



Simulazione Numerica di Iniezione di Getti in Condizioni di Gas Reale

E. Giacomazzi, D. Cecere, N. Arcidiacono, F.R. Picchia

SIMULAZIONE NUMERICA DI INIEZIONE DI GETTI IN CONDIZIONI DI GAS REALE

E. Giacomazzi, D. Cecere, N. Arcidiacono, F.R. Picchia (ENEA)

Settembre 2016

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Annuale di Realizzazione 2015

Area: Generazione di energia elettrica con basse emissioni di carbonio

Progetto: Cattura e sequestro della CO₂ prodotta dall'utilizzo di combustibili fossili

Obiettivo: Parte A - Cicli turbo-gas a CO₂ -

Simulazione di ossi-combustione di CH₄ in atmosfera di CO₂ supercritica

Responsabile del Progetto: Franca Rita Picchia, ENEA

Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 GLI STRUMENTI DI CALCOLO	6
3 IL MODELLO DI GAS REALE: L'EQUAZIONE DI STATO DI PENG-ROBINSON	6
3.1 RIDUZIONE DEL TEMPO DI CALCOLO: CALCOLO DEI VALORI MOLARI PARZIALI	7
3.2 MIGLIORAMENTO DELL'ACCURATEZZA: IL CONCETTO DELLA TRASLAZIONE DI VOLUME.....	8
4 SCHEMI NUMERICI SPAZIALI PER AUMENTARE ACCURATEZZA E ROBUSTEZZA.....	8
4.1 VALIDAZIONE DEGLI SCHEMI DI BASSO ORDINE: WENO E TVD.....	9
4.2 VALIDAZIONE DELLO SCHEMA COMPATTO DI ALTO ORDINE	10
5 SIMULAZIONE DI UN GETTO COASSIALE DI AZOTO LIQUIDO E IDROGENO GASSOSO	13
5.1 IL SET-UP DELLA SIMULAZIONE NUMERICA.....	14
5.2 RISULTATI	14
5.3 UN PRIMO SGUARDO ALLA DINAMICA DELLA TURBOLENZA	17
6 CONCLUSIONI	20
7 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI.....	21

Sommario

Il progressivo aumento delle fonti di energia rinnovabile sta mettendo a rischio la stabilità della rete elettrica a causa delle inevitabili ed improvvise fluttuazioni di potenza che le caratterizzano. I cicli turbogas a CO₂ supercritica (che operano ad elevata pressione, circa 300 bar) possono rappresentare un'ottima soluzione al problema della sostenibilità delle fonti di energia rinnovabile. Infatti, tali sistemi, nella loro configurazione semi-chiusa, in cui l'ossi-combustione di gas naturale (o idrogeno, od altre miscele idrogenate) è la fonte di calore interna al ciclo, sembrano avere le caratteristiche di load-flexibility necessarie per stabilizzare la rete elettrica. Inoltre, nella loro configurazione chiusa, in cui il calore proviene dall'esterno tramite scambiatori, bene si prestano per aumentare la flessibilità degli attuali cicli combinati, sostituendo la sezione vapore. Non sono infine da trascurare le ricadute nel settore dei trasporti navali.

Le attività svolte nella presente attività puntano all'ulteriore sviluppo del codice di simulazione numerica HeaRT, di proprietà ENEA, al fine di renderlo in grado di investigare gli effetti dell'alta pressione e della forte diluizione con CO₂ sui regimi di combustione, per giungere alla definizione di una strategia di combustione in condizioni supercritiche (300 bar) ed alla progettazione di una piastra di iniezione per l'ossi-combustore di una macchina turbogas a CO₂ supercritica. Le attività svolte si possono classificare in tre gruppi: 1. ottimizzazione dei moduli software già implementati (nella precedente annualità) nel codice HeaRT per il calcolo delle proprietà di gas reali; 2. implementazione di schemi numerici spaziali per il controllo delle oscillazioni; 3. validazione della modellistica implementata in HeaRT.

In particolare, sono state ottimizzate le routine già implementate relative al modello di Peng-Robinson. La strategia basata sulle 'departure functions' è stata utilizzata per calcolare i valori parziali molari dei volumi e delle entalpie delle singole specie chimiche trasportate, con preventivo calcolo dei loro volumi parziali molari. Questa procedura ha sostituito la precedente basata invece sul calcolo dei potenziali chimici delle singole specie, molto dispendiosa dal punto di vista del calcolo. Inoltre, il modello di Peng-Robinson è stato esteso implementando la versione ai volumi traslati, per aumentarne l'accuratezza nel calcolo della densità dei liquidi a temperature criogeniche.

Nella precedente annualità alcuni test avevano evidenziato la poca robustezza degli schemi di integrazione spaziale implementati in HeaRT, nel caso delle simulazioni di flussi ad alta pressione. Poca robustezza di uno schema significa tendenza a far nascere oscillazioni spaziali spurie nella soluzione. Per evitare la nascita di oscillazioni numeriche spurie dovute ai forti gradienti di densità, sono stati implementati diversi schemi spaziali: lo schema AUSM per i termini convettivi di tutte le equazioni trasportate è stato esteso implementando l'interpolatore WENO al terzo ordine e un interpolatore TVD di ordine più basso accoppiato a diversi limitatori di flusso. Per l'equazione di trasporto della quantità di moto, tali schemi sono stati anche resi ibridi, cioè, sulla base di un sensore locale che quantifica l'intensità dei gradienti spaziali, lo schema è in grado di passare automaticamente dal secondo ordine centrato a AUSM con WENO o TVD (lo schema diventa quindi automaticamente più diffusivo nelle zone con forti gradienti spaziali). E' stato anche implementato uno schema compatto al sesto ordine su tutti i termini (convettivi e diffusivi) delle equazioni di trasporto, computazionalmente più costoso ma con caratteristiche dispersive molto più interessanti e molto più accurato.

La modellistica, sia fisica sia numerica, implementata è stata validata in una prima fase con un problema monodimensionale che presenta contemporaneamente un'espansione, una discontinuità di contatto ed un urto: questo caso è usato comunemente per testare schemi numerici. Gli schemi sono poi stati testati con un mixing layer non reattivo metano/ossigeno a 100 bar, ed uno reattivo metano/ossigeno, sia a 1.5 sia a 150 bar. Infine, è stato simulato un caso di letteratura non reattivo significativo per le applicazioni: iniezione di un getto di azoto liquido in condizioni transcritiche con un getto coassiale di idrogeno gassoso. Tale caso è stato studiato sperimentalmente da Oswald ed è stato selezionato perché sono disponibili misure di confronto e perché rappresentativo per testare la robustezza degli schemi numerici per gli elevati gradienti spaziali che lo caratterizzano. La simulazione numerica è stata eseguita mediante tecnica Large Eddy.

1 Introduzione

Oggi esistono diverse applicazioni di flussi ad alta pressione, condizione alla quale le proprietà del fluido possono differire da quelle di gas ideale: ad esempio, turbogas con cicli Rankine organici, turbogas a CO₂ supercritica (di importanza strategica per la stabilizzazione del sistema elettrico in uno scenario energetico dominato dalle rinnovabili), motori diesel a pressioni sempre più alte, ma anche motori a ossigeno liquido per applicazioni spaziali, canali di raffreddamento sia per turbogas che motori per lanciatori spaziali. Le pressioni di iniezione sono dell'ordine dei 100 bar (nei turbogas a CO₂ supercritica si arriva a 300 bar), al di sopra del valore critico dei comuni propellenti, come idrogeno, ossigeno e molti degli idrocarburi. Inoltre, contrariamente ai diesel, in cui l'iniezione avviene a circa 350 K, per i motori a razzo occorre considerare che la temperatura di iniezione dell'ossidante è criogenica, intorno ai 100 K o inferiore. Le non idealità termodinamiche, tra cui le forze intermolecolari attrattive e repulsive introducono gradi di libertà di cui occorre tenere conto per simulare più realisticamente il comportamento di tali fluidi.

La progettazione dei dispositivi necessari per le applicazioni sopra citate si basa sulle simulazioni fluidodinamiche (CFD). Tuttavia, eseguire simulazioni numeriche in tali condizioni richiede di affrontare problemi di accuratezza modellistica e di efficienza computazionale. Questo è dovuto principalmente alle drastiche variazioni delle proprietà del fluido in prossimità della linea di pseudo-ebollizione, che descrive la transizione dallo stato pseudo-liquido a quello pseudo-gassoso in condizioni supercritiche [1]. Per esempio, la densità, la viscosità ed i calori specifici sono fortemente non lineari al variare della pressione e della temperatura in tali condizioni. Di conseguenza, per eseguire simulazioni fluidodinamiche numeriche affidabili in prossimità del punto critico sono necessari modelli complessi sia per le proprietà di trasporto che per le equazioni di stato.

Le equazioni di stato cubiche, come quella di Soave-Redlich-Kwong (SRK) [2] e quella di Peng-Robinson (PR) [3], sono comunemente usate in CFD per la loro semplicità ed accettabile accuratezza sia per fluidi mono-componente che per miscele. E' da sottolineare che soprattutto per le simulazioni computazionalmente molto onerose, l'aspetto prestazionale ha un'importanza analoga a quella dell'accuratezza del modello adottato per l'equazione di stato. Questo significa che il modello deve essere relativamente accurato ed al tempo stesso abbastanza semplice da richiedere un basso sforzo di calcolo. Occorre anche osservare che le equazioni di stato cubiche hanno problemi di accuratezza in certe condizioni: ad esempio, il modello di Peng-Robinson non è accurato, devia cioè dai dati di riferimento del NIST, in condizioni criogeniche, mentre quello di Soave non lo è in prossimità del punto critico [4].

Per superare tali limitazioni ed estendere il campo di applicazione delle equazioni di stato cubiche, Martin ha introdotto il concetto della traslazione del volume [5], che consiste nel traslare lo stato termodinamico lungo l'asse del volume mantenendo costanti la temperatura e la pressione per migliorare l'accuratezza del calcolo della densità. Il concetto della traslazione del volume ha ripercussioni anche nel calcolo delle proprietà termodinamiche "caloriche", quali l'energia interna molare, l'entalpia e l'entropia, e quindi la traslazione del volume va correttamente inclusa nel loro calcolo per avere un modello termodinamicamente consistente.

Quanto detto giustifica le attività della presente annualità. Per aumentare l'efficienza del calcolo, sono state ottimizzate le routine relative al modello di Peng-Robinson già implementate lo scorso anno. In particolare, la strategia basata sulle 'departure functions' è stata utilizzata per calcolare i valori parziali molari dei volumi e delle entalpie delle singole specie chimiche trasportate, con preventivo calcolo dei loro volumi parziali molari. Questa procedura ha sostituito la precedente basata invece sul calcolo dei potenziali chimici delle singole specie, molto dispendiosa dal punto di vista del calcolo. Per migliorare l'accuratezza del modello fisico, soprattutto nel calcolo della densità dei liquidi a temperature criogeniche, l'equazione di stato cubica di Peng-Robinson è stata estesa implementando la versione ai volumi traslati.

Infine per aumentare la robustezza degli schemi di integrazione spaziale implementati in HeaRT, cioè ridurre la tendenza a far nascere oscillazioni spaziali spurie nella soluzione dovute ai forti gradienti di densità e di proprietà caloriche e di trasporto tipiche delle simulazioni di gas reali, sono stati implementati diversi schemi spaziali: lo schema AUSM per i termini convettivi di tutte le equazioni trasportate è stato esteso implementando l'interpolatore WENO al terzo ordine e un interpolatore TVD di ordine più basso

accoppiato a diversi limitatori di flusso. E' stato anche implementato uno schema compatto al sesto ordine su tutti i termini (convettivi e diffusivi) delle equazioni di trasporto, computazionalmente più costoso ma con caratteristiche dispersive molto più interessanti e molto più accurato.

2 Gli Strumenti di Calcolo

Le simulazioni della presente attività sono state effettuate principalmente sulla piattaforma di calcolo CRESCO4 (Computational RESearch center on COMplex system), un cluster basato su architettura Linux x86-64, che ha fino a 4864 core; saltuariamente è stata anche adoperata la piattaforma CRESCO5 anch'essa basata su architettura Linux x86-64, che ha fino a 640 core. Il codice di calcolo adoperato è HearT, sviluppato dall'ENEA.

Le simulazioni sono state effettuate con il codice HearT, sviluppato da ENEA, in cui le equazioni comprimibili sono scritte in forma conservativa e risolte con una formulazione "staggered" delle variabili per migliorare le proprietà dispersive degli schemi numerici spaziali [6]. In particolare, il codice implementa un'integrazione spaziale alle differenze finite ed un'integrazione nel tempo al terzo ordine di tipo Runge-Kutta. Per il termine convettivo delle equazioni di trasporto degli scalari (densità, energia, frazioni massiche) e della quantità di moto è stato adottato lo schema AUSM [7] con interpolazione WENO [8] al terzo ordine; sono stati effettuati test anche con uno schema TVD di più basso ordine accoppiato a vari limitatori di flusso [8] e con uno schema compatto al sesto ordine [9].

I trasporti diffusivi includono: la legge di Fourier ed il termine legato alle entalpie delle singole specie ed alla diffusione delle specie stesse nel flusso di calore; la diffusione preferenziale, modellata con la legge di Hirschfelder e Curtiss, nel flusso diffusivo di massa. Le proprietà di trasporto sono accuratamente calcolate per mezzo della teoria cinetica. Esse sono tabulate, ad eccezione dei coefficienti di diffusione binaria, usando le routine fornite dai Prof. Ern e Giovangigli [10-12] nel caso di gas ideale. Le leggi di mescolamento di Wilke (per simulazioni di gas ideali), Mathur (per simulazioni di gas ideali), Hirschfelder e Curtiss (per simulazioni di gas ideali e reali), sono usate per stimare la viscosità, conducibilità ed i coefficienti di diffusione di massa. Per i gas reali, tutte le proprietà di trasporto e caloriche sono calcolate mediante le routine di REFPROP sviluppato dal NIST [13], opportunamente interfacciate ad HearT ed ottimizzate per ridurre il tempo di calcolo. I coefficienti di diffusione di massa sono invece calcolati con le stesse routine già implementate in HearT basate sulla teoria cinetica, che include la dipendenza dalla pressione.

La condizione al contorno di uscita è trattata come parzialmente non riflessiva con una costante di rilassamento di 0.27: il modello implementato (Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions) è quello esteso a gas reali e per trattare flussi reagenti con proprietà di trasporto variabili con la temperatura, la pressione e la composizione, ed in modo che risentano dell'effetto del rilascio di calore locale [14-17]. Per le condizioni al contorno di ingresso, HearT ha anche un generatore di turbolenza sintetica per produrre fluttuazioni turbolente di velocità [18].

Per le simulazioni di tipo Large Eddy è stato utilizzato il modello di turbolenza di Smagorinsky nella sua formulazione dinamica. Lo Schmidt turbolento è stato assunto pari a 0.7, mentre il Prandtl turbolento a 0.9.

3 Il Modello di Gas Reale: l'Equazione di Stato di Peng-Robinson

Affinchè un'equazione di stato possa descrivere sia il comportamento di un gas che di un liquido, deve essere almeno cubica rispetto alla grandezza volume. Un'equazione di stato per essere di tipo analitico può al massimo essere di quarto grado: in questo modo, date pressione e temperatura, questa equazione può essere risolta analiticamente rispetto al volume, piuttosto che numericamente.

Le equazioni di stato analitiche cubiche sono molto usate perché sono un buon compromesso tra accuratezza e costo computazionale. Si sottolinea che la forma cubica dell'equazione di stato differisce dall'equazione di stato per gas ideale perché considera alcune forze intermolecolari. La limitazione delle

classiche equazioni di stato cubiche è la scarsa accuratezza nell'intorno del punto critico, dove le varie funzioni termodinamiche hanno gradienti molto elevati o sono mal poste.

L'equazione di stato di Peng-Robinson [3] è tra le più usate in fluidodinamica computazionale. Poiché richiede solo il fattore acentrico ed i valori critici di pressione, temperatura e volume, è di facile implementazione per una varietà di specie chimiche; ha una soddisfacente accuratezza sia per liquidi compressi, che fluidi supercritici e gas ideali. Rispetto alla pure diffusa equazione di stato cubica di Redlich-Kwong [2], risulta più accurata grazie ad una più complessa dipendenza dalla temperatura. L'equazione può essere scritta sotto forma di pressione, p , o di fattore di comprimibilità, Z ,

$$p = \frac{R_u T}{V - B_m} - \frac{A_m}{V^2 + 2VB_m - B_m^2},$$

$$Z = \frac{V}{V - B_m} - \frac{V}{R_u T} \left(\frac{A_m}{V^2 + 2VB_m - B_m^2} \right),$$

dove A_m e B_m sono calcolate dalle proprietà critiche delle singole specie e sfruttando leggi di mescolamento per miscele. La grandezza B_m rappresenta il volume effettivo molecolare. Nelle espressioni sono evidenti due addendi: il primo gruppo modella la forza repulsiva tra le molecole; il secondo modella le forze attrattive a lungo raggio tra le molecole (forze elettrostatiche, forze di polarizzazione e di dispersione di London, ad esempio).

Alcune grandezze termodinamiche, come quelle che figurano nelle equazioni di stato (p ; T ; V) od il calore specifico a pressione costante nel caso ideale, C_p , sono misurabili. Molte altre grandezze (entalpia, energia interna, entropia, ...), talvolta definite "concettuali", non possono essere misurate direttamente ed in modo assoluto; se ne possono apprezzare solo le variazioni ricorrendo ad esperimenti e relazioni termodinamiche tra grandezze misurabili: sono funzioni di stato, che non dipendono dallo stato iniziale e finale della trasformazione.

Il modo più conveniente per valutare le variazioni delle proprietà "concettuali" in una trasformazione di un gas reale, consiste nel ricorrere ad un percorso artificiale, scelto perché richiede solamente un'equazione di stato che legghi pressione, volume, temperatura, ed il calore specifico a pressione costante. Nel particolare processo adottato il fluido in esame è trasformato da fluido reale (molecole interagenti) alla condizione (p_1 ; T_1) a fluido ideale (molecole non interagenti) alla stessa condizione (p_1 ; T_1); poi, il fluido ideale viene portato alla condizione (p_2 ; T_2); infine, è trasformato nuovamente allo stato reale, ma alla condizione (p_2 ; T_2). Tale percorso è conveniente perché possiamo valutare in modo semplice la variazione di una funzione di stato da (p_1 ; T_1) a (p_2 ; T_2) nel caso di gas ideale: infatti, non dipende dalla pressione ed occorre solo valutare il C_p alle due temperature T_1 e T_2 . La variazione relativa alla trasformazione da fluido reale a ideale, e viceversa, ad una data condizione (p ; T), è invece calcolata ricorrendo alle "departure functions". La "departure function" per una generica proprietà concettuale F , è definita come $F^d = F^{ig}(p; T) - F(p; T)$, essendo F^{ig} la proprietà in condizioni di fluido ideale. Le "departure functions" possono essere calcolate una volta definita l'equazione di stato [19].

3.1 Riduzione del Tempo di Calcolo: Calcolo dei Valori Molari Parziali

Nella precedente annualità i valori parziali molari dell'entalpia e del volume delle singole specie veniva calcolato mediante espressioni termodinamiche che coinvolgevano i potenziali chimici μ_i [20]:

$$H_i = -T^2 * d[\mu_i / T] / dT |_{p,n}$$

$$V_i = d[\mu_i] / dP |_{T,n}$$

Essendo il calcolo dei potenziali chimici molto oneroso, sono state implementate nuove espressioni basate sul concetto delle "departure functions" [19]. L'implementazione di tali espressioni ha consentito di ridurre il tempo di calcolo dei valori parziali molari dell'entalpia e del volume.

3.2 Miglioramento dell'Accuratezza: il Concetto della Traslazione di Volume

E' noto che l'equazione di stato di Peng-Robinson [3] tende a sovrastimare la densità in fluidi a temperatura inferiore a quella critica: questo tipicamente avviene nel caso di getti iniettati in condizioni criogeniche.

L'inaccuratezza delle equazioni di stato a due parametri è dovuta al fatto che i parametri A_m e B_m sono funzione delle sole temperatura critica e pressione critica; manca la dipendenza dal volume critico. Per questo motivo, se queste equazioni sono usate per stimare il volume critico, questo può essere molto diverso da quello misurato. Per superare tale limitazione, Martin ha introdotto il concetto della traslazione del volume [5]: il volume non traslato presente nell'equazione è traslato di una quantità V_s (volume shift) a temperatura e pressione costanti per migliorare l'accuratezza della densità dei liquidi. In base alla definizione del "volume shift" si definiscono tre tipi di metodi di complessità crescente:

1. V_s dipende solo dalle specie considerate;
2. V_s è funzione anche della temperatura;
3. V_s è funzione della temperatura e del volume non traslato.

Il metodo implementato in HeaRT è del tipo 1, in cui V_s è funzione delle sole specie chimiche. La grandezza V_s è stata introdotta nel calcolo di tutte le proprietà caloriche (energia interna, entalpia, entropia, calori specifici) per avere un modello di gas reale termodinamicamente consistente.

4 Schemi Numerici Spaziali per Aumentare Accuratezza e Robustezza

Nella precedente annualità alcuni test avevano evidenziato la poca robustezza degli schemi di integrazione spaziali implementati in HeaRT, nel caso delle simulazioni di flussi ad alta pressione modellati come un gas reale. Poca robustezza di uno schema significa tendenza a far nascere oscillazioni spaziali spurie nella soluzione. Per evitare la nascita di oscillazioni numeriche spurie dovute ai forti gradienti di densità, sono stati implementati diversi schemi spaziali: lo schema AUSM [7] per i termini convettivi di tutte le equazioni trasportate è stato esteso implementando l'interpolatore WENO [8] al terzo ordine e un interpolatore TVD [8] di ordine più basso accoppiato a diversi limitatori di flusso. Per l'equazione di trasporto della quantità di moto, tali schemi sono stati anche resi ibridi, cioè, sulla base di un sensore locale che quantifica l'intensità dei gradienti spaziali, lo schema è in grado di passare automaticamente dal secondo ordine centrato a WENO o TVD (lo schema diventa quindi automaticamente più diffusivo nelle zone con forti gradienti spaziali).

L'applicazione del Metodo dei Volumi Finiti, comporta la suddivisione dello spazio in un certo numero N di celle in ciascuna delle quali si assume un unico valore delle variabili conservate (quelle relative al centroide del volume). Tuttavia, tale suddivisione implica un problema che si manifesta tra le facce adiacenti di due celle contigue: le variabili conservate, infatti, assumono, in generale, un valore diverso a sinistra e a destra della faccia di separazione dei due volumi. Tali discontinuità potrebbero essere significative, come accade in corrispondenza di discontinuità di contatto o di fronti di fiamma in fiamme premiscelate. Un problema di questo tipo, connesso alla presenza di questa discontinuità, è un problema alla Riemann la cui risoluzione risulta necessaria per calcolare il vettore flusso di una variabile trasportata quale quantità di moto, frazione massica di specie chimiche o energia totale. L'individuazione della soluzione esatta del problema di Riemann è cosa molto complessa e costosa dal punto di vista computazionale, pertanto, si è scelto di ricorrere a solutori approssimati del problema di Riemann: il metodo WENO [8] e un metodo TVD [8] di più basso ordine inseriti in un approccio AUSM [7], applicato sia al termine convettivo dell'equazione di trasporto degli scalari che a quello della quantità di moto.

Approssimazioni più accurate delle derivate delle variabili f_i che compaiono nelle equazioni dei Navier-Stokes per flussi reattivi, possono essere ottenute a partire dalla seguente formula:

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = \frac{\beta}{2h} (f_{i+1} + f_{i-1}) + \frac{\gamma}{4h} (f_{i+2} + f_{i-2})$$

per $i=2, \dots, n-2$, con n i punti della griglia computazionale di spessore h . I coefficienti dello schema (alfa, beta, gamma) sono da determinare in modo che la precedente formula produca dei valori della derivata con il più alto ordine possibile rispetto alla griglia h . Ovviamente gli schemi alle differenze finite classiche corrispondono alla scelta $\alpha=0$ e consentono di calcolare in maniera esplicita l'approssimazione della derivata prima di f in un nodo di calcolo, mentre gli schemi compatti richiedono comunque la risoluzione di un sistema lineare dalle forma $\mathbf{Au}=\mathbf{f}$, con \mathbf{A} matrice $n \times n$ tridiagonale, \mathbf{u} il vettore delle derivate incognite negli n nodi di griglia, \mathbf{B} la matrice dei coefficienti beta e gamma e \mathbf{f} il valore della funzione di cui calcolare la derivata negli n nodi. Ovviamente la formula precedente della derivata compatta va completata con opportune relazioni nei nodi vicini al bordo fisico (nodi 1,2 e $n-1$ ed n), dissimmettizzandola [9]. A parità di ordine, gli schemi compatti presentano uno stencil più piccolo dei corrispondenti schemi alle differenze finite tradizionali. Inoltre tali schemi presentano altre caratteristiche positive, quali la minimizzazione dell'errore di fase che li rendono superiori [9,21].

4.1 Validazione degli schemi di basso ordine: WENO e TVD

Gli schemi numerici implementati sono stati validati con un test classico detto di SOD, e poi con simulazioni relative al mescolamento reattivo (mixing layer) di getti metano/ossigeno.

- Il caso test SOD.** Questo caso test [22] consiste nella simulazione monodimensionale di un'iniziale discontinuità nel campo di pressione. In particolare, il campo è inizializzato con velocità nulle, composizione (solo ossigeno) e temperatura (300 K) costanti, un salto con un fattore 10 nella distribuzione di pressione a $z=0.05$ m (150 bar e 15 bar). L'evoluzione temporale di questa condizione mostra un'onda di espansione propagare verso sinistra, una discontinuità di contatto e un urto propagare verso destra (Fig. 1). La simulazione è stata effettuata con gas reale adottando l'equazione di Peng-Robinson classica (senza il concetto della traslazione del volume). L'interpolatore TVD è stato testato con cinque limitatori di flusso [8]. Quello di van Albada è quello che ha dato la soluzione migliore tra i cinque, e maggiormente in accordo con la soluzione WENO. L'oscillazione presente immediatamente a valle di $z=0.05$ m è probabilmente dovuta alla discontinuità iniziale di pressione (da punto a punto, senza essere risolta nel campo iniziale). La soluzione esatta è colta dallo schema WENO, presentando però dei veri plateau nei tratti tendenzialmente orizzontali della figura.
- Mixing layer.** Il mixing layer bidimensionale simulato consiste in un getto centrale di metano a 100 m/s, immerso in una corrente di ossigeno a 25 m/s: entrambe le specie si trovano ad una temperatura di 300 K. Il campo relativo alla simulazione del mixing layer è inizializzato con i tre getti aventi un forte gradiente (nell'ordine, dal più grande al più piccolo, di energia totale, specie, e velocità) in corrispondenza delle due interfacce di separazione: il forte gradiente del campo iniziale è discretizzato e risolto con circa 10 punti di calcolo. Nella direzione del flusso sono state assunte condizioni di periodicità, che portano ad una evoluzione temporale del mixing layer simulato; nella direzione trasversale sono state assunte condizioni di uscita non riflessive. Sono state analizzate due condizioni di pressione: 1.5 e 150 bar.

La reazione chimica adottata consiste nel modello di chimica infinitamente veloce proposto nell'ambito dell'Eddy Dissipation Concept, in cui la reazione avviene appena i reagenti entrano in contatto [23] secondo la stechiometria della reazione globale del tipo

$$\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$$

La simulazione a pressione più bassa è stata effettuata con lo schema AUSM con interpolazione QUICK per i termini convettivi delle equazioni di trasporto degli scalari, e con uno schema centrato al secondo ordine per il termine convettivo dell'equazione di trasporto della quantità di moto.

La simulazione a pressione più alta si è dimostrata instabile con lo schema numerico adottato a pressione più bassa. La soluzione stabile è stata ottenuta con lo schema AUSM con interpolazione WENO, adottato ai termini convettivi di tutte le equazioni di trasporto; questo si è dimostrato superiore a quello con interpolazione TVD di più basso ordine, sia in termini di accuratezza

(presenza di oscillazioni spurie nel campo di temperatura, in particolare tendenza a valori inferiori ai 300 K di ingresso dei reagenti) che di robustezza.

Si riportano in Fig. 2 due campi istantanei di temperatura per i due casi a 1.5 e 150 bar simulati con LES Smagorinsky, che evidenziano la differente struttura di fiamma prodotta dai diversi livelli di pressione.

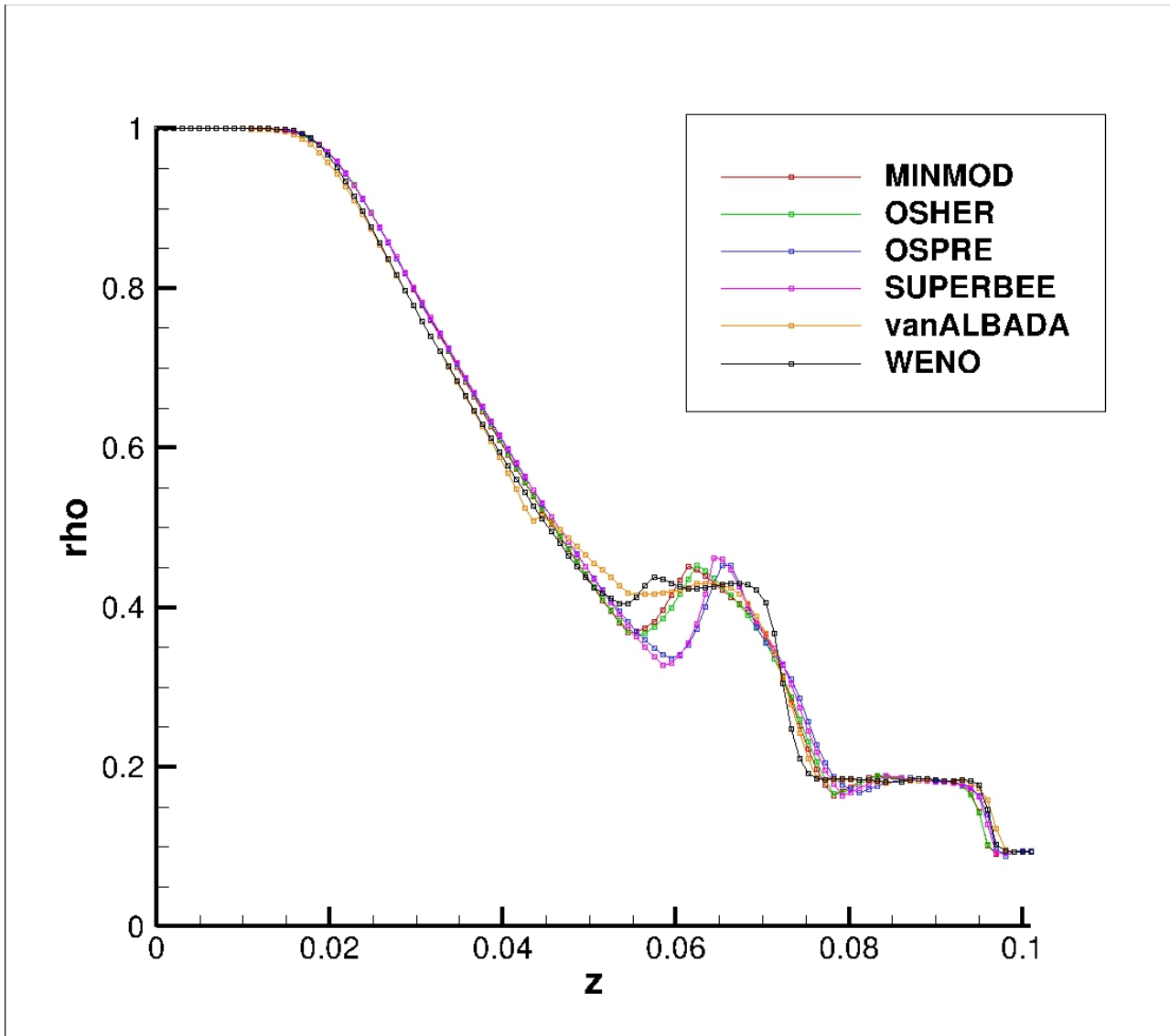


Figura 1. Confronto delle soluzioni relative al test case SOD [22] ottenute dopo 89.6 microsec con lo schema WENO e lo schema TVD accoppiato a diversi limitatori di flusso. La soluzione esatta, non riportata, consiste in una spezzata prossima alla soluzione WENO e con plateau nei tratti tendenti a variazioni nulle.

4.2 Validazione dello schema compatto di alto ordine

Lo schema compatto è stato validato simulando un mixing layer non reattivo di metano ed ossigeno alla pressione di 10 bar.

In Fig. 3 sono riportati i campi istantanei di densità e frazione massica del CH_4 . La stessa simulazione, effettuata con uno schema al secondo ordine centrato esplicito non risulta essere stabile, presentando nella zona della discontinuità di contatto tra metano ed ossigeno una serie di wiggles (oscillazioni) numeriche che rendono la soluzione praticamente inutilizzabile.

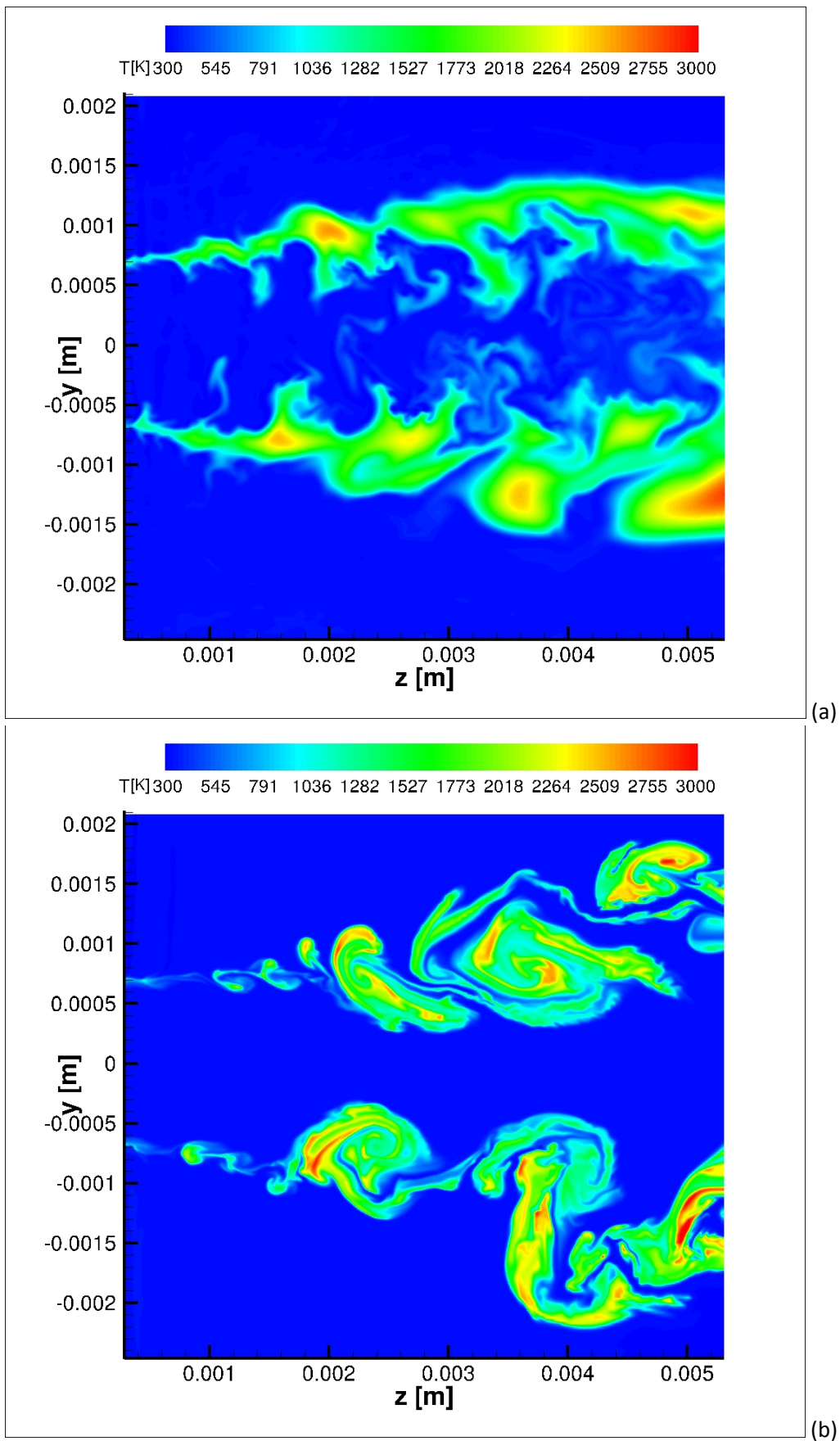


Figura 2. Campi istantanei di temperatura del mixing layer reattivo a 1.5 (a) e 150 (b) bar simulati con schemi a basso ordine.

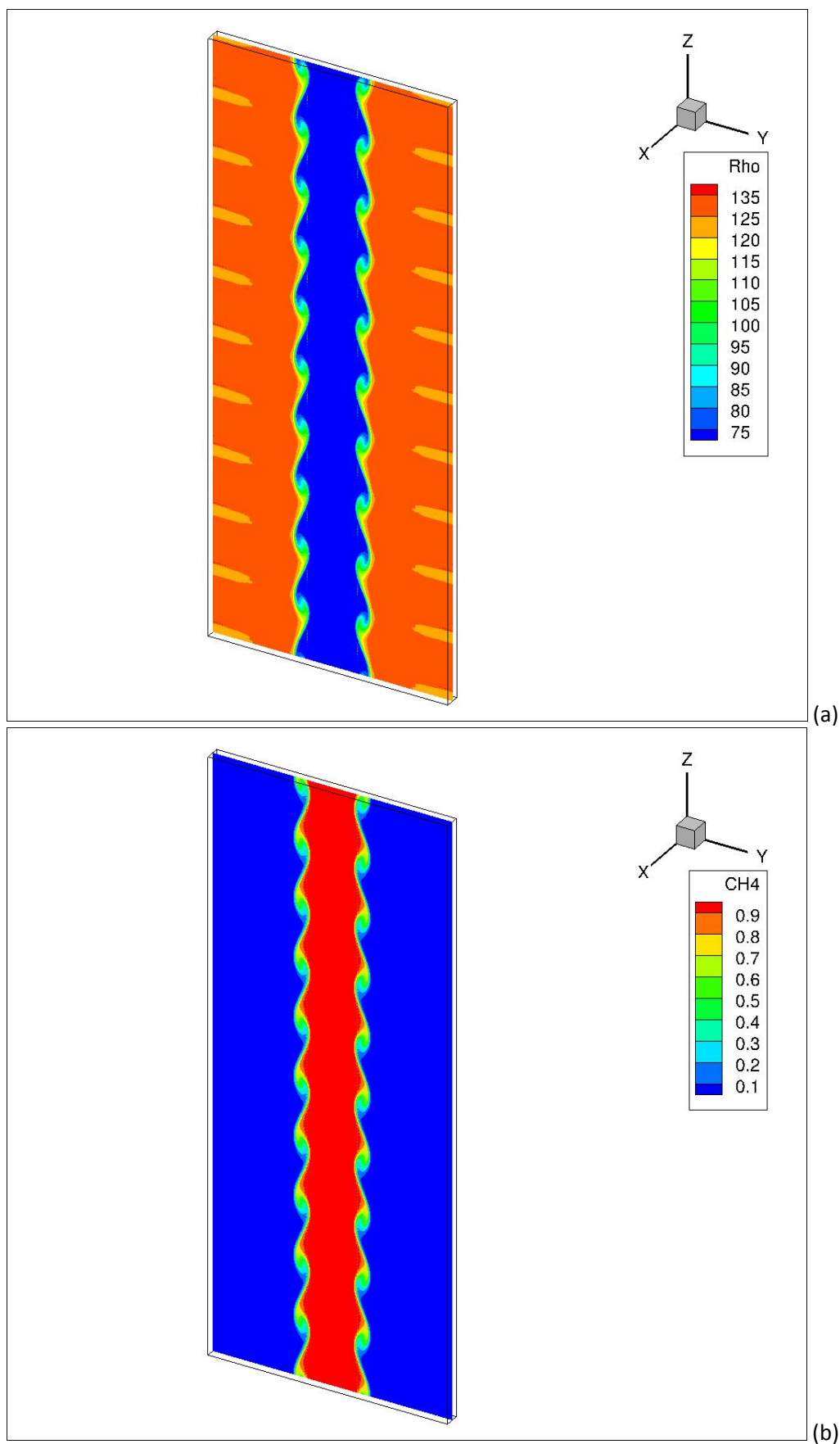


Figura 3. Campo istantaneo di un mixing layer non reattivo CH_4/O_2 alla pressione di 100 bar, simulato con schemi compatti. Densità [Kg/m^3] e frazione massica del metano.

5 Simulazione di un Getto Coassiale di Azoto Liquido e Idrogeno Gassoso

L'obiettivo finale dell'attività relativa alla simulazione di gas reali per questa annualità consiste nella simulazione di un caso test di letteratura per cui sono disponibili dati sperimentali e che sia rappresentativo per testare la robustezza degli schemi numerici adottati. La simulazione numerica è stata eseguita mediante tecnica Large Eddy.

Il caso test selezionato consiste nell'iniezione e mescolamento non reattivo di un getto di azoto liquido ed un getto coassiale di idrogeno gassoso. Questo caso è stato studiato sperimentalmente da Oswald [24]. Si tratta di un contenitore cilindrico del diametro interno di 10 cm, inizialmente riempito con azoto gassoso a 40 bar e 298.15 K. La lunghezza di tale contenitore non è specificata negli articoli sperimentali; per le simulazioni, essa è stata stabilita da altre simulazioni presenti in letteratura. Il contenitore ha un iniettore coassiale: il tubo di iniezione centrale per l'azoto liquido ha un diametro interno $D_i = 1.9$ mm, mentre l'iniettore coassiale di idrogeno gassoso ha il diametro inferiore di 2.4 mm e quello superiore di 3.4 mm. Nelle condizioni simulate (caso E4 negli articoli di letteratura) l'azoto liquido è iniettato in condizioni transcritiche ($T < T_c = 126.19$ K; $P > P_c = 33.978$ bar) a 118 K e 5 m/s, mentre l'idrogeno gassoso a 270 K e 120 m/s ($T > T_c = 33.180$ K; $P > P_c = 13$ bar). Considerando i valori di densità e viscosità di riferimento del NIST (calcolati con REFPROP) [13], il numero di Reynolds del getto centrale di azoto liquido è circa 115000, mentre quello del getto coassiale di idrogeno (basato sul diametro idraulico) è circa 50000. E' stato osservato che l'effetto fondamentale del getto coassiale di idrogeno è quello di intensificare il mescolamento. Le temperature sono state misurate con termocoppie nei canali di iniezione 20 mm a monte delle loro uscite (20 mm è proprio la lunghezza dei canali di ingresso simulata).

La Fig. 4 riporta il diagramma di fase liquido-vapore per la miscela H₂/N₂ a 40 bar [25]. La zona grigia rappresenta stati in cui la miscela è bifase. Le linee rappresentano una trasformazione isentalpica della miscela a 40 bar. In particolare, la linea corrispondente alla condizione E4 qui simulata attraversa ampiamente la regione bifase (caratterizzata da un'interfaccia in fase liquida e vapore), evidenziando un non trascurabile abbassamento della temperatura della miscela al di sotto dei 118 K di ingresso (effetto di gas reale). Quindi nel mixing layer turbolento tra i due getti ci sarà un'interfaccia molecolare tra l'azoto criogenico e l'idrogeno più caldo.

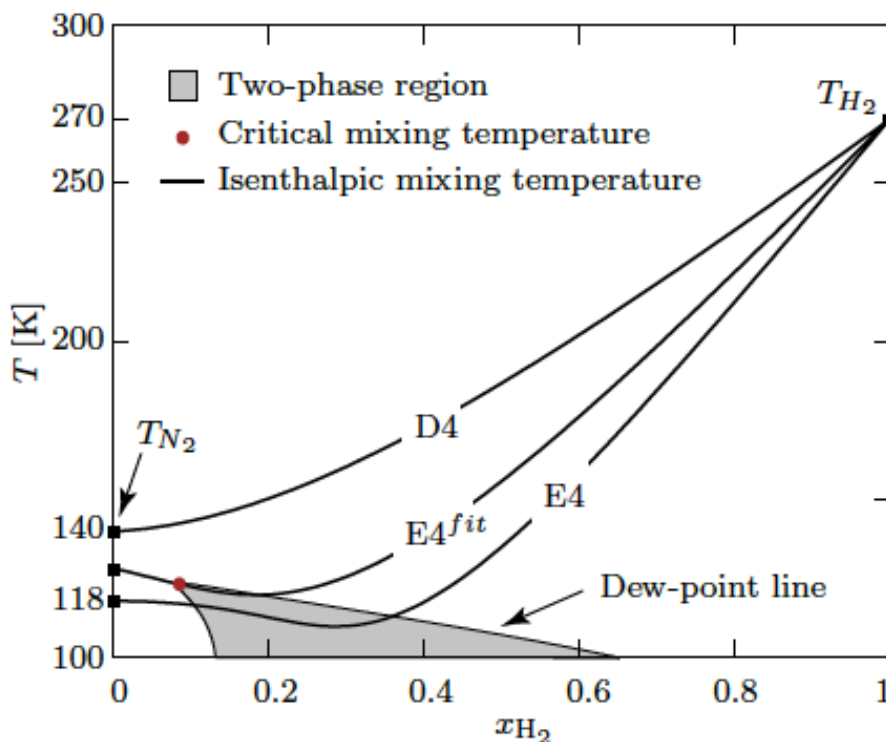


Figura 4. Diagramma di fase binario per la miscela H₂/N₂ risultante da calcoli di equilibrio liquido-vapore effettuati con l'equazione di stato di Peng-Robinson [25].

5.1 Il Set-Up della Simulazione Numerica

La griglia di calcolo adottata è bidimensionale cartesiana. Inizialmente è stato simulato solo un semipiano (dall'asse fino alla parete laterale del contenitore cilindrico), considerando i canali di iniezione per una lunghezza di 2 cm ed il contenitore cilindrico per una lunghezza di 10 cm. Con tale dominio, di circa 405000 nodi di calcolo, i due getti sono stati fatti evolvere per un tempo sufficiente a valutare gli effetti del mantello laterale del contenitore cilindrico sui getti. Dopo aver verificato che gli effetti di riflessione di onde acustiche sul mantello erano trascurabili, e che l'interesse nell'evoluzione dei getti riguardava una distanza inferiore ai 10 cm, il dominio di calcolo (del solo contenitore cilindrico) è stato rimpicciolito. È stato simulato anche il semipiano opposto in modo da cogliere meglio gli effetti di turbolenza lungo l'asse di simmetria; inoltre, è stata aumentata la risoluzione spaziale lavorando con circa 552000 nodi. La zona di mescolamento a valle degli iniettori coassiali si estende per 6 cm e copre 5 cm (2.5 cm per ogni semipiano) in direzione radiale.

Le pareti degli iniettori e quella alla base del contenitore cilindrico sono state assunte adiabatiche, impermeabili e viscose. L'uscita (tutto il contorno della zona di mescolamento, a parte quello con parete ed iniettori) è stata trattata come parzialmente non riflessiva con una costante di rilassamento di 0.27: il modello implementato (Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions) è quello esteso a gas reali e per trattare flussi reagenti con proprietà di trasporto variabili con la temperatura, la pressione e la composizione, ed in modo che risentano dell'effetto del rilascio di calore locale [14-17]. Per l'ingresso abbiamo adottato un generatore di turbolenza sintetica per produrre fluttuazioni turbolente di velocità del 10% della velocità media di ingresso, con lunghezze di correlazione spaziale di 0.4 mm nella direzione di flusso e di 0.2 mm nelle direzioni trasversali [18]. La turbolenza di ingresso è stata attivata solo dopo un primo sviluppo dei due getti; si è osservato che dopo l'attivazione della turbolenza all'ingresso, il getto di azoto liquido si è accorciato. Questo ha fatto dedurre l'importanza della turbolenza nella riduzione della distanza di cambiamento di fase del getto centrale di azoto liquido (pseudo-vaporizzazione).

5.2 Risultati

Essendo la simulazione ancora in corso, non è stato possibile effettuare il confronto diretto con i dati sperimentali. In particolare, i dati sperimentali disponibili in letteratura [24] consistono in profili di densità di azoto ed idrogeno misurate con tecnica Raman in due sezioni: una assiale, lungo l'asse del contenitore cilindrico, e l'altra radiale, in corrispondenza di $z=4$ mm (distanza dalla sezione di ingresso del contenitore cilindrico). Il confronto tra i profili sperimentali e quelli numerici verrà quindi effettuato in futuro. Tuttavia è stato possibile riportare alcune interessanti osservazioni, alcune attese teoricamente, altre rilevate anche sperimentalmente.

1. La simulazione predice gli effetti di gas reale attesi sulla base dell'analisi di mescolamento iso-entalpico a pressione costante riportata in Fig. 4 [25]: in particolare, i risultati mostrano un abbassamento della temperatura (di almeno 10 gradi) della miscela al di sotto dei 118 K di ingresso nella regione bifase (caratterizzata da un'interfaccia in fase liquida e vapore).
2. I risultati mostrano la nascita di vortici nello shear-layer relativo all'interfaccia liquido/gas: grazie a tali strutture l'idrogeno coassiale penetra nel getto di azoto criogenico (Fig. 5). Questo conferma quanto osservato sperimentalmente, cioè che l'effetto fondamentale del getto coassiale di idrogeno è quello di intensificare il mescolamento [24].
3. Le distribuzioni istantanee mostrano che, sorprendentemente, la densità dell'idrogeno che penetra il getto di azoto non diminuisce: questo effetto è stato anche osservato sperimentalmente [24] e numericamente [25], in scala molto simile (da circa 3.5 a 5.5 kg/m³). Secondo lo sperimentale Oswald [24] questo effetto è dovuto al trasferimento di calore dall'idrogeno all'azoto criogenico e alla diffusione dell'idrogeno nell'azoto stesso, con conseguente riduzione della temperatura dell'idrogeno ed innalzamento della sua densità. Secondo il numerico Matheis [25] invece, questo aumento della densità dell'idrogeno è un effetto di mescolamento di gas reale; anche le nostre simulazioni mostrano che tali aumenti di densità dell'idrogeno sono evidenti nelle zone di forte mescolamento e non in quelle di interfaccia (Fig. 5).

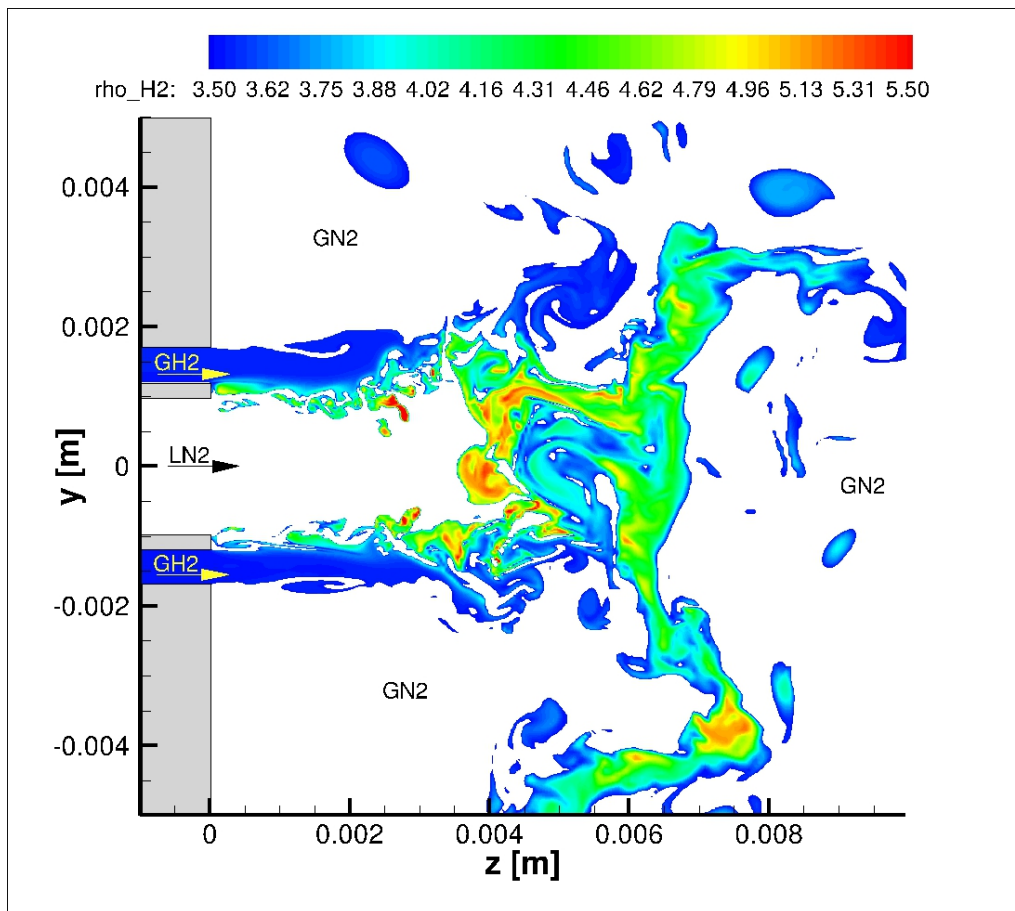


Figura 5. Distribuzione istantanea della densità di idrogeno.

4. Come in un altro lavoro numerico disponibile in letteratura [25], è stata osservata una grande differenza tra i valori sperimentali della densità dell'azoto liquido e quelli numerici in prossimità dell'iniezione, non dovuta al particolare approccio modellistico adottato per l'equazione di stato di gas reale. Si osserva che l'azoto liquido iniettato alla temperatura di 118 K e alla pressione di 40 bar ha una densità di riferimento del NIST, calcolata con il modello GERG 2004 [26], di 584 kg/m^3 , quella stimata con Peng-Robinson (standard) è di 608 kg/m^3 , e quella stimata con Peng-Robinson ai volumi traslati (adottato nella simulazione) è di 559 kg/m^3 . In tal caso, anche se la densità non è sovrastimata rispetto al dato NIST (come succede di solito con i liquidi), l'errore percentuale dei due modelli Peng-Robinson è lo stesso, 4%. Tale errore non giustifica la grande differenza tra i valori sperimentali e quelli numerici in prossimità dell'iniezione (vedi Fig. 6a, relativa ad un campo istantaneo durante l'avviamento del getto di azoto liquido). L'aver simulato anche i canali di iniezione non ha migliorato la soluzione in prossimità dell'iniezione rispetto agli stessi risultati numerici in letteratura in cui gli iniettori non sono stati simulati [25]: questo significa che nell'iniettore di azoto non succedono (o comunque non sono colti dalla nostra simulazione) fenomeni (variazioni di pressione e/o temperatura) tali da ridurre (di circa 160 kg/m^3) la densità dell'azoto liquido ai 400 kg/m^3 misurati sperimentalmente. Le simulazioni mostrano che la densità dell'azoto liquido è rimasta inalterata rispetto a quella imposta al contorno di ingresso nonostante le fluttuazioni turbolente del 10% (imposte sulla velocità) e le indotte variazioni del campo di pressione. Occorre sottolineare che le misure sperimentali Raman hanno un errore non trascurabile, somma di due contributi [24]: 1. la cross-section Raman è stata estrapolata alle condizioni del test, con un errore del 30% (in prossimità dell'ingresso dove la densità è più alta) nel caso peggiore di iniezione di azoto a 100 K; 2. i problemi di riflessione e "beam steering" causati dall'interfaccia LN_2/GH_2 (forti gradienti di densità) e riscontrati durante le misure aggiungono

ulteriore incertezza, non quantificata dagli sperimentatori [24], ma che potrebbe anche essere comparabile a quello di estrapolazione. Considerando che alle basse temperature, ed in particolare nel range 100-120 K, il gradiente (rispetto alle temperatura) della densità dell'azoto diminuisce (Fig. 6b) rispetto a temperature superiori, è plausibile assumere che l'errore del 30% a 100 K, legato all'estrapolazione dei dati di cross-section Raman, diminuisca solo leggermente per il caso a 118 K. In sostanza, è lecito considerare un errore del 40% (se non superiore) per le misure in prossimità dell'iniezione.

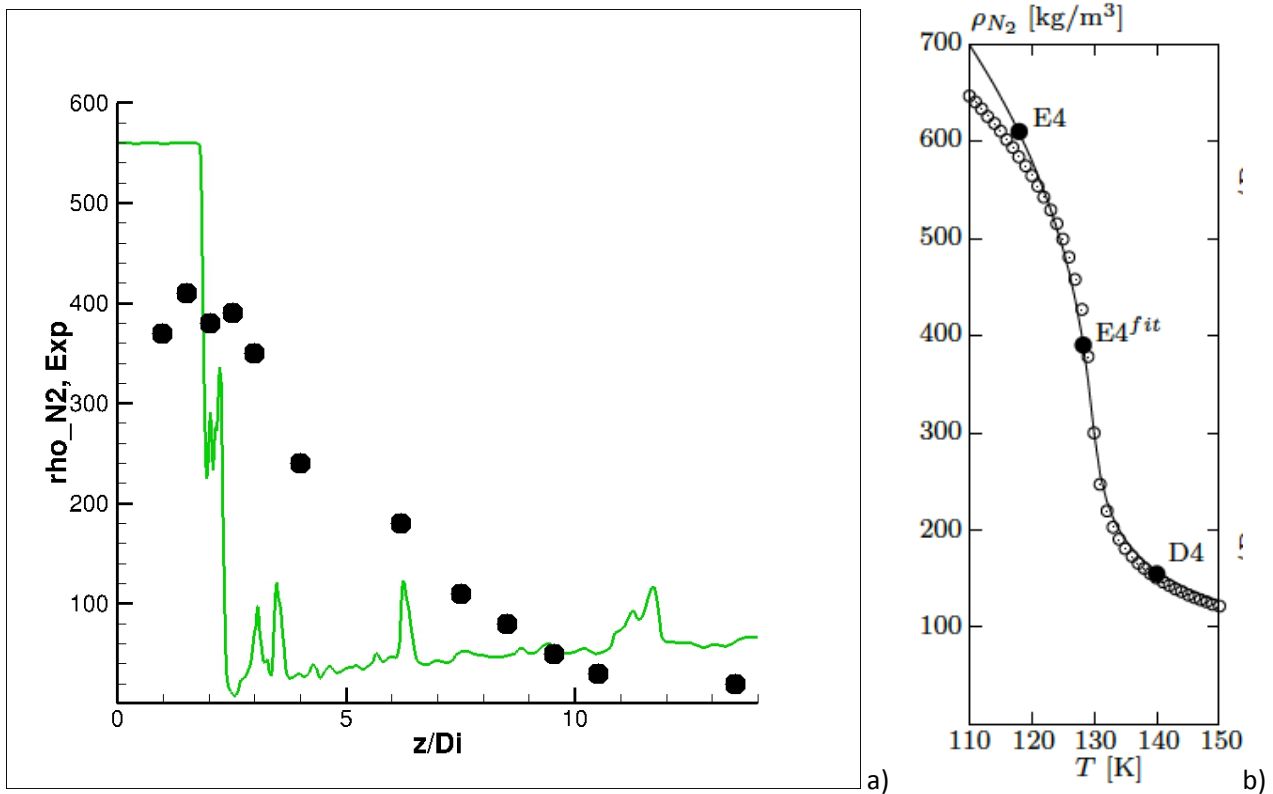


Figura 6. (a) Profilo della densità dell'azoto lungo l'asse in un istante durante l'avviamento del getto; la simulazione è relativa al caso E4 con l'equazione di stato di Peng-Robinson ai volumi traslati. (b) Andamento della densità dell'azoto in funzione della temperatura, fissata la pressione a 40 bar. I cerchi sono i dati NIST e la curva sono i dati ottenuti con l'equazione di stato di Peng-Robinson non ai volumi traslati[25].

5. A tutto ciò va anche aggiunto il fatto che la densità dell'azoto liquido è estremamente sensibile a piccole variazioni di temperatura: questo significa che anche un piccolo errore nella misura della temperatura di ingresso dell'azoto liquido comporta una non trascurabile variazione della densità (un innalzamento della temperatura di ingresso da 118 a 128 K è sufficiente ad avere la densità di circa 400 kg/m³ riportata nei lavori sperimentali, come osservato in Fig. 6b). La temperatura è stata misurata con una termocoppia 20 mm a monte dell'uscita dell'azoto dall'iniettore; di conseguenza, non è detto che sia l'effettiva temperatura di uscita. Considerando che le proprietà molecolari cambiano drasticamente nelle condizioni trans-/super- critiche rispetto alle subcritiche, ha senso investigare eventuali effetti di scambio termico tra l'azoto liquido, freddo, nel condotto centrale e l'idrogeno gassoso, caldo, nel condotto coassiale. L'analisi è stata effettuata con la relazione di Dittus-Boelter, valida strettamente nel range subcritico, che lega il numero di Nusselt a quelli di Reynolds e Prandtl:

$$Nu = 0,023 * Re^{0,8} * Pr^{1/3}.$$

Tendendo a sovrastimare lo scambio termico, tale relazione cambia in condizioni supercritiche, e soprattutto intorno al punto critico; negli anni sono state proposte diverse relazioni, alcune delle

quali si basano sulla forma dell'espressione di Dittus-Boelter e propongono coefficienti diversi ed anche fattori correttivi, derivati per fluidi specifici (spesso acqua o CO₂) [27-28]. L'analisi seguente con la relazione di Dittus-Boelter è quindi solo indicativa. Nelle condizioni considerate (Tab. 1), i coefficienti di scambio termico a parete sono molto alti (Tab. 2). Trattando l'iniettore come uno scambiatore di calore in equicorrente, ed assumendo come vere le temperature misurate 20 mm prima dell'uscita, si ha che l'azoto liquido si scalda fino a 124 K e l'idrogeno si raffredda fino a 254 K in quei soli 20 mm (Tab. 2). Il materiale considerato è acciaio, come riferito da Oswald in risposta ad una nostra richiesta via mail. L'innalzamento della temperatura dell'azoto liquido a 124 K porterebbe a una densità di 515 kg/m³ (NIST) all'ingresso del recipiente cilindrico, inferiore a quella di 584 kg/m³ imposta. In questo modo la densità predetta dalle simulazioni vicino all'iniezione si avvicinerebbe o addirittura entrerebbe nella zona di incertezza della misura (considerando l'errore del 40%). Non conoscendo esattamente il tipo di acciaio dell'iniettore, la conduttività termica è stata variata nel range tipico degli acciai, da 30 a 60 W/(m K): poiché la resistenza offerta dalla parete (molto sottile) è dieci volte più piccola di quelle dei due fluidi (Tab. 3), il valore della conduttività termica dell'acciaio risulta ininfluente per il calcolo delle temperature di uscita (Tab. 3).

p = 40 bar	T inlet [K]	rho [kg/m ³]	Cp [J/(kg K)]	Viscosity [kg/(m s)]	Conductivity [W/(m K)]	V [m/s]	m [kg/s]
N2	118	584,429	2849	0,00004841	0,0719	5	0,008281
H2	270	3,504	14310	0,00000843	0,1744	120	0,001914

Tabella 1. Dati usati per la valutazione dello scambio termico.

	Re	Pr	Nu	Wall therm. exch. coeff. [W/(m ² K)]	T outlet [K]
N2	114679	1,92	318,82	12073	124
H2	49859	0,69	116,57	20334	265

Tabella 2. Numeri caratteristici e coefficienti di scambio termico a parete.

	Conductivity [W/(m K)]	R in [K m ² /W]	R wall [K m ² /W]	R out [K m ² /W]	T N2 outlet [K]	T H2 outlet [K]
Acciaio 1	30	8,283 x 10 ⁻⁵	8,333 x 10 ⁻⁶	4,918 x 10 ⁻⁵	123,97	264,86
Acciaio 2	60	8,283 x 10 ⁻⁵	4,167 x 10 ⁻⁶	4,918 x 10 ⁻⁵	124,14	264,71

Tabella 3. Effetto della conduttività termica dell'acciaio: resistenze termiche e temperature finali nei due casi limite.

5.3 Un primo sguardo alla dinamica della turbolenza

Oltre alle precedenti osservazioni, abbiamo anche iniziato ad investigare la dinamica della turbolenza nelle condizioni trans- e super- critiche. In particolare, uno dei campi istantanei dell'evoluzione dei due getti è stato usato per investigare i meccanismi di produzione della turbolenza e alla base del mescolamento azoto liquido / idrogeno gassoso nelle condizioni transcritiche simulate. Il campo analizzato è quello associato alle distribuzioni di temperatura e densità riportate in Fig. 7. Il campo fluidodinamico è caratterizzato da gradienti spaziali di densità e pressione molto intensi, come dimostra ad esempio la Fig. 8. Il non allineamento dei gradienti di densità e di pressione, e la loro intensità, comporta che il termine baroclinico di produzione di vorticità è molto forte e localizzato, come evidenziato in Fig. 9, in cui la distribuzione è molto più spostata nel range positivo di produzione piuttosto che in quello di distruzione di vorticità. Infine, in Fig. 10 abbiamo rappresentato la distribuzione del modulo del prodotto vettoriale tra velocità e vorticità. Il gradiente di tale termine è pari alla somma del termine di trasporto convettivo di vorticità e del termine (di distribuzione) di vortex stretching. E' in sostanza il termine responsabile del trasferimento di energia

dalle grandi alle piccole scale turbolente nella cascata di Kolmogorov. In futuro sarà interessante capire se tale termine assume valori molto più alti rispetto al caso subcritico, e se quindi possa risultare in un trasferimento di energia più rapido verso le piccole scale, e di conseguenza in una pendenza maggiore di $k^{5/3}$ nel range inerziale dello spettro dell'energia cinetica turbolenta.

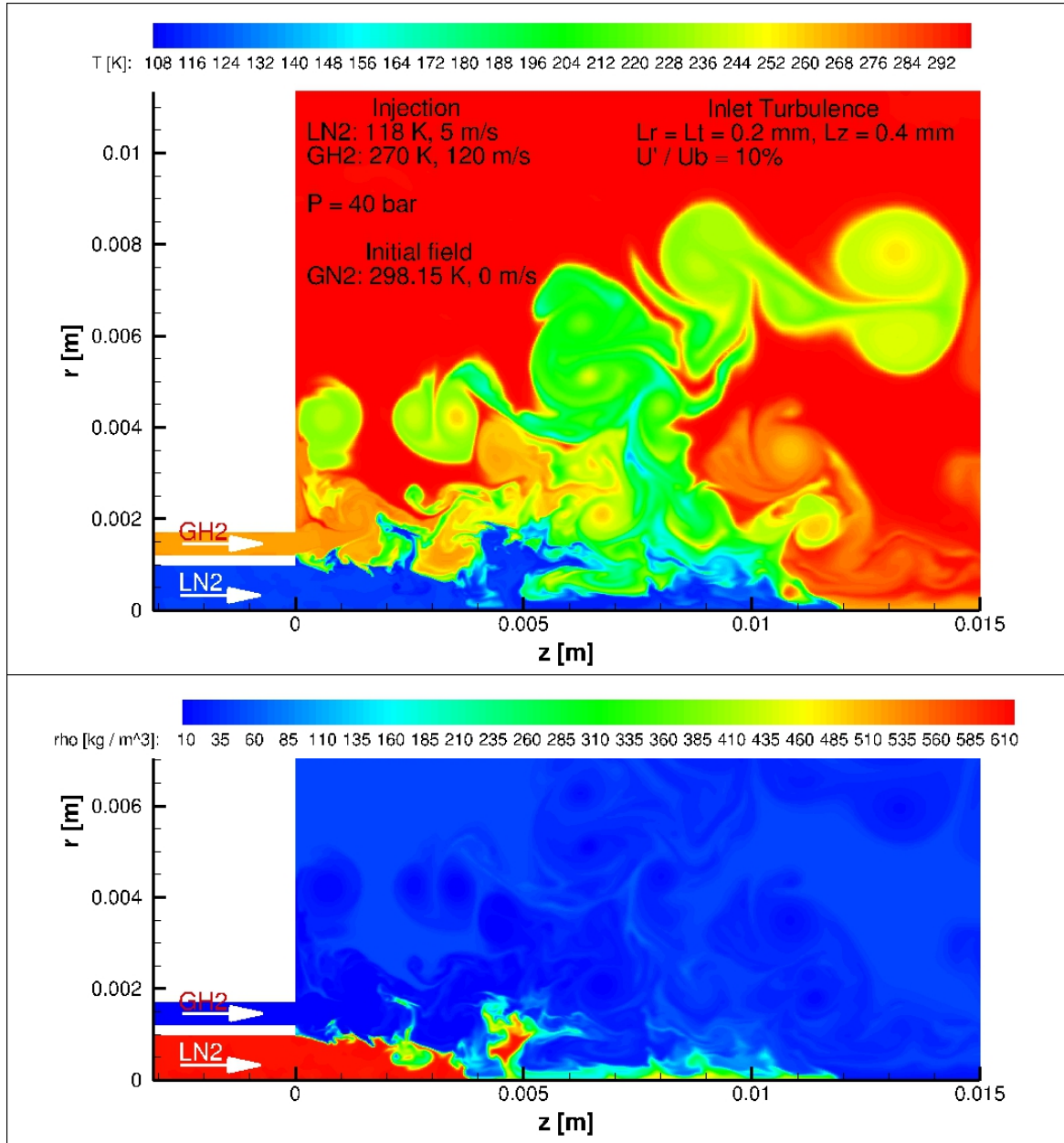


Figura 7. Campo istantaneo di temperatura e densità per il caso LN2GH2 ottenuti con l'equazione di Peng-Robinson non ai volumi traslati. L'aver utilizzato campi ottenuti con questo metodo non è influente in questa fase.

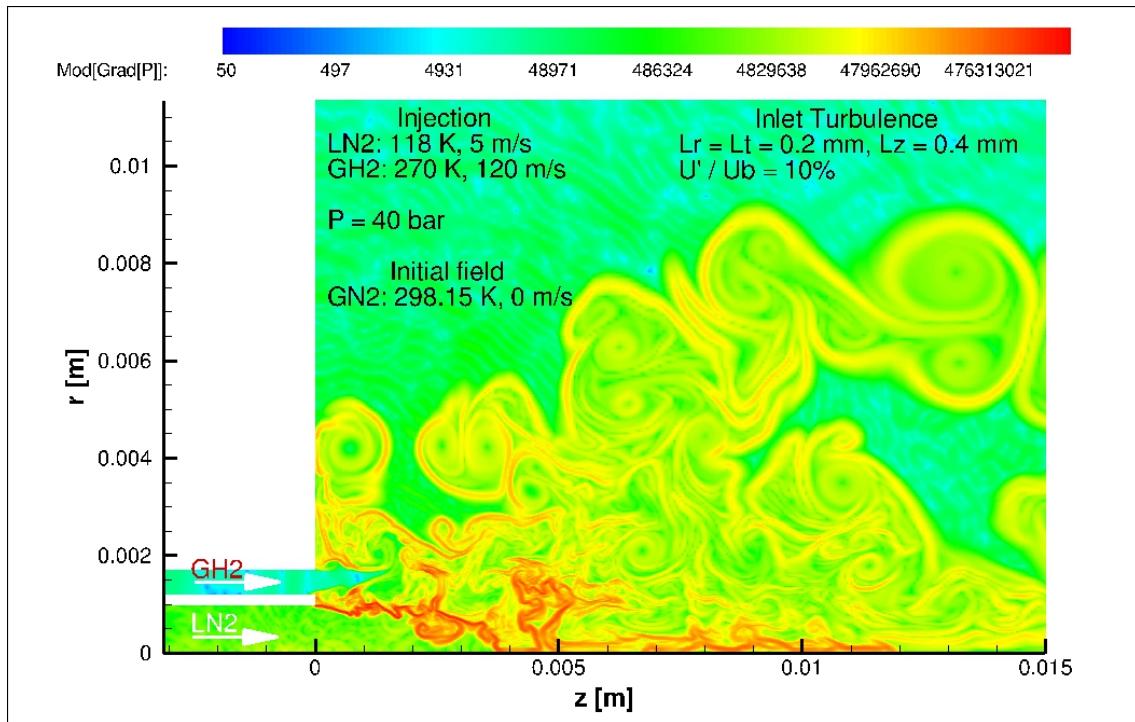


Figura 8. Campo istantaneo del modulo del gradiente di pressione per il caso LN2GH2.

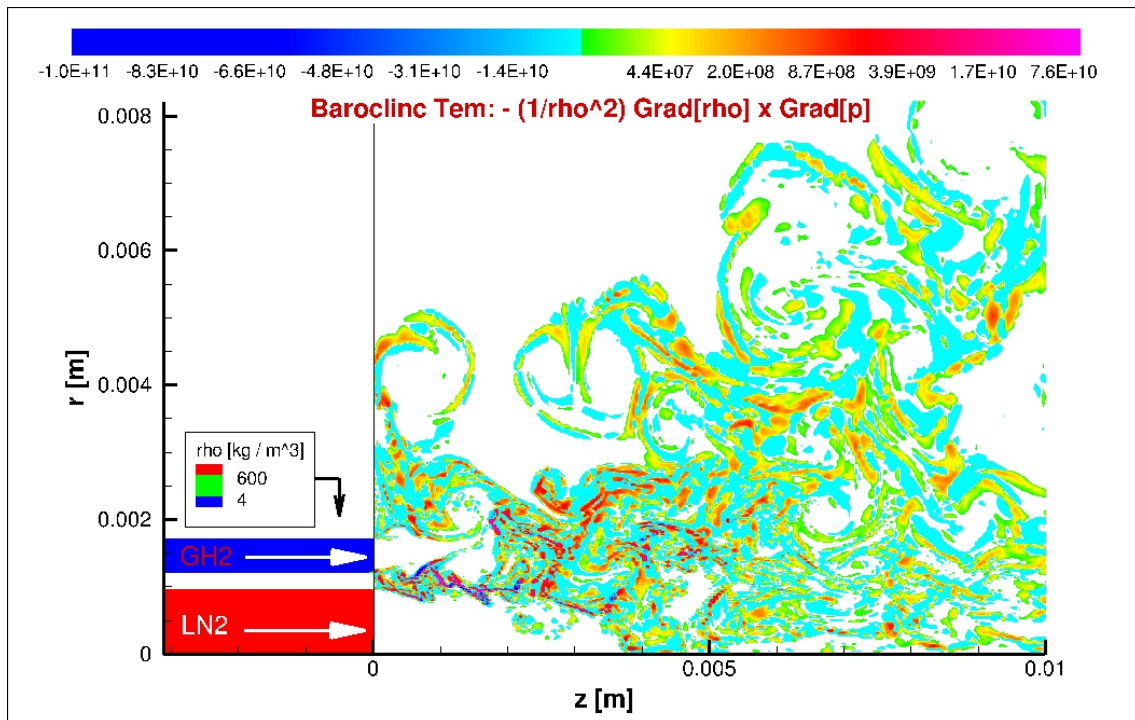


Figura 9. Campo istantaneo del termine baroclinico dell'equazione di trasporto della vorticità per il caso LN2GH2.

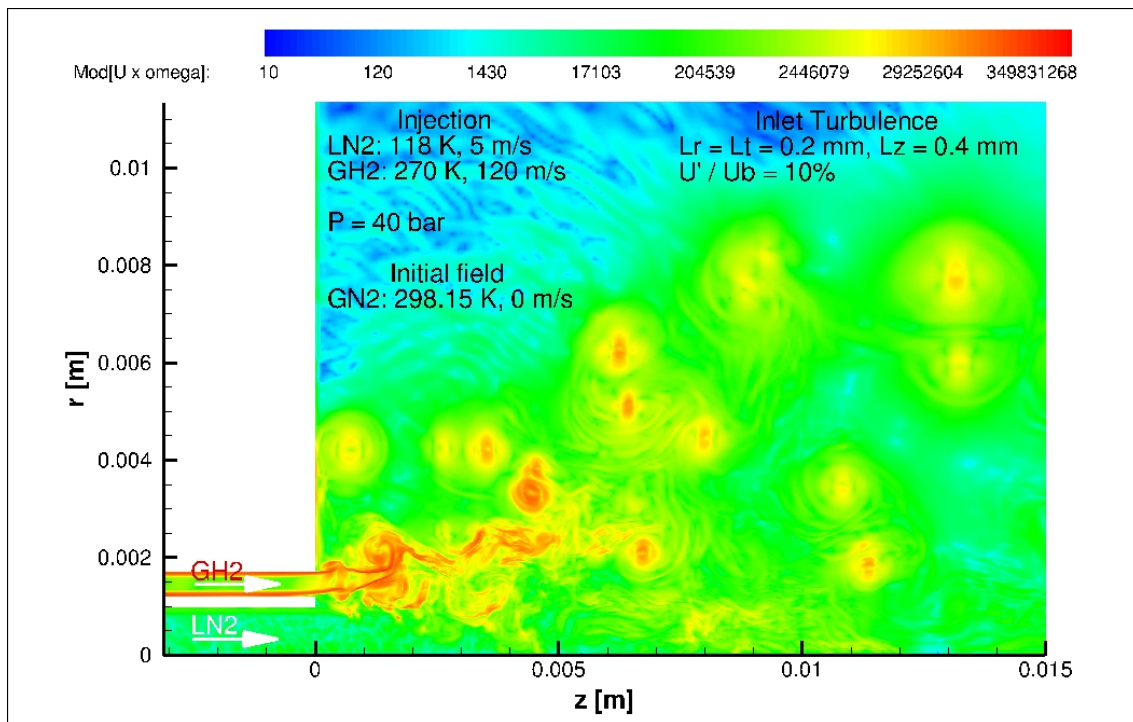


Figura 10. Campo istantaneo del termine responsabile del trasferimento totale di vorticità (che include sia il trasporto convettivo di vorticità sia la sua ridistribuzione dovuta al termine di vortex stretching) per il caso LN2GH2.

6 Conclusioni

In conclusione, con le attività svolte nella presente annualità il codice HeaRT è ora in grado di simulare flussi reattivi e non reattivi ad alta pressione modellando il comportamento di gas reale con l'equazione di stato di Peng-Robinson ai volumi traslati e non. Con i nuovi schemi numerici implementati è stato raggiunto un discreto livello di robustezza, che sarebbe bene migliorare soprattutto per le applicazioni con iniezione di ossigeno liquido. Nonostante le ottimizzazioni già implementate, il tempo per ottenere la soluzione è molto grande: qualcosa si può fare ancora sul lato implementativo, ma si ritiene anche opportuno investigare nuovi metodi di integrazione temporale che portino ad un aumento significativo del CFL e quindi del passo temporale richiesto. Dal punto di vista della modellistica di sottogriglia per Large Eddy Simulation, visto il rapido fiorire della letteratura, è necessaria una revisione degli attuali modelli implementati in HeaRT per estenderne l'operatività alle condizioni di alta pressione (gas reale).

La simulazione dell'iniezione di un getto di azoto liquido con un getto coassiale di idrogeno gassoso in un ambiente preventivamente riempito con azoto gassoso a temperatura ambiente ha permesso di mettere in evidenza alcuni aspetti messi in luce dalla sperimentazione, nonostante la simulazione non sia stata terminata a causa dei lunghi tempi di calcolo. Inoltre, la simulazione ha pure evidenziato aspetti non messi in luce dalla precedente letteratura, ma che sembrano di rilevanza fondamentale nelle applicazioni di flussi supercritici.

Abbiamo iniziato ad investigare la dinamica della turbolenza nelle condizioni trans- e super- critiche. Tale analisi ha mostrato che il non allineamento dei gradienti di densità e di pressione, e la loro intensità, comporta una forte e localizzata sorgente baroclinica di vorticità. Inoltre, l'analisi semplificata dello scambio termico nell'iniettore tra azoto liquido ed idrogeno, ha evidenziato che tale scambio non può essere trascurato. Può avere un effetto molto importante nel riscaldamento dell'azoto, che con pochi gradi, porterebbe la sua densità a valori comparabili con quelli misurati sperimentalmente (considerando gli errori di misura). Nell'immediato futuro, gli autori hanno dunque pianificato di implementare nel codice HeaRT anche il trasferimento di calore all'interno del solido (la parete che separa i due getti di azoto liquido ed idrogeno gassoso), in modo da predire la temperatura di uscita dei due getti.

7 Riferimenti bibliografici

- [1] Banuti D.T., "Crossing the Widom-line - Supercritical pseudo-boiling", *The Journal of Supercritical Fluids*, 98:12-16, 2015.
- [2] Soave G., "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state", *Chemical Engineering Science*, 27:1197-1293, 1972.
- [3] Peng D.Y., Robinson D.B., "A new two-constant equation of state", *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15:59-64, 1976.
- [4] Poling B., Prausnitz J., O'Connell J., "The properties of gases and liquids", McGraw Hill Professional, 2000.
- [5] Martin J.J., "Cubic equations of state-which?", *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 18(2):81-97, 1979.
- [6] Nagarajan S., Lele S.K., Ferziger J.H., *J. Comput. Phys.*, 191:392-419, 2003.
- [7] Wada Y., Liou M.-S., "An Accurate and Robust Flux Splitting Scheme for Shock and Contact Discontinuities", *SIAM J. Scientific Computing*, 18:633-657, 1997.
- [8] Toro E.F., "Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics" (2nd ed.), Springer-Verlag, 1999.
- [9] S.K. Lele, Compact Finite Difference Schemes with Spectral like Resolution, *Journal of Computational Physics* 103, 16-42 (1992).
- [10] Ern A. and Giovangigli V., "Optimized transport algorithms for flame codes". *Combustion Science and Technology*, 118:387-395, 1996.
- [11] Ern A. and Giovangigli V., "EGLib: A General-Purpose Fortran Library for Multicomponent Transport Property Evaluation". Manual of EGLib version 3.4, 2004.
- [12] Giacomazzi E., Picchia F.R., Arcidiacono N., "A Review on Chemical Diffusion, Criticism and Limits of Simplified Methods for Diffusion Coefficients Calculation", *Combustion Theory and Modeling*, 12(1):135-158, 2008.
- [13] NIST. Chemical kinetics database: <http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp>.
- [14] Poinot T.J. and Lele S.K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows", *J. Comput. Phys.*, 101:104-129, 1992.
- [15] Rudy D.H. and Strikverda J.C., *J. Comput. Phys.*, 36:55-70, 1981.
- [16] Polifke W. and Wall C., "Non-reflecting boundary conditions for acoustic transfer matrix estimation with LES", Center for Turbulence Research, Proceedings of Summer Program, Stanford, 2002.
- [17] Sutherland J.C. and Kennedy C.A., *J. Comput. Phys.*, 191:502-524, 2003.
- [18] Klein M., Sadiki A., Janicka J., "Digital filter based generation of inflow data for spatially developing Direct Numerical or Large Eddy Simulations", *J. Comput. Phys.*, 186:652-665, 2003.
- [19] Masquelet M.M., "Large-Eddy Simulations of High-Pressure Shear Coaxial Flows Relevant for H₂/O₂ Rocket Engines", PhD thesis, School of Aerospace Engineering, Georgia Institute of Technology, May 2013.
- [20] Denbigh K., "The principles of chemical equilibrium", IV Edition, Cambridge University Press, 1981.
- [21] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, Numerical Mathematics, Springer 2007.
- [22] Sod G.A., "A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws", *J. Comput. Phys.* 27:1-31, 1978.
- [23] Byggstoyl S., Magnussen B.F., "A model for flame extinction in turbulent flow", 4th Symposium on Turbulent Shear Flows, Karlsruhe, 1032-1038, 1983.
- [24] Oswald M., Schik A., Klar M., Mayer W., "Investigation of coaxial LN₂/GH₂-injection at supercritical pressure by spontaneous Raman scattering", AIAA 99-2887, 35th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, Los Angeles, California, June 20-24, 1999.
- [25] Matheis J., Muller H., Pfitzner M., Hickel S., "Large Eddy Simulation of cryogenic coaxial LN₂/GH₂ injection under supercritical pressures", 8C-5, Int. Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Melbourne, Australia, 30 June - 3 July, 2015.

- [26] Kunz O., Wagner W., *"The GER-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: An expansion of GERG-2004"*, Journal of Chemical Engineering Data, 57:3032–3091, 2012.
- [27] Yoo J.Y., *"The turbulent flows of supercritical fluids with heat transfer"*, Annual Review of Fluid Mechanics, 45:495-525, 2013.
- [28] Gupta S., Saltanov E., Mokry S.J., Piore I., Trevani L., McGillivray D., *"Developing empirical heat-transfer correlations for supercritical CO2 flowing vertical bare tubes"*, Nuclear Engineering and Design, 261:116-131, 2013.