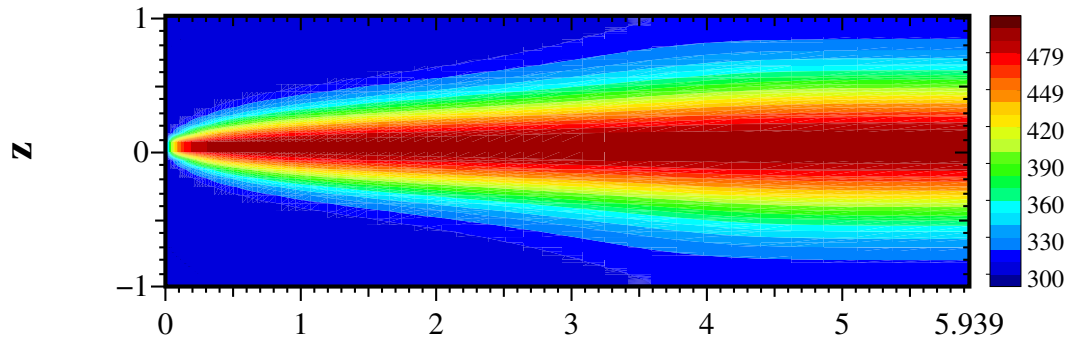


Figura 22: Curve di livello per la temperatura nella fiamma di diffusione laminare.

In fig. 21 sono rappresentate le curve di livello per la variabile di Schwab-Zeldovich Z nella porzione del canale più prossima all'imbocco. È evidente come ossidante e combustibile incomincino ad entrare in contatto all'imbocco nel punto medio del canale provocando immediatamente una reazione chimica, e come, procedendo in direzione longitudinale x la zona di miscelamento tra i due flussi si diffonda.

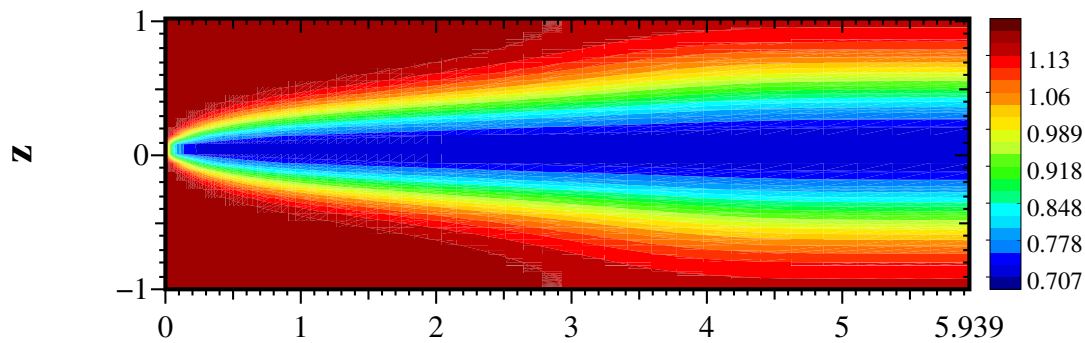


Figura 23: Curve di livello per la densità nella fiamma di diffusione laminare.

Nella figura 22 si può notare come si abbia un brusco innalzamento della temperatura rispetto al valore con cui sono immessi i fluidi. Questo innalzamento si presenta proprio dove combustibile ed ossidante incominciano a reagire. I valori più alti di temperatura sono trovati in centro al canale dove le percentuali di combustibile ed ossidante sono più vicine al valore stechiometrico di reazione. Procedendo in direzione longitudinale anche la zona a temperatura elevata si diffonde.

Il grafico per la densità in fig. 23 è molto simile a quello della temperatura illustrato precedentemente. I due fluidi vengono immessi nel canale con uguale densità. La reazione chimica nel centro del canale provoca una immediata riduzione di densità, associata all'innalzamento di temperatura.

Nelle figure 24 e 25 sono rappresentate le curve di livello per le componenti di velocità rispettivamente longitudinale e normale alle pareti. È presente una zona dove prevale l'adattamento del campo di velocità dopo le condizioni di ingresso: il profilo per la componente U deve modificarsi da costante verso un andamento parabolico, e a causa di ciò la componente W vicino all'ingresso è diretta verso il centro del canale (fig. 25). A questa zona segue una regione dove diventa dominante l'effetto della combustione: a causa dell'espansione del fluido nella zona centrale del canale si ha un incremento della componente longitudinale U , mentre la componente normale W è

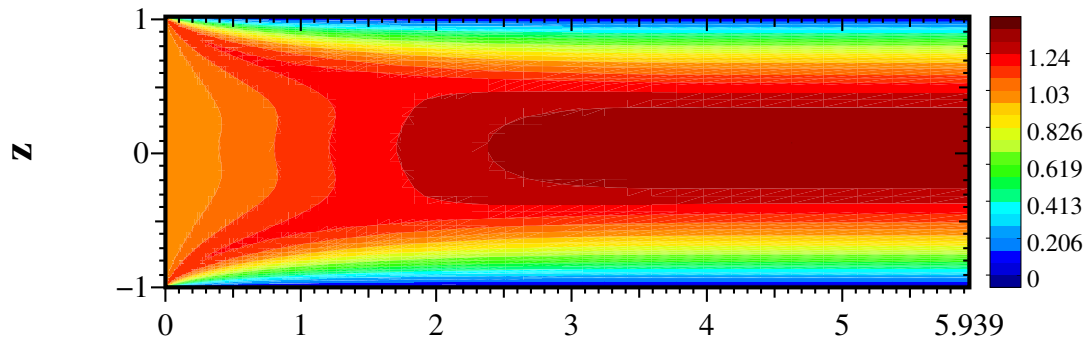


Figura 24: Curve di livello per la componente longitudinale della velocità nella fiamma di diffusione laminare.

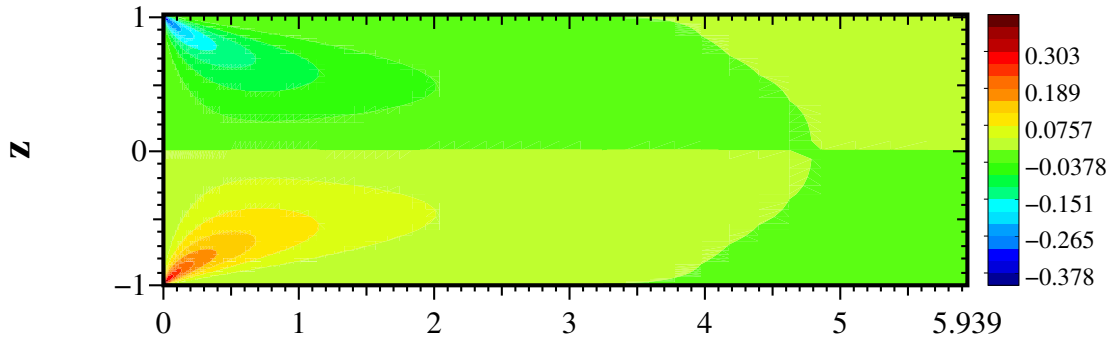


Figura 25: Curve di livello per la componente normale alla parete della velocità nella fiamma di diffusione laminare.

orientata verso le pareti.

Si può quindi affermare che il codice di calcolo dimostra un buon comportamento.

2.4.2 Il counterflow bidimensionale

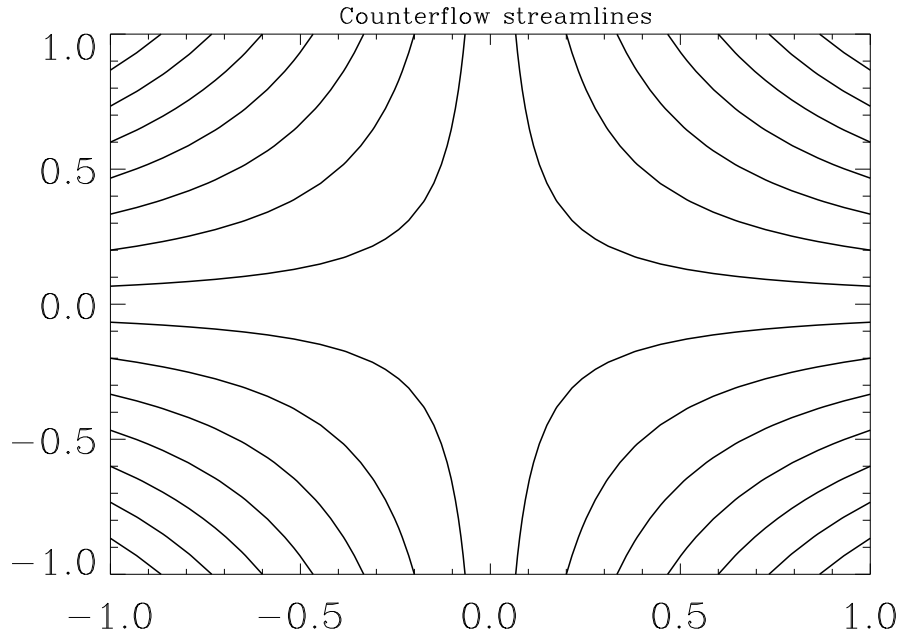


Figura 26: Counterflow. Linee di flusso, nello stato iniziale.

Consideriamo il flusso incomprimibile e irrotazionale con un punto di ristagno, brevemente *counterflow*, mostrato in figura 26 il cui campo di velocità è definito come:

$$\begin{cases} u_x = ax \\ u_y = 0 \\ u_z = -az \end{cases} \quad (2)$$

Il counterflow è un flusso che per la sua semplicità si presta abbastanza bene alla verifica del modello numerico. In particolare, è stato testata la capacità del codice di maneggiare forti differenze di densità. Ricordiamo che il codice è formalmente incomprimibile, e le variazioni di densità sono legate solamente a quelle di temperatura mediante l'equazione dei gas perfetti. Una relazione parabolica tra la temperatura T e lo scalare conservato, è stata assunta, in luogo di quella lineare valida in caso di reazione infinitamente veloce (cfr. 1). Questa ipotesi è consistente con una fiamma di spessore piccolo ma finito e risolto dalla numerica ed è adottata in luogo di una delle equazioni per le specie chimiche, per esempio per Y_F .

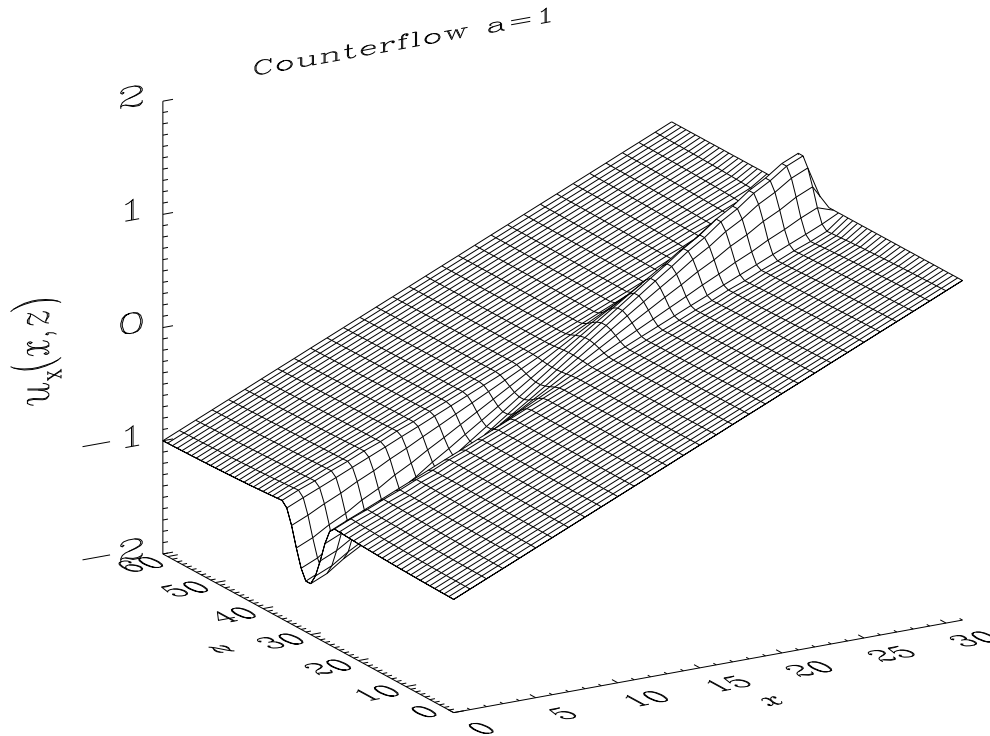


Figura 27: *Counterflow*. La superficie mostrata rappresenta il valore della velocità in direzione x nel piano $x - z$. Nello stato iniziale essa sarebbe una superficie piana, come indicato dalle relazioni (2). La deviazione dal piano è dovuta all'aumento di velocità in uscita, dovuto alla reazione.

Nella figura 27 è evidenziato l'aumento (circa un fattore due) della velocità di efflusso dei gas dovuta alla reazione chimica, il cui calore prodotto va a modificare il flusso di base.

La reazione in questa simulazione avviene nella parte mediana del dominio come evidenziato nei profili in fig. 28, che si riferiscono ad uno stato stazionario. Il codice produce attualmente un errore relativo nella conservazione della massa totale di circa un fattore 10^{-6} per passo di integrazione. Un run prende tipicamente ordine $10^3 - 10^4$ passi prima che si raggiunga uno stato stazionario. Abbiamo dunque un errore relativo

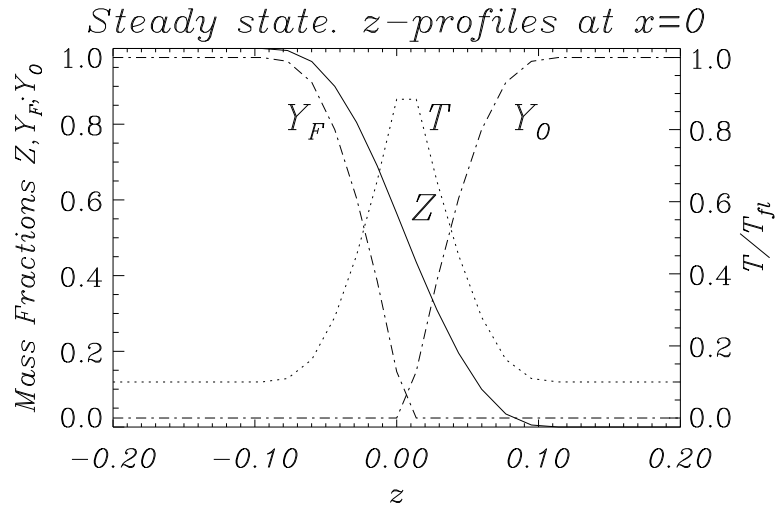


Figura 28: *Counterflow. Profili lungo la direzione z , ad x costante, di scalare Z , frazioni Y_F , Y_O e temperatura. Il tempo trascorso è di qualche unità in termini del turnover time ed è tale da aversi un flusso stazionario.*

sulla produzione di massa di un fattore $10^{-2} - 10^{-3}$. Tale errore potrebbe essere dovuto in principio al grado di approssimazione dovuto all'ipotesi di bassi numeri di Mach. È opportuno comunque approfondire meglio questo aspetto.

3 L'approccio a fronte di fiamma

Il fenomeno di reazione-diffusione di flussi premiscelati può essere descritto dall'equazione

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c = \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot (\rho D \nabla c)) + \frac{\dot{\omega}}{\rho}$$

per la variabile c che rappresenta la concentrazione dei prodotti nella miscela incombusta. Se le scale caratteristiche legate alla chimica sono molto più piccole di quelle fluidodinamiche, la fiamma può essere considerata come una superficie di spessore trascurabile (fronte). In queste ipotesi l'equazione per la variabile c può essere sostituita da un'equazione per il fronte di fiamma, rappresentato da un'isolinea del campo G [5]

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla G = s_L |\nabla G|. \quad (3)$$

s_L è la velocità della fiamma relativa alla velocità locale della corrente. Nel caso di correnti turbolente sarà necessario introdurre un modello per la velocità di fiamma

s_L [7]. Se le dimensioni delle strutture turbolente sono piccole confrontate con lo spessore della fiamma l_F , l'equazione può essere riscritta come

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla G = s_L^0 |\nabla G| + \mathcal{D} \Delta G. \quad (4)$$

dove s_L^0 è la velocità laminare del fronte di fiamma, $\mathcal{D} = s_L^0 \mathcal{L}$ è il coefficiente di diffusività di Markstein e $\mathcal{L}$ è la lunghezza di Markstein. La diffusione può essere espressa in funzione della viscosità cinematica e del numero di Prandtl $\mathcal{D} = (\frac{\nu}{Pr}) Mk$ dove $Mk = \frac{\mathcal{L}}{l_F}$ viene detto numero di Markstein.

Premixed (FKPP) flame and G flame-fr

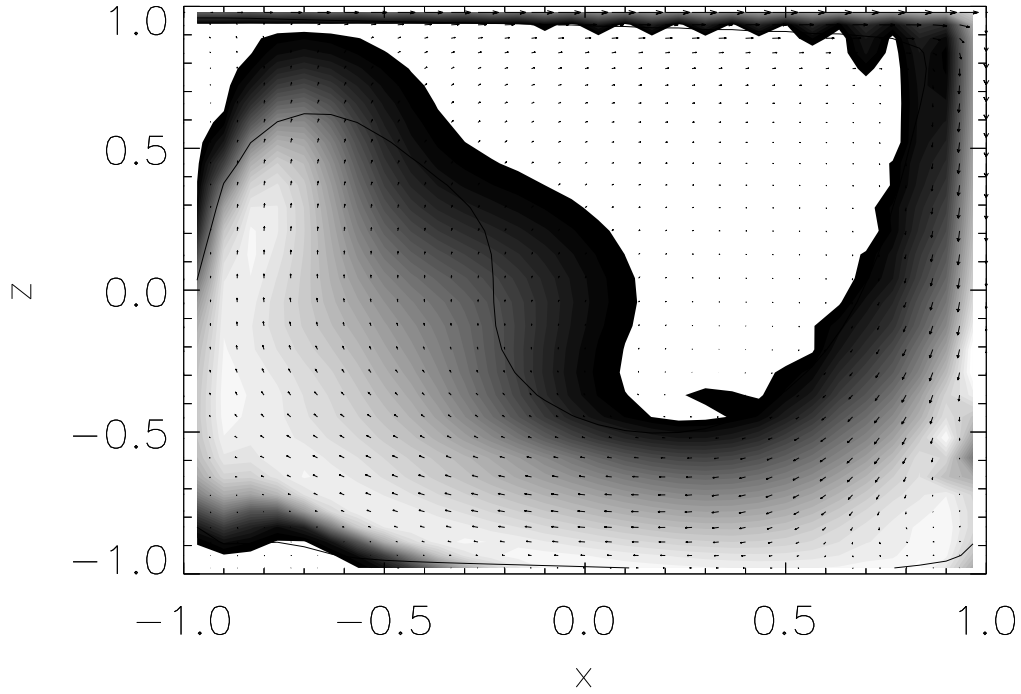


Figura 29: Campo della variabile di concentrazione c per la fiamma premiscelata in una cavità a $Re = 500$. è sovrapposta la linea $G = 0.5$ rappresentante il fronte di fiamma.

Nella figura 29 è presentato il risultato di una DNS di una fiamma premiscelata in una cavità cubica, in cui è stata risolta l'equazione per la concentrazione c unitamente alle equazioni di Navier-Stokes per correnti a bassi numeri Mach. Al campo della variabile di concentrazione c è sovrapposta l'isolina di $G = 0.5$ rappresentante il fronte di fiamma ottenuto risolvendo l'equazione 4. I parametri della simulazione sono: $Re = 500$, $Pr = 4$, $Da = 0.5$, e, per l'equazione del fronte di fiamma, $s_L^0 = .01$, $Mk = .05$. La figura dimostra un buon accordo tra le due soluzioni.

3.1 L'approccio stocastico

Un'analisi stocastica permette di formulare un modello per la velocità del fronte di fiamma. Al problema di Cauchy associato all'equazione 4, con condizioni iniziali $G(0, \vec{x}) = f(\vec{x})$, possiamo applicare il teorema di Feynman-Kac [11] e, assumendo localmente valida l'approssimazione di $|\nabla G|$ con una funzione quadratica in $|\nabla G|$, otteniamo

$$s_L^0 |\nabla G| = s_L^0 (\alpha |\nabla G|^2 + \vec{\beta} \cdot \nabla G) + O(\delta x^2, \delta y^2, \delta z^2). \quad (5)$$

L'approssimazione 5 è valida per tempi piccoli e piccoli $\delta x, \delta y, \delta z$.

Per un generico campo di velocità $\mathbf{u}$ questo approccio conduce ad una espressione analitica contenente un integrale stocastico. Si possono definire due casi particolari in cui questo integrale è facilmente determinabile:

- **$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$ costante** In questo caso si ottiene la seguente approssimazione per G

$$G(t, \vec{x}) = \frac{\mathcal{L}}{\alpha} \cdot \log E^{\vec{x}} \left[e^{\frac{\alpha}{\mathcal{L}} \cdot f(W_t) + \frac{(s_L^0 \vec{\beta} - \vec{v}_0)}{2\mathcal{D}} \cdot (W_t - \vec{x}) - \frac{1}{2} \frac{|s_L^0 \vec{\beta} - \vec{v}_0|^2}{2\mathcal{D}} t} \right]. \quad (6)$$

- **$\mathbf{u} = \nabla \phi$: corrente a potenziale**

In questo caso otteniamo

$$G(t, \vec{x}) = \frac{\mathcal{L}}{\alpha} \cdot \log E^{\vec{x}} \left[\exp \left\{ \frac{\alpha}{\mathcal{L}} \cdot f(W_t) + \frac{s_L^0 \vec{\beta}}{2\mathcal{D}} \cdot (W_t - \vec{x}) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2\mathcal{D}} \left(\phi(t, W_t) - \phi(0, \vec{x}) - \int_0^t \frac{\partial \phi}{\partial t}(s, W_s) ds - \frac{1}{2} \int_0^t \Delta \phi(s, W_s) 2\mathcal{D} ds \right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \int_0^t \frac{|s_L^0 \vec{\beta} - \nabla \phi(t-\theta, W_\theta)|^2}{2\mathcal{D}} d\theta \right\} \right]. \quad (7)$$

Nelle equazioni 6 e 7 $W_t/\sqrt{2\mathcal{D}}$ è una famiglia browniana con W_t definito a partire da $\vec{x}$.

Nelle figure 30 e 31 vengono messe a confronto le soluzioni ottenute analiticamente dalla formula 6 e numericamente integrando l'equazione 4. I grafici presentano l'evoluzione temporale di un fronte di fiamma a partire da una forma iniziale con un profilo Gaussiano. I grafici mostrano la bontà dell'approssimazione stocastica per la velocità del fronte di fiamma che si rivela quindi un approccio promettente.

4 Modellistica LES di flussi turbolenti in presenza di reazioni chimiche infinitamente veloci

Applichiamo l'operazione di filtraggio alla Favre alle equazioni per correnti turbolente con reagenti nell'ipotesi di chimica infinitamente veloce. Nel seguito indicheremo con $\tilde{f}$ le quantità ottenute con un filtraggio alla Favre

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (8)$$

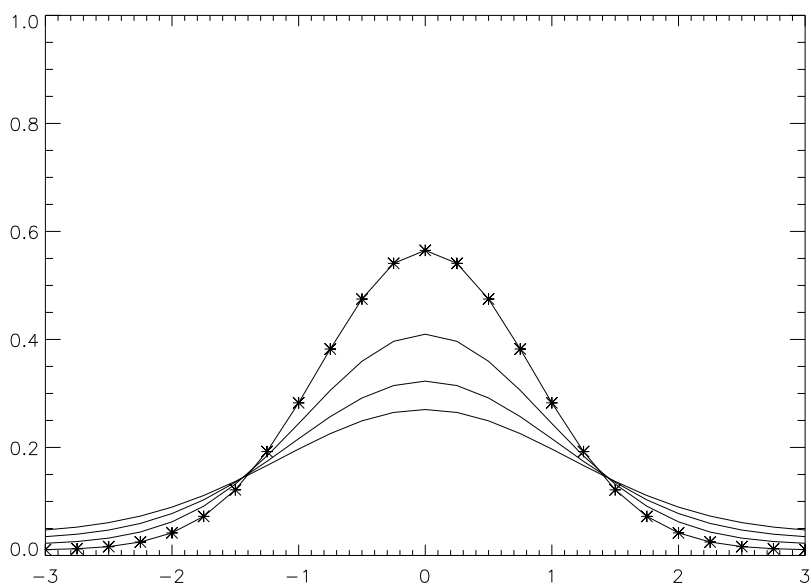


Figura 30: *Profili di G ottenuti per 4 diversi istanti temporali risolvendo la formula (6). * indica il profilo iniziale.*

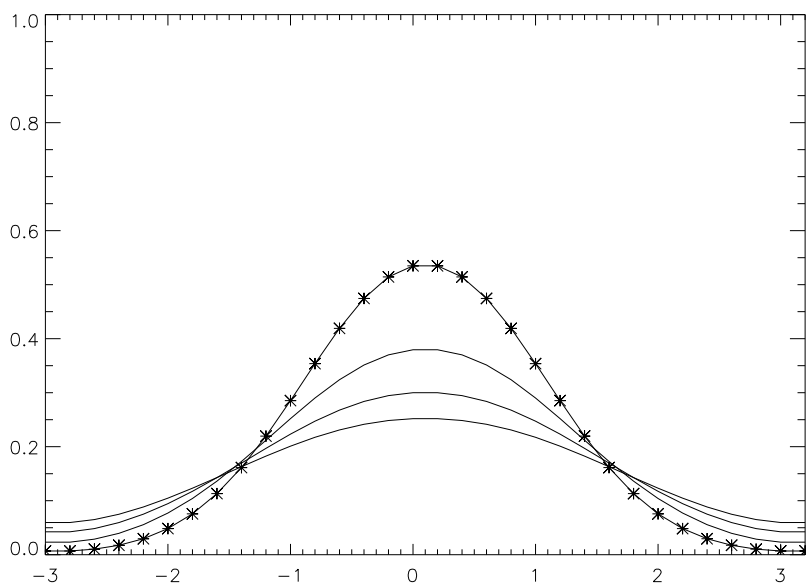


Figura 31: *Profili di G ottenuti per 4 diversi istanti temporali integrando l'equazione (4). * indica il profilo iniziale.*

mentre con $\bar{f}$ sono indicate le quantità ottenute dall'operazione di filtraggio puramente spaziale. Le quantità non risolte nelle equazioni saranno allora date da

$$f'' = f - \bar{f} \quad (9)$$

Le equazioni filtrate risultano

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij}^u \right] \quad (11)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{RePr} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} + \tau_j^Z \right) \quad (12)$$

Le grandezze

$$\tau_{ij}^u = (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \bar{\rho} \quad (13)$$

$$\tau_j^Z = (\widetilde{u_i Z} - \tilde{u}_i \tilde{Z}) \bar{\rho} \quad (14)$$

sono da modellare. Si assume che la parte isotropa del tensore τ_{ij}^u sia inglobata nel termine di pressione.

Applicando un modello tipo Smagorinsky [15] [21] si ottiene

$$\tau_{ij}^u = -2C\bar{\rho}\bar{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij} \quad (15)$$

$$\tau_j^Z = -\frac{C}{Pr_t} \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\tilde{S}| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \quad (16)$$

dove $|\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (17)$$

e $\bar{\Delta}$ è l'ampiezza del filtro di griglia.

Introduciamo un filtro test di ampiezza $\hat{\Delta}$ maggiore di $\bar{\Delta}$; definiamo le quantità sub-test

$$T_{ij}^u = \widehat{\widetilde{\rho u_i u_j}} - \frac{1}{\hat{\rho}} \widehat{\widetilde{\rho u_i}} \widehat{\widetilde{\rho u_j}} \quad (18)$$

$$T_j^Z = \widehat{\widetilde{\rho u_i Z}} - \frac{1}{\hat{\rho}} \widehat{\widetilde{\rho u_i}} \widehat{\widetilde{\rho Z}} \quad (19)$$

che sono legate alle grandezze turbolente risolte dalle relazioni dinamiche

$$L_{ij} = T_{ij}^u - \hat{\tau}_{ij}^u \quad (20)$$

$$R_i = T_j^Z - \hat{\tau}_j^Z \quad (21)$$

I coefficienti C e Pr_t vengono calcolati secondo la procedura dinamica

$$C = \frac{1}{2} \frac{\langle L_{ij} M_{ij} \rangle}{\langle M_{ij} M_{ij} \rangle} \quad (22)$$

$$Pr_t = C \frac{\langle Q_i Q_i \rangle}{\langle R_i Q_i \rangle} \quad (23)$$

dove

$$M_{ij} = \left[-\hat{\bar{\rho}} \left(\frac{\hat{\Delta}}{\bar{\Delta}} \right)^2 |\hat{\tilde{S}}| \hat{\tilde{S}}_{ij} + \widehat{\bar{\rho} |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij}} \right] \bar{\Delta}^2 \quad (24)$$

$$Q_i = \left[-\hat{\bar{\rho}} \left(\frac{\hat{\Delta}}{\bar{\Delta}} \right)^2 |\hat{\tilde{S}}| \frac{\partial \hat{\tilde{Z}}}{\partial x_i} + \widehat{\bar{\rho} |\tilde{S}| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}} \right] \bar{\Delta}^2 \quad (25)$$

Le $\langle \rangle$ indicano medie nelle direzioni di omogeneità e nel tempo.

4.1 Simulazione numerica di una fiamma turbolenta

Il codice di calcolo risolvete le equazioni in forma adimensionale per un flusso reagente nelle ipotesi semplificative esposte nei paragrafi precedenti e con modelli sottogriglia per le equazioni della quantità di moto e dello scalare conservato, è stato provato per una fiamma di diffusione turbolenta. La valutazione del comportamento del codice ha per il momento un carattere puramente qualitativo.

E' stata simulata la corrente in un canale piano tra due pareti indefinite poste rispettivamente alla coordinata adimensionale $z = -1$ e $z = +1$. In questo canale viene immesso un flusso con un profilo di velocità pari a quello medio sviluppato in assenza di reazioni chimiche. Il numero di Reynolds della corrente è $Re_\tau = u_\tau \delta / \nu = 180$, basato sulla velocità di attrito alla parete $u_\tau = 1$, $\delta = 1$ è la semialtezza del canale e ν è la viscosità cinematica. Al profilo medio in ingresso viene sovrapposto un disturbo random con ampiezza massima pari a 0.01 la velocità in centro canale. In corrispondenza della sezione di ingresso viene imposta la variabile di Schwab-Zeldovich $Z = 0$ per $-1 \leq z \leq 0$ (corrispondente all'immissione di ossidante) e $Z = 1$ per $0 \leq z \leq 1$ (corrispondente all'immissione di combustibile), mentre sulla pressione è assegnata una condizione al contorno di Neumann. Ossidante e combustibile in ingresso hanno pari densità $\rho = 1$. Alle pareti la velocità deve rispettare una condizione di no-slip, mentre per la pressione e per la variabile Z vengono imposte derivate nulle in direzione normale alla parete. Sulla sezione di uscita la pressione è imposta pari ad una pressione di riferimento $p_0 = 1$, e tutte le altre variabili sono assunte con derivata longitudinale nulla.

La simulazione è stata effettuata utilizzando una griglia di calcolo con 20 punti in direzione longitudinale x , 16 in direzione trasversale y e 20 in direzione normale alla parete z . Il calcolo, a partire da condizioni iniziali fittizie, è stato protratto fino al raggiungimento della condizione statisticamente stazionaria.

Nelle figure 32 e 33 sono rappresentate le curve di livello per le componenti longitudinale e normale alla parete della velocità. Da esse si può rilevare il livello di turbolenza della corrente, ma non è possibile fare valutazioni quantitative dell'effetto della variazione di densità sul campo di velocità.

Più espliciti sono invece i grafici rappresentanti le curve di livello della densità (fig. 34) e della temperatura (fig. 35): è evidente l'effetto della turbolenza su queste grandezze nella zona di miscelamento tra combustibile ed ossidante. E' stato verificato

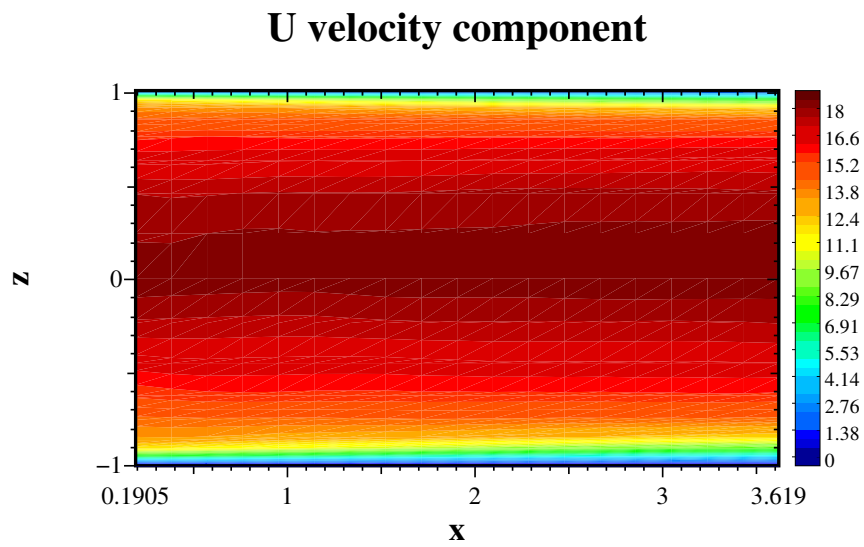


Figura 32: Curve di livello per la velocità longitudinale per la fiamma turbolenta in un canale piano.

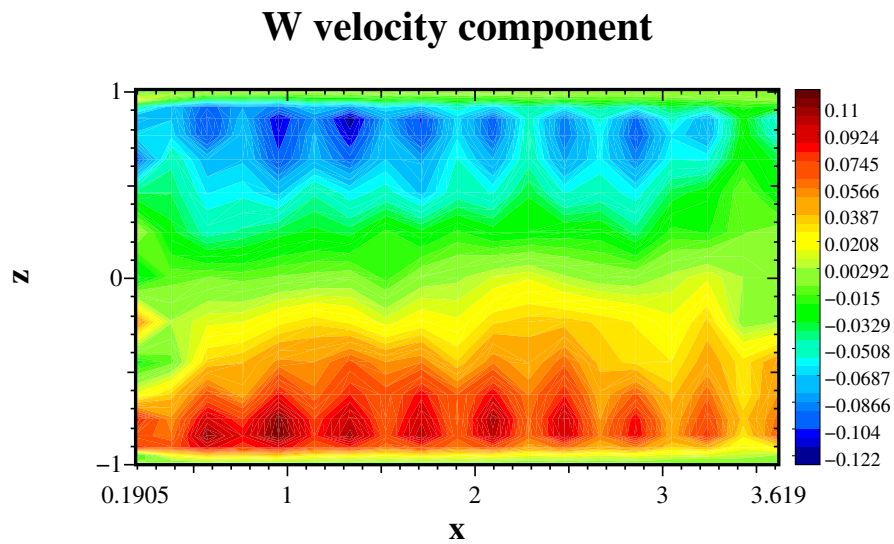


Figura 33: Curve di livello per la velocità normale alla parete per la fiamma turbolenta in un canale piano.

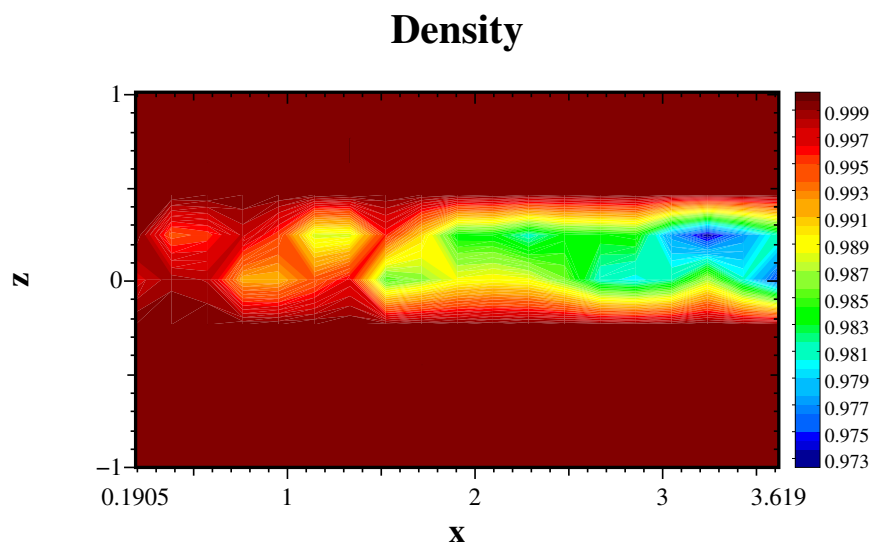


Figura 34: *Curve di livello per la densità per la fiamma turbolenta in un canale piano.*

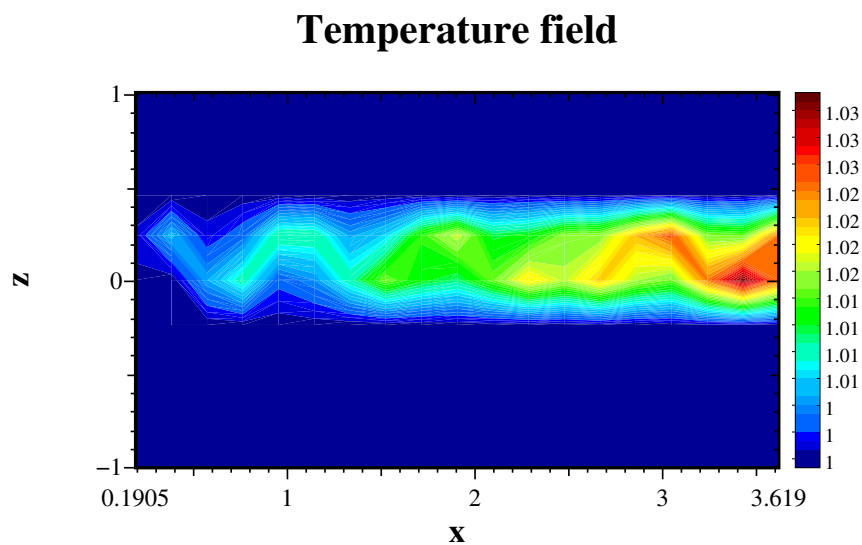


Figura 35: *Curve di livello per la temperatura per la fiamma turbolenta in un canale piano.*

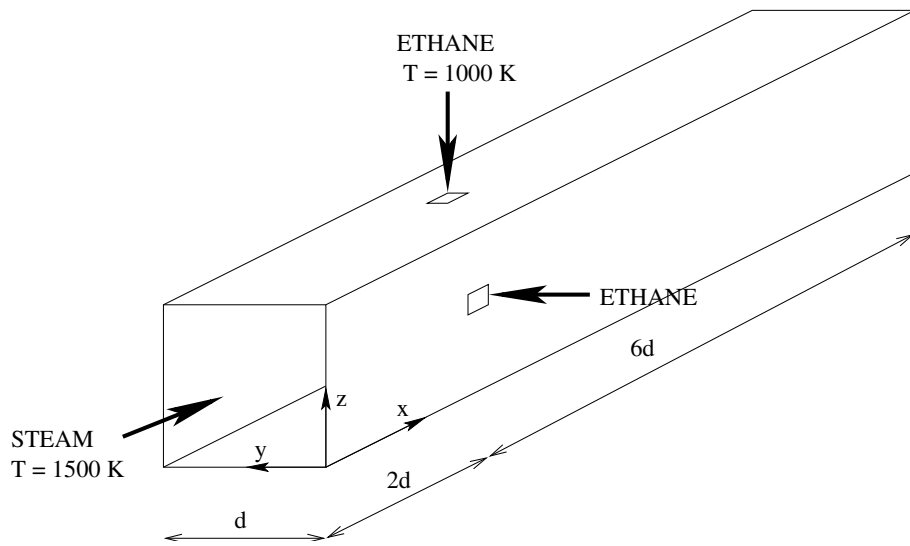


Figura 36: *Configurazione della simulazione.*

che aumenti del livello di turbolenza in ingresso provocano una diminuzione delle variazioni di densità e temperatura nel canale.

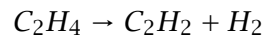
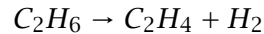
È stata poi compiuta una simulazione di una corrente turbolenta di vapore acqueo in un canale a sezione quadrata in cui, da fuori nelle pareti laterali, viene immesso etano per la produzione di etilene (fig. 36) [1].

All'ingresso viene immesso vapore acqueo alla temperatura $T_1 = 1500K$ e ad un numero di Reynolds $Re = U\delta/\nu = 3000$ basato sulla velocità media di ingresso U e sulla larghezza del canale δ .

L'etano viene immesso da fuori nelle pareti laterali ad una velocità $U_2 = 2U$ e ad una temperatura $T_2 = 1000K$. La portata dei flussi è tale da garantire le condizioni stechiometriche.

La cinetica chimica è stata gentilmente fornita dai Proff. Ranzi e Faravelli dell'Istituto di Chimica Industriale del Politecnico di Milano.

La decomposizione dell'etano in etilene è governata dalle reazioni



dove il vapore è una specie inerte. Le temperature di attivazione delle reazioni sono rispettivamente $T_{a_1} = 29000K$ e $T_{a_2} = 28000$ e i fattori preesponenziali $A_1 = 10^{10}$ e $A_2 = 1.1 \times 10^{10}$.

Per simulare questo tipo di flusso reagente sono state risolte numericamente le equazioni di conservazione delle specie.

Gli sforzi turbolenti sottogriglia nell'equazione della quantità di moto, sono stati modellati con il classico modello dinamico a viscosità turbolenta [8, 12]. Un modello analogo è stato implementato nel codice di calcolo anche per i flussi sottogriglia di uno scalare (per le specie chimiche) [15, 4].

Inoltre nelle simulazioni LES è necessario introdurre un modello anche per le quantità derivanti dal filtraggio del termine sorgente $\widetilde{\dot{\omega}}$ nell'equazione di conservazione delle specie chimiche:

$$\widetilde{\dot{\omega}}_k = w_k \sum_{i=1}^{NR} (v''_{ik} - v'_{ik}) A_i e^{-\frac{T_{a_i}}{\widetilde{T}}} \Pi_{j=1}^{NS} \left(\frac{\widetilde{Y}_j}{w_j} \right)^{v'_{jk}}$$

NR e NS sono rispettivamente il numero delle specie e delle reazioni chimiche, ρ la densità della miscela, A_i il fattore pre-esponenziale, T_{a_i} la temperatura di attivazione, v_{ik} il coefficiente stechiometrico della j -esima specie nella i -esima reazione, e Y_j le concentrazioni delle specie. Al termine esponenziale viene applicato uno sviluppo in serie di Taylor nell'intorno del valore della temperatura filtrata $\widetilde{T}$:

$$e^{-\frac{T_{a_i}}{\widetilde{T}}} = e^{-\frac{T_{a_i}}{\widetilde{T}}} \left[1 + \frac{T_{a_i}}{\widetilde{T}^3} \left(\frac{T_{a_i}}{2\widetilde{T}} - 1 \right) \widetilde{T''^2} \right]$$

dove $\widetilde{T''}$ rappresenta le fluttuazioni sottogriglia della temperatura. Poichè il campo di temperatura, se il rilascio di calore è moderato, presenta uno spettro simile a quello dell'energia [9], si può assumere anche per esso un'ipotesi di similarità di scala per determinare le fluttuazioni sottogriglia di temperatura in funzione di quelle risolte

$$\widetilde{T''^2} = C_T \left(\widehat{\widetilde{T}^2} - \widehat{\widetilde{T}}^2 \right)$$

C2H6 concentration

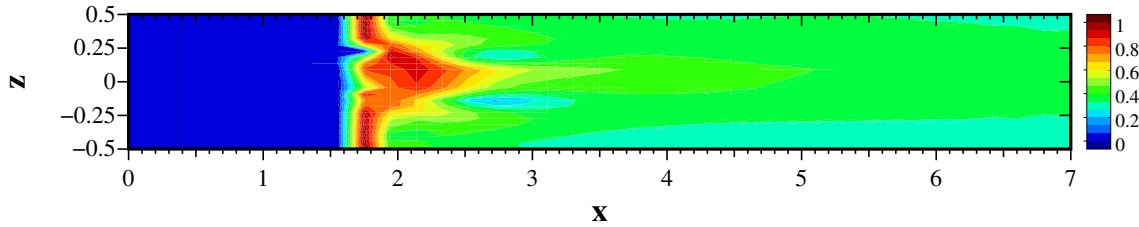


Figura 37: Concentrazione di C_2H_6 in una sezione longitudinale del canale.

C2H4 concentration

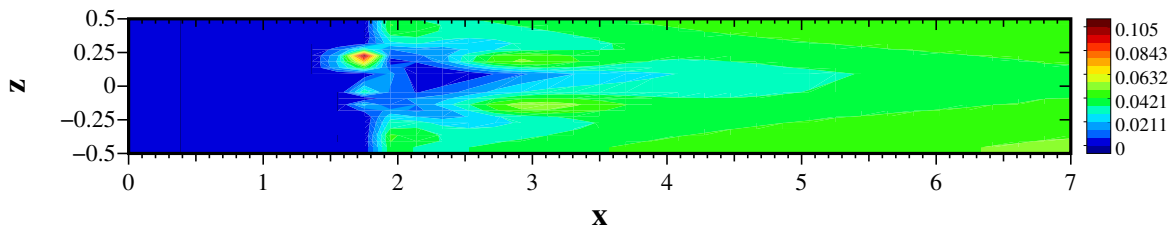


Figura 38: Concentrazione di C_2H_4 in una sezione longitudinale del canale.

Nelle figure 37, 38 e 39 sono rappresentate le concentrazioni dell'etano e dei prodotti. Si può notare l'elevata concentrazione di etano nei pressi dei fori di immissione, poi rapidamente l'etano si trasforma dando origine ai prodotti.

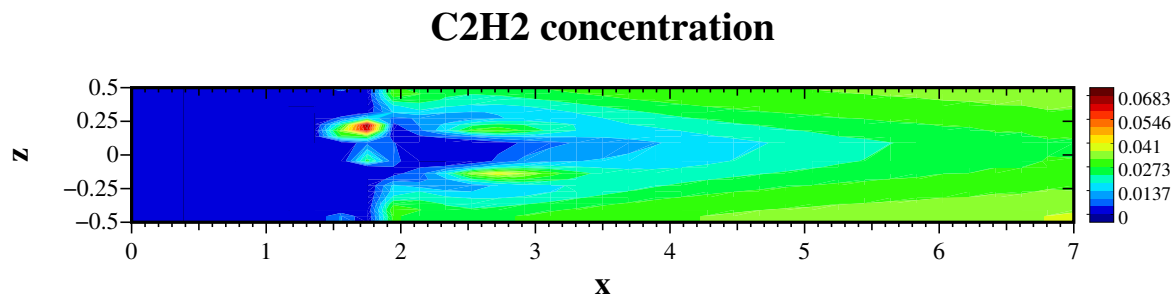


Figura 39: *Concentrazione di C_2H_2 in una sezione longitudinale del canale.*

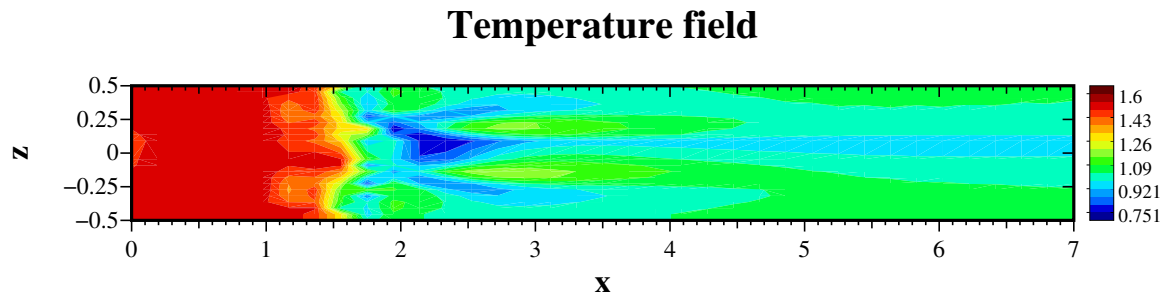


Figura 40: *Campo di temperatura in una sezione longitudinale del canale.*

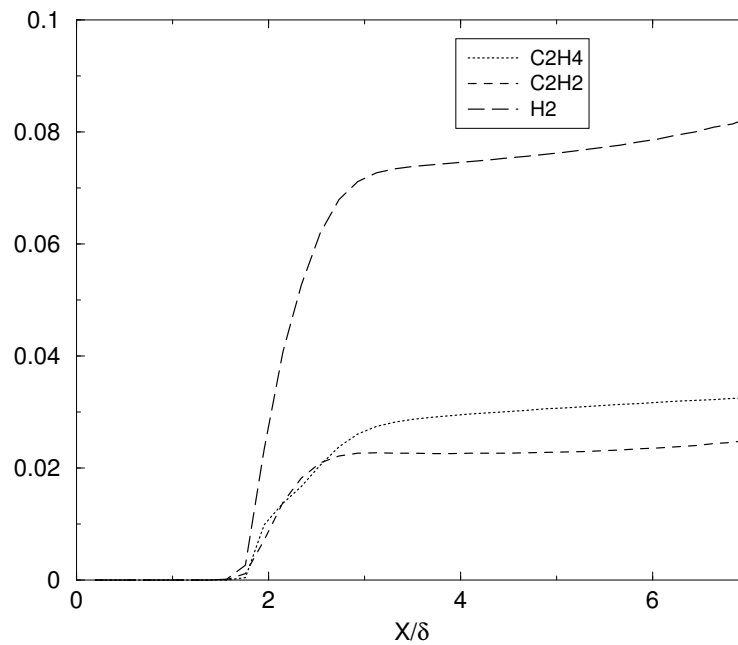


Figura 41: *Concentrazione media dei prodotti in funzione della distanza dall'ingresso.*

In fig. 40 è rappresentato il campo di temperatura in una sezione longitudinale del canale: è evidente la presenza della reazione endotermica particolarmente intensa nella zona di immissione dell'etano.

In fig. 41 sono riportati, in funzione della distanza dall'ingresso del vapore, le concentrazioni dei prodotti, mediate sulla sezione trasversale.

È possibile fare una valutazione qualitativa dei risultati ottenuti, potendo affermare che i modelli turbolenti proposti per i flussi e per il termine sorgente delle equazioni per le specie chimiche dimostrano un buon comportamento.

Riferimenti bibliografici

- [1] T. Faravelli A. Abba', C. Cercignani and E. Ranzi. A LES approach to turbulent reacting flow. In *Proc. Symp. Combustion and the Environment.*, 2001.
- [2] A. Abbà, C. Cercignani, , G. Picarella, and L. Valdetaro. A 3D turbulent boundary layer test for LES models. In *Computational Fluid Dynamics 2000*, 2000.
- [3] A. Abbà, C. Cercignani, and L. Valdetaro. Analysis of Subgrid Scale Models. *to appear in Computers and Mathematics with Applications*.
- [4] A. Abbà, C. Cercignani, L. Valdetaro, and P. Zanini. Les of turbulent thermal convection. In *Proceedings from the Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation*, Grenoble, September 1996. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- [5] F.A. Williams A.R. Kerstein, W.T. Ashurst. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Physical Review A*, 37(7):2728–2731, April 1988.
- [6] J. Bardina, J.H. Ferziger, and W.C. Reynolds. *Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows*. PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1983.
- [7] K. Bray and N. Peters. Laminar flamlets in turbulent flames. In *Turbulent reacting flows*. Academic Press London, 1994.
- [8] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys.Fluids A*, 3(7):1760–1765, July 1991.
- [9] S.S. Girimaji and Y. Zhou. Analysis and modeling of subgrid scalar mixing using numerical data. *Phys. Fluids*, 8(5):1224–1236, May 1996.
- [10] M.A. Gonze. Revue, amélioration et validation de modélisations sous-maille. Technical report, CERCA, Montréal, Canada, 1994.
- [11] I. Karatzas and S.E. Shreve. *Brownian motion and stochastic calculus*. Springer-Verlag, second edition, 1991.
- [12] D.K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, 4(3):633–635, March 1992.

- [13] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, **42**:185, 1985.
- [14] O. Metais and M. Lesieur. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *J. Fluid Mech.*, 239:157–194, 1992.
- [15] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A*, 3(11):2746–2757, November 1991.
- [16] S. Banerjee M.V. Salvetti. A priori tests of a new dynamic subgrid-scale model for finite-difference large-eddy simulations. *Phys. Fluids*, 7(11):2831–2847, November 1995.
- [17] C. Meneveau S. Liu and J. Katz. On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jets. *J. Fluid Mech.*, 275:83–119, 1994.
- [18] P.R. Spalart. Theoretical and numerical study of a three-dimensional turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 205:319–340, 1989.
- [19] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A first course in turbulence*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, second edition, 1973.
- [20] P. Moin U. Piomelli and J.H. Ferziger. Model consistency in large-eddy simulation of turbulent channel flows. *Phys. Fluids*, 31(7):1884–1891, July 1988.
- [21] D.K. Lilly V.C. Wong. A comparison of two dynamic closure methods for turbulent thermal convection. *Phys. Fluids*, 6(2):1016–1023, February 1994.
- [22] K.D. Squires X. Wu. Large eddy simulation of an equilibrium three-dimensional turbulent boundary layer. *AIAA Journal*, 35(1):67–74, January 1997.