

ALMA MATER STUDIORUM  
UNIVERSITA' DI BOLOGNA

SCUOLA DI INGEGNERIA E ARCHITETTURA  
Sede di Forlì

Corso di Laurea in  
INGEGNERIA AEROSPAZIALE  
Classe LM-20

TESI DI LAUREA  
in Sistemi di Propulsione Avanzati

STUDIO E RICOSTRUZIONE DELLE DISTRIBUZIONI  
GRANULOMETRICHE INTERNE AL GRANO  
IN MOTORI A PROPELLENTE SOLIDO

CANDIDATO  
Alessandro Jommi

RELATORE  
Prof. Fabrizio Ponti  
CORRELATORE  
Ph.D. Roberto Bertacin

CONTRORELATORE  
Prof. Alessandro Talamelli

Anno Accademico 2013/2014

Sessione II



# Abstract

The main purposes of this essay were to investigate in detail the burning rate anomaly phenomenon, also known as "Hump Effect", in solid rocket motors casted in mandrel and the mechanisms at the base of it, as well as the developing of a numeric code, in Matlab environment, in order to obtain a forecasting tool to generate concentration and orientation maps of the particles within the grain. The importance of these analysis is due to the fact that the forecasts of ballistics curves in new motors have to be improved in order to reduce the amount of experimental tests needed for the characterization of their ballistic behavior. This graduate work is divided into two parts. The first one is about bidimensional and tridimensional simulations on z9 motor casting process. The simulations have been carried out respectively with Fluent and Flow 3D. The second one is about the analysis of fluid dynamic data and the developing of numeric codes which give information about the concentration and orientation of particles within the grain based on fluid strain rate information which are extrapolated from CFD software.



# Indice

<b>1</b>	<b>Endoreattori a propellente solido</b>	<b>1</b>
1.1	Lavorazione del propellente e descrizione del processo di colaggio . . . . .	13
1.2	Comportamento reologico del propellente . . . . .	21
1.3	Modello reologico del propellente . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Metodi numerici per il trattamento delle interfacce</b>	<b>27</b>
2.1	Metodi moving grid . . . . .	28
2.2	Metodi front tracking . . . . .	28
2.3	Metodi particles-based . . . . .	28
2.3.1	Metodi DEM . . . . .	29
2.3.2	Metodi LBM . . . . .	30
2.4	Metodi Level Set (LS) . . . . .	31
2.5	Metodi VOF . . . . .	32
2.6	Metodo CLSVOF . . . . .	34
2.7	Metodo pseudo-VOF . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Modellistica fisica e numerica per il trattamento delle interfacce fluide</b>	<b>39</b>
3.1	Modello fisico . . . . .	39
3.1.1	Equazione di continuità . . . . .	39
3.1.2	Equazione di bilancio della quantità di moto . . . . .	40
3.2	Condizioni al contorno e condizioni iniziali . . . . .	41
3.2.1	Velocity inlet . . . . .	41
3.2.2	No-slip condition . . . . .	41
3.2.3	Pressure outlet . . . . .	42
3.2.4	Condizioni iniziali . . . . .	42
3.2.5	Condizioni di compatibilità . . . . .	42
3.2.6	Forma conservativa di una PDE . . . . .	43
3.3	Codici di simulazione . . . . .	44
3.3.1	Fluent . . . . .	44
3.3.2	Flow 3D . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Simulazioni numeriche</b>	<b>59</b>
4.1	Simulazione bidimensionale del processo di colaggio sul motore z9 . . . . .	62
4.2	Simulazione tridimensionale del processo di colaggio sul motore z9 . . . . .	74

<b>5</b>	<b>Codici di calcolo</b>	<b>85</b>
5.1	Codice delle concentrazioni . . . . .	85
5.2	Codice dell'orientamento . . . . .	93
5.3	Codice dell'orientamento 3D . . . . .	106
<b>6</b>	<b>Conclusioni e sviluppi futuri</b>	<b>111</b>
	<b>Appendice A</b>	<b>115</b>

# Elenco delle figure

1.1	Principali componenti di un endoreattore a solido . . . . .	2
1.2	Definizione $\Theta_r$ e $\Theta_z$ . . . . .	3
1.3	Burn-rate in relazione all'orientamento della particella . . . . .	3
1.4	Correlazione tra rateo di combustione ed orientamento particellare (direzione radiale $\Theta_r$ )	4
1.5	Correlazione tra rateo di combustione ed orientamento particellare (direzione assiale $\Theta_z$ )	4
1.6	Disposizione particellare all'interno del propellente ( $\beta = 1.3$ ) <b>(a)</b> Ordered (Standing) <b>(b)</b> Ordered (Lying) <b>(c)</b> Random . . . . .	5
1.7	Rateo medio di combustione per le tre disposizioni <b>(a,b,c)</b> al variare del parametro $\beta$ . . . . .	5
1.8	Distribuzione del rateo di trasferimento del calore (p=100 atm, AP/HTPB: 70/30 e $d_{AP}=200 \mu m$ ). . . . .	7
1.9	Distribuzione del rateo di trasferimento del calore (p=50 atm, AP/HTPB: 70/30 e $d_{AP}=20 \mu m$ ). . . . .	7
1.10	Temperatura e distribuzione del rateo di trasferimento del calore ad $1 \mu m$ sopra la superficie del propellente (p=100 atm, AP/HTPB: 70/30 e $d_{AP}=200 \mu m$ ). . . . .	8
1.11	Temperatura e distribuzione del rateo di trasferimento del calore ad $1 \mu m$ sopra la superficie del propellente (p=50 atm, AP/HTPB: 70/30 e $d_{AP}=20 \mu m$ ). . . . .	8
1.12	Aumento rateo di combustione al variare dell'angolo . . . . .	9
1.13	Ricostruzione grafica delle striature (a sinistra), vista dall'alto del processo di colaggio del propellente (a destra) . . . . .	10
1.14	Influenza della concentrazione di ossidante sull'impulso specifico, la temperatura e il peso molecolare dei gas di combustione . . . . .	16
1.15	Fasi di lavorazione di un endoreattore a solido . . . . .	17
1.16	Descrizione apparato per il colaggio a baionetta . . . . .	18
1.17	Descrizione apparato per il colaggio in pressione (sistema di pressurizzazione meccanica con pistone) . . . . .	19
1.18	Descrizione apparato per il colaggio nel vuoto . . . . .	20
1.19	Formulazione dei propellenti utilizzate per la caratterizzazione reologica . . . . .	22
1.20	Viscosità delle due formulazione in funzione dello shear-rate rate ( $\square$ ) formulazione con HTPB ( $\circ$ ) formulazione con HMX . . . . .	22
1.21	Viscosità in funzione dello shear-rate (formulazione (68% AP 18% Al 14% HTPB)) . . . . .	23
1.22	Confronto comportamento Newtoniano e comportamento non-Newtoniano . . . . .	24
2.1	Rappresentazione dei nodi del metodo D2Q9 . . . . .	30

---

2.2	Stencil a nove punti . . . . .	35
2.3	Posizione dell'interfaccia nella cella $i,j$ . . . . .	36
2.4	Diagramma a blocchi del metodo CLSVOF . . . . .	37
3.1	Getto di propellente in colata (il colore azzurro testimonia l'avvenuto mescolamento tra l'aria ed il propellente, fenomeno che nella realtà non si verifica) . . . . .	45
3.2	Settaggio pannello generale . . . . .	46
3.3	Controllo unità di misura . . . . .	46
3.4	Scelta dei modelli da utilizzare . . . . .	47
3.5	Impostazione valori di densità e viscosità . . . . .	47
3.6	Impostazione condizioni al contorno . . . . .	48
3.7	Impostazione condizioni operative . . . . .	48
3.8	Setting metodi numerici di discretizzazione . . . . .	49
3.9	Setting parametri di sottorilassamento . . . . .	50
3.10	Setting metodi numerici di discretizzazione . . . . .	51
3.11	Inizializzazione "volume fraction" sulla colonna di colata . . . . .	51
3.12	Inizializzazione valore di velocità sulla colonna di colata (pari alla velocità all'inlet) . . . . .	51
3.13	Impostazione passo temporale . . . . .	52
3.14	Impostazione tipologia componente e sotto componente . . . . .	54
3.15	Impostazione mesh . . . . .	55
3.16	Impostazione modelli fisici . . . . .	55
3.17	Impostazione proprietà del materiale . . . . .	56
3.18	Impostazione condizioni al contorno . . . . .	56
3.19	Impostazione metodi numerici . . . . .	57
4.1	Caratteristiche motore Z9 . . . . .	59
4.2	Configurazione lanciatore VEGA . . . . .	60
4.3	Struttura camera di combustione z9 (vista prospettica) . . . . .	60
4.4	Struttura camera di combustione motore z9 (vista dall'alto) . . . . .	60
4.5	Rappresentazione bocche di colata . . . . .	61
4.6	Geometria 2D impiegata nelle simulazione . . . . .	62
4.7	Geometria tridimensionale equivalente . . . . .	62
4.8	Viscosità impasto in funzione del tempo . . . . .	64
4.9	Tabella viscosità nelle cinque colate . . . . .	64
4.10	Condizioni al contorno imposte per la simulazione . . . . .	65
4.11	Ingrandimento sulla zona dell'inlet . . . . .	65
4.12	Condizione di inizializzazione . . . . .	66
4.13	Mesh serbatoio completo . . . . .	67
4.14	Infittimento mesh sulla zona limitrofa alla colonna di colata . . . . .	67
4.15	Simulazione 1 <sup>a</sup> Colata ( $t=1.5s$ ) . . . . .	68

---

4.16	Simulazione 1 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=24s)	68
4.17	Simulazione 1 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=43s)	68
4.18	Simulazione 1 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=49s)	68
4.19	Simulazione 2 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=50s)	69
4.20	Simulazione 2 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=54s)	69
4.21	Simulazione 2 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=71s)	69
4.22	Simulazione 2 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=86s)	69
4.23	Simulazione 3 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=98s)	70
4.24	Simulazione 3 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=114s)	70
4.25	Simulazione 3 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=124s)	70
4.26	Simulazione 3 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=135s)	70
4.27	Simulazione 4 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=143s)	71
4.28	Simulazione 4 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=150s)	71
4.29	Simulazione 4 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=163s)	71
4.30	Simulazione 4 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=175s)	71
4.31	Simulazione 5 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=187s)	72
4.32	Simulazione 5 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=191s)	72
4.33	Simulazione 5 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=198s)	72
4.34	Simulazione 5 <sup>a</sup> <i>Colata</i> (t=204s)	72
4.35	Campo di velocità al piede del getto (velocità in [ $\frac{m}{s}$ ])	73
4.36	Confronto volumi dei batch reali e quelli ottenuti tramite la simulazione	73
4.37	Porzione di motore considerata	74
4.38	Rappresentazione geometrica del motore z9	75
4.39	Rappresentazione geometria di simulazione	75
4.40	Mesh di calcolo (vista dall'alto)	75
4.41	Mesh di calcolo (ingrandimento in corrispondenza del fyn)	75
4.42	Condizione al contorno	76
4.43	Campo di velocità (ingrandimento al piede del getto)	77
4.44	Riempimento serbatoio (10s)	78
4.45	Riempimento serbatoio (500s)	78
4.46	Riempimento serbatoio (750s)	78
4.47	Riempimento serbatoio (1050s)	78
4.48	Campo di velocità confronto tra simulazioni 2D & 3D	79
4.49	Campo di velocità (sezione a 0° t=503s)	79
4.50	Campo di velocità (sezione a 5° t=503s)	79
4.51	Campo di velocità (sezione a 10° t=503s)	80
4.52	Campo di velocità (sezione a 15,5° t=503s)	80
4.53	Campo di velocità (sezione a 0.45m t=1065s)	80
4.54	Campo di velocità (sezione a 0.57m t=1065s)	80

4.55	Campo di velocità (sezione a 0.68m t=1065s)	80
4.56	Campo di velocità (sezione a 0.80m t=1065s)	80
4.57	Campo di velocità (sezione a 0.88m t=1065s)	81
4.58	Campo di velocità (sezione a 0.92m t=1065s)	81
4.59	Rappresentazione sezioni analizzate	81
4.60	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.45m t=1065s)	82
4.61	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.57m t=1065s)	82
4.62	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.68m t=1065s)	82
4.63	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.80m t=1065s)	82
4.64	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.88m t=1065s)	83
4.65	Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.92m t=1065s)	83
5.1	Rappresentazione punti di controllo	86
5.2	Interpolazione punti di controllo	88
5.3	Rappresentazione flussi particelle solide tra celle contigue	89
5.4	Profilo dei batch inizio 3 <sup>a</sup> colata	90
5.5	Concentrazioni inizio 3 <sup>a</sup> colata	90
5.6	Profilo dei batch inizio 4 <sup>a</sup> colata	90
5.7	Concentrazioni inizio 4 <sup>a</sup> colata	90
5.8	Profilo dei batch inizio 5 <sup>a</sup> colata	91
5.9	Concentrazioni inizio 5 <sup>a</sup> colata	91
5.10	Andamento medio concentrazione lungo il web	92
5.11	Corrispondenza tra angolo e fattore di alterazione	95
5.12	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=3) (j2=0,6 0,8 1)	96
5.13	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=12,75) (j2=0,6 0,8 1)	96
5.14	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=16) (j2=0,6 0,8 1)	97
5.15	Mappa RMS al variare dei valori di $ \dot{\gamma}_{ref} $ e di $n$	97
5.16	Andamento superfici di combustione (Funzione del tempo)	99
5.17	Andamento superfici di combustione (Funzione del web bruciato)	99
5.18	Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 privata del secondo contributo)	99
5.19	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=3) (j2=10,20,50)	100
5.20	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=12,75) (j2=10,20,50)	101
5.21	Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (j1=16) (j2=10,20,50)	101
5.22	Mappa RMS al variare dei valori $ \dot{\gamma}_{ref} $ ed $ \dot{\epsilon}_{ref} $	102
5.23	Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 completa)	103
5.24	Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 completa & calcolo orientamento interno al simulatore)	104
5.25	Simulazione 3D sezione sulla bocca di colata (j1=12,75) (j2=20)	105
5.26	Simulazione 3D sezione sulla bocca di colata (j1=16) (j2=20)	105

---

5.27	Simulazione 2D allo stesso livello del 3D (j1=12,75) (j2=20)	105
5.28	Simulazione 2D allo stesso livello del 3D (j1=16) (j2=20)	105
5.29	Rappresentazione terna relativa e terna fissa	107
5.30	Rappresentazione sezioni risultati orientamento 3D	108
5.31	Mappe orientazioni particellari codice 3D (sezione a 0°)	109
5.32	Mappe orientazioni particellari codice 3D (sezione a 16°)	109
5.33	Confronto funzione di Hump codice 3D (sezione a 0°)	109
5.34	Confronto funzione di Hump codice 3D (sezione a 16°)	109
A.1	Definizione di spazio fisico e spazio computazionale	115
A.2	Definizione volume di controllo	117
A.3	Rappresentazione griglia staggered	118
A.4	Rappresentazione volume di controllo	118
A.5	Interpolazione sui punti di frontiera	119
A.6	Valutazione gradiente nel centroide della cella	120
A.7	Rappresentazione griglia staggered	121
A.8	Rappresentazione vettore di skewness $\vec{m}$	122
A.9	Schema algoritmo SIMPLEC	126
A.10	Rappresentazione frazione volumetrica nella cella donatrice	127
A.11	Diagramma NVD e regione di limitatezza per formulazioni esplicite	129
A.12	Diagramma NVD del metodo HYPER-C	130
A.13	Definizione del vettore normale all'interfaccia $\vec{n}$ e del vettore $\vec{d}$ congiungente i centroidi delle celle A e D	131



# Elenco delle tabelle

1.1	Caratteristiche componenti propellenti compositi . . . . .	14
1.2	Tipiche formulazione di propellenti per ciascuna categoria . . . . .	15
3.1	Tabella riassuntiva vantaggi-svantaggi del software Fluent . . . . .	53
3.2	Tabella riassuntiva vantaggi-svantaggi del software Flow3D . . . . .	57



# Introduzione

Il presente lavoro di tesi è finalizzato all'analisi dei possibili fattori determinanti le anomalie di prestazione riscontrate sperimentalmente nei motori a propellente solido.

Tali anomalie vengono generalmente correlate a variazioni del rateo di combustione che, allo stato attuale, vengono modellate in ambito industriale attraverso l'introduzione di relazioni semi-empiriche (note con il nome di funzioni *HUMP* o *BARF*) all'interno dei normali algoritmi di simulazione balistica. Nel complesso dunque tali relazioni costituiscono un tentativo di compensare lo scostamento esistente tra l'andamento teorico del profilo di pressione e quello ottenuto per via sperimentale, senza però di fatto riuscire a cogliere la natura fisica del fenomeno che ne è alla base. I tradizionali parametri con cui viene caratterizzata la prestazione di un propellente (Legge di Vielle) fanno riferimento a grandezze globali e non tengono dunque conto delle inevitabili eterogeneità del rateo di combustione che possono originarsi a seguito del processo di riempimento del motore.

Tali fenomeni di eterogeneità vengono ulteriormente aggravati nei motori di grandi dimensioni, per via della modalità di colaggio multi-batch con il quale vengono costruiti. In tali casi il processo intero di colaggio viene infatti suddiviso in fasi intermedie in ciascuna delle quali viene riempita una certa frazione del motore. Per quanto in fase di produzione si tenti il più possibile di uniformare il processo di fabbricazione e di lavorazione degli impasti, le variabili in gioco sono molte (temperatura, umidità, tempo di lavorazione, dosaggio e caratteristiche dei componenti) e ciò comporta che ciascun impasto evidenzia delle proprie caratteristiche balistiche.

Comunemente, di tale diversità non viene tenuto conto nel calcolo dei parametri balistici, ma viene applicata una procedura di best-fitting sui dati sperimentali nel loro insieme.

Il progetto di questa tesi nasce dunque dalla richiesta dell'azienda AVIO S.p.A<sup>1</sup>, con cui si è collaborato in opera, di ricostruire le cause alla base del fenomeno di eterogeneità del rateo di combustione e al contempo sviluppare uno strumento numerico in grado di migliorare l'accuratezza nelle previsioni delle curve balistiche dei nuovi motori, limitando dunque la necessità di prove sperimentali. L'analisi si è focalizzata principalmente sul motore Zefiro 9 (o Z9), sviluppato e prodotto da Avio, che equipaggia il terzo stadio del lanciatore europeo Vega e che fin dal principio ha presentato alcune anomalie prestazionali nel corso delle prove sperimentali. A partire da simulazioni fluidodinamiche del processo di colaggio adottato dall'azienda, si è cercato di ricostruire in post-processing le possibili dinamiche capaci di generare difformità interne al propellente.

---

<sup>1</sup>azienda leader europea nel settore dei motori (principalmente a solido)

---

La presente dissertazione è stata complessivamente organizzata in cinque capitoli.

Nel primo capitolo verrà effettuata una breve descrizione dei motori a solido, del loro tipico layout e dei principali metodi di produzione dei medesimi. Verrà poi introdotta la problematica dell'eterogeneità del rateo di combustione ed infine verrà fatta una completa caratterizzazione del comportamento reologico del propellente.

Nel secondo capitolo verranno presentate le principali metodologie utilizzabili per il trattamento delle interfacce fluide di materiali immiscibili all'interno dei codici CFD, e verranno descritti i motivi che hanno condotto all'impiego della tecnica VOF (Volume of Fluid).

Nel terzo capitolo verranno descritti i modelli fisico-matematici alla base dei codici numerici impiegati e verrà fatto un confronto tra i due codici utilizzati mostrando le varie impostazioni usate per l'allestimento delle differenti simulazioni.

Nel quarto capitolo verranno presentati i risultati delle simulazioni numeriche bidimensionali e tridimensionali condotte sulla geometria del motore Zefiro 9.

Infine, nel quinto capitolo verrà illustrato il funzionamento degli algoritmi numerici, realizzati in ambiente MatLab, volti a ricostruire, sulla base dei risultati delle simulazioni fluidodinamiche, le dinamiche particellari interne al propellente.

# Capitolo 1

## Endoreattori a propellente solido

Gli endoreattori a propellente solido (o Solid Rocket Motor SRM) sono dei motori nei quali il combustibile e l'ossidante risultano stoccati in forma solida in un'unica miscela. Tali motori sono caratterizzati da una grande semplicità costruttiva (se confrontati con altre tipologie come i motori a liquido o elettrici) la quale si traduce in termini di economicità produttiva ed estrema affidabilità. Oltre a ciò hanno il vantaggio di avere una buona manutenibilità e la caratteristica di poter essere stoccati anche per periodi relativamente lunghi (5 - 20 anni). Presentano peraltro elevati rapporti spinta/peso.

Gli svantaggi relativi a questi motori risiedono principalmente nel fatto che non sono riaccendibili e nell'impossibilità di regolarne la spinta.

In figura 1.1 vengono presentati le principali parti di un endoreattore a solido, che possono essere brevemente riassunte in:

- Un serbatoio esterno realizzato in lega leggera (es. titanio) o oggi giorno più di frequente in materiale composito.
- Un ignitore, ossia un dispositivo pirotecnico idoneo all'accensione del propellente stoccato nel serbatoio.
- Un ugello propulsivo utile all'espansione dei gas combusti e dunque alla generazione della spinta
- La protezione termica, posta in corrispondenza della gola dell'ugello, zona particolarmente critica per i fenomeni di erosione.
- Uno strato di isolamento termico, posto nella parte interna al case.
- Delle flange esterne al case del motore che vengono utilizzate per collegare i diversi stadi del lanciatore e per trasferire i carichi dinamici alla struttura esterna.
- La camera di combustione, costituita dalla parte cava del serbatoio una volta caricato con il propellente.

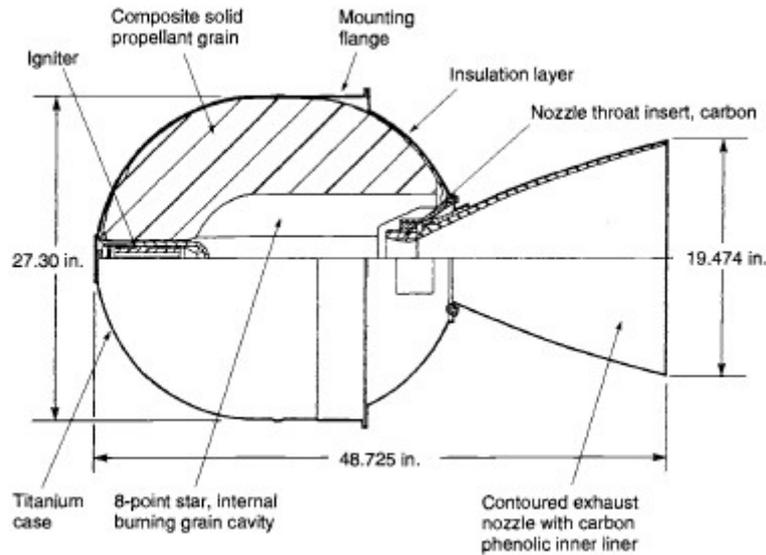


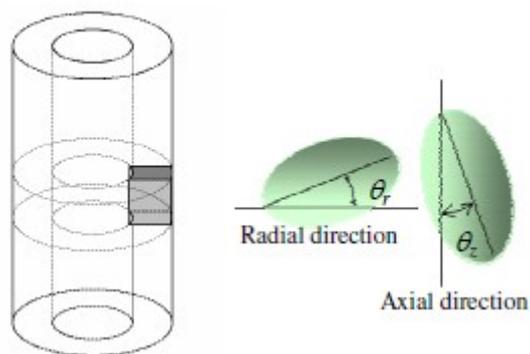
Figura 1.1: Principali componenti di un endoreattore a solido

Nell'ambito della presente dissertazione si è rivolta l'attenzione verso l'analisi del fenomeno di eterogeneità del rateo di combustione. Nella pratica infatti, se si escludono le variazioni spaziali di pressione o temperatura, la velocità con il quale il propellente brucia subisce delle variazioni locali in quanto in generale la composizione del propellente non è uniforme punto per punto all'interno del booster ma può variare in relazione a diversi fattori.

Da un'attenta ricerca bibliografica è emerso come le cause alla base del fenomeno potrebbero essere diverse e non è quindi immediato capire quale di queste sia predominante nella generazione delle anisotropie di combustione. Nel complesso dunque si è cercato di andare ad indagare più nel dettaglio i diversi aspetti cercando una metodologia di analisi, per ricavare delle informazioni sulle eventuali anisotropie, in relazione ai dati quantitativi sulla fluidodinamica del colaggio.

Di seguito verranno riproposti gli studi effettuati in merito al sopraccitato fenomeno che hanno poi portato alla formulazione delle diverse ipotesi:

- Una di queste ipotesi è quella relativa all'orientamento del particolato all'interno del propellente. Uno dei primi ricercatori ad aver indagato tale ipotesi è stato T. Shimada unitamente al proprio gruppo di ricerca. Da analisi condotte ai raggi X [24] su un campione di propellente, gli autori del citato articolo avevano osservato una certa correlazione tra orientamento interno delle particelle di AP rispetto alle coordinate radiale e assiale (figura 1.2) e la velocità del rateo di combustione medio.

Figura 1.2: Definizione  $\theta_r$  e  $\theta_z$ 

Nel dettaglio, immaginando la particella allungata come un corpo conduttivo, possiamo pensare che nel momento in cui essa offra al fronte di fiamma la direzione in cui è più allungata (si veda figura 1.3) essa sia in grado di trasferire calore più in profondità nel propellente dunque attivando la combustione di una maggiore porzione di grain ed innalzando localmente la velocità di combustione.

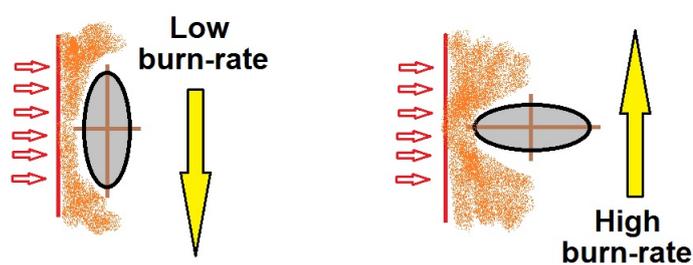


Figura 1.3: Burn-rate in relazione all'orientamento della particella

In figura 1.4 e 1.5 vengono mostrati i risultati degli studi condotti dagli autori sopracitati.

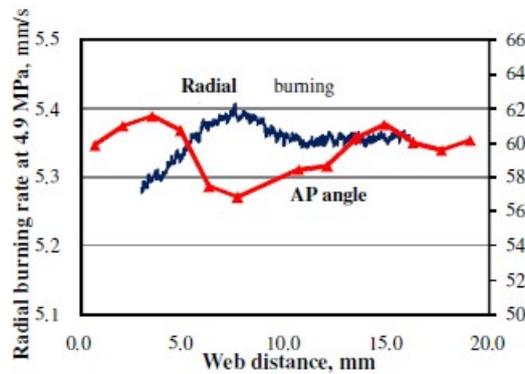


Figura 1.4: Correlazione tra rateo di combustione ed orientamento particellare (direzione radiale  $\Theta_r$ )

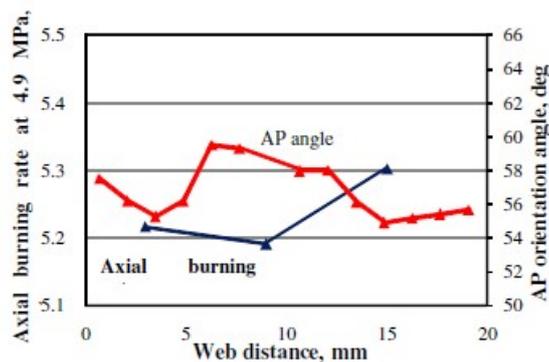


Figura 1.5: Correlazione tra rateo di combustione ed orientamento particellare (direzione assiale  $\Theta_z$ )

Ad ulteriore riprova di tale teoria si vuole citare un articolo [45] nel quale sono state condotte delle simulazioni numeriche DNS per lo studio della combustione di propellente composito con particolare attenzione rivolta all'analisi dell'effetto dell'orientamento particellare sulla combustione.

Le analisi numeriche sono state condotte su un campione virtuale di propellente composito (80% AP e 20% HTPB), delle dimensioni di 1.4x1.4x2mm. Si è supposto che le particelle di AP avessero forma di sferoide prolato. Si è presa una composizione di AP di tipo bimodale composto da particelle aventi diametro equivalente<sup>1</sup> di 200 e 15  $\mu m$ . Le simulazioni sono state effettuate per tre ipotetiche disposizioni del propellente (si veda figura 1.6) e per diversi valori del rapporto d'aspetto  $\beta$ <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Per diametro equivalente si intende il diametro della sfera avente pari volume alla particella ellissoidale  
<sup>2</sup> $\beta$  viene calcolato come rapporto tra semiasse maggiore e semiasse minore dello sferoide.

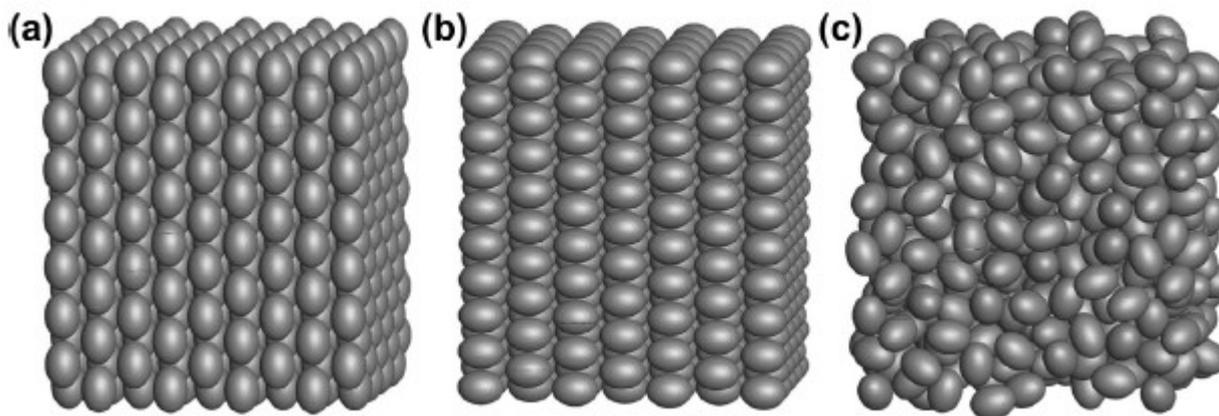


Figura 1.6: Disposizione particellare all'interno del propellente ( $\beta = 1.3$ ) (a) Ordered (Standing) (b) Ordered (Lying) (c) Random

I risultati di tali simulazioni sono visibili in figura 1.7, essi confermano in pieno gli studi condotti da Shimada et al., in particolar modo si vede che per la configurazione (a) nel quale le particelle hanno il semiasse maggiore parallelo alla direzione di regressione del grano sia complessivamente maggiore rispetto alla controparte (b), c'è tuttavia da notare che per quest'ultima disposizione vi sia un tendenziale aumento per valori di  $\beta > 1.3$ . In ultimo si vuole far notare che per la disposizione random, per valori moderati di  $\beta$ , il rateo si mantenga all'incirca costante.

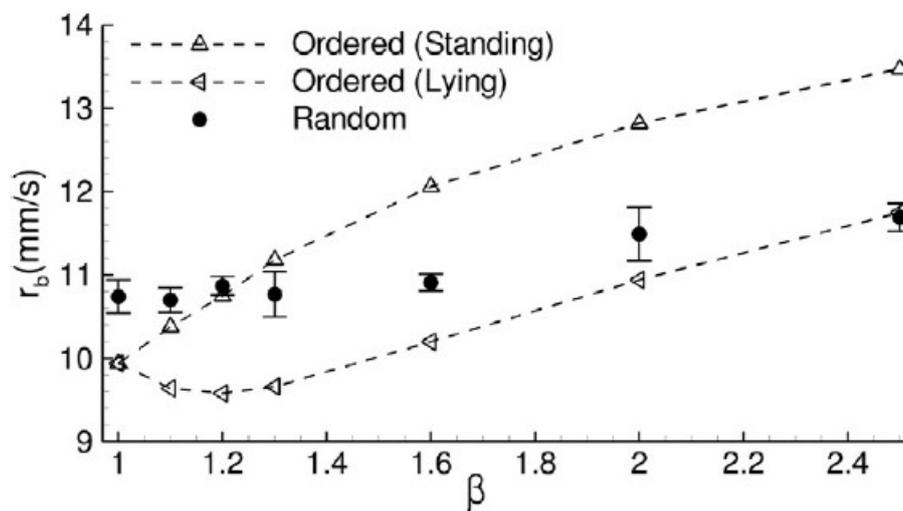


Figura 1.7: Rateo medio di combustione per le tre disposizioni (a,b,c) al variare del parametro  $\beta$

- Un'altra ipotesi è quella formulata da alcuni autori [31, 23, 12] i quali concordano nel pensare che alla base dell'effetto Hump possa esserci la segregazione particellare tra grandi e piccole. Tale meccanismo è stato per la prima volta messo in rilievo attraverso gli studi condotti da Gadala-Maria e Acrivos [18] i quali notarono, durante esperimenti reologici condotti attraverso reometri di Couette, che la viscosità apparente delle sospensioni non colloidali diminuiva gradualmente con l'applicazione di uno shear-stress. Ad ogni modo numerosi esperimenti sono stati condotti su flussi canonici e tutti evidenziano un'importante correlazione tra lo shear-stress e un effetto di migrazione differenziale connessa con le dimensioni del particolato. Successivamente queste evidenze hanno condotto alla formulazione di un modello che in qualche maniera descrivesse accuratamente il fenomeno sopraccitato, tale modello si deve a J. Philips et al.[44]. Tale modello descrive il processo di migrazione come una diffusione locale in cui il flusso netto è la somma di due flussi parziali.

L'uno dovuto alla gradiente della frequenza delle collisioni tra il particolato e dunque allo shear-rate rate:

$$N_c = -K_c \phi a^2 \nabla(\dot{\gamma} \phi)$$

L'altro dovuto al gradiente della viscosità:

$$N_\eta = -K_\eta a^2 \frac{\dot{\gamma} \phi^2}{\eta(\phi)} \nabla[\eta(\phi)]$$

Dove:

“a” rappresenta il diametro della particella

$\dot{\gamma}$  è lo shear-rate

$\phi$  è la frazione volumetrica di fase solida

$\eta(\phi)$  è la viscosità della sospensione intesa come funzione della frazione solida

$K_c$  e  $K_\eta$  sono due costanti sperimentali

Normalmente per modellare la variazione di viscosità indotta dalla variazione di concentrazione si fa ricorso al modello di Krieger, riassumibile tramite la relazione:

$$\eta = \eta_s \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-[\eta]\phi_m}$$

Dove:

$\eta$  rappresenta la viscosità intrinseca della sospensione, così definita:  $[\eta] = \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{\eta - \eta_s}{\phi \eta_s}$   
 $\phi_m$  rappresenta frazione volumetrica di fase solida in corrispondenza del massimo impacchettamento.

$\eta_s$  è la viscosità relativa alla sola fase liquida.

Dalle relazioni appena presentate possiamo dunque comprendere come il flusso particellare, e dunque la mobilità delle particelle, sia una funzione di proporzionalità diretta con la dimensione delle particelle stesse. Ciò spiegherebbe la tendenza del particolato a migrare nelle zone a basso shear-stress, tendenza più marcata nel caso delle particelle di grandi dimensioni. Resta tuttavia da comprendere come un eventuale concentrazione locale di particelle di una certa dimensione si ripercuota sul rateo di combustione. In particolare da studi condotti da W.Cai et al. [6] su due formulazioni di propellente, uno con AP da  $200 \mu m$  e l'altro da  $20 \mu m$ , si evidenzia come il rapporto superficie/volume sia strettamente correlato alla diffusività dei reagenti. In particolar modo per particelle piccole (in cui il rapporto è più alto) la velocità di combustione dimostra un tendenziale incremento relativamente a quelle con dimensione maggiore. Osservando le figure 1.8 e 1.9 si può confrontare l'altezza di fiamma. Per la seconda formulazione ( $d_{AP} = 20 \mu m$ ) tale altezza si riduce a  $8 \mu m$ , da raffrontare con i  $140 \mu m$ , della formulazione con  $d_{AP} = 200 \mu m$ .

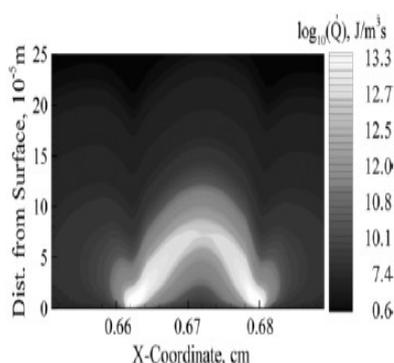


Figura 1.8: Distribuzione del rateo di trasferimento del calore (p=100 atm, AP/HTPB: 70/30 e  $d_{AP}=200 \mu m$ ).

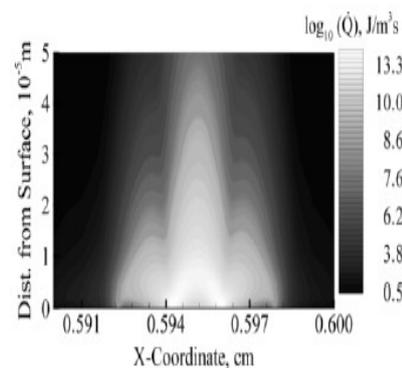


Figura 1.9: Distribuzione del rateo di trasferimento del calore (p=50 atm, AP/HTPB: 70/30 e  $d_{AP}=20 \mu m$ ).

Le figure 1.10 e 1.11 mostrano le corrispondenti temperature e la distribuzione del rateo di trasferimento di calore ad una distanza di  $1 \mu m$  sopra la superficie di combustione. L'incremento del gradiente di temperatura sopra la superficie del propellente intensifica il ritorno di calore alla fase condensata e quindi la velocità di combustione. Si noti come in particolare come il rateo di traferimento di calore per le particelle più piccole sia quasi il doppio rispetto a quelle di dimensione maggiore.

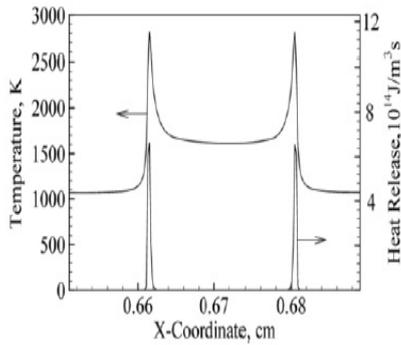


Figura 1.10: Temperatura e distribuzione del rateo di trasferimento del calore ad  $1 \mu m$  sopra la superficie del propellente ( $p=100 \text{ atm}$ , AP/HTPB: 70/30 e  $d_{AP}=200 \mu m$ ).

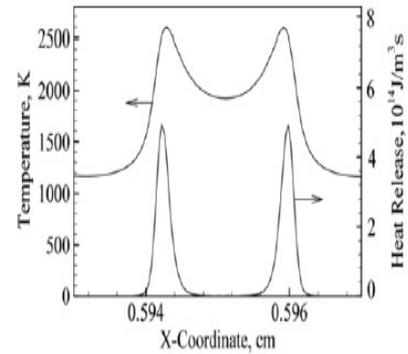


Figura 1.11: Temperatura e distribuzione del rateo di trasferimento del calore ad  $1 \mu m$  sopra la superficie del propellente ( $p=50 \text{ atm}$ , AP/HTPB: 70/30 e  $d_{AP}=20 \mu m$ ).

- In ultimo si vogliono presentare ulteriori studi presenti in letteratura volti ad indagare l'effetto di separazione della fase liquida da quella solida nella generazione delle anisotropie sul rateo di combustione (si tenga infatti presente che la fase liquida, rappresentata dal legante, in genere esibisce un minor potere combustivo relativamente alla fase solida). Da alcune analisi ai raggi X effettuate su campioni di propellente inerte [3] è emerso chiaramente come vi sia localmente (in particolar modo nelle vicinanze delle pareti e all'interfaccia tra colate differenti) un generale impoverimento di particolato. Uno degli studiosi che in particolar modo ha sviluppato questa tesi sulla separazione tra le fasi è stato G. Uhrig et al. [57]. Dallo studio citato, rivolto ad una particolare tecnica di colaggio in cui il serbatoio viene fatto ruotare durante il riempimento del motore, è emerso che nella fase di colaggio si genererebbe una stratificazione del propellente con conseguente formazione di strati in cui il propellente è ricco di legante e strati in cui invece vi è una maggiore concentrazione di perclorato, dal momento che il legante ha un potere combustivo minore rispetto all'AP si verificherebbe una diminuzione del rateo di combustione nelle zone in cui il fronte di fiamma si muove con un certo angolo diverso da zero rispetto alla tangente striatura (figura 1.12).

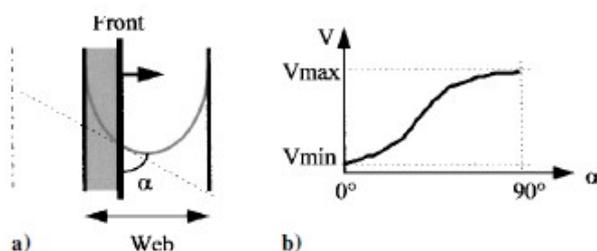


Figura 1.12: Aumento rateo di combustione al variare dell'angolo

Il motivo di ciò è inerente al fatto che la fiamma incontra una maggiore percentuale di HTPB rispetto al perclorato. Quest'ipotesi era stata inizialmente formulata a seguito di una sperimentazione effettuata colando del propellente all'interno di un contenitore (anch'esso posto in rotazione), dall'esperimento era proprio emersa questa netta stratificazione del materiale colato (figura 1.13).

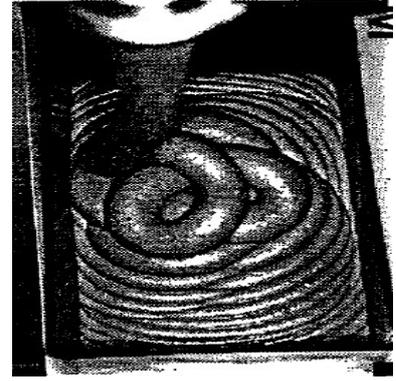
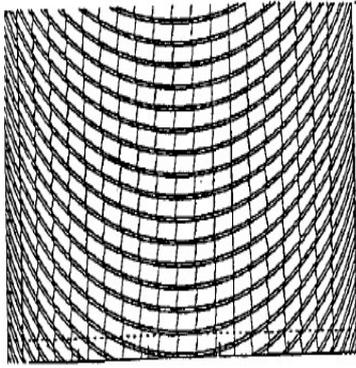


Figura 1.13: Ricostruzione grafica delle striature (a sinistra), vista dall'alto del processo di colaggio del propellente (a destra)

Nell'ambito di questo progetto di tesi si è focalizzata l'attenzione sul primo e sull'ultimo degli aspetti finora presentati (più facilmente modellabili), tralasciando, per il momento, l'influenza della segregazione particellare.

Allo stato attuale, nell'industria dei motori a propellente solido, il fenomeno di anomalia del rateo di combustione viene modellato attraverso delle funzioni ricavate per via sperimentale che di fatto compensano lo scostamento fra i dati teorici e quelli sperimentali.

Di fatto tale funzioni non colgono la natura locale del fenomeno ma modellano unicamente la variazione del rateo medio di combustione lungo la direzione radiale.

Di seguito vengono riproposti gli sviluppi per ricavare l'andamento del fattore di compensazione, precedentemente citato. Prima di ciò è bene però introdurre, senza entrare in ulteriori sviluppi, le espressioni semi-analitiche, tramite le quali è possibile esprimere il comportamento balistico del motore in condizioni stazionarie.

La prima relazione descrive la pressione dei gas presenti in camera di combustione, la seconda invece descrive la dipendenza del rateo di combustione (ossia la velocità con il quale la superficie del propellente regredisce) da diversi fattori quali la pressione in camera, la temperatura al quale si trova il propellente prima di iniziare la combustione e da altre proprietà relative alla formulazione del propellente stesso.

$$p_0 = \left( \frac{(\rho_g - \rho_0) \cdot A_b \cdot a \cdot c^*}{A^*} \right)^{\frac{1}{1-n}} \quad (1.1)$$

$$r_b = \underbrace{f_{comp} \cdot S.F. \cdot e^{\sigma(T_p - T_{ref})}}_{f_{correttivo}} \cdot (a \cdot p_0^n) \quad (1.2)$$

I diversi termini delle due equazioni assumono il seguente significato:

- $p_0$  [Pa] rappresenta la pressione in camera di combustione
- $\rho_0$  [Kg/m<sup>3</sup>] è la densità di gas presenti in camera
- $\rho_g$  [Kg/m<sup>3</sup>] è la densità del grain

- $A_b [m^2]$  è la superficie di grain che sta bruciando nel dato istante temporale
- “a” ed “n” sono due coefficienti sperimentali
- $A^* [m^2]$  è l’area di gola dell’ugello
- $c^* [\frac{m}{s}]$  è la velocità caratteristica
- “ $r_b$ ” rappresenta il rateo di combustione medio del propellente
- “S.F.” considera gli effetti di “scala” tra le Baria<sup>3</sup> ed il motore reale
- “ $T_p$ ” [C°] è la temperatura di firing del propellente
- “ $T_{ref}$ ” [C°] è una temperatura di riferimento
- “ $\sigma$ ” [1/C°] è un parametro che identifica la sensibilità termica del grain
- “ $f_{comp}$ ” è il fattore di compensazione sopraccitato.

Entriamo ora più nel dettaglio spiegando come viene ricavato l’ultimo fattore citato “ $f_{comp}$ ”

Indichiamo con  $p_{th}$  l’andamento teorico della pressione in camera di combustione (nel caso cioè il propellente bruci uniformemente in tutti i punti) e con  $p_{re}$  l’andamento reale della pressione misurato durante le prove sperimentali.

Si può allora riscrivere la relazione (1.1), riferita alle due pressioni, nel seguente modo:

$$p_{th} = (K \cdot a_{th})^{\frac{1}{1-n}} \quad (1.3)$$

$$p_{re} = (K \cdot a_{re})^{\frac{1}{1-n}} \quad (1.4)$$

Dove:

- $K = \frac{\rho_g S_b c^*}{A^*}$
- $a_{th}$  è il coefficiente teorico della legge di Vieille, questo viene ricavato attraverso un opportuno metodo di riduzione dei dati [19]. Si prenda allora in considerazione la relazione (1.2) privata dei termini correttivi S.F,  $f_{hump}$  e del termine di sensibilità termica. Per calcolare il valore di  $a_{th}$  (e di  $n$ ) si misura il valore del rateo di combustione medio ( $\overline{r_b}$ ) come rapporto tra lo spessore del web bruciato diviso per il tempo che il provino impiega per bruciare completamente ( $t_b$ ). Si calcola un valore di pressione media  $\overline{p_0}$  come rapporto tra l’integrale di pressione della prova ed il tempo ( $t_b$ ). Si effettuano dunque diverse prove al variare della pressione in camera

<sup>3</sup>Motori di piccola dimensione utilizzati per il reperimento dei coefficienti balistici “a” ed “n”

(questo si fa variando la dimensione dell'ugello di scarico) in modo tale da ottenere diversi punti nel piano  $\overline{p_0} - \overline{r_b}$ . Tecnicamente sarebbero sufficienti due prove per determinare i valori incogniti ( $a_{th}$  e  $n$ ) tuttavia, per incrementare l'accuratezza, di norma ne vengono effettuate tre per poi ricercare una soluzione nel senso dei minimi quadrati.

- $a_{re}$  invece si ottiene come prodotto tra l' $a_{th}$  ed il termine di correzione ( $f_{correttivo}$ ) che può essere ulteriormente scisso nei tre diversi contributi (S.F., sensibilità termica ed  $f_{comp}$ ).

Il fattore  $f_{comp}$  può essere allora ottenuto tramite il seguente procedimento. Dividiamo la (1.4) per la (1.3) ed applichiamo il logaritmo in modo da ottenere:

$$\ln\left(\frac{p_{0,re}}{p_{0,th}}\right) = \frac{1}{1-n} \cdot \ln\left(\frac{a_{re}}{a_{th}}\right) \quad (1.5)$$

Si tenga ad ogni modo presente che nella relazione (1.5) si sono implicitamente fatte delle assunzioni:

- Si è supposto che la superficie  $S_b$  di combustione regredisca come nel caso teorico mantenendosi ad ogni istante autosimile. In altri termini significa che il vettore di regressione del grano si mantiene sempre ortogonale alla superficie di combustione.

- I parametri  $c^*$  e  $A^*$  vengono ritenuti indipendenti dalla pressione raggiunta in camera (sperimentalmente si evidenzia che la validità di questa assunzione è sufficientemente buona).

- Il parametro  $n$  è funzione solo del tipo di propellente e non dipende dalla prova che si sta effettuando.

Aggiungiamo e sottraiamo il valore unitario all'interno della (1.5):

$$\ln\left(1 + \left(\frac{p_{0,re}}{p_{0,th}} - 1\right)\right) = \frac{1}{1-n} \cdot \ln\left(1 + \left(\frac{a_{re}}{a_{th}} - 1\right)\right) \quad (1.6)$$

Sviluppiamo in serie di Taylor la (1.6), arrendoci al primo termine, in modo da ottenere:

$$\frac{p_{0,re}}{p_{0,th}} - 1 = \frac{1}{1-n} \cdot \left(\frac{a_{re}}{a_{th}} - 1\right) \quad (1.7)$$

Indicando con  $f_{comp} = a_{re}/a_{th}$  si può in definitiva ricavare l'espressione del fattore di compensazione:

$$f_{comp} = (1-n) \cdot \left(\frac{p_{0,re}}{p_{0,th}} - 1\right) + 1 \quad (1.8)$$

## 1.1 Lavorazione del propellente e descrizione del processo di collaudo

La scelta del propellente riveste un'importanza cruciale nel comportamento balistico di un endoreattore. Di seguito vengono presentate le caratteristiche ideali che un propellente dovrebbe avere:

1. Elevati impulsi specifici, nella fattispecie ciò si traduce in elevate temperature dei gas di combustione e/o bassi pesi molecolari.
2. Un comportamento prevedibile e riproducibile.
3. Proprietà meccaniche adeguate.
4. Elevata densità (in modo da permettere degli ingombri minori e favorire lo stoccaggio).
5. Buone qualità di ignizione (al fine di scongiurare pericoli di sovrappressione in fase di accensione).
6. Buona resistenza all'invecchiamento (in modo da poter essere stoccato anche per lunghi periodi).
7. Bassa tendenza all'assorbimento di umidità.
8. Basso costo e facilità di lavorazione.
9. Bassi rischi connessi allo stoccaggio o alla fabbricazione.
10. Insensibilità alle condizioni ambientali esterne (es. pressione, temperatura, umidità).
11. Non deve produrre gas di combustione tossici.
12. Non deve essere incline ad instabilità di combustione.

Normalmente i propellenti vengono distinti in tre principali categorie:

- Propellenti a doppia base
- Propellenti compositi
- Compositi a doppia base (CMDB)

Di seguito vengono descritte più nel dettaglio le tipologie di propellenti citati.

## Propellenti a doppia base

I propellenti a doppia base (anche detti omogenei o colloidali) sono costituiti da miscele di sostanze esplosive tenute insieme da un materiale colloidale. Ciascun componente esplosivo ha al suo interno tutti gli elementi essenziali per generare una combustione ossia: combustibile e comburente. La più comune combinazione utilizzata per questo genere di propellenti è Nitrocellulosa (NC), di natura solida, disciolta in Nitroglicerina (NG), più eventualmente altri additivi. Tali composizioni, sebbene garantiscano basse fumosità e buone prestazioni, risultano piuttosto pericolose ed il loro utilizzo è in continuo calo. In genere i motori solidi realizzati con questa tipologia di propellente vengono ottenuti per estrusione.

## Propellenti compositi

I propellenti compositi, i quali rappresentano la categoria di propellenti maggiormente utilizzati, sono invece costituiti da una miscela eterogenea di cristalli di ossidanti (AP, AN, KN, KP, HMX<sup>4</sup>) e polvere di combustibile (generalmente alluminio), tenuti insieme da un legante, generalmente una gomma o una matrice polimerica (i materiali più comuni sono HTPB, PBAN, PBAA, CTPB).

In tabella 1.1 vengono mostrate le caratteristiche chimico-fisiche relative ai diversi componenti ed indicati i nomi completi.

Propellant Type <sup>a</sup>	$I_s$ Range (sec) <sup>b</sup>	Flame Temperature <sup>c</sup>		Density or Spec. Gravity <sup>c</sup>		Metal Content (wt %)	Burning Rate <sup>c,e</sup> (in./sec)	Pressure Exponent <sup>c</sup> $n$	Hazard Classification <sup>d</sup>	Stress (psi)/Strain (%)		Processing Method
		(°F)	(°K)	(lb/in <sup>3</sup> )	(sp. gr.)					-60°F	+150°F	
DB	220–230	4100	2550	0.058	1.61	0	0.05–1.2	0.30	1.1	4600/2	490/60	Extruded
DB/AP/Al	260–265	6500	3880	0.065	1.80	20–21	0.2–1.0	0.40	1.3	2750/5	120/50	Extruded
DB/AP-HMX/Al	265–270	6700	4000	0.065	1.80	20	0.2–1.2	0.49	1.1	2375/3	50/33	Solvent cast
PVC/AP/Al	260–265	5600	3380	0.064	1.78	21	0.3–0.9	0.35	1.3	369/150	38/220	Cast or extruded
PU/AP/Al	260–265	5700	3440	0.064	1.78	16–20	0.2–0.9	0.15	1.3	1170/6	75/33	Cast
PBAN/AP/Al	260–263	5800	3500	0.064	1.78	16	0.25–1.0	0.33	1.3	520/16	71/28	Cast
CTPB/AP/Al	260–265	5700	3440	0.064	1.78	15–17	0.25–2.0	0.40	1.3	(at -10°F) 325/26	88/75	Cast
HTPB/AP/Al	260–265	5700	3440	0.067	1.86	4–17	0.25–3.0	0.40	1.3	910/50	90/33	Cast
PBAA/AP/Al	260–265	5700	3440	0.064	1.78	14	0.25–1.3	0.35	1.3	500/13	41/31	Cast
AN/Polymer	180–190	2300	1550	0.053	1.47	0	0.06–0.5	0.60	1.3	200/5	NA	Cast

<sup>a</sup> Al, aluminum; AN, ammonium nitrate; AP, ammonium perchlorate; CTPB, carboxy-terminated polybutadiene; DB, double-base; HMX, cyclotetramethylene tetranitramine; HTPB, hydroxy-terminated polybutadiene; PBAA, polybutadiene-acrylic acid polymer; PBAN, polybutadiene-acrylic acid-acrylonitrile terpolymer; PU, polyurethane; PVC, polyvinyl chloride.

<sup>b</sup> At 1000 psia expanding to 14.7 psia, ideal or theoretical value at reference conditions.

<sup>c</sup> At 1000 psia.

<sup>d</sup> See page 491.

<sup>e</sup>  $I_s$  flame temperature, density, burn rate and pressure exponent will vary slightly with specific composition.

Tabella 1.1: Caratteristiche componenti propellenti compositi

<sup>4</sup>Le sigle fanno riferimento ai nomi indicati in fondo alla tabella 1.1

Comunemente i motori di grande dimensioni vengono realizzati colando all'interno di un serbatoio la miscela di materiali solidi (Al +ossidante) ed ingredienti liquidi (il legante).

All'interno della miscela viene inserito un agente curante che ha lo scopo di far reticolare (ossia indurire) il propellente.

Convenzionalmente i propellenti compositi contengono dal 60% al 72% di ossidante, una percentuale variabile tra 8% e 16% di legante e una quantità di alluminio che può arrivare fino al 22%.

Vi sono poi propellenti compositi dove per aumentare densità ed impulso specifico vengono aggiunte delle cicloammine come RDX o HMX.

È possibile inoltre trovare formulazioni in cui l'HTPB viene sostituito da nitroglicerina e altre ancora in cui l'AP viene sostituito con HMX.

Formulazioni tipiche delle varie categorie di propellente sono riportate in tabella 1.2.

Double-Base (JPN Propellant)		Composite (PBAN Propellant)		Composite Double-Base (CMDDB Propellant)	
Ingredient	Wt %	Ingredient	Wt %	Ingredient	Wt %
Nitrocellulose	51.5	Ammonium perchlorate	70.0	Ammonium perchlorate	20.4
Nitroglycerine	43.0	Aluminum powder	16.0	Aluminum powder	21.1
Diethyl phthalate	3.2	Polybutadiene-acrylic acid-acrylonitrile	11.78	Nitrocellulose	21.9
Ethyl centralite	1.0	Epoxy curative	2.22	Nitroglycerine	29.0
Potassium sulfate	1.2			Triacetin	5.1
Carbon black	<1%			Stabilizers	2.5
Candelilla wax	<1%				

Tabella 1.2: Tipiche formulazione di propellenti per ciascuna categoria

È importante comunque notare come anche piccole variazioni della formulazione del propellente influenzino drasticamente le performance che il motore avrà nelle fasi di missione, a titolo esemplificativo in figura 1.14 viene mostrata l'influenza della concentrazione di ossidante sull'impulso specifico, sulla temperatura dei gas di combustione e sul loro peso molecolare.

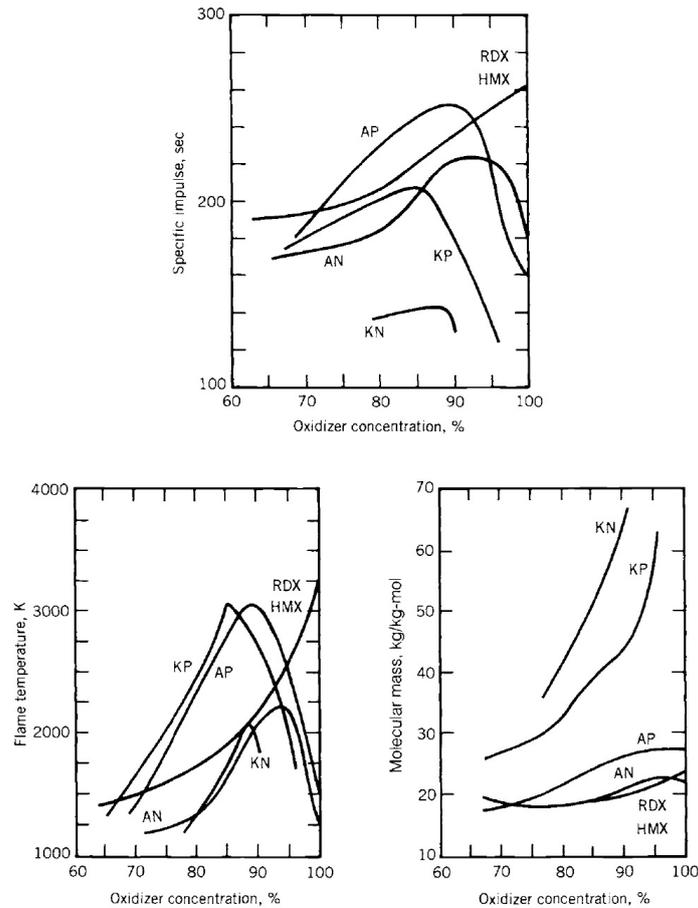


Figura 1.14: Influenza della concentrazione di ossidante sull'impulso specifico, la temperatura e il peso molecolare dei gas di combustione

La lavorazione di un endoreattore a solido è un processo piuttosto delicato che può richiedere tempi piuttosto lunghi anche dell'ordine della decina di ore, si pensi ad esempio al caso dei grandi lanciatori, come l'Ariane V, in cui la sola fase di riempimento del motore prevede il colaggio di 10 batch di propellente, in un tempo di 1 ora e mezza ciascuno per un totale dunque di 15 ore. Sebbene sarebbe auspicabile realizzare il riempimento in unica colata, sia per ragioni di sicurezza che di fattibilità, (risulterebbe infatti impossibile lavorare in contemporanea tutta la massa di propellente), nei booster di grande dimensioni si adotta la tecnica di colaggio multi-batch. Normalmente per ridurre il rischio di formazione di difettosità interne al grano, come bolle d'aria, si tende ad effettuare il colaggio nel vuoto di modo che, quando il serbatoio viene riportato in pressione, le bolle d'aria collasino su se stesse.

Nella figura seguente viene riportato uno schematico che riassume tutte le fasi di lavorazione, quelle riportate con asterisco sono le fasi potenzialmente rischiose.

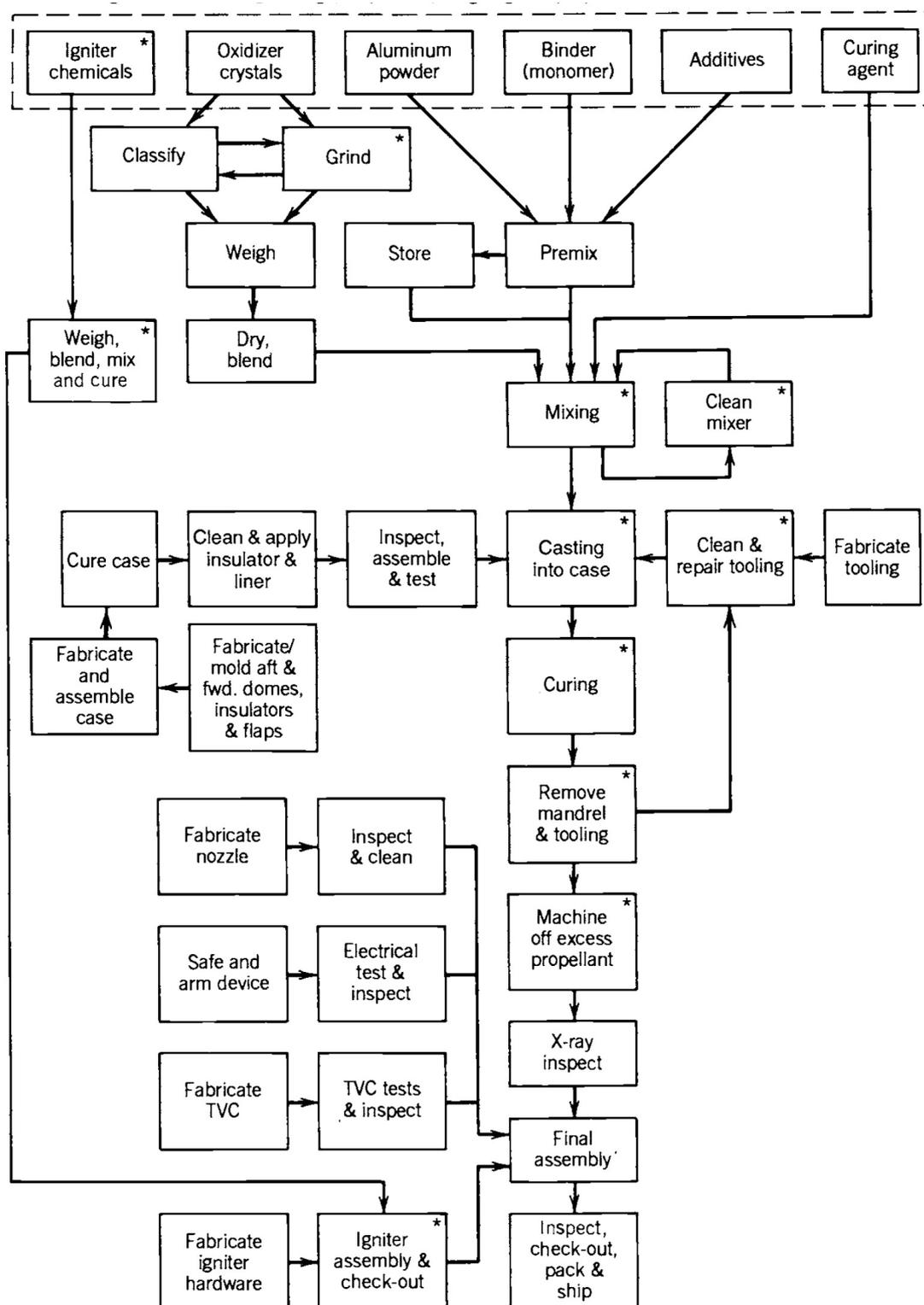


Figura 1.15: Fasi di lavorazione di un endoreattore a solido

Per quanto riguarda le principali metodologie di riempimento del case del motore si possono citare le seguenti categorie:

### • Colaggio a baionetta

Da quanto emerso dalla letteratura questa metodologia di colaggio viene per lo più applicata per motori di piccole dimensioni (applicazioni missilistiche) solo in un caso si è trovato essere stata impiegata per grandi booster [9] . Il motivo principale perché tale tecnica si applichi a motori di piccole dimensioni, come indicato in [9] , è relativa al fatto che in questo processo si devono utilizzare propellenti con bassa viscosità e con lunghi tempi di reticolazione.

Nel complesso l'apparato per il colaggio è costituito da un serbatoio riempito di propellente, un pistone che comprime il fluido e lo spinge attraverso un tubo (la baionetta), la baionetta, ovviamente inserita all'interno del motore, viene tirata su man mano che il motore viene riempito. Come indicato in [14] questa tecnica, rispetto ad altre, sembra lasciare più vuoti all'interno del propellente e questo può causare, in fase di lancio, delle anomalie nella combustione tali da portare anche ad eventuali esplosioni.

In figura 1.16 viene illustrato l'apparato, tuttavia quello mostrato si applica solamente a motori in cui l'inserimento della spina avviene successivamente alla fase di colaggio, fermo restando la verosimiglianza con gli apparati dedicati ai i motori con il mandrino già in posizione, l'unica variazione, in quest'ultimo caso, è la mancanza del piano di formatura.

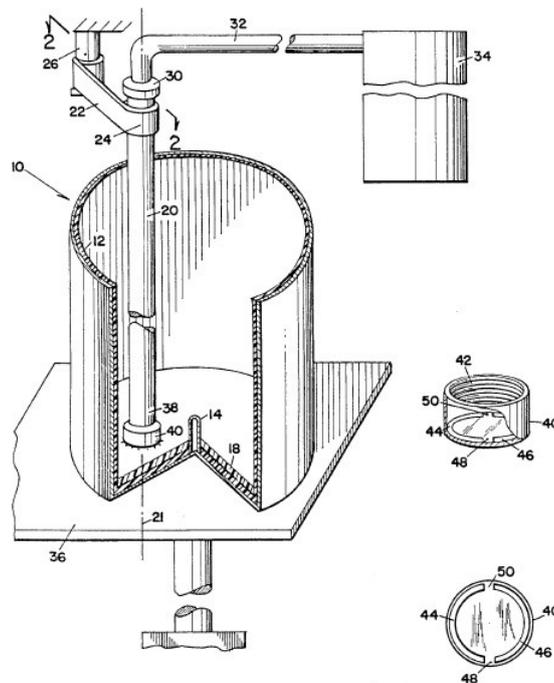


Figura 1.16: Descrizione apparato per il colaggio a baionetta

## • Colaggio in pressione

Il colaggio in pressione, insieme a quella a vuoto, è certamente una delle tecniche più utilizzate per il riempimento di booster di grandi dimensioni. Come illustrato in figura 1.17 l'apparato è costituito da un serbatoio riempito di propellente a cui è connesso un tubo per il trasferimento del materiale all'interno del motore. Il propellente viene spinto all'interno del tubo attraverso un pistone (o eventualmente tramite una pressurizzazione con un gas inerte tipo azoto o anche con aria). Il flusso di propellente viene regolato tramite la valvola posta al di sotto del serbatoio. Sebbene in figura venga mostrato un riempimento dal basso verso l'alto, più di frequente viene utilizzata la configurazione contraria, dove il propellente viene fatto cadere dall'alto.

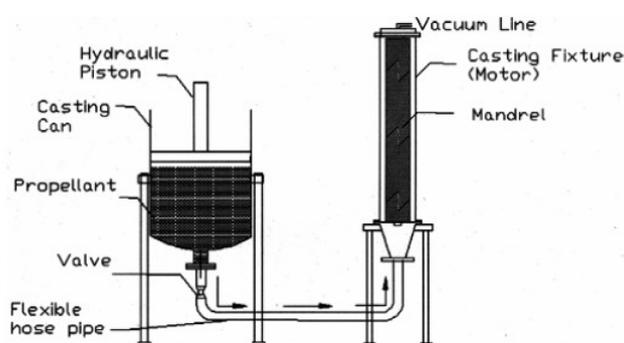


Figura 1.17: Descrizione apparato per il colaggio in pressione (sistema di pressurizzazione meccanica con pistone)

• Colaggio nel vuoto

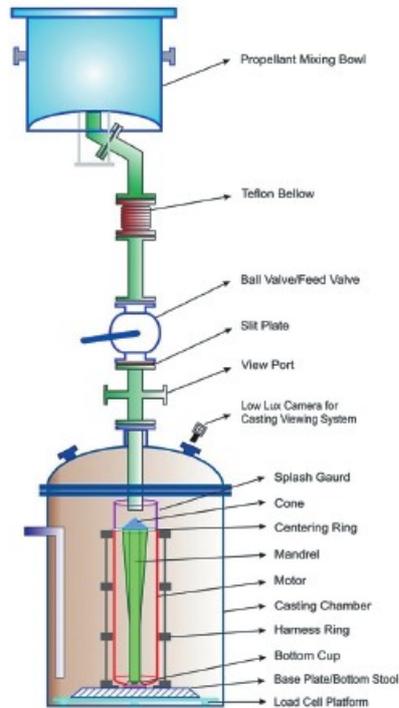


Figura 1.18: Descrizione apparato per il colaggio nel vuoto

La tecnica di colaggio a vuoto è forse la più utilizzata per il processo di riempimento dei grandi motori a solido. Nel complesso l'apparato, figura 1.18, non differisce molto da quello per il colaggio in pressione, ad eccezione del fatto che il case è inserito all'interno di una camera dove viene generato il vuoto ( $\sim 1300-10.000$  Pa di pressione), il propellente viene spinto all'interno del case dalla differenza di pressione tra il serbatoio e la camera dove è contenuto il case. Anche in questo caso il flusso viene regolato da una valvola posta sotto il serbatoio. Questa tecnica certamente ha un grande vantaggio, è stato dimostrato infatti che riduce drasticamente le difettosità interne al grano relative alla generazione di microvuoti [55], dal momento che, una volta terminata l'operazione di colaggio, il serbatoio viene riportato alla pressione ambiente facendo collassare le eventuali bolle d'aria formatesi all'interno del grain.

Per via degli innegabili vantaggi citati, l'azienda Avio utilizza quest'ultimo come sistema di riempimento di motori. È per questo motivo dunque che il lavoro di tesi è stato incentrato proprio sulla realizzazione di simulazioni numeriche del processo di colaggio nel vuoto e sulla successiva analisi dei dati ricavati dalle simulazioni.

## 1.2 Comportamento reologico del propellente

Come già detto in precedenza i propellenti compositi sono costituiti da tre ingredienti fondamentali, l'ossidante e il combustibile (che formano la parte solida del composto) ed il legante (che costituisce la parte liquida). Nel complesso dunque i propellenti compositi sono delle miscele eterogenee che in genere esibiscono un comportamento reologico molto complesso che include:

-Pseudoplasticità: ossia la tendenza del fluido a ridurre la viscosità all'aumentare dello sforzo di taglio ad esso applicato.

-Viscoelasticità non lineare: si intende la proprietà del materiale di mostrare contemporaneamente un comportamento viscoso ed elastico. I materiali come il miele ad esempio esibiscono un comportamento puramente viscoso per cui si deformano in maniera direttamente proporzionale allo sforzo di taglio applicato. I materiali perfettamente elastici invece una volta che viene rimossa la sollecitazione a taglio tendono a tornare allo stato iniziale. L'aggettivo non lineare sta ad indicare il fatto che il materiale cambia le proprie proprietà quando viene sottoposto a deformazione.

-Tissotropia: è la tendenza del fluido a ridurre la propria viscosità in dipendenza al tempo di applicazione dello sforzo di taglio.

-Elevata sensitività alla storia di carico imposta.

Ovviamente tutte queste proprietà si presentano in maniera più o meno evidente in dipendenza della formulazione della miscela; formulazione intesa sia in termini di concentrazione dei vari componenti, sia in termini di quali componenti sono o non sono presenti nella miscela.

Nello specifico, studi condotti [38] su due formulazioni di propellente differenti, l'uno contenente AP come ossidante e l'altro realizzato con HMX (in figura 1.19 viene mostrata la formulazione completa) hanno evidenziato comportamenti reologici completamente differenti.

Propellant compositions			
HTPB composite		High energy	
Ingredient	Vol %	Ingredient	Vol %
Binder <sup>a</sup>	23.5	Binder <sup>b</sup>	32.8
Aluminum, 30 $\mu$ <sup>c</sup>	12.0	Aluminum, 30 $\mu$	12.2
AP 200 $\mu$	51.6	AP 200 $\mu$	3.8
15 $\mu$	12.9	HMX 11 $\mu$	25.4
		3 $\mu$	25.4
		Carbon < 1 $\mu$	0.5
Vol % solids	76.5	Vol % solids	67.3

<sup>a</sup>HTPB prepolymer, plasticizer, isophorone di-isocyanate curative, and minor ingredients.  
<sup>b</sup>PEG prepolymers, nitrate ester plasticizer, desmodur N-100 curative, and minor ingredients including nitrocellulose.  
<sup>c</sup>All sizes are nominal diameters.

Figura 1.19: Formulazione dei propellenti utilizzate per la caratterizzazione reologica

Sulle due tipologie di propellente sono state effettuate analisi volte ad indagare tutte le possibili proprietà reologiche dei due materiali. In particolar modo da tale analisi è emerso che la composizione con HTPB globalmente presentasse un comportamento quasi newtoniano, l'altra al contrario presentava un comportamento prettamente pseudoplastico (si veda figura 1.20).

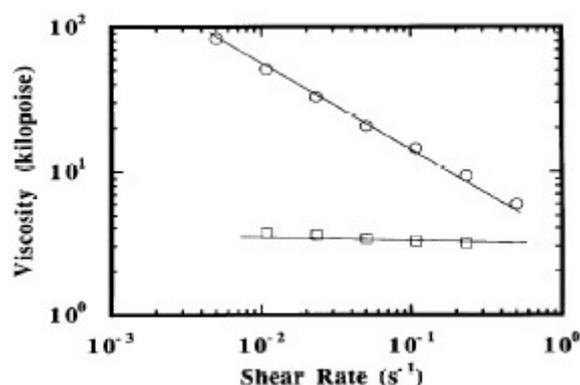


Figura 1.20: Viscosità delle due formulazione in funzione dello shear-rate rate ( $\square$ ) formulazione con HTPB ( $\circ$ ) formulazione con HMX

Ad ogni modo è bene tener presente che per formulazioni di propellenti con elevata concentrazione di fase solida, in cui le distanze interparticellari sono ridotte, diventano significative le interazioni di London-van der Waals ciò conduce alla generazione di aggregati in cui le grandi particelle attraggono nelle vicinanze le piccole. La rottura di questi aggregati per effetto di un elevato shear-stress determina ciò che macroscopicamente si manifesta come il comportamento pseudoplastico del materiale. Questo spiega perché in altri studi [32] a parità di componenti inseriti nella formulazione (AP, Al, HTPB), dove però la miscela presenta rispetto al caso precedentemente citato una concentrazione di fase solida più elevata (86%) di cui (68% AP e 18% Al), il propellente esibisca il tipico comportamento pseudoplastico globalmente riassunto dalla figura 1.21

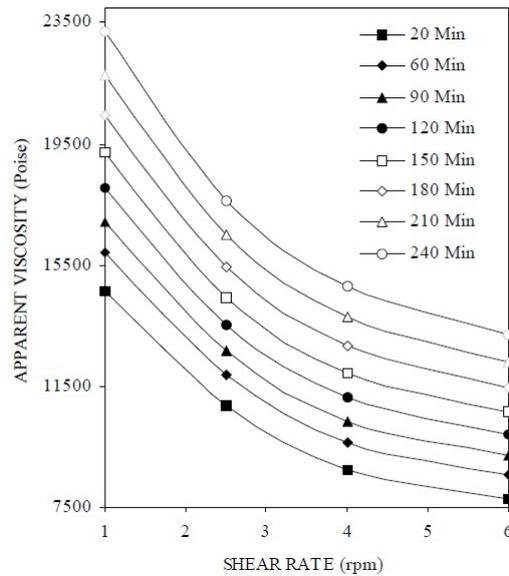


Figura 1.21: Viscosità in funzione dello shear-rate (formulazione (68% AP 18% Al 14% HTPB))

### 1.3 Modello reologico del propellente

A questo punto è opportuno trattare i modelli reologici comunemente impiegati per la caratterizzazione del propellente.

Si può anzitutto citare il modello classico newtoniano descritto dalla relazione lineare tra tensioni e rateo di deformazione brevemente riassunta dalla (1.9).

$$\tau = \mu \dot{\gamma} \quad (1.9)$$

Sebbene come si è precedentemente detto il propellente non esibisca comportamento newtoniano, la (1.9) costituisce una valida approssimazione nel momento in cui i tempi con cui avviene il colaggio risultino relativamente brevi perché il fluido inizi a reticolare.

Di frequente, come testimoniato in [11], si accetta dunque questa ipotesi decomponendo normalmente la simulazione in un numero di step pari al numero di colate, durante il processo le viscosità del fluido in colaggio e di quello già colato rimangono costanti per tutto lo step di simulazione di colaggio del batch per essere variate solamente allo step successivo, in relazione a quanto è il tempo intercorso tra una colata e la successiva.

Per completezza comunque è bene citare che in letteratura [30] sono stati reperiti casi in cui le simulazioni numeriche venissero condotte utilizzando modelli che descrivessero il comportamento non newtoniano, è il caso del modello di Krieger-Dougherty precedentemente citato.

In altri casi invece [48] si è fatto ricorso a modelli più semplici come quello di Ostwald de Waele (o modello a legge di potenza) brevemente riassunto tramite la relazione (1.10):

$$\tau = k(\dot{\gamma})^n \quad (1.10)$$

Dove:

- “k” è un indice di consistenza
- “n” è l’indice di pseudo-plasticità

Più specificatamente nella notazione tensoriale la relazione (1.10) viene espressa in maniera più estesa:

$$\tau_{ij} = kP_k^{\frac{n-1}{2}} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla E_k \right) \quad (1.11)$$

Con:

$$- P_k = \left[ 2\delta_{ij} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]$$

$$- E_k = \frac{1}{2}\delta_{ij} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2$$

Nelle simulazioni effettuate si è scelto comunque di fare uso del primo dei due modelli dal momento che, da quanto emerso in letteratura, tale ipotesi risulta ampiamente utilizzata. Inoltre, sebbene sia stata valutata l’ipotesi di utilizzare il secondo dei due modelli, l’azienda AVIO non ha potuto fornirci i dati sull’indice di pseudo-plasticità per il propellente oggetto delle simulazioni realizzate. Inoltre supponendo anche di utilizzare dei valori dell’indice “n” reperibili in letteratura [38] (valori che si aggirano intorno 0.89÷0.93) si può dimostrare a posteriori come i livelli di strain-rate siano sufficientemente bassi perché l’approssimazione introdotta sia globalmente valida e non influenzi i risultati delle simulazioni condotte, come si può facilmente evincere dalla figura sottostante.

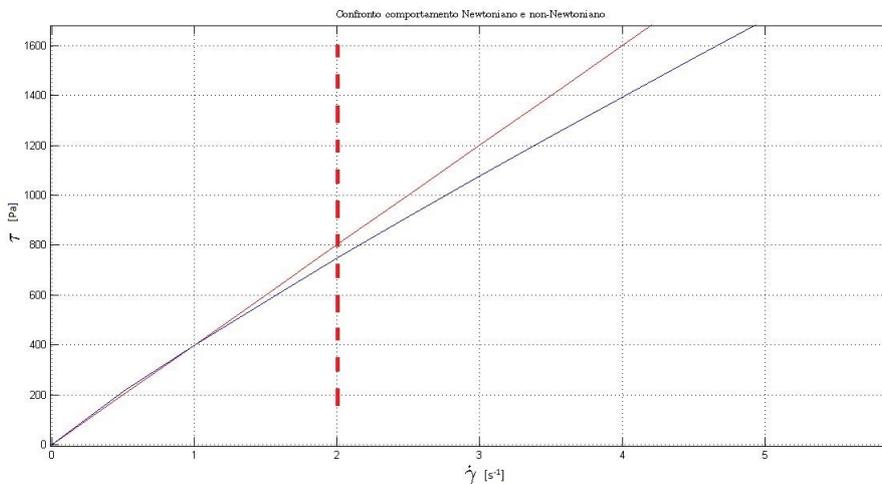


Figura 1.22: Confronto comportamento Newtoniano e comportamento non-Newtoniano

La linea tratteggiata identifica in generale i livelli più alti di strain-rate riscontrati durante la simulazione, tali valori sono presenti in prossimità del piede del getto laddove i valori di frazione volumetrica<sup>5</sup> del propellente sono più bassi (all'interno della cella di calcolo si ha una maggiore quantità di aria) e dunque il fluido assume un comportamento intermedio tra quello relativo all'aria e quello relativo al propellente stesso, in queste zone, dal momento che l'aria è un fluido newtoniano l'approssimazione introdotta risulta comunque di buona qualità. Ad ogni modo nei punti completamente interni al propellente i valori sono di norma inferiori all'unità.

---

<sup>5</sup>per la definizione si veda il capitolo successivo, paragrafo 2.5



# Capitolo 2

## Metodi numerici per il trattamento delle interfacce

Nel capitolo che segue verranno illustrate le principali tecniche per il trattamento delle interfacce tra fluidi immiscibili, in particolar modo verrà posto l'accento su quella che è la metodologia principalmente utilizzata nell'ambito propulsivo per le simulazioni sul processo di colaggio.

Il problema del tracciamento delle interfacce è un problema che fondamentalmente affonda le proprie radici negli anni '60 anche se il principale sviluppo è stato negli anni '70 quando già i calcolatori avevano raggiunto una certa maturità e si era accresciuta la possibilità di disporre di maggiori potenze di calcolo. Il problema dei flussi multifase riveste in ambito industriale una certa rilevanza, basti pensare a tutti quei processi di fusione e riempimento di stampi o anche ai sistemi di raffreddamento per mezzo di spray, o anche allo studio, in ambito aerospaziale, dei fenomeni di "sloshing" nei serbatoi a bordo dei satelliti.

Possiamo anzitutto distinguere due approcci allo studio di queste problematiche:

-Metodi interface capturing: volume of fluid, level set, phase field methods, eulerian methods.

-Metodi interface tracking: moving grid, front tracking, marker methods.

Nei metodi tracking l'interfaccia viene trattata in modo esplicito come una superficie di discontinuità che si muove attraverso la griglia computazionale. Rispetto ai metodi capturing si ha complessivamente una migliore accuratezza a fronte di un costo computazionale maggiore. Come si può già intuire questa tecnica è di natura lagrangiana poiché i punti giacenti sull'interfaccia vengono tracciati integrando l'equazione della cinematica:

$$\frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{u}_i$$

Con  $\vec{u}_i$  che indica la velocità del punto  $i$ -esimo presente sull'interfaccia.

Nei metodi capturing, al contrario, di natura euleriana, la dinamica dell'interfaccia non viene seguita esplicitamente ma ricostruita attraverso un'opportuna equazione di avvezione in  $\phi$  (quantità che rappresenta la percentuale volumetrica di un dato fluido all'interno di una data cella di calcolo).

Tra i metodi capturing si possono inoltre distinguere due categorie: una in cui la funzione caratteristica  $\phi$  è continua in tutto il dominio computazionale ed una in cui la

funzione caratteristica è discontinua, resta tuttavia da notare che la funzione suddetta non è esattamente discontinua poiché esiste tutta una regione, che è funzione della mesh-size, in cui essa varia in maniera più o meno regolare. In tale regione, a parità di mesh-size, è possibile ridurre l'ampiezza dell'interfaccia a patto di utilizzare schemi numerici con buone proprietà di monotonia e con un basso grado di diffusività numerica. Il problema più grande infatti si ha nel momento in cui si trattano due fluidi con forti differenze nelle proprietà fluidodinamiche (viscosità, densità) in quanto la diffusività numerica compromette sensibilmente l'accuratezza della soluzione dal momento che nelle zone diffuse si avrà un fluido con delle proprietà intermedie tra i due, con il risultato che quanto simulato non riproduce correttamente quanto succede nella realtà, in cui normalmente i due fluidi possono considerarsi immiscibili e il comportamento dell'uno può essere ritenuto indipendente da quanto accade all'altro fluido.

### 2.1 Metodi moving grid

In questi metodi si possono distinguere due sotto-categorie: una di tipo puramente lagrangiano, in cui ciascun punto della griglia può essere mobile ed un'altra di tipo misto, lagrangiano-euleriano, se solo un dato sottoinsieme di punti può essere spostato. Sebbene tali tecniche siano piuttosto accurate normalmente possono essere impiegate solo nei casi in cui vi siano superfici piuttosto regolari, senza forti deformazioni, filamentazioni o break-up. Il motivo è relativo al fatto che la deformazione e distorsione della mesh introduce delle difficoltà nella descrizione topologica ed un degrado complessivo dell'accuratezza della soluzione.

### 2.2 Metodi front tracking

In questi metodi l'interfaccia viene rappresentata tramite dei marker lagrangiani connessi per formare un fronte che si muove attraverso la mesh computazionale fissata a priori. Mentre il fronte si muove e si deforma i punti d'interfaccia vengono aggiunti, rimossi o riconnessi se necessario. Questi metodi in generale non hanno una buona conservazione di massa, ciò li rende adatti solo a quei problemi in cui l'interfaccia è sufficientemente regolare, o in altri casi si è costretti ad aumentare sensibilmente la densità dei marker.

### 2.3 Metodi particles-based

I metodi "particle-based" sono caratterizzati dall'uso di particelle per la rappresentazione di quantità fluidodinamiche macroscopiche. Le equazioni di Navier-Stokes lagrangiane, in questi metodi, sono integrate su sfere di fluido (particle) aventi proprietà come massa, quantità di moto ed energia. Da un punto di vista computazionale questa tecnica fanno

della ridotta diffusività un notevole punto di forza. Sebbene negli scorsi anni queste tecniche fossero scarsamente utilizzate e per lo più relegate all'ambito accademico per fini di ricerca, oggi stanno diventando sempre più utilizzate e con la nascita di codici commerciali dedicati stanno prendendo piede anche nel mondo industriale. Altri vantaggi che hanno reso questi metodi numerici particolarmente attraenti negli ultimi anni è che essi si prestano bene alla parallelizzazione, sono sufficientemente flessibili e con l'impiego sempre più diffuso delle architetture multi-core si possono raggiungere efficienze computazionali a volte maggiori delle principali formulazioni concorrenti (metodi basati su elementi/volumi finiti).

Tra i principali metodi facenti parte della categoria particle-based ricordiamo:

- I metodi DEM (Discrete Element Method)
- I metodi LBM (Lattice Boltzmann Method)

### 2.3.1 Metodi DEM

Come già introdotto, in questa categoria di metodi, il comportamento dinamico del flusso viene rappresentato numericamente integrando, per ciascuna particella l'equazione fondamentale della meccanica classica:

$$\sum_{j \neq i} f_{j \rightarrow i} = m \ddot{x}_i$$

All'interno del termine  $f_{j \rightarrow i}$  ci sono tutte le forze che si scambiano le due particelle "i" e "j", tra le quali includiamo:

- Forze di attrito Coulombiano (statico/dinamico)
- Forza gravitazionale
- Forze elastiche
- Forze di attrito volvente
- Forze elettrostatiche
- Forze di coesione
- Forze d'isteresi
- ...

I metodi DEM si presentano normalmente in due formulazioni:

- Hard Sphere
- Soft Sphere

Senza entrare troppo nel dettaglio sui loro principi di funzionamento si può dire complessivamente che la prima rispetto alla seconda gode di una maggiore efficienza computazionale, inoltre sebbene la seconda sia più corretta fisicamente e normalmente più accurata, richiede un'operazione di "tuning" dei parametri riguardanti gli urti

anelastici (es. parametri di dumping, tempi di contatto tra le particelle, coefficienti di restituzione).

Normalmente questi modelli vengono ampiamente utilizzati nello studio dei meccanismi di segregazione nei flussi granulari come testimoniato da alcuni articoli presenti in letteratura [39],[27].

### 2.3.2 Metodi LBM

Il metodo Lattice Boltzmann trae le proprie origini dalla teoria cinetica dei gas formulata dallo stesso Ludwig Boltzmann. L'idea di base è che i gas o i fluidi possono essere immaginati come composti da un gran numero di piccole particelle che si muovono con moto randomico. Nel loro movimento, urtando, le particelle si scambiano quantità di moto ed energia proprio come delle "palle da biliardo" durante una collisione.

Questo processo può essere modellato con un'equazione di trasporto, detta equazione di Boltzmann, che nella sua formulazione classica si presenta nella forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f = \Omega \quad (2.1)$$

Dove  $f(\vec{x}, t)$  è la funzione di distribuzione delle particelle,  $\vec{u}$  è la velocità della particella, ed  $\Omega$  è un qualche operatore di collisione. Come tutti i metodi numerici, l'obiettivo principale è quello di ridurre gli  $\infty^{3N}$  gradi di libertà (dove "N" è il numero di particelle) ad un numero "n" pari al numero di nodi del reticolo. All'interno del reticolo le particelle possono muoversi solo lungo certe direzioni (vd. figura 2.1) e ad ogni direzione viene associata una probabilità che la particella si muova lungo essa per mezzo della funzione  $f(\vec{x}, t)$ .

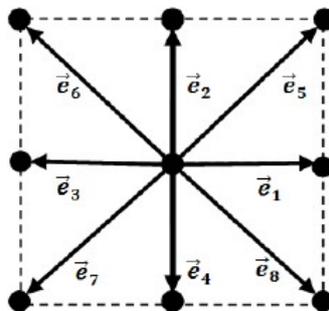


Figura 2.1: Rappresentazione dei nodi del metodo D2Q9

## 2.4 Metodi Level Set (LS)

I metodi level set sono stati introdotti inizialmente da Osher e Sethian [41] e applicati allo studio di flussi multifase. Il concetto di base consiste nel definire l'interfaccia come la curva di livello zero di una funzione continua di pseudo densità. Rispetto ai metodi VOF, di cui si tratterà nel paragrafo che segue, questi metodi garantiscono un tracciamento netto dell'interfaccia.

Sia  $\Omega(t)$  il dominio di calcolo la funzione  $\phi$  di level set viene così definita:

$$\begin{cases} \phi(\vec{x}, t) > 0 & \forall \vec{x} \in \Omega^+(t) \\ \phi(\vec{x}, t) < 0 & \forall \vec{x} \in \Omega^-(t) \\ \phi(\vec{x}, t) = 0 & \forall \vec{x} \in \Gamma(t) \end{cases}$$

Come già preannunciato l'interfaccia, che indichiamo con  $\Gamma(t)$ , sarà allora costituita dall'insieme dei punti in cui  $\phi$  assume valore zero.

$$\Gamma(t) = \{x \in \Omega : \phi(x, t) = 0\}$$

Densità e viscosità possono allora essere espresse in funzione di  $\phi$  attraverso la (2.2) e la (2.3).

$$\rho = \rho^- + (\rho^+ - \rho^-)H(\phi) \quad (2.2)$$

$$\mu = \mu^- + (\mu^+ - \mu^-)H(\phi) \quad (2.3)$$

In cui  $H(\phi)$  è una particolare funzione detta di Heaviside: 
$$\begin{cases} H(\phi) = 0 & \phi < 0 \\ H(\phi) = 1 & \phi > 0 \end{cases}$$

La funzione di level set viene propagata attraverso un'equazione di level set che assume la forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{div}(\phi \vec{u}) \quad (2.4)$$

Per come è costruito il modello Level Set è evidente che la sua applicazione si presta bene ad essere applicato alle simulazioni di fenomeni in cui sono coinvolti fluidi immiscibili.

C'è inoltre da dire che normalmente l'integrazione della (2.4) è piuttosto complessa e richiede degli schemi numerici "ad hoc", adatti per funzioni che presentano delle forti discontinuità, come ad esempio il metodo di Godunov o il metodo upwind.

Nel complesso i metodi "LS" sono ottimi per la ricostruzione dell'interfaccia perché garantiscono un tracciamento netto, d'altra parte però non sono conservativi, problema che in generale viene superato infittendo pesantemente la mesh di calcolo.

### 2.5 Metodi VOF

In questo paragrafo si cercherà di fare una trattazione estensiva dei metodi VOF, il motivo per cui ci si soffermerà per lo più su questa categoria di metodi è giustificata dall'ampio uso che se ne fa per le simulazioni numeriche dei processi di colaggio in ambito propulsivo, come testimoniato da diversi articoli [5],[11],[48],[49].

Dall'attenta analisi di quanto disponibile in letteratura si è scelto di impiegare questo metodo per gli scopi di questo lavoro in quanto questa tecnica sembra oramai piuttosto matura e consolidata per i problemi oggetto di questa dissertazione. Tuttavia c'è da dire, come poi si vedrà in seguito, che nella sua formulazione classica questo metodo numerico non permette di trattare il propellente come un fluido bi-fase composto da una fase solida ed una liquida, questo esclude la possibilità di simulare direttamente gli eventuali processi di segregazione che avvengono durante la colata costringendo ad un'analisi indiretta sulla base degli stati tensionali o sul tracciamento delle traiettorie delle particelle fluide, propriamente intese come un'unica miscela di solido e liquido.

I metodi VOF sono stati introdotti negli anni 70' da De Bar [13], in questi metodi la geometria dell'interfaccia viene ricostruita attraverso dei polinomi a tratti di grado unitario.

In linea generale tuttavia nel corso degli anni si sono sviluppate altre tecniche che, sebbene meno accurate, hanno il vantaggio di essere più semplici da implementare. Si citano ad esempio il metodo SLIC (Simple Line Interface Calculation) ideato da Noh e Woodward [40] negli stessi anni 70' ed il metodo PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) sviluppato da Parker e Youngs nel 92' [43]. La differenza sostanziale tra questi due metodi (PLIC e SLIC) risiede nel fatto che nel primo la normale all'interfaccia non è necessariamente allineata con uno dei bordi della cella di calcolo ma la pendenza di ciascun tratto di retta viene determinata sulla base del valore del gradiente della "volume fraction" ( $\alpha$ ) calcolato nel nodo centrale della relativa cella. Una volta determinata la pendenza del tratto di retta sulla cella, per determinare la quota si procede per via iterativa fino a quando non viene soddisfatta la condizione sul valore di  $\alpha$  nella cella. Nel metodo SLIC invece la retta viene messa parallela ad uno dei quattro lati (caso 2D), facendo in modo che la normale alla retta sia nella direzione in cui è massima la variazione della funzione "volume fraction" e anche in questo caso la quota viene aggiustata in modo da garantire il corretto valore di  $\alpha$  nella cella in questione.

Si vuole ora specificare più nel dettaglio il significato di "volume fraction", si consideri allora un sistema dove siano presenti "n" fluidi, si prenda una porzione di volume fluido, che chiameremo cella, ed indichiamo con  $V$  il volume di tale porzione.

Indichiamo con  $V_i$  la porzione di volume ( $V$ ) della cella occupata dal fluido  $i$ -esimo, possiamo allora indicare con "volume fraction"  $\alpha_i$  la seguente quantità:

$$\alpha_i = \frac{V_i}{V}$$

Da cui è facile comprendere che valgono le seguenti proprietà:

$$-\alpha_i \begin{cases} = 0 & \text{se nella cella non è presente il fluido } i - \text{esimo} \\ 0 \leq \alpha_i \leq 1 & \text{nella contenente l'interfaccia} \\ = 1 & \text{se la cella è piena di fluido } i - \text{esimo} \end{cases}$$

$$-\sum_i \alpha_i = 1$$

$$-V_i = \int_V \alpha_i dV$$

$-M_i = \int_V \rho_i \alpha_i dV$  (dove con  $M_i$  si intende la massa del fluido  $i$ -esimo contenuto all'interno della cella)

$$-M = \sum_i M_i$$

Da cui discendono le relazioni:

$$\rho = \frac{1}{V} \sum \int_V \rho_i \alpha_i dV \quad (2.5)$$

$$\mu = \frac{1}{V} \sum \int_V \mu_i \alpha_i dV \quad (2.6)$$

Ciascuno dei fluidi obbedisce alla ben nota relazione di continuità da cui si può riscrivere:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\rho_i \vec{u}) = 0 \quad (2.7)$$

Moltiplicando la (2.7) per  $V$  e dividendo per  $M$  si ottiene in definitiva l'equazione di avvezione per le "volume fraction":

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \text{div}(\alpha_i \vec{u}) = 0 \quad (2.8)$$

Si tenga presente che normalmente per questo set di equazioni si utilizza una discretizzazione con il metodo dei volumi finiti che nella sua forma conservativa assicura la conservazione della massa di fluido, data la linearità della relazione tra  $\alpha$  e  $\rho$ .

## 2.6 Metodo CLSVOF

In questo paragrafo viene descritta la metodologia utilizzata per la realizzazione delle simulazioni che prevede un accoppiamento tra metodo VOF e metodo LS, tale metodo viene denominato CLSVOF (Coupled Level Set Volume of Fluid).

Il metodo CLSVOF nasce primariamente per sopperire alle mancanze dei due metodi che lo costituiscono, in particolar modo, come già accennato, il metodo LS non è conservativo e può andare in crisi nel momento in cui vi siano delle zone in cui l'interfaccia vada incontro ad importanti fenomeni di stiramento.

D'altra parte il metodo VOF non garantisce una ricostruzione accurata dell'interfaccia in quanto tende a diffonderne i contorni causando un comportamento fisicamente poco sensato nel momento in cui si debbano trattare fluidi con proprietà piuttosto differenti.

Si capisce quindi che l'accoppiamento dei due metodi risulta giustificata quando i fluidi in analisi presentano differenze di densità e viscosità piuttosto importanti.

Riprendiamo allora le due equazioni di avvezione (equazioni (2.4) e (2.8)), l'una relativa alla funzione di level-set che indichiamo con  $\phi$  e l'altra relativa alla frazione volumetrica che indichiamo con  $\alpha$ .

Caratterizziamo anzitutto come celle contenenti l'interfaccia fluida quelle celle che soddisfano le seguenti proprietà:

1.  $|\phi| < (0.5\Delta x)^{1/2}$
2.  $0 < \alpha < 1$

Per le altre celle varrà:

- $\text{sign}(\phi) = -1$  e  $\alpha = 1$
- $\text{sign}(\phi) = +1$  e  $\alpha = 0$

Di seguito viene proposta la formulazione bidimensionale originariamente sviluppata da Ménard [36].

Definiamo la funzione ricostruita di level-set  $\phi_{i,j}^R$  nel seguente modo : <sup>1</sup>

$$\phi_{i,j}^R = a_{i,j}(x - x_i) + b_{i,j}(y - y_i) + c_{i,j}$$

I coefficienti  $a_{i,j}$  e  $b_{i,j}$  sono presi in maniera tale da soddisfare la condizione di normalizzazione  $a_{i,j}^2 + b_{i,j}^2 = 1$ , in modo che essi rappresentino le coordinate del vettore normale all'interfaccia.  $c_{i,j}$  rappresenta allora la distanza tra l'interfaccia e il centroide della cella, di coordinate  $(x_i, y_i)$ .

I coefficienti  $a_{i,j}$ ,  $b_{i,j}$  e  $c_{i,j}$  vengono determinati in maniera che  $\phi_{i,j}^R$  sia più vicino possibile al valore reale della funzione di level-set  $\phi$ .

---

<sup>1</sup>la definizione della funzione di level set in questa forma si deve a Sussman e Puckett [53]

Si procede allora a cercare una soluzione ai minimi quadrati introducendo la funzione di errore:

$$E_{i,j} = \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \delta(\phi) (\phi - a_{i,j}(x - x_i) - b_{i,j}(y - y_j) - c_{i,j})^2 dx dy$$

Che in forma discreta, con uno stencil a nove punti (figura 2.2), si riduce a

$$E_{i,j} = \sum_{i'=i-1}^{i+1} \sum_{j'=j-1}^{j+1} w_{i'-i, j'-j} \delta_\varepsilon(\phi_{i',j'}) (\phi_{i',j'} - a_{i,j}(x_{i'} - x_i) - b_{i,j}(y_{j'} - y_j) - c_{i,j})^2 dx dy \quad (2.9)$$

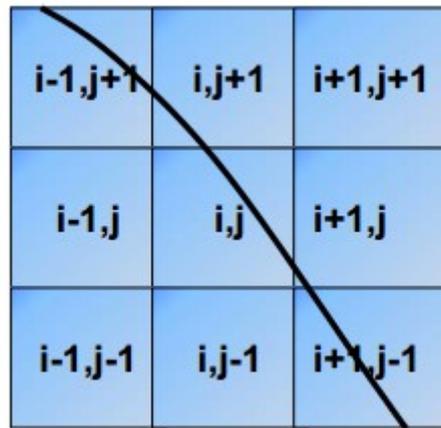


Figura 2.2: Stencil a nove punti

Dove  $\delta_\varepsilon(\phi_{i',j'})$  rappresenta una funzione top-hat che vale “uno” in un intervallo  $\varepsilon$  (con  $\varepsilon = \sqrt{2}dx$ ) e  $w_{i'-i, j'-j}$  rappresentano dei fattori peso.

Minimizzare la (2.9) significa imporre che le derivate della funzione di errore  $E_{i,j}$  rispetto alle tre variabili  $a_{i,j}, b_{i,j}, c_{i,j}$  siano identicamente nulle.

Ciò conduce al sistema sottoriportato:

$$\begin{bmatrix} \sum \sum whX^2 & \sum \sum whXY & \sum \sum whX \\ \sum \sum whXY & \sum \sum whY^2 & \sum \sum whY \\ \sum \sum whX & \sum \sum whY & \sum \sum wh \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i,j} \\ b_{i,j} \\ c_{i,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \sum wh\phi X \\ \sum \sum wh\phi Y \\ \sum \sum wh\phi \end{bmatrix}$$

Dove si è indicato con:

- $wh \leftrightarrow w_{i'-i, j'-j} \delta_\varepsilon(\phi_{i',j'})$
- $X \leftrightarrow (x_{i'} - x_i)$
- $Y \leftrightarrow (y_{j'} - y_j)$
- $\phi \leftrightarrow \phi_{i,j}$

Una volta trovati i coefficienti  $a_{i,j}$ ,  $b_{i,j}$ ,  $c_{i,j}$  è allora nota la direzione della normale all'interfaccia e la sua posizione (figura 2.3) occorre allora determinare la frazione di volume, relativamente alla cella considerata:

$$\alpha_{i,j} = \frac{1}{dxdy} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} H(a_{i,j}(x - x_i) + b_{i,j}(y - y_j) + c_{i,j}) dx dy \quad (2.10)$$

Dove con H si intende ancora la funzione di Heaviside.

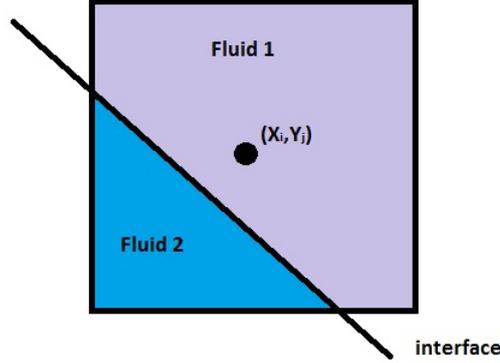


Figura 2.3: Posizione dell'interfaccia nella cella i,j

Si tenga presente che il valore trovato di  $\alpha_{i,j}$  non necessariamente coincide con quello calcolato propagando la relazione (2.8). Consideriamo ora il problema inverso, dalla relazione (2.8) calcoliamo il valore della "volume fraction"  $\alpha_{i,j}$ , supponiamo di mantenere invariata la normale all'interfaccia (dunque i coefficienti  $a_{i,j}$  e  $b_{i,j}$  rimarranno uguali a quelli calcolati al punto precedente) e variamo  $c_{i,j}$  nel seguente modo:

$$c_{i,j}^{NEW} = c_{i,j} - \frac{\frac{1}{dxdy} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} H(a_{i,j}(x - x_i) + b_{i,j}(y - y_j) + c_{i,j}) dx dy - \alpha_{i,j}^n}{\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \delta(a_{i,j}(x - x_i) + b_{i,j}(y - y_j) + c_{i,j}) dx dy} \quad (2.11)$$

Dove il denominatore rappresenta la lunghezza del segmento di interfaccia che cade sulla cella i,j (o la dimensione della superficie nel caso tridimensionale).

A questo punto possiamo riassumere gli step principali dell'algorithm CLSVOF.

Inizializzazione:

- Si parte da un valore di  $\phi^{n=0}$
- Si calcolano i coefficienti  $a_{i,j}$ ,  $b_{i,j}$ ,  $c_{i,j}$  e  $\phi^{R,n=0}$
- Si calcola  $\alpha_{i,j}^n$  attraverso la (2.10).

Propagazione accoppiata delle variabili  $\phi$  e  $\alpha$  :

1. Si fissa  $\phi = \phi^n$
2. Si calcolano  $\tilde{\phi}$  e  $\tilde{\alpha}^n$  propagando le equazioni (2.4) e (2.8) con i valori di  $\alpha$  e  $\phi$
3. Si calcolano i nuovi coefficienti  $a_{i,j}, b_{i,j}, c_{i,j}$  per  $\tilde{\phi}_{i,j}^R$
4. Noto  $\tilde{\phi}_{i,j}^R$ , si calcola  $c_{i,j}^{NEW}$  attraverso la (2.11) in modo da soddisfare il principio di conservazione della massa.
5. Dalla convezione delle variabili  $\tilde{\phi}$  e  $\tilde{\alpha}^n$  si ottengono  $\hat{\alpha}^n$  e  $\hat{\phi}$
6. Si calcola  $\alpha^{n+1}$  e  $\phi^{n+1}$  utilizzando opportune tecniche di splitting di operatori per la discretizzazione dell'equazione di trasporto descritte in [53].
7. Si corregge il valore di  $\alpha^{n+1}$  imponendo
 
$$\begin{cases} \alpha^{n+1} = 0 & \text{se } \alpha^{n+1} < 0 \text{ o } \phi^{n+1} < -\Delta x \\ \alpha^{n+1} = 1 & \text{se } \alpha^{n+1} > 1 \text{ o } \phi^{n+1} > \Delta x \\ \alpha^{n+1} = \alpha^{n+1} & \text{negli altri casi} \end{cases}$$
8. Si calcolano i coefficienti  $a_{i,j}, b_{i,j}, c_{i,j}$  e si corregge il valore di  $\phi^{n+1}$
9. Si risolve l'equazione di Navier-Stokes mediante opportuni metodi di proiezione e si torna al punto 1.

Di seguito viene proposto uno diagramma a blocchi semplificato che illustra concettualmente gli step da seguire:

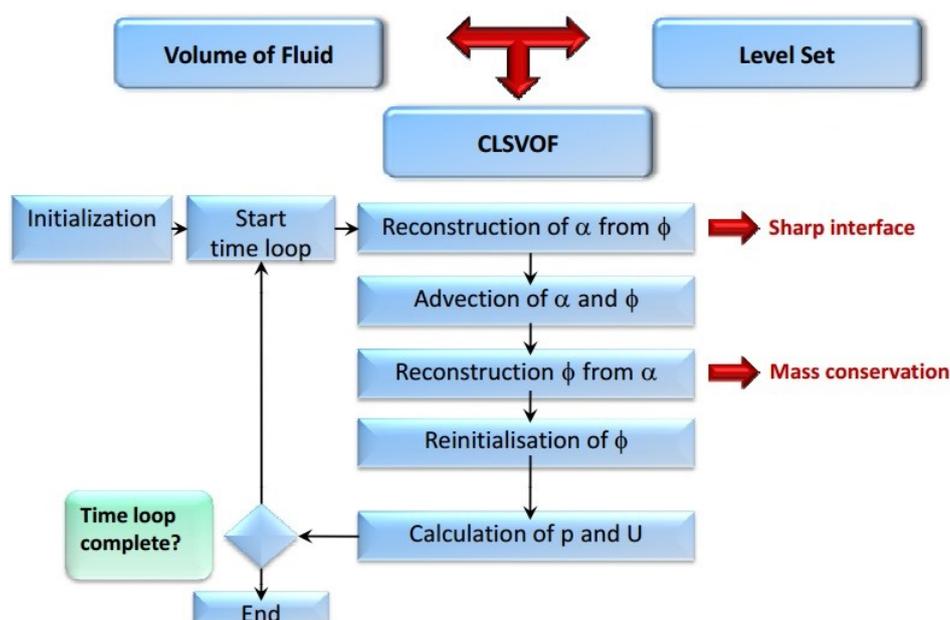


Figura 2.4: Diagramma a blocchi del metodo CLSVOF

### 2.7 Metodo pseudo-VOF

In questo paragrafo si vuole solo dare un cenno del principio di funzionamento della tecnica pseudo-VOF, tecnica implementata all'interno del software commerciale FLOW 3D.

Nella tecnica pseudo-VOF, differentemente dal metodo classico, l'equazione (2.8) di avvezione delle volume-fraction viene calcolata solo nelle celle contenenti il fluido d'interesse (nel caso relativo alla nostra simulazione il fluido d'interesse sarà il propellente), ne consegue dunque un costo computazionale ridotto, vantaggi in termini di accuratezza e in termini di una diminuzione significativa della memoria allocata.

Di fatto si può immaginare tale tecnica come un misto tra tecniche front-tracking e front-capturing.

Attraverso l'equazione di Navier-Stokes viene calcolata la velocità con il quale si muove il volume contenente il liquido e di seguito il volume viene redistribuito sulle celle attraversate dal volume di fluido.

Nel complesso tale tecnica somiglia a quelle di natura lagrangiana nel quale il contorno del volume di fluido movimentato viene ad essere l'unione tra la superficie della mesh di calcolo (quella costruita all'inizio della simulazione) e la superficie libera del fluido.

# Capitolo 3

## Modellistica fisica e numerica per il trattamento delle interfacce fluide

In questo capitolo verranno richiamati i concetti relativi al modello fisico alla base delle simulazioni fluidodinamiche ed infine verranno illustrati gli step eseguiti per l'allestimento delle simulazioni condotte mediante l'ausilio di due diversi software per analisi CFD: Fluent e Flow3D.

### 3.1 Modello fisico

Nell'ambito dei flussi incomprimibili il modello matematico che descrive il comportamento dinamico dei fluidi si basa su un set di equazioni che esprimono fisicamente il principio di conservazione della massa (equazione di continuità) e quello di conservazione della quantità di moto (equazione di Navier-Stokes). Di seguito dunque verranno illustrati i passaggi che permettono di ricavare il modello completo.

#### 3.1.1 Equazione di continuità

Secondo il principio di conservazione della massa si può affermare che, fissato un volume di controllo "V", la massa contenuta in esso varia nel tempo solo per effetto di flussi di massa attraverso la frontiera "S".

In termini analitici quanto detto si può esprimere attraverso la relazione:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_S \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS$$

Dal momento che il volume di controllo rimane fisso nel tempo è possibile portare la derivata sotto il segno di integrale ed applicando al secondo membro il teorema di Gauss è possibile pervenire all'espressione:

$$\int_V \frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho \vec{u}) dV = 0$$

Si tenga presente che non si sono fatte particolari ipotesi sul volume fluido dacché la relazione precedente deve risultare verificata per un generico "V", ciò comporta che il termine integrando deve risultare identicamente nullo, in tal modo si perviene alla formulazione differenziale:

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho\vec{u}) = 0 \quad (3.1)$$

### 3.1.2 Equazione di bilancio della quantità di moto

L'equazione di bilancio della quantità di moto discende direttamente dal secondo principio della dinamica, secondo il quale, fissato un volume di controllo, la variazione di quantità di moto è dovuta all'azione risultante delle forze esterne. Da cui si può scrivere:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\vec{u} dV = - \int_S \rho\vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{n}) dS + \int_V \rho\vec{F} dV + \int_S \mathbf{T}\vec{n} dS$$

- “ $\vec{F}$ ” rappresenta le forze di volume che agiscono sul fluido (es. forza di gravità, forza di galleggiamento)

- “ $\mathbf{T}$ ” rappresenta le forze di superficie (es. tensione superficiale, sforzi di taglio)

Applicando ancora una volta il teorema di Gauss è possibile pervenire, anche in questo caso alla formulazione differenziale:

$$\frac{d\rho\vec{u}}{dt} + \text{div}(\rho\vec{u}\vec{u}) - \rho\vec{F} - \text{div}(\mathbf{T}) = 0 \quad (3.2)$$

A questo punto per chiudere il set di equazioni occorre introdurre dei modelli che leghino in qualche maniera le quantità “ $\vec{F}$ ” e “ $\mathbf{T}$ ”, finora incogniti, al campo di velocità, in modo da ridurre il numero di incognite del problema e renderlo in definitiva risolvibile.

Per quanto riguarda la quantità  $\vec{F}$  per i nostri propositi si considererà solamente l'azione gravitazionale da cui si potrà esprimere:

$$\vec{F} = \vec{g} \quad (\text{dove } \vec{g} \text{ rappresenta l'accelerazione gravitazionale})$$

Concernemente, per un fluido Newtoniano, “ $\mathbf{T}$ ” è legato linearmente al tensore delle deformazioni “ $\mathbf{D}$ ” secondo la relazione costitutiva:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \lambda\text{div}(u)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}$$

Dove:

-  $\mathbf{I}$  è il tensore unitario

$$- \mathbf{D} = \frac{1}{2}(\text{grad}(\vec{u}) + \text{grad}(\vec{u})^T)$$

-  $\mu$  è il coefficiente di viscosità dinamica

-  $\lambda$  è il coefficiente di “bulk viscosity” il cui effetto è generalmente trascurabile tranne nei casi di flussi comprimibili.

Inserendo nella (3.2) i due termini ricavati si ottiene:

$$\frac{D\rho\vec{u}}{Dt} = \rho\vec{g} - \nabla p + \text{div}(2\mu\mathbf{D} + \lambda\text{div}(u)\mathbf{I})$$

Che nel caso di flusso incomprimibile si riduce a:

$$\frac{D\rho\vec{u}}{Dt} = \rho\vec{g} - \nabla p + \mu\nabla^2\vec{u} \quad (3.3)$$

Le equazioni (3.1) e (3.3) insieme alle opportune condizioni al contorno e con le condizioni all'istante iniziale sono in grado di fornire la soluzione completa del problema fluidodinamico.

## 3.2 Condizioni al contorno e condizioni iniziali

Il problema sull'assegnazione delle condizioni al contorno rappresenta in generale una difficoltà tutt'altro che di secondaria importanza dal momento che la soluzione del problema fluidodinamico dipende fortemente da esse.

Si possono anzitutto distinguere tre categorie principali di condizioni al contorno:

- Condizioni di Dirichlet: nel quale viene assegnato il valore della variabile al contorno (sia essa la velocità o la pressione)
- Condizioni di Neumann: nel quale vengono assegnate le derivate della variabili, sempre valutate sul contorno del dominio
- Condizioni di Robin: le quali rappresentano una combinazione lineare delle prime due.

Entrando più nel dettaglio verranno descritte le condizioni al contorno che sono state poi utilizzate all'interno delle simulazioni.

### 3.2.1 Velocity inlet

La condizione di velocity inlet definisce sul contorno il campo di velocità del fluido e dunque, nota la sezione d'ingresso, la portata volumetrica in entrata. Nei flussi incomprimibili questo genere di condizione lascia libere di variare le variabili totali, in modo da rispettare il campo di velocità imposto. Da quanto detto risulta chiara che questo genere di condizione risulta inadatta nei flussi comprimibili perché condurrebbe a risultati senza alcun significato fisico dal momento che permetterebbe alle variabili di ristagno di fluttuare assumendo qualsiasi valore.

### 3.2.2 No-slip condition

La condizione di no-slip rientra nella categoria delle condizioni di Dirichlet. Come suggerisce il nome la condizione di non-slip impone che in presenza di una parete solida il fluido assuma la stessa velocità della parete, senza scorrere relativamente ad essa.

L'idea che c'è dietro questa condizione al contorno è la seguente: da un punto di vista microscopico le molecole di fluido sono in continuo movimento aleatorio, tuttavia se si considera una particella fluida, ossia un campione sufficientemente rappresentativo perché si possa definire una velocità media, si può osservare, che in presenza della parete, il moto medio che assumono le particelle sia approssimativamente nullo, dal momento che gli urti molecolari con la parete assumono una caratteristica di completa randomicità.

### 3.2.3 Pressure outlet

Anche la condizione di pressure outlet rientra nella categoria delle condizioni di Dirichlet e consiste nell'imposizione di un valore al contorno di pressione statica (o differenziale). Nominalmente questo genere di condizione viene impiegata solo nei casi di flussi subsonici.

### 3.2.4 Condizioni iniziali

Come già introdotto, poiché si è in presenza di un sistema di equazioni differenziali tempo varianti, è necessario assegnare le condizioni sul campo di velocità all'istante iniziale. Si faccia attenzione al fatto che si è fatto riferimento solo alla variabile di velocità, dal momento che, nei flussi incomprimibili, si è in mancanza di un'equazione di avvezione per la pressione, tale aspetto, come verrà specificato in seguito, costituisce un'ulteriore difficoltà nella soluzione dell'equazione di Navier-Stokes, difficoltà che in genere viene risolta mediante l'utilizzo di opportuni metodi di proiezione.

Riferendosi alle simulazioni condotte, le condizioni iniziali imposte prevedevano l'inizializzazione del getto di propellente in colata con una velocità pari a quella di ingresso, mentre nei restanti nodi del dominio la velocità veniva posta identicamente nulla. Questa condizione, sebbene fisicamente non sia propriamente corretta, dal momento che il getto di propellente, in rispetto della continuità, tende a restringersi man mano che accelera sotto l'effetto gravitazionale, è risultata essere una buona approssimazione come testimoniato in [11].

### 3.2.5 Condizioni di compatibilità

Occorre tener presente che nei flussi incomprimibili le condizioni iniziali e quelle al contorno non possono essere assegnate in maniera del tutto arbitraria, dal momento che è necessario rispettare, ad ogni istante di tempo, la condizione di incomprimibilità, dunque anche all'istante iniziale.

Questa condizione si esprime imponendo che la divergenza del campo di velocità inizialmente assegnato sia identicamente nulla in ogni punto del dominio, da cui indicando con  $\vec{u}_0(\vec{x}, t)$  il campo di velocità all'istante iniziale si può riscrivere quanto detto nella forma:

$$\operatorname{div}(\vec{u}_0) = 0 \quad (3.4)$$

Integrando la relazione di continuità sul volume del dominio e poi applicando il teorema di Gauss si perviene alla relazione:

$$\int_V \operatorname{div}(\vec{u}(\vec{x}, t)) = \oint_s \vec{n} \cdot \vec{u}(\vec{x}, t)|_S = 0 \quad (3.5)$$

Indicando con  $\vec{b}(\vec{x}_s, t)$  il dato al contorno si può riscrivere:

$$\oint_s \vec{n} \cdot \vec{u}(\vec{x}, t)|_S = \oint_s \vec{n} \cdot \vec{b}(\vec{x}_s, t) \quad (3.6)$$

In virtù della (3.4), il primo termine della (3.6), osservando anche la (3.5), risulta identicamente nullo e ciò conduce a poter scrivere:

$$\oint_s \vec{n} \cdot \vec{b}(\vec{x}_s, t) = 0 \quad \forall t \geq 0$$

Si tenga peraltro presente che la relazione (3.6) ha anche valore locale sicché vale:

$$\vec{n} \cdot \vec{u}(\vec{x}, t)|_S = \vec{n} \cdot \vec{b}(\vec{x}_s, t)$$

Riassumendo le condizioni di compatibilità si possono riscrivere tramite tre relazioni analitiche:

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\vec{u}_0) = 0 \\ \oint_s \vec{n} \cdot \vec{b}(\vec{x}_s, t) = 0 \\ \vec{n} \cdot \vec{u}(\vec{x}, t)|_S = \vec{n} \cdot \vec{b}(\vec{x}_s, t) \end{cases}$$

### 3.2.6 Forma conservativa di una PDE

In generale nella fluidodinamica numerica è sempre conveniente porre una PDE, qualora risulti possibile, in forma conservativa.

Una PDE si dice posta in forma conservativa quando i coefficienti che compaiono davanti alle derivate sono costanti o se variabili non compaiono esplicitamente nell'equazione. Più propriamente si dice che una PDE si presenta in forma conservativa forte se le derivate spaziali che compaiono all'interno delle equazioni si possono racchiudere all'interno dell'operatore divergenza.

Per comprendere meglio il concetto si osservino le equazioni (3.7) e (3.8) sottostanti, le quali rappresentano l'equazione di continuità nel caso unidimensionale rispettivamente scritte nella forma conservativa e non:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} u + \frac{\partial u}{\partial x} \rho = 0 \quad (3.8)$$

Applicando alla prima equazione un generico schema alle differenze finite, esempio uno schema centrato, si potrebbe notare che i termini interni al dominio si elidono a due a due e dunque la soluzione della (3.7) verrebbe a dipendere dai soli valori al contorno. Ciò è in accordo con la formulazioni integrale del problema, infatti integrando la (3.7) su un volume chiuso ed applicando il teorema di Gauss si ottiene che la soluzioni dipendono dalle sole condizioni al contorno, come già osservato in precedenza (si veda l'equazione (3.6)).

Al contrario se si applicasse alla (3.8) il medesimo schema centrato non si avrebbe, come nel primo caso, la cancellazione dei termini interni al dominio e la soluzione non verrebbe più a dipendere dai soli valori al contorno.

Per il metodo ai volumi finiti, di cui si tratterà ampiamente in seguito, seppure con qualche variazione sulla formulazione, valgono le stesse considerazioni fatte finora, per cui in generale l'equazione viene integrata nella forma conservativa per garantire il rispetto della fisica del problema.

### 3.3 Codici di simulazione

Dopo aver effettuato un illustrato i modelli fisici di base in questo paragrafo vengono descritte le differenti fasi di set-up dei parametri all'interno dei due codici utilizzati per le simulazioni, sottolineando i vantaggi e svantaggi di entrambi e le eventuali difficoltà riscontrate durante la fase di implementazione.

#### 3.3.1 Fluent

Il primo passo per l'allestimento della simulazione è stato quello di realizzazione della mesh di calcolo, tale step risulta tutt'altro che banale dal momento che occorre coniugare esigenze di accuratezza della soluzione con costi computazionali, e dunque tempi di calcolo, accettabili. Si capisce dunque che la realizzazione della mesh è difatti un processo iterativo che richiede di volta in volta opportuni raffinamenti laddove la soluzione fluidodinamica presenti forti variazioni. In particolare, la difficoltà maggiore è stata quella di caratterizzare la dimensione minima della griglia in corrispondenza del getto di pro-pellente in colata dal momento che man mano che il getto scende accelera e dunque, per continuità, subisce una strizione.



Si procede anzitutto impostando la tipologia di simulazione, che nel caso in particolare sarà di tipo transitorio, si imposta il valore e la direzione dell'accelerazione gravitazionale ed il tipo di solutore che nel caso di simulazioni di flussi incomprimibili è il "pressure-based solver"

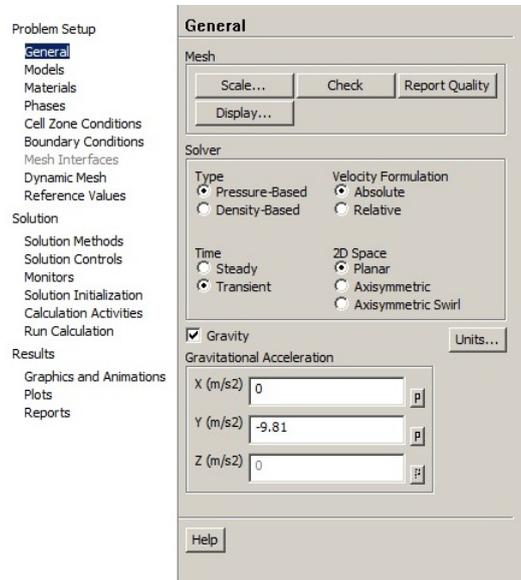


Figura 3.2: Settaggio pannello generale

È bene anche controllare che le unità di misure siano corrette dal momento che, cambiando la tipologia di meshatore, è possibile che si verifichino delle incongruità tra i vari tipi.

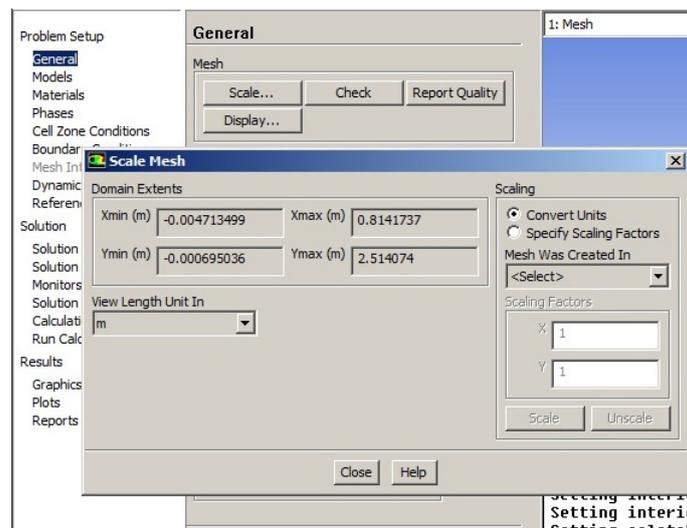


Figura 3.3: Controllo unità di misura

Si passa poi ad impostare i modelli da utilizzare, nel particolare caso si è scelto il metodo CLSVOF per le ragioni illustrate in precedenza, il numero dei materiali coinvolti nella simulazione ed eventualmente si possono inserire dei modelli di turbolenza, nel caso specifico non sono stati utilizzati particolari modelli dunque il flusso viene ritenuto “laminare”.

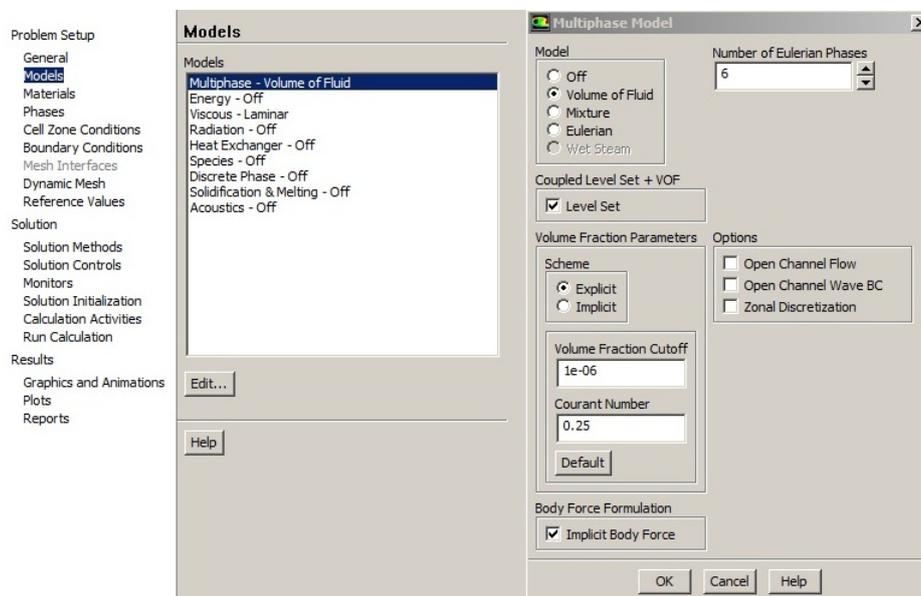


Figura 3.4: Scelta dei modelli da utilizzare

Si impostano poi le proprietà di viscosità e densità dei materiali coinvolti.

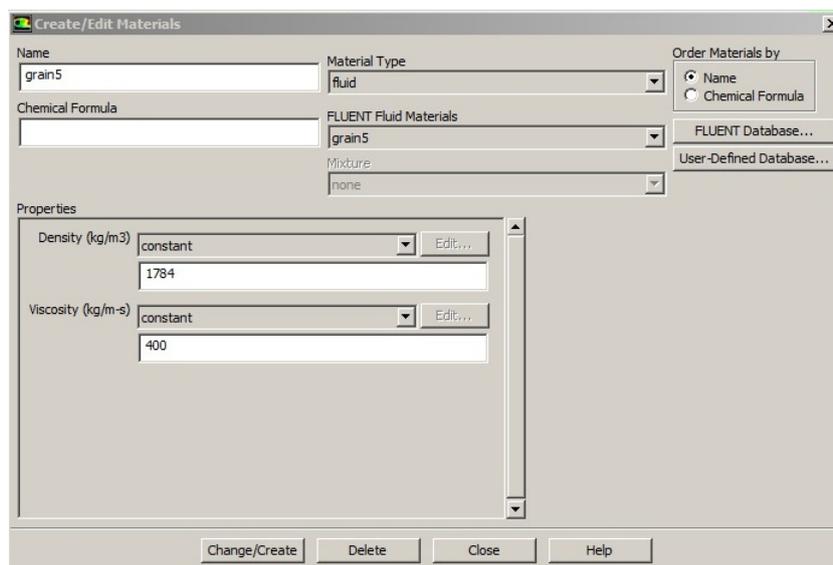


Figura 3.5: Impostazione valori di densità e viscosità

Si impostano le condizioni al contorno, nel dettaglio si vedrà poi nel capitolo 4 l'insieme delle specifiche condizioni utilizzate per la simulazione.

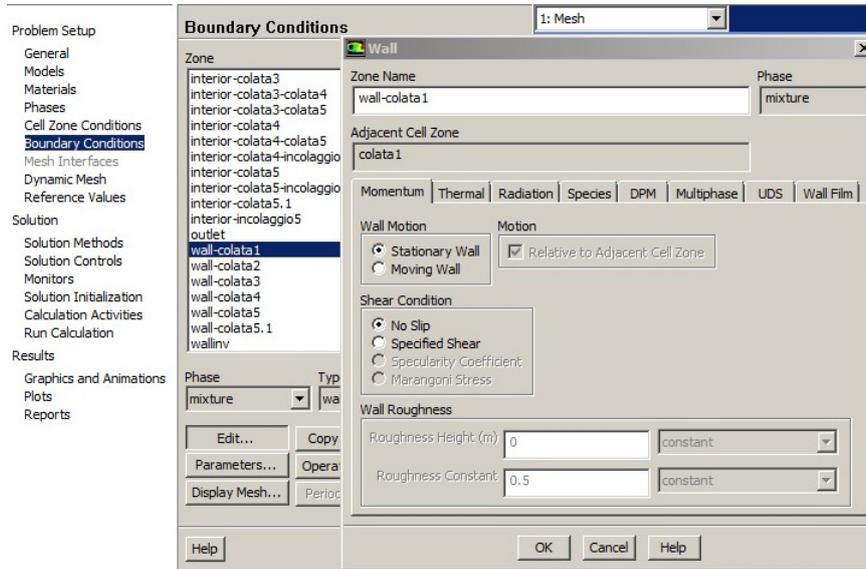


Figura 3.6: Impostazione condizioni al contorno

Particolare attenzione va posta nell'impostazione del riferimento di pressione, il quale deve essere fissato in un punto nel quale è noto che la pressione abbia un valore costante. Nel caso particolare, avendo impostato la condizione di pressure-outlet, si sceglierà come riferimento proprio un punto vicino all'outlet.

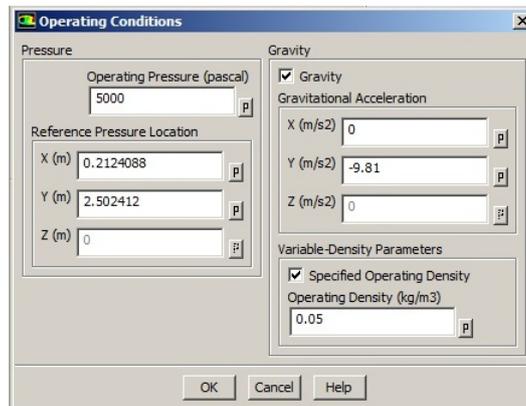


Figura 3.7: Impostazione condizioni operative

Vengono settati i differenti metodi numerici di discretizzazione relativi ai vari termini dell'equazione di Navier Stokes, in Appendice A sono descritti nel dettaglio il significato dei diversi parametri.

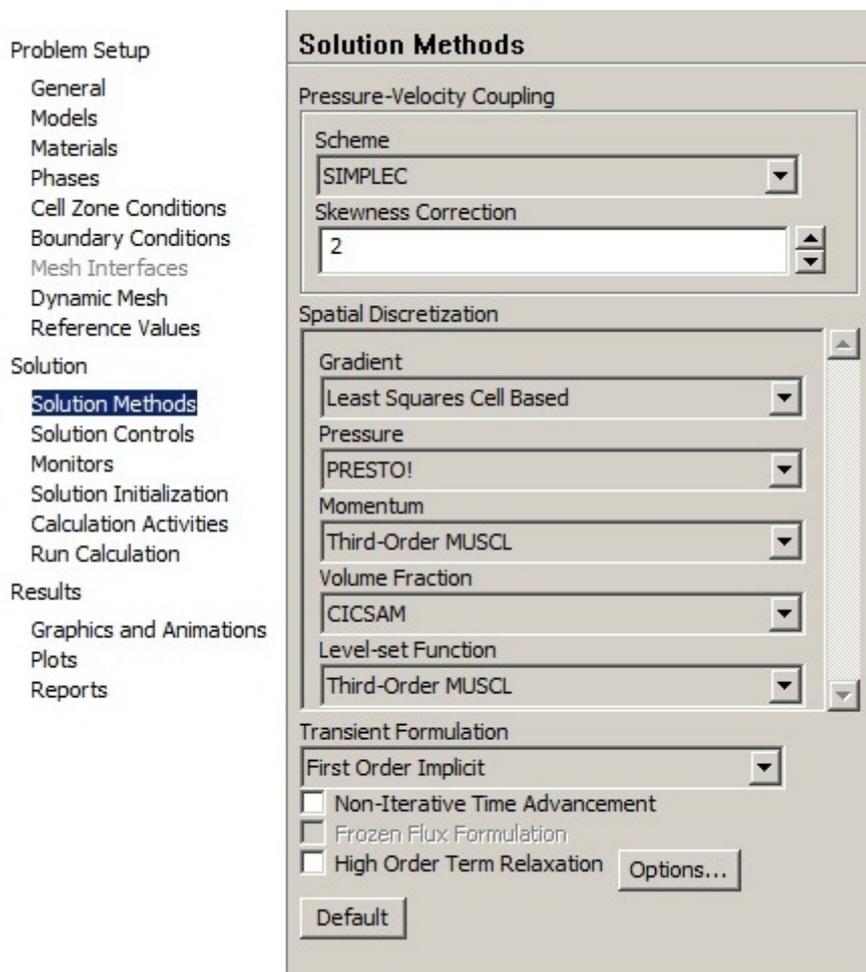


Figura 3.8: Setting metodi numerici di discretizzazione

Si regolano i fattori di sottorilassamento, ossia dei parametri che agevolano la convergenza delle equazioni del problema fluidodinamico. In sostanza nel problema fluidodinamico ci si trova a risolvere un sistema, ad ogni step temporale e per ogni variabile in gioco. Di norma tale sistema viene risolto per via iterativa e dal momento che tra un'iterazione e l'altra la variabile propagata può subire delle variazioni repentine che possono rallentare la convergenza (o portare anche a divergere) normalmente si riscrive la soluzione al passo  $n$ -esimo come combinazione lineare tra la stessa e quella al passo  $n+1$ . I parametri di sottorilassamento costituiscono allora i coefficienti di tale combinazione lineare. Il tuning di tali parametri può essere effettuato in corso di simulazione in modo da ottimizzare i tempi riducendo il numero di iterazioni per ciascuno step temporale.

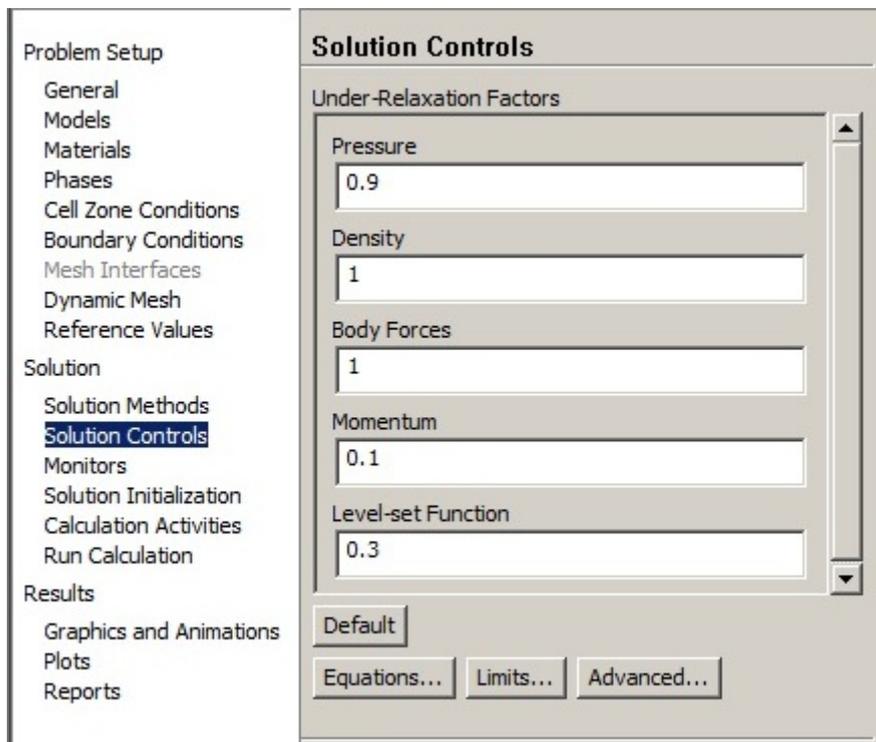


Figura 3.9: Setting parametri di sottorilassamento

Va poi inizializzata la soluzione, settando tutte le celle ad un dato valore di riferimento pari ad esempio a quello relativo all'outlet.

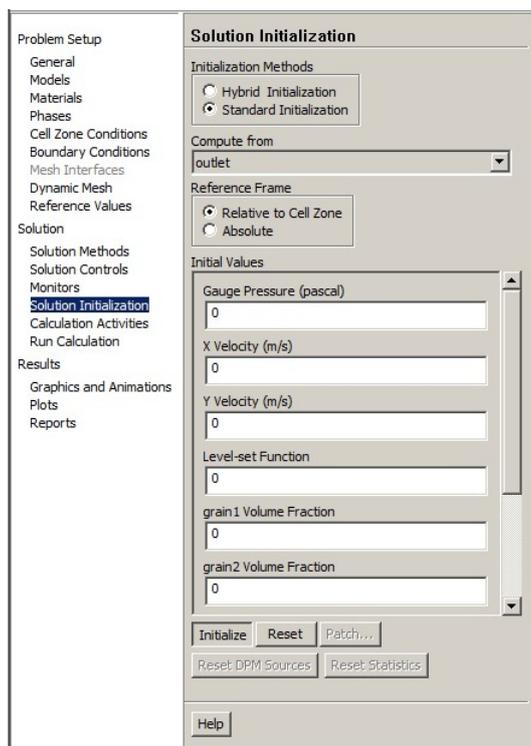


Figura 3.10: Setting metodi numerici di discretizzazione

Si procede poi inizializzando la colonna di propellente in colata, questo viene fatto al fine di ridurre i tempi di calcolo. Il procedimento sommariamente consiste nel marcare le celle appartenenti alla colonna di colata con il valore di volume fraction, corrispondente al batch in colata, pari ad uno (la colonna di colata viene approssimata con un parallelepipedo di base pari alla dimensione dell'inlet).



Figura 3.11: Inizializzazione “volume fraction” sulla colonna di colata

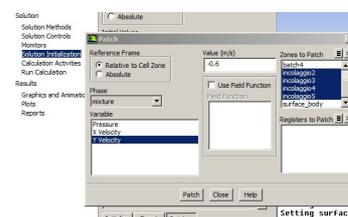


Figura 3.12: Inizializzazione valore di velocità sulla colonna di colata (pari alla velocità all'inlet)

L'ipotesi di inizializzare la colonna di colata con il valore di velocità pari a quello in corrispondenza dell'inlet è stata ripresa da un precedente lavoro di tesi [11]. Sebbene non sia propriamente corretta, dal momento che il fluido cadendo accelera e subisce una

strizione, è possibile considerare questo “errore” limitato ad i primi istanti di simulazione fintanto cioè che non si raggiunga la soluzione di regime.

Si procede infine settando il valore del passo temporale e il valore del tempo di fine di simulazione. Una volta terminata la colata di un batch si attende che il fluido colato si arresti ed in seguito è possibile ripetere gli step finora visti per il colaggio dei restanti batch. In seguito, nel capitolo 4, si vedranno nel dettaglio le approssimazioni introdotte per questa fase.

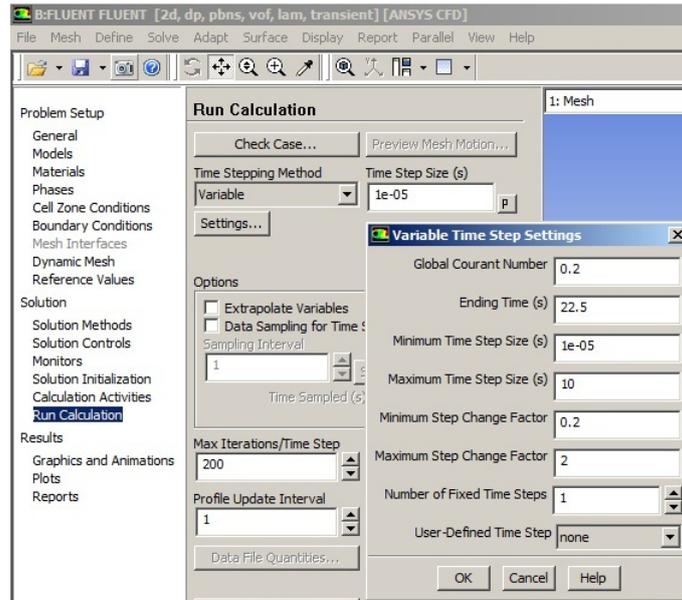


Figura 3.13: Impostazione passo temporale

Per le simulazioni si è impiegato uno step temporale variabile, il quale viene cambiato rispettando la seguente condizione:

$$\Delta t_{globale} = \frac{CFL_{globale}}{\max(\sum \frac{\text{flusso uscente}}{\text{Volume}})}$$

Dove il termine  $\sum \frac{\text{flusso uscente}}{\text{Volume}}$  viene calcolato per ciascuna cella di calcolo e viene preso il valore massimo fra tutte le celle.

Il numero di Courant Globale ( $CFL_{globale}$ <sup>1</sup>) è stato abbassato dal valore 2 (di default) ad un valore di 0.2 al fine di avere una soluzione numerica più accurata e stabile.

Resta da dire che comunque, nell’ambito di questa tesi, il software Fluent è stato utilizzato solo per la realizzazione delle simulazioni bidimensionali. Sebbene si sia tentato di realizzare tramite lo stesso software anche la simulazione 3D, i tempi di calcolo, eccessivamente lunghi, non erano compatibili con gli scopi di questa tesi. Si è quindi

<sup>1</sup> $CFL_{globale} = \frac{\Delta t_{globale}}{\Delta t_{caratteristico}}$  Dove  $\Delta t_{caratteristico} = \min \left[ \sum \frac{\text{Volume cella}}{\text{flusso uscente}} \right]$  (minimo fra tutte le celle di calcolo)

deciso di abbandonare per il momento l'idea di utilizzare il software per la simulazione tridimensionale.

Al termine di questo excursus è possibile dunque riassumere i vantaggi e gli svantaggi relativi all'utilizzo del software Fluent.

<b>Fluent</b>	<b>Vantaggi</b>	<b>Svantaggi</b>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Presenza di una documentazione riccamente dettagliata sui metodi numerici disponibili</li> <li>• Possibilità di simulare più fluidi contemporaneamente</li> <li>• Vasta gamma di metodi numerici offerti, adattabili ad ogni esigenza di simulazione</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tempi di calcolo molto lunghi</li> <li>• Richiede particolare accortezza nella generazione della mesh onde evitare fenomeni di diffusione del propellente</li> </ul>

Tabella 3.1: Tabella riassuntiva vantaggi-svantaggi del software Fluent

### 3.3.2 Flow 3D

A differenza del software Fluent, Flow 3D si presenta come un programma maggiormente user-friendly in particolare per ciò che riguarda la generazione della griglia di calcolo. Il software in questione è specializzato per le simulazioni di natura tridimensionale.

Una volta caricata la geometria in formato “.STL”, il software automaticamente genererà un blocco a forma di parallelepipedo intorno alla geometria caricata. Come già introdotto nel paragrafo 2.7, la tecnica pseudo-VOF non richiede che la mesh si adatti perfettamente alla geometria, questo ovviamente costituisce un grande vantaggio perché semplifica di molto la fase di meshing. In seguito occorre dunque definire la tipologia di geometria caricata, che nel caso particolare sarà di tipo solido, ed indicarla come sotto-componente complementare. Così facendo il blocco rappresenta una sorta di stampo la cui “sagoma” è rappresentata dalla geometria precedentemente caricata.

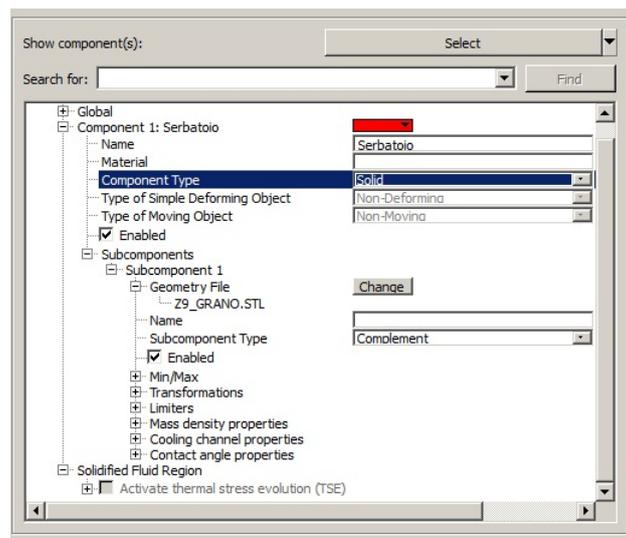


Figura 3.14: Impostazione tipologia componente e sotto componente

Si procede dunque alla generazione della mesh. Nel software è possibile scegliere tra due tipologie, cartesiana o cilindrica, si può poi impostare la dimensione delle celle ed eventualmente dividere il blocco principale in sotto-blocchi in modo da inserire eventuali infittimenti in una direzione piuttosto che nell'altra. Per la particolare applicazione si è scelta una mesh di tipo cilindrico in modo da minimizzare il dominio di calcolo necessario per realizzare la simulazione e si è scelto inoltre di inserire un infittimento in corrispondenza della bocca di colata di modo da garantire che su essa cadano almeno 4 celle.

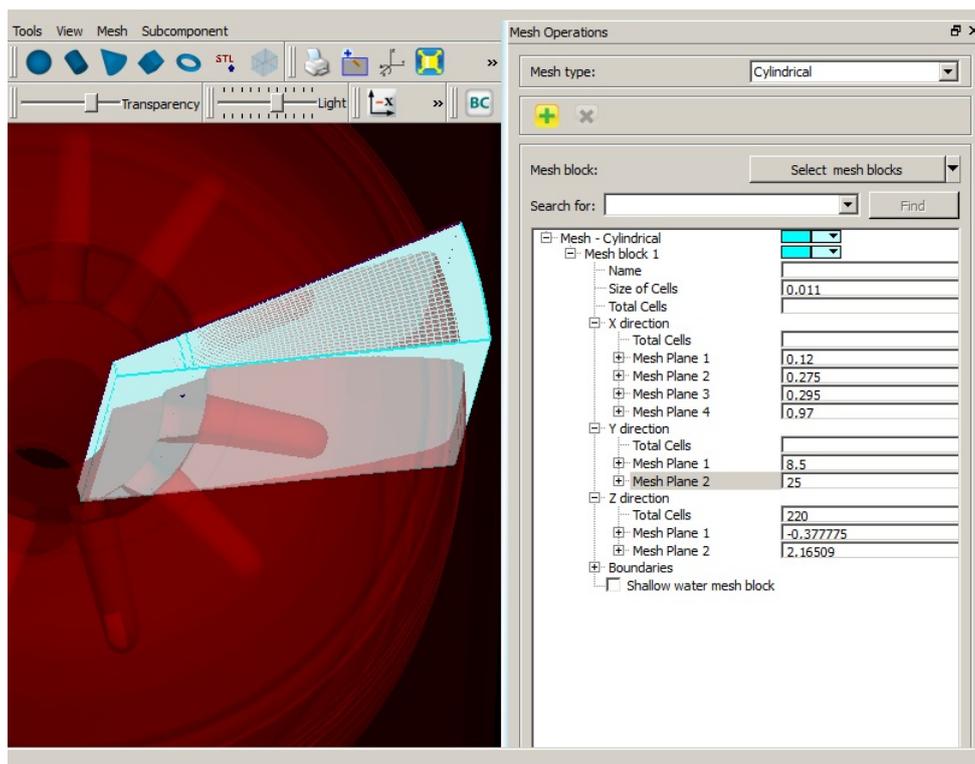


Figura 3.15: Impostazione mesh

Si impostano poi, come in Fluent, i modelli di viscosità, la presenza di sorgenti di massa (la bocca di colata) e l'eventuale presenza dell'accelerazione gravitazionale.

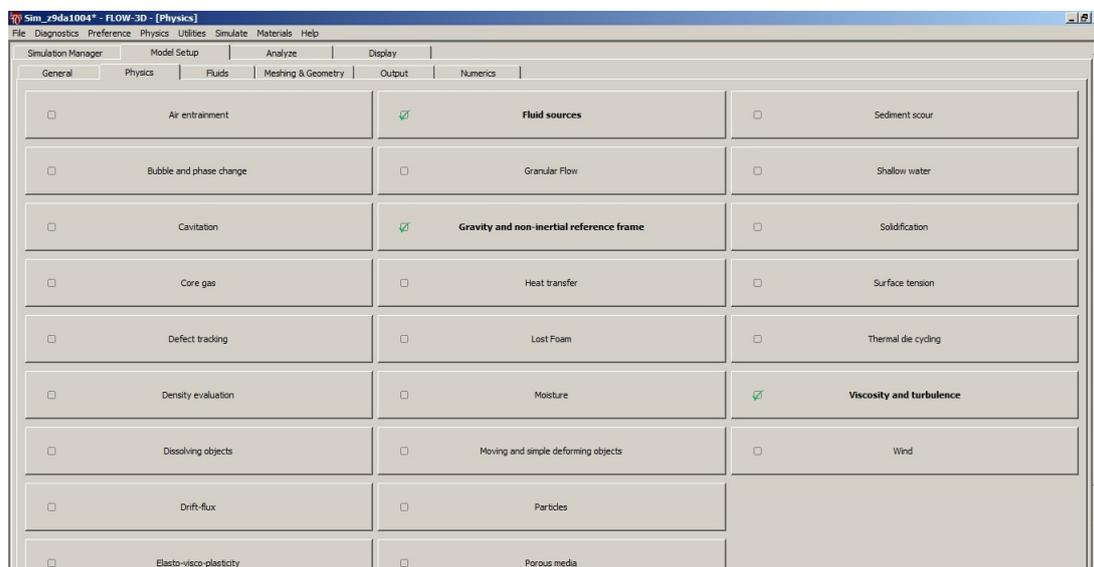


Figura 3.16: Impostazione modelli fisici

Si impostano poi le proprietà di densità e viscosità del materiale in colata.

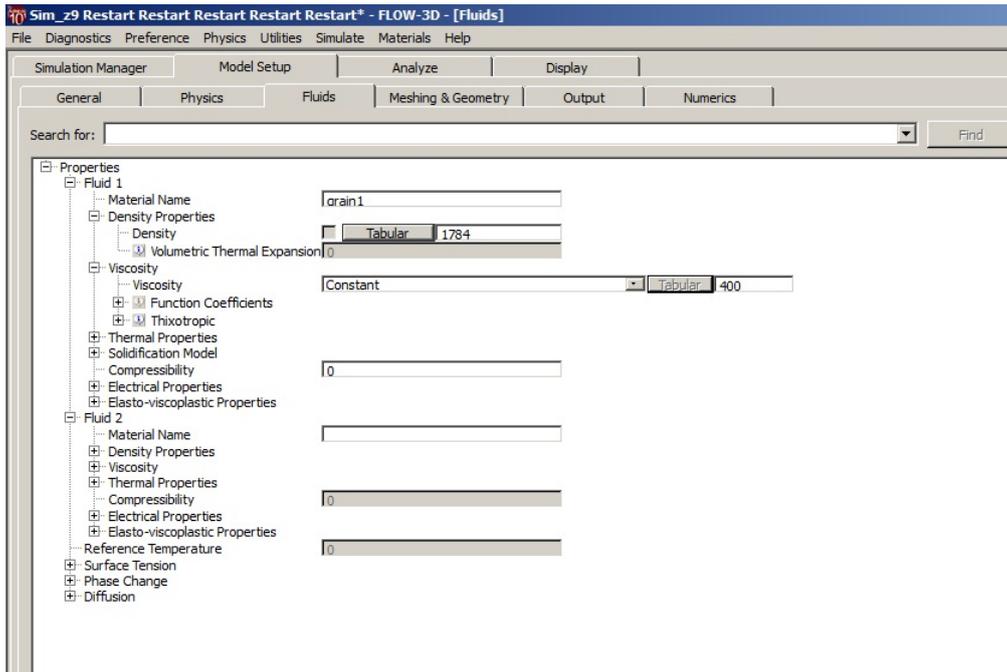


Figura 3.17: Impostazione proprietà del materiale

Vengono poi impostate le condizioni al contorno.

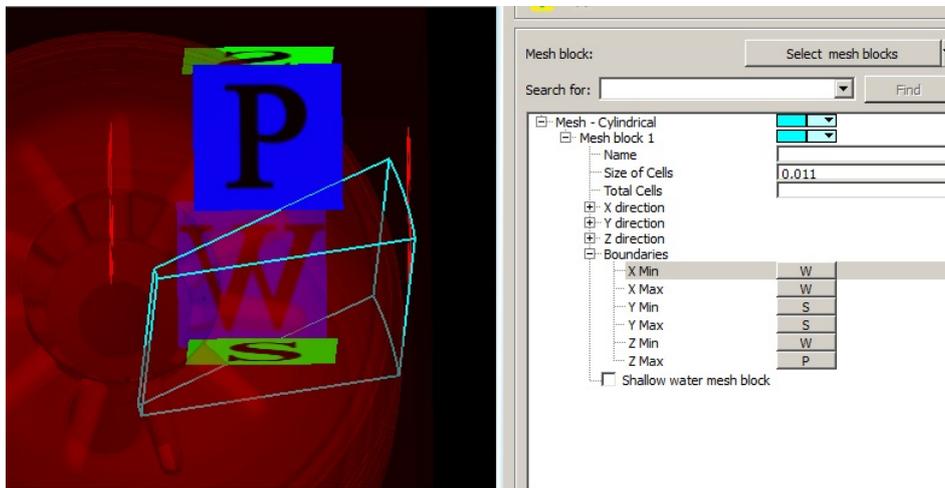


Figura 3.18: Impostazione condizioni al contorno

Ed infine si impostano i limiti sullo step temporale, i criteri di convergenza e i diversi metodi numerici da utilizzare.

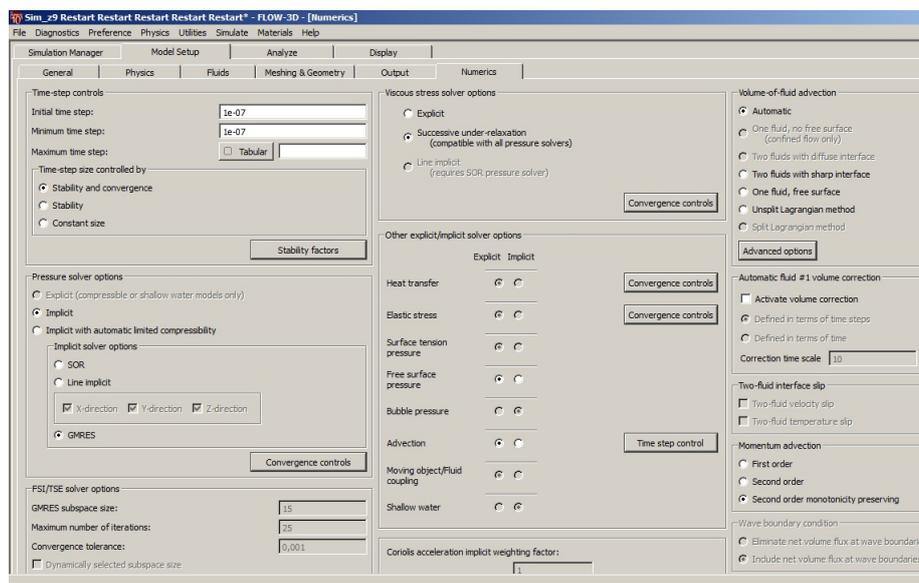


Figura 3.19: Impostazione metodi numerici

Complessivamente dunque si possono citare i vantaggi e svantaggi riscontrati nell'utilizzo del software.

Flow 3D	Vantaggi	Svantaggi
	<ul style="list-style-type: none"> <li>Implementa al suo interno un sistema di meshing intuitivo ed automatizzato</li> <li>Grazie alla tecnica pseudo-vof non è necessario che la mesh si adatti perfettamente alla geometria</li> <li>Tempi di calcolo ridotti</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Possibilità di simulare al più due fluidi</li> <li>Assenza di una documentazione dettagliata</li> </ul>

Tabella 3.2: Tabella riassuntiva vantaggi-svantaggi del software Flow3D



# Capitolo 4

## Simulazioni numeriche

In questo capitolo vengono riportati i risultati delle simulazioni numeriche condotte. Le analisi effettuate sono state rivolte al motore ZEFIRO9 (ZEro FIrst stage ROcket). L'attenzione è stata posta in particolare su questo tipo di motore dal momento che nel corso dello sviluppo si sono incontrati alcuni problemi. Una delle problematiche, ad esempio, è emersa nel lancio del marzo 2007. Dopo i primi 35sec, in cui il motore si è comportato come previsto in fase di progetto, si è verificata un'improvvisa caduta di pressione all'interno della camera di combustione del propulsore. Dopo le prime fasi la pressione si è stabilizzata ad un valore più basso di quello nominale e per questo motivo la combustione è durata più dei 105sec previsti.

Il motore ZEFIRO9 costituisce il terzo stadio del lanciatore VEGA (Vettore Europeo di Generazione Avanzata) sviluppato in collaborazione dall'Agenzia Spaziale Italiana (ASI) e l'Agenzia Spaziale Europea (ESA) per il lancio in orbita di piccoli satelliti. Il motore è stato sviluppato, costruito e testato dalla società italiana AVIO S.p.A e ad oggi costituisce uno dei motori a solido più performanti in termini di rapporto tra propellente caricato a bordo e volume della camera di combustione. Nella figure seguenti vengono riproposte le caratteristiche principali legate al motore z9 e la configurazione del lanciatore.

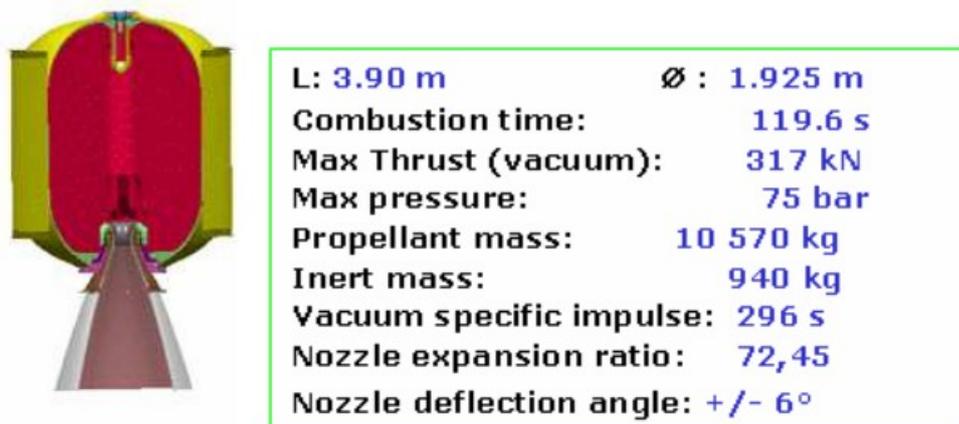


Figura 4.1: Caratteristiche motore Z9

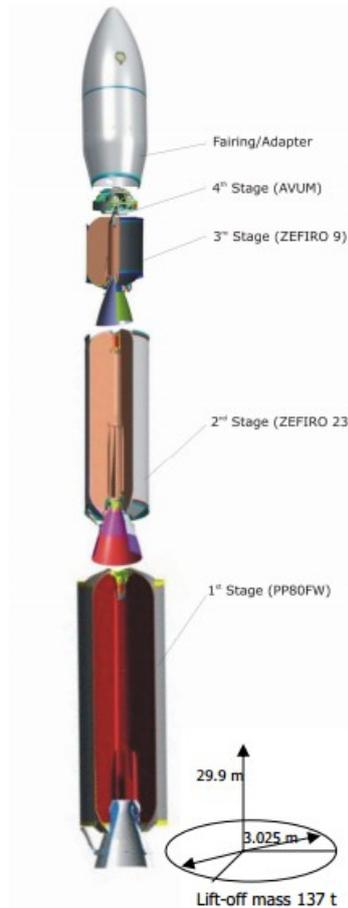


Figura 4.2: Configurazione lanciatore VEGA

Il motore in questione presenta una struttura interna della camera di combustione ad 11-points finocyl, come mostrato nelle figure sottostanti.

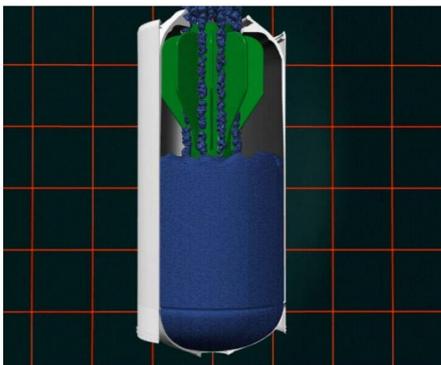


Figura 4.3: Struttura camera di combustione z9 (vista prospettica)



Figura 4.4: Struttura camera di combustione motore z9 (vista dall'alto)

Come si può osservare in figura 4.3 il colaggio avviene disponendo il motore sottosopra, nella parte dove è presente la struttura a finocyl sono collocate le bocche di colata.

Più precisamente la terna di bocche colata si trova in corrispondenza del settore che separa ciascun finocyl, come di può vedere in figura 4.5.



Figura 4.5: Rappresentazione bocche di colata

Nel contesto delle analisi fluidodinamiche sono state svolte due diverse tipologie di simulazione:

- Simulazione bidimensionale del processo di colaggio del motore z9 sulla sezione in corrispondenza delle bocche di colata.
- Simulazione tridimensionale del processo di colaggio di un settore del motore sopraccitato.

La simulazione bidimensionale è stata condotta utilizzando il software commerciale per la fluidodinamica computazionale FLUENT. Per la simulazione tridimensionale, al contrario, ci si è avvalsi del software FLOW 3D. Si è scelto di adoperare il primo per le simulazione 2D dal momento che attraverso tale programma è possibile simulare il processo di colaggio multi-batch riproducendo l'interazione fra più fluidi. Tuttavia i tempi di calcolo risultano notevolmente lunghi, circa 10 giorni per la realizzazione di all'incirca 205 secondi di simulazione ed una mesh di  $\sim 23.000$  elementi, ecco allora perché, per le simulazioni tridimensionali, si è optato per l'utilizzo del software FLOW 3D il quale, oltre ad agevolare la fase di creazione della mesh, promette dei tempi di calcolo notevolmente inferiori, circa 3 giorni per simulare lo stesso numero di secondi con una mesh di 395.733 elementi. Come già indicato il software FLOW 3D inoltre implementa al suo interno la tecnica pseudo-VOF la quale si presta bene per gli scopi di questa tesi in quanto risulta particolarmente accurata nel momento in cui si debbano trattare fluidi immiscibili con elevati rapporti di viscosità e densità. Lo svantaggio del software FLOW 3D tuttavia risiede nell'impossibilità di realizzare simulazioni multi-batch in quanto è possibile simulare

unicamente l'interazione tra soli due fluidi e non è peraltro possibile implementare delle UDFs (User Define Functions) che permettano di variare la viscosità del fluido in funzione del tempo (come invece risulta possibile attraverso l'altro software). Si è dunque accettato di simulare unicamente il colaggio del primo batch, limitando l'analisi complessiva del fenomeno.

### 4.1 Simulazione bidimensionale del processo di colaggio sul motore z9

Come è evidente da quanto detto finora il problema considerato non risulta a simmetria assiale, dal momento che la geometria in sé presenta nella parte alta una geometria a stella che non è uguale sezione per sezione, inoltre le bocche di colata sono poste in punti discreti dei  $360^\circ$ , dunque, anche nell'ipotesi in cui la geometria fosse stata perfettamente assialsimmetrica ad ogni modo la posizione e la geometria delle bocche di colata avrebbero introdotto una tridimensionalizzazione del flusso. Per poter effettuare un'analisi bidimensionale ci si è dunque ricondotti ad un caso di studio differente che quantomeno però rispettasse alcune delle caratteristiche relative al caso reale. In figura 4.6 e 4.7 vengono dunque rappresentate la geometria bidimensionale utilizzata in definitiva per le simulazioni e l'equivalente tridimensionale. In particolare si è scelto di analizzare la sezione corrispondente alla parte senza slot, dal momento che è quella dove sono collocate le bocche di colata.



Figura 4.6: Geometria 2D impiegata nelle simulazioni

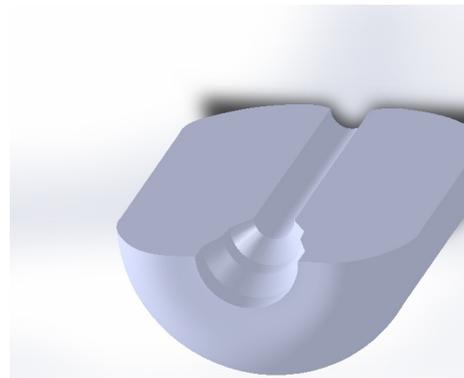


Figura 4.7: Geometria tridimensionale equivalente

Rispetto al caso reale vengono rispettati:

- I rapporti di viscosità tra colate successive.
- La velocità di ingresso del propellente nel serbatoio.
- L'altezza del pelo libero del propellente a fine di ciascuna colata.
- La posizione radiale dell'inlet

Gli elementi di diversità rispetto al caso reale invece sono:

- L'assenza della configurazione con fynocil.

- La geometria dell'inlet. Nel caso di studio infatti l'inlet è di forma anulare. Nel caso 2D infatti l'inlet si riduce ad essere un segmento ortogonale all'asse del motore (di dimensioni pari al diametro equivalente della terna di bocche di colata), di conseguenza se si pensa di effettuare un'intera rivoluzione di tale segmento ciò che si ottiene nel caso tridimensionale è una forma anulare.

- Le tempistiche del colaggio. Dal momento che, come si è già detto, il parametro che è stato fissato, in conformità al caso reale, è la velocità all'inlet, essendo nel caso di studio la sezione di inlet notevolmente aumentata si ottiene che anche la portata di propellente in ingresso risulta esserlo e dunque il riempimento del serbatoio avviene in tempi decisamente più ridotti. Si può brevemente calcolare quanto valga questo rapporto tra le due portate volumetriche reale  $\left(\dot{Q}_R\right)$  e simulata  $\left(\dot{Q}_S\right)$ . Si supponga nota la portata reale  $\left(\dot{Q}_R\right)$  essa si ottiene dal rapporto tra volume totale del motore e tempo di colaggio. Da essa si può ottenere la velocità di inlet tramite la seguente relazione:

$$v_{in} = \frac{\dot{Q}_R}{A_{bocca} \cdot N_{bocche}}$$

$$\text{Dove} \begin{cases} A_{bocca} & \text{è l'area di ciascuna bocca di colata} \\ N_{bocche} & \text{è il numero delle bocche} \end{cases}$$

Il valore della portata simulata si può ottenere allora in questo modo:

$$\dot{Q}_S = \pi \underbrace{\left[ \left(x_b + \frac{d_b}{2}\right)^2 - \left(x_b - \frac{d_b}{2}\right)^2 \right]}_{A_{anello}} \cdot v_{in}$$

$$\text{Dove} \begin{cases} x_b & \text{è la posizione radiale del baricentro della terna delle bocche di colata (vd. figura 4.5)} \\ d_b & \text{è il diametro equivalente di ciascuna terna di bocche} \\ A_{anello} & \text{è l'area dell'anello} \end{cases}$$

Infine dividendo  $\dot{Q}_S$  con  $\dot{Q}_R$  si ottiene il rapporto tra le due portate (nel caso in esame tale rapporto risulta essere circa otto).

Per la realizzazione delle simulazioni è stata fatta l'ipotesi che il fluido esibisse un comportamento Newtoniano e la viscosità rimanesse costante durante il colaggio di ciascun batch. Nel capitolo 1 si è già discussa questa ipotesi giustificandone i limiti di validità, in figura 4.8 viene semplicemente riportato l'andamento di viscosità in funzione del tempo considerando le tempistiche del caso reale. Si noti che, anche nel caso reale, la variazione percentuale di viscosità tra inizio e fine colata di ciascun batch rimane contenuta (al di sotto del 9.5% per tutti e cinque le colate). L'ipotesi quindi risulta ancora più valida nel caso di studio dove le tempistiche per effettuare il colaggio di un singolo batch risultano circa venti volte più brevi.

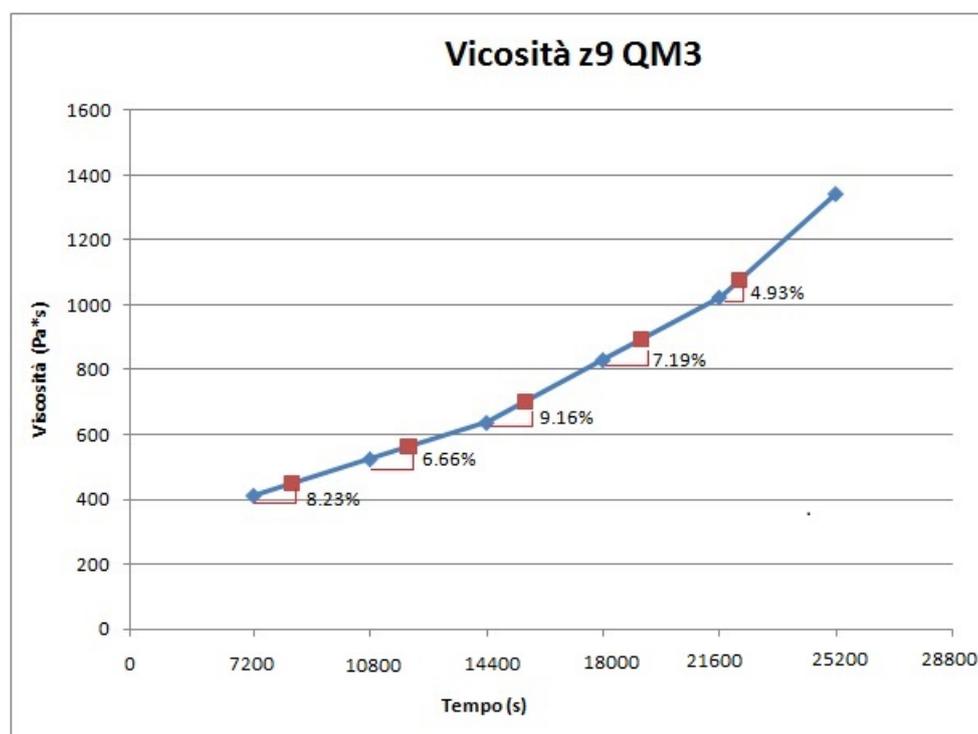


Figura 4.8: Viscosità impasto in funzione del tempo

Di seguito viene riproposta una tabella con i valori di viscosità assunti da ciascun batch relativamente a ciascuna delle cinque colate.

Viscosità Batch	Colata 1	Colata 2	Colata 3	Colata 4	Colata 5
$\mu_1$ (Pa*s)	413,21	525,81	638,40	831,70	1025,00
$\mu_2$ (Pa*s)		413,21	525,81	638,40	831,70
$\mu_3$ (Pa*s)			413,21	525,81	638,4
$\mu_4$ (Pa*s)				413,21	525,81
$\mu_5$ (Pa*s)					413,21

Figura 4.9: Tabella viscosità nelle cinque colate

Le condizioni al contorno impostate sono state le seguenti:

- Inlet: velocità uniforme su tutta la sezione di ingresso.
- Outlet: condizione di pressione imposta.
- Parete del serbatoio: condizione di non scorrimento.
- Parete vicino l'inlet: condizione di scorrimento.

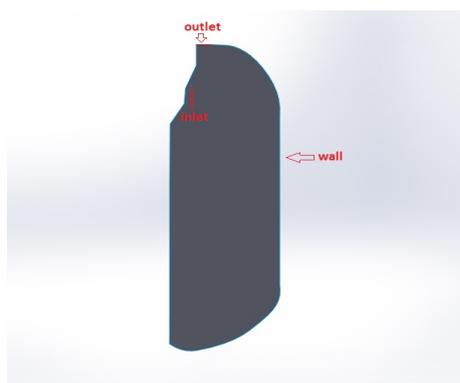


Figura 4.10: Condizioni al contorno imposte per la simulazione

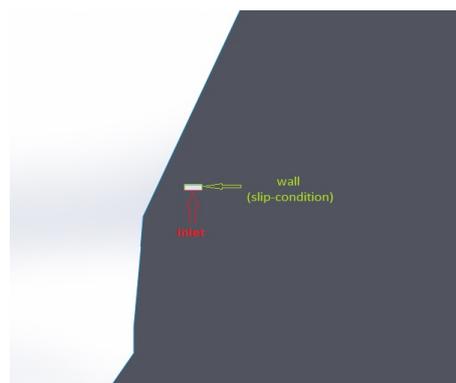


Figura 4.11: Ingrandimento sulla zona dell'inlet

La posizione particolare dell'inlet, e la forma del medesimo, è dovuto all'esigenza di permettere all'aria di "girare" intorno alla colonna di colata per raggiungere l'outlet. Nel caso 2D infatti la colonna di colata divide il dominio di calcolo in due regioni. Supponendo di mettere l'inlet nella posizione in cui è realmente (vd. figura 4.5), ossia a contatto con la parete superiore, l'aria che si trova a sinistra della colonna non riuscirebbe a fuoriuscire man mano che il serbatoio si riempie, a meno di non inserire un ulteriore outlet anche nella parte di sinistra del serbatoio.

La simulazione del colaggio di ciascun batch è stata condotta inizializzando la colonna di colata fino al pelo libero del fluido con una velocità iniziale pari al valore imposto all'inlet come mostrato nella figura seguente.

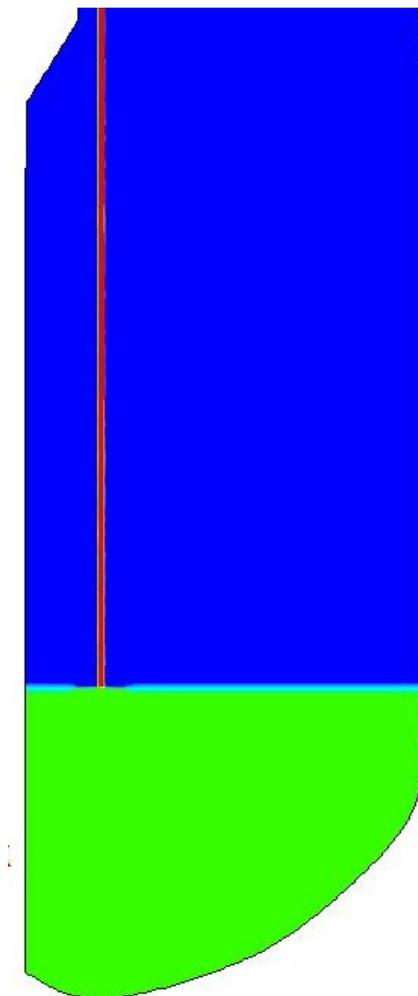


Figura 4.12: Condizione di inizializzazione

Di seguito viene riportata in figura la mesh di calcolo e un relativo ingrandimento nella zona circostante all'inlet. Si noti l'inserimento di un infittimento della mesh al fine di cogliere la fenomenologia sul restringimento del getto, condizione dettata dal rispetto dell'equazione di continuità; per effetto della gravità infatti il fluido accelera e tende a restringersi dovendo essere rispettata la portata di massa.



Figura 4.13: Mesh serbatoio completo

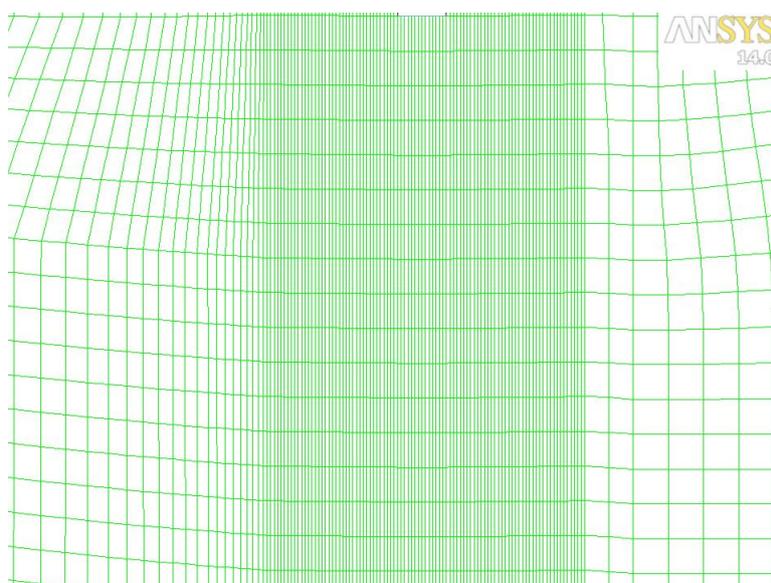


Figura 4.14: Infittimento mesh sulla zona limitrofa alla colonna di colata

Si riportano inoltre i risultati complessivi delle simulazioni.

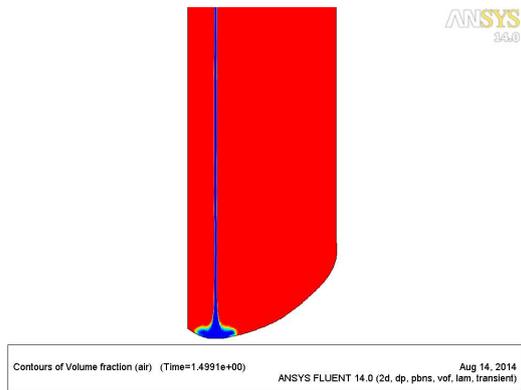


Figura 4.15: Simulazione 1<sup>a</sup> Colata (t=1.5s)

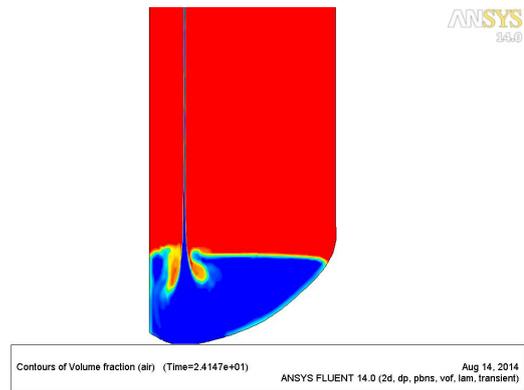


Figura 4.16: Simulazione 1<sup>a</sup> Colata (t=24s)

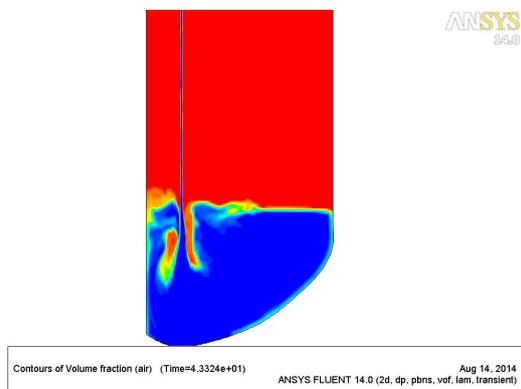


Figura 4.17: Simulazione 1<sup>a</sup> Colata (t=43s)

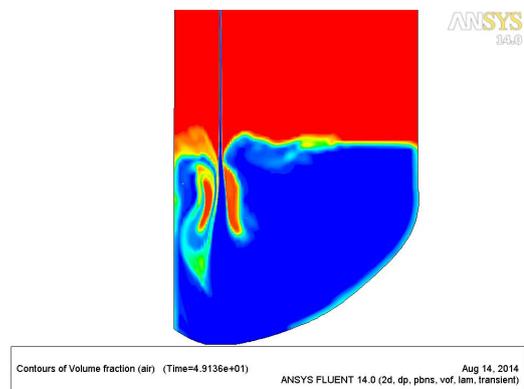


Figura 4.18: Simulazione 1<sup>a</sup> Colata (t=49s)

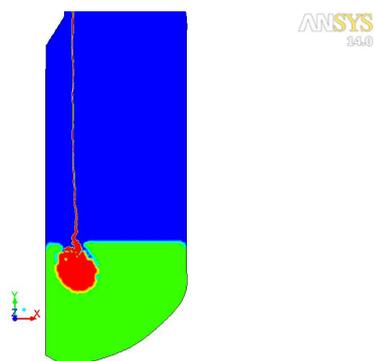


Figura 4.19: Simulazione 2<sup>a</sup> Colata (t=50s)

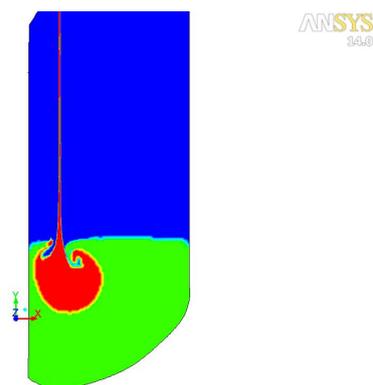


Figura 4.20: Simulazione 2<sup>a</sup> Colata (t=54s)

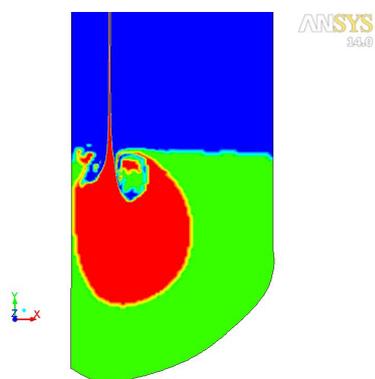


Figura 4.21: Simulazione 2<sup>a</sup> Colata (t=71s)

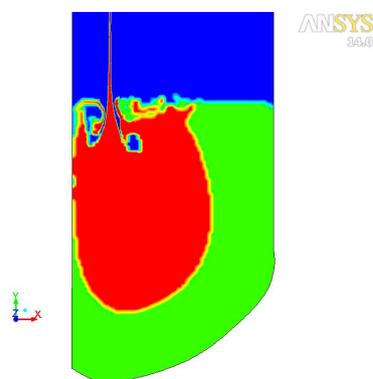


Figura 4.22: Simulazione 2<sup>a</sup> Colata (t=86s)

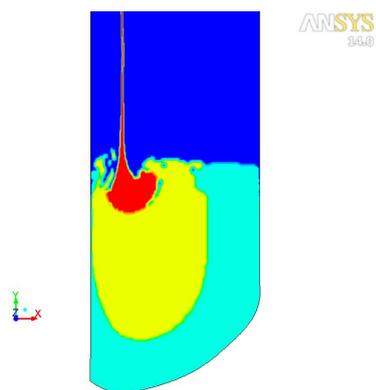


Figura 4.23: Simulazione 3<sup>a</sup> Colata (t=98s)

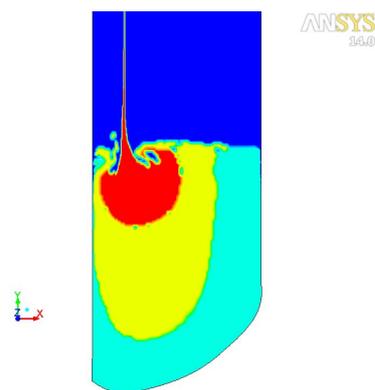


Figura 4.24: Simulazione 3<sup>a</sup> Colata (t=114s)

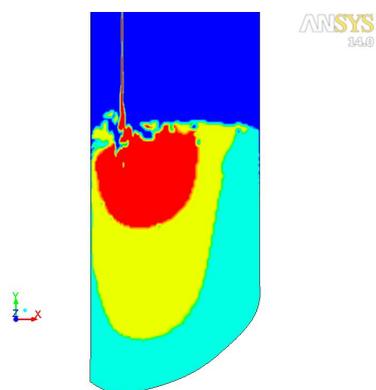


Figura 4.25: Simulazione 3<sup>a</sup> Colata (t=124s)

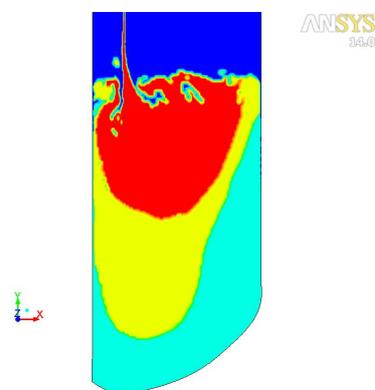


Figura 4.26: Simulazione 3<sup>a</sup> Colata (t=135s)

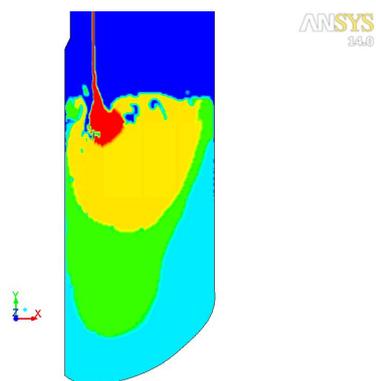


Figura 4.27: Simulazione 4<sup>a</sup> Colata (t=143s)

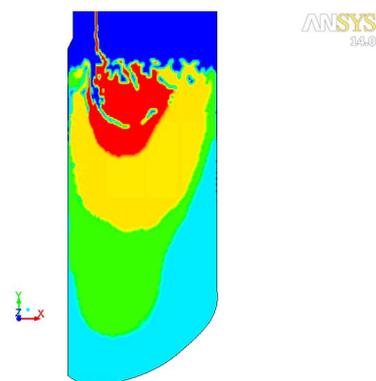


Figura 4.28: Simulazione 4<sup>a</sup> Colata (t=150s)

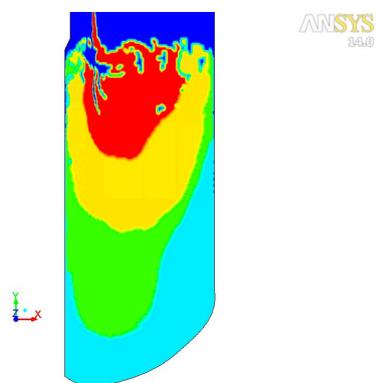


Figura 4.29: Simulazione 4<sup>a</sup> Colata (t=163s)

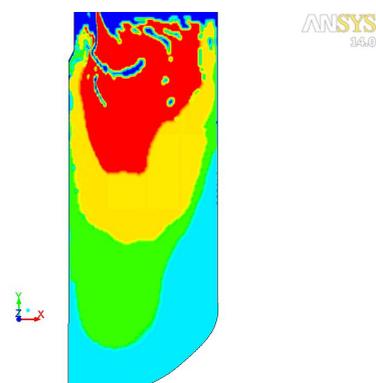


Figura 4.30: Simulazione 4<sup>a</sup> Colata (t=175s)

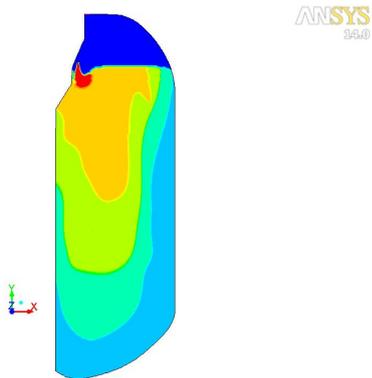


Figura 4.31: Simulazione 5<sup>a</sup> Colata (t=187s)

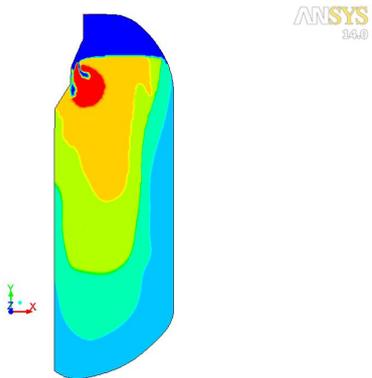


Figura 4.32: Simulazione 5<sup>a</sup> Colata (t=191s)

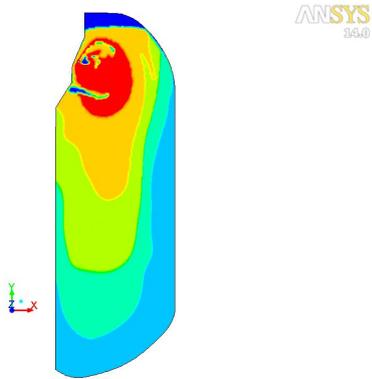


Figura 4.33: Simulazione 5<sup>a</sup> Colata (t=198s)

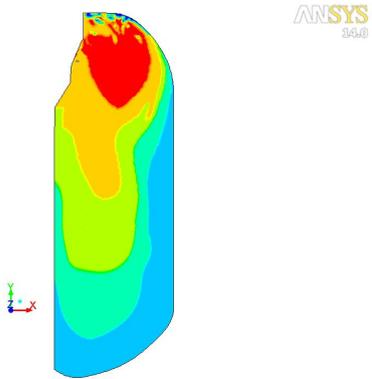


Figura 4.34: Simulazione 5<sup>a</sup> Colata (t=204s)

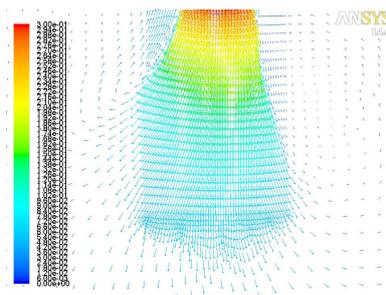


Figura 4.35: Campo di velocità al piede del getto (velocità in  $[\frac{m}{s}]$ )

Analizzando i risultati delle simulazioni bidimensionali si possono riscontrare alcune incongruenze con il caso reale. In particolare la simulazione bidimensionale non è in grado di rispettare il volume associato a ciascun batch. Nel grafico sottostante viene riportato il confronto: la linea blu rappresenta i volumi di propellente colato nel motore reale (dati forniti dall'azienda Avio S.p.A) relativamente a ciascun batch, in rosso invece la stima ottenuta applicando la ben nota formula di Pappo-Guldino alle aree della simulazione bidimensionale (ossia rivoluzionando lungo i 360° la poligonale associata al profilo di ciascun batch).

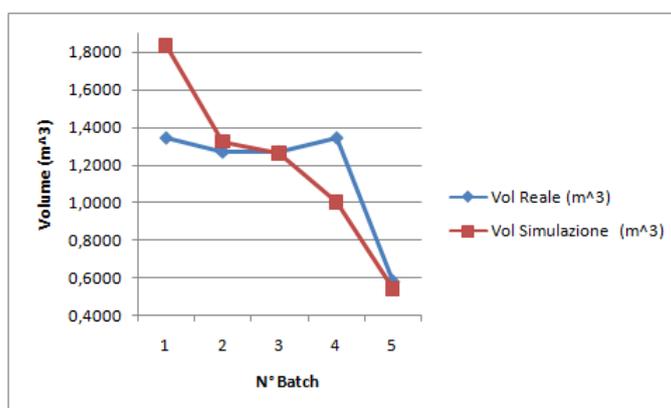


Figura 4.36: Confronto volumi dei batch reali e quelli ottenuti tramite la simulazione

Come si può osservare dal grafico, per il primo batch, nel caso simulato, si ha un aumento importante di volume rispetto al caso reale e per compensazione il quarto batch invece risulta avere un volume più piccolo. Il motivo di queste incongruenze risiede nel fatto che la portata di propellente in colata nel caso simulato è molto maggiore e questo conduce ad uno schiacciamento del propellente verso le pareti del serbatoio e dunque ad una risalita del medesimo più marcata nel caso simulato relativamente al caso reale. Nel momento in cui si va a rivoluzionare l'area del 2D, poiché alle porzioni di area più lontane all'asse di rivoluzione competono un volume maggiore rispetto a quelle più vicine, ne consegue che al primo batch, che è "spostato" verso la parte esterna del motore, compete un volume maggiore.

## 4.2 Simulazione tridimensionale del processo di collaggio sul motore z9

Per le analisi 3D è stato preso un settore di motore pari a circa  $16^\circ$ , ossia metà delle undici parti uguali in cui è possibile suddividere il motore (si veda la figura sottostante).

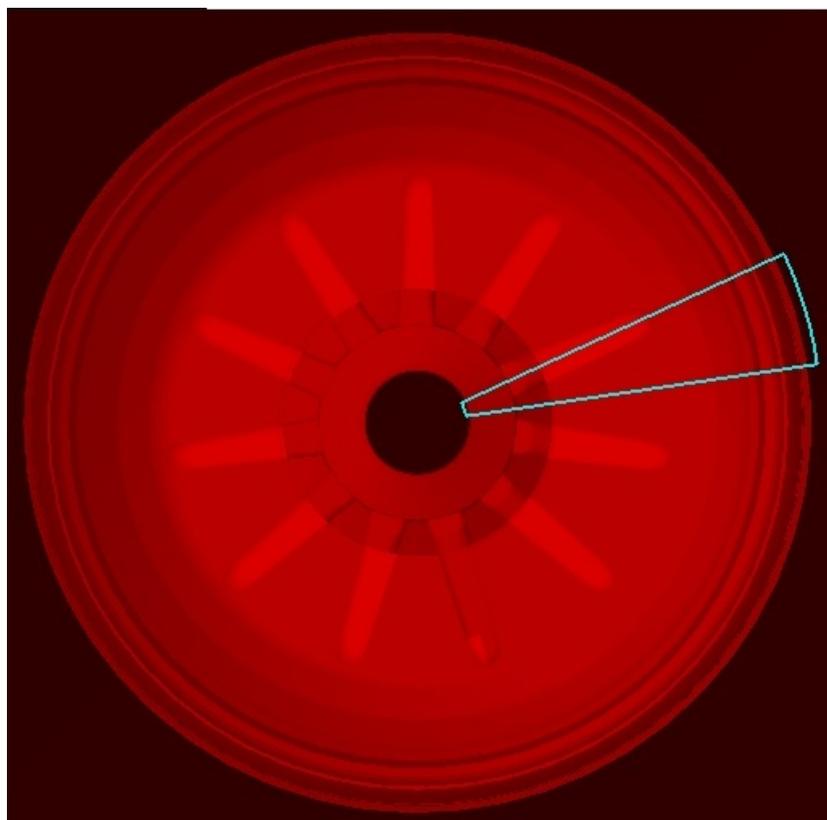


Figura 4.37: Porzione di motore considerata

Nelle due figure sottostanti vengono rappresentate rispettivamente uno spaccato della geometria completa del motore e il relativo settore tridimensionale analizzato con FLOW 3D.

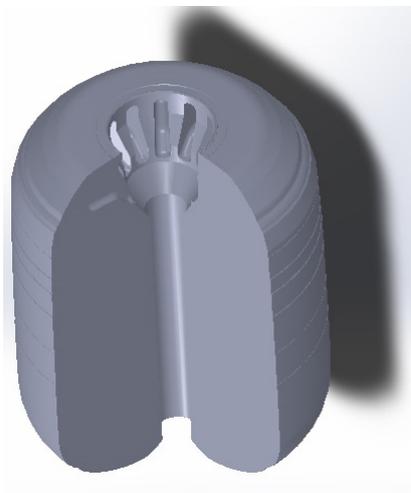


Figura 4.38: Rappresentazione geometrica del motore z9

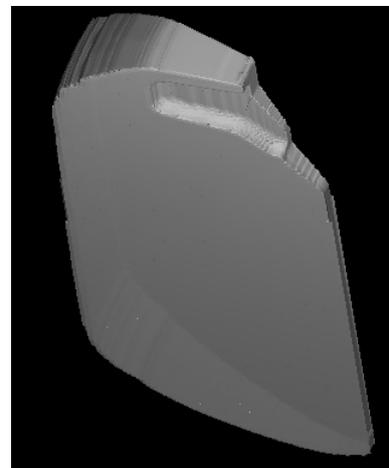


Figura 4.39: Rappresentazione geometria di simulazione

Di seguito vengono presentate delle immagini raffiguranti la mesh di calcolo.

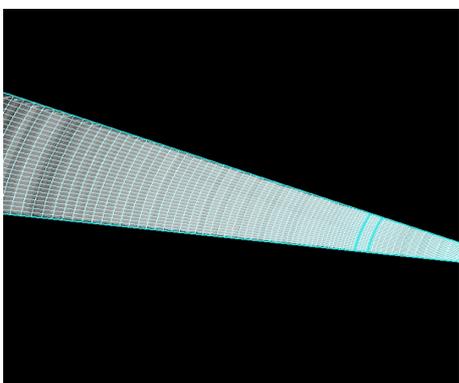


Figura 4.40: Mesh di calcolo (vista dall'alto)

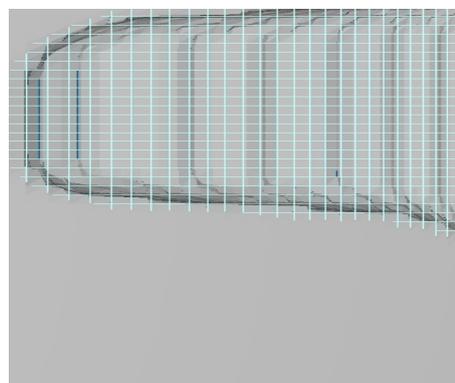


Figura 4.41: Mesh di calcolo (ingrandimento in corrispondenza del fyn)

In figura 4.42 vengono illustrate le condizioni al contorno impostate. Nelle impostazioni di Flow3D le condizioni al contorno si intendono riferite alle sei facce di cui si compone il blocco di mesh considerato.

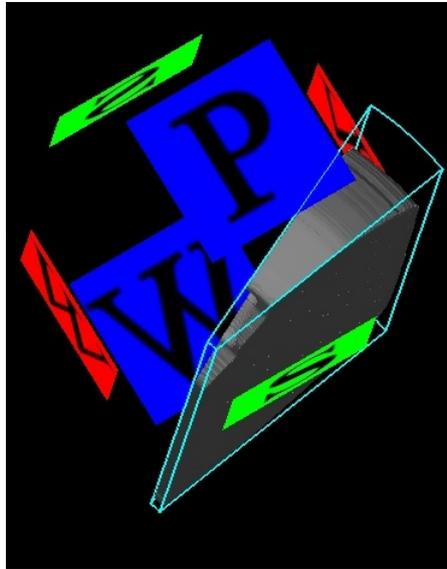


Figura 4.42: Condizione al contorno

Le condizioni al contorno applicate per il caso tridimensionale sono state analoghe a quelle impiegate per le simulazioni 2D ad eccezione della condizione di simmetria impostata sulle due facce laterali dello spicchio.

Manca ovviamente la condizione di inlet dal momento che in flow3D è possibile inserire delle sorgenti di massa localizzate in un dato punto del dominio. Tali sorgenti possono essere di forma circolare o quadrangolare e ovviamente è possibile sceglierne le dimensioni e la posizione.

Infine vengono presentati per via grafica i risultati ottenuti dalle simulazioni.

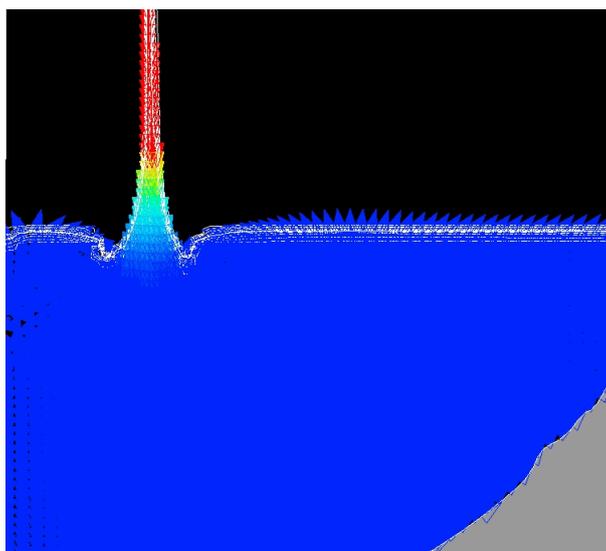


Figura 4.43: Campo di velocità (ingrandimento al piede del getto)

Confrontando la figura 4.43 con la 4.16 si può immediatamente verificare come l'affossamento in prossimità del piede del getto sia meno importante nel caso tridimensionale rispetto alla simulazione 2D, ciò è dovuto al fatto che nel caso reale la portata di propellente è minore ed il propellente può distribuirsi anche in direzione azimutale, nel caso bidimensionale al contrario si trova vincolato a svilupparsi in due sole dimensioni. Inoltre rispettando le portate si riesce a rispettare anche le tempistiche del colaggio.

Di seguito vengono proposti alcuni frame di simulazione.

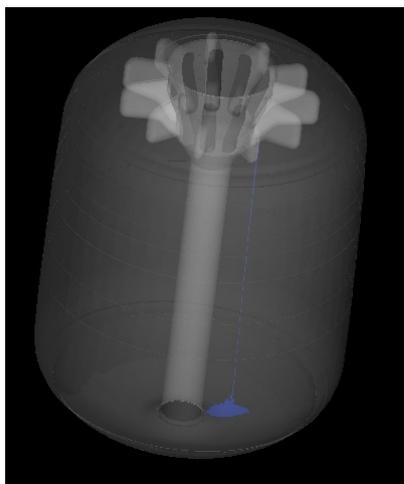


Figura 4.44: Riempimento serbatoio (10s)

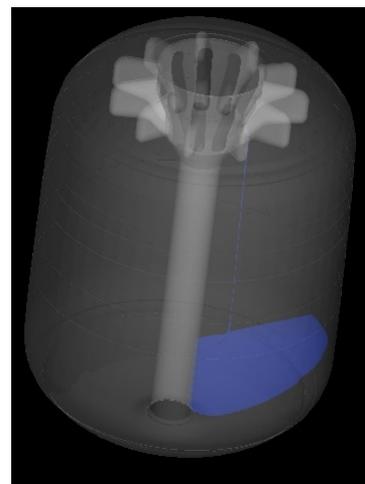


Figura 4.45: Riempimento serbatoio (500s)

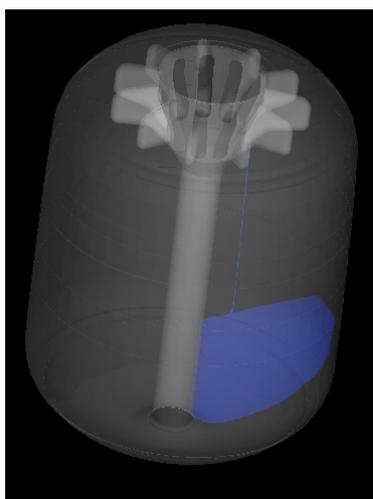


Figura 4.46: Riempimento serbatoio (750s)

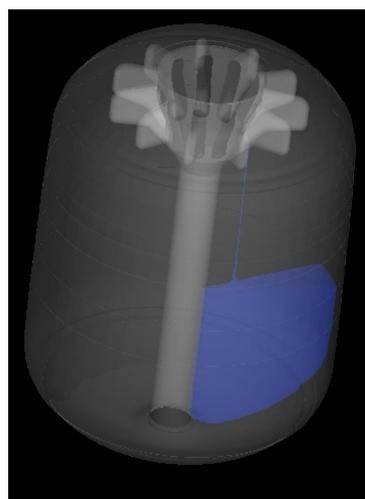


Figura 4.47: Riempimento serbatoio (1050s)

Dopo aver effettuato le simulazioni 3D si è voluto confrontare i risultati ottenuti in questo caso con quelli ottenuti dalle simulazioni bidimensionali. In particolar modo si è voluto confermare il fatto che fosse possibile sommariamente rispettare la similitudine cinematica dei due campi di moto, in vista delle analisi sull'orientamento del particolato.

Dalle figure sottostanti si può osservare come complessivamente la similitudine cinematica dei campi di moto delle due simulazioni sia sufficientemente buona sebbene vi siano zone, come quelle nelle vicinanze del getto dove difatti tale similitudine viene parzialmente persa.

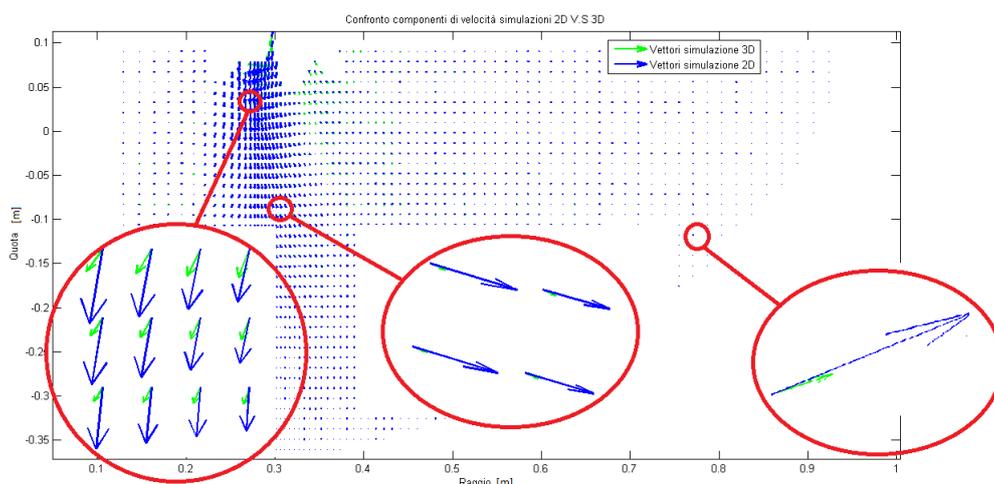


Figura 4.48: Campo di velocità confronto tra simulazioni 2D & 3D

Tali conclusioni si possono anche trarre dall'osservazione delle figure sottoriportate le quali mostrano gli andamenti del modulo della velocità del propellente sia in varie sezioni sia azimutali (dalla 4.49 alla 4.52) che a diverse quote (dalla 4.53 alla 4.58).

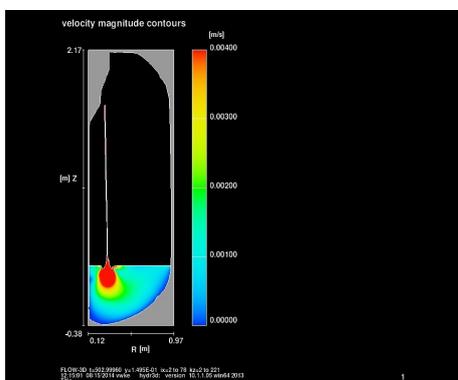


Figura 4.49: Campo di velocità (sezione a  $0^\circ$   $t=503s$ )

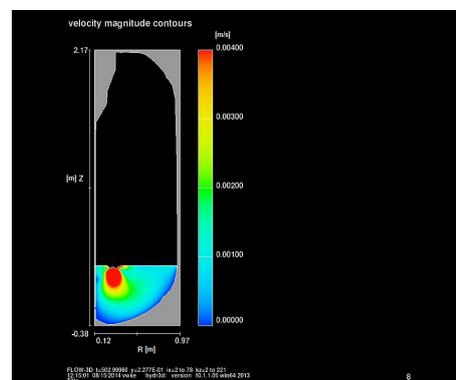


Figura 4.50: Campo di velocità (sezione a  $5^\circ$   $t=503s$ )

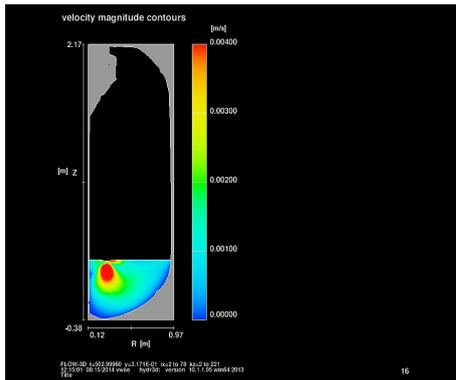


Figura 4.51: Campo di velocità (sezione a  $10^\circ$   $t=503s$ )

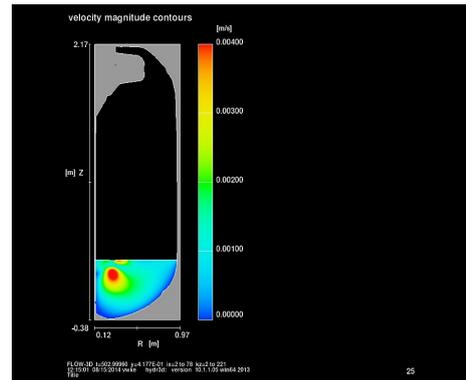


Figura 4.52: Campo di velocità (sezione a  $15,5^\circ$   $t=503s$ )

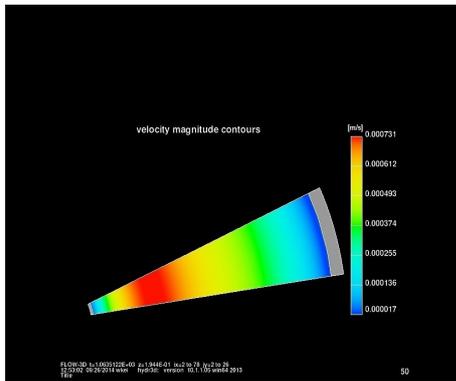


Figura 4.53: Campo di velocità (sezione a  $0.45m$   $t=1065s$ )

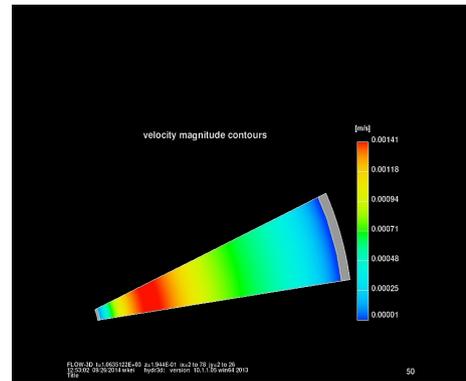


Figura 4.54: Campo di velocità (sezione a  $0.57m$   $t=1065s$ )

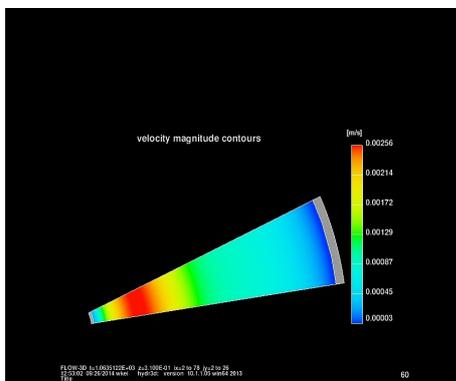


Figura 4.55: Campo di velocità (sezione a  $0.68m$   $t=1065s$ )

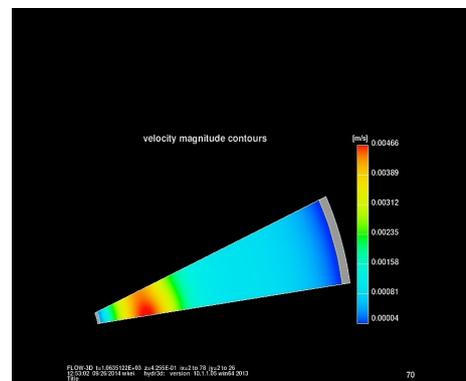


Figura 4.56: Campo di velocità (sezione a  $0.80m$   $t=1065s$ )

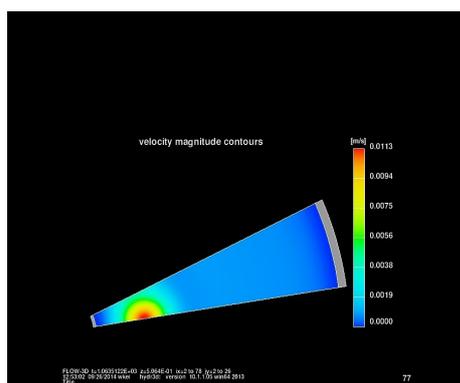


Figura 4.57: Campo di velocità (sezione a 0.88m t=1065s)

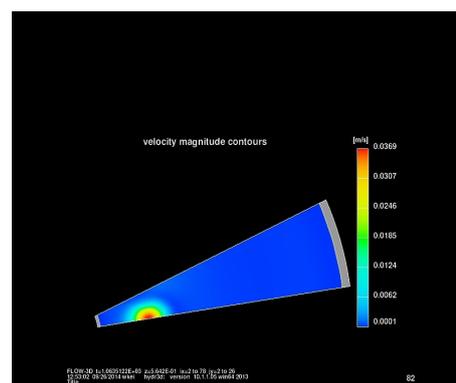


Figura 4.58: Campo di velocità (sezione a 0.92m t=1065s)

Si noti che solo nelle sezioni più vicine al piede del getto si perda complessivamente l'assialsimmetria del problema fluidodinamico. Questo comporta che se si è interessati alla sola analisi della direzione del flusso locale allora l'impiego di una simulazione bidimensionale o tridimensionale difatti risulta equivalente, al contrario se si è interessati al modulo che le grandezze fluidodinamiche in gioco assumono ovviamente occorre orientarsi verso l'impiego di simulazioni completamente 3D.

Nella figura sottostante viene riproposto uno spaccato del motore. In giallo vengono indicate le quote corrispondenti alle sezioni analizzate.

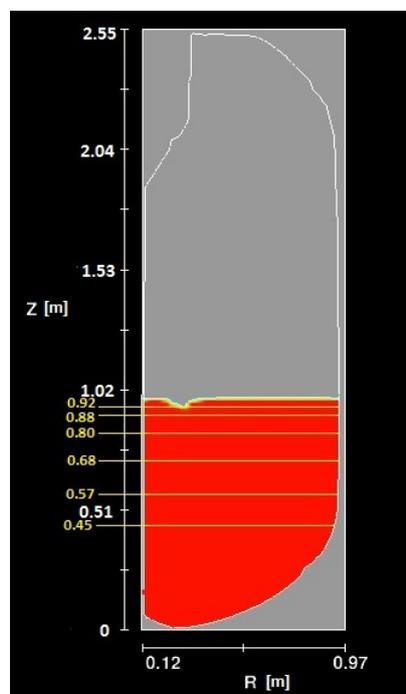


Figura 4.59: Rappresentazione sezioni analizzate

Nelle figure seguenti (dalla 4.60 alla 4.65) invece vengono riportati i valori della velocità in direzione circonferenziale, si noti ancora una volta che più ci si allontana dal getto più i valori della velocità sono prossimi allo zero confermando nel complesso la “bidimensionalità del problema”.

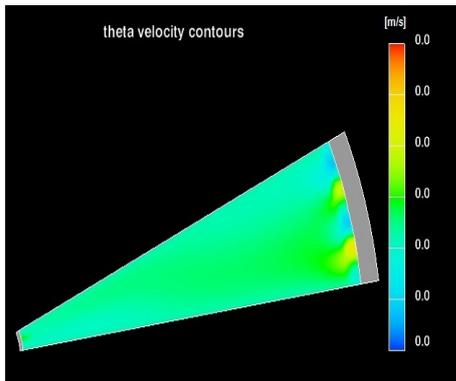


Figura 4.60: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.45m  $t=1065s$ )

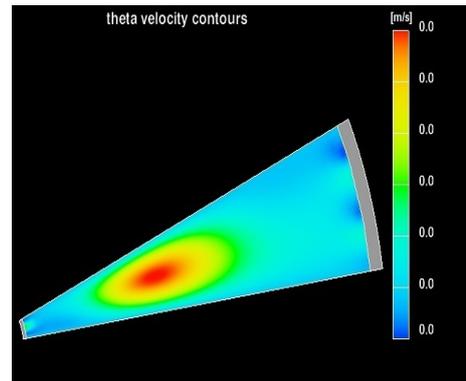


Figura 4.61: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.57m  $t=1065s$ )

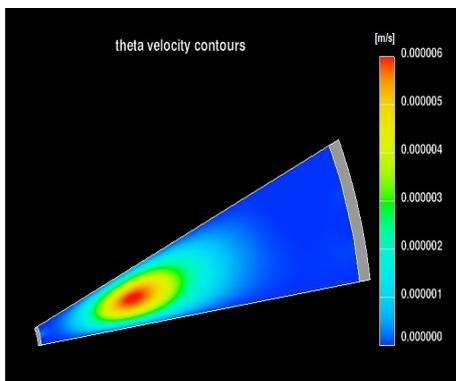


Figura 4.62: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.68m  $t=1065s$ )

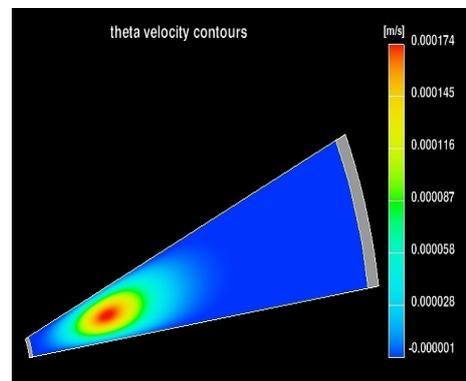


Figura 4.63: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.80m  $t=1065s$ )

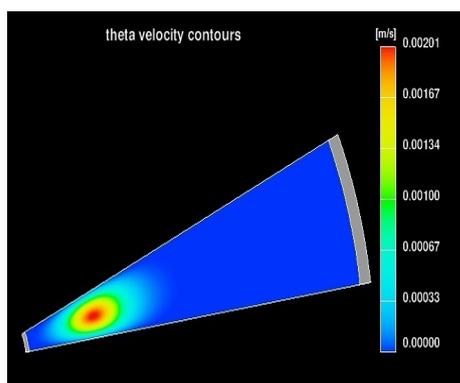


Figura 4.64: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.88m  $t=1065s$ )

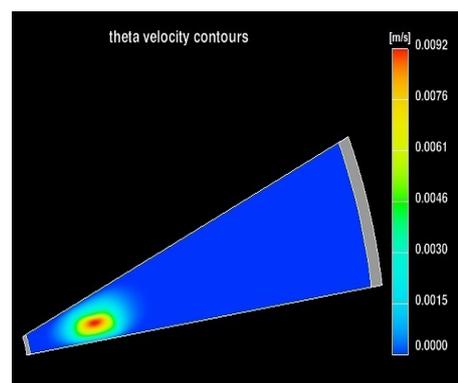


Figura 4.65: Campo di velocità circonferenziale (sezione a 0.92m  $t=1065s$ )



# Capitolo 5

## Codici di calcolo

In questo capitolo verranno descritti nel dettaglio i codici MATLAB opportunamente scritti al fine di ricostruire indirettamente ed in post-processing informazioni sui dati di concentrazione e sull'orientamento del particolato all'interno del propellente. Nel primo paragrafo verrà descritta la struttura del codice per l'analisi della concentrazione impiegato nelle simulazioni bidimensionali condotte sulla geometria del motore z9 e nei seguenti verranno mostrati i codici sull'analisi dell'orientamento rispettivamente utilizzati per le simulazioni 2D e 3D dello stesso motore.

### 5.1 Codice delle concentrazioni

Il codice implementato si articola in una serie di step di seguito descritti:

- Caricamento dei dati derivanti dalla simulazione fluidodinamica: tale fase ha richiesto la scrittura di un algoritmo ad hoc che riuscisse a convertire i dati di output provenienti da Fluent (o da Flow3D), in formato “.txt”, in un formato che fosse facilmente gestibile tramite MATLAB ossia il formato “.mat”.
- Definizione punti di controllo: sulla base delle dimensioni fisiche del campo fluidodinamico vengono definiti dei punti di controllo che altro non sono che i nodi di una griglia cartesiana che globalmente ricopre il dominio geometrico. Da quanto detto è facile comprendere che alcuni di questi punti cadranno al di fuori del dominio di calcolo, tali punti costituiranno ovviamente dei nodi “deattivati”, ossia che non scambiano “informazioni” di concentrazione con quelli invece interni al dominio, allo stesso tempo possono considerarsi “deattivati” i punti di controllo i quali, ad un certo istante temporale, non ricadono all'interno del propellente. Nella figura a pagina seguente viene illustrato quanto appena detto.

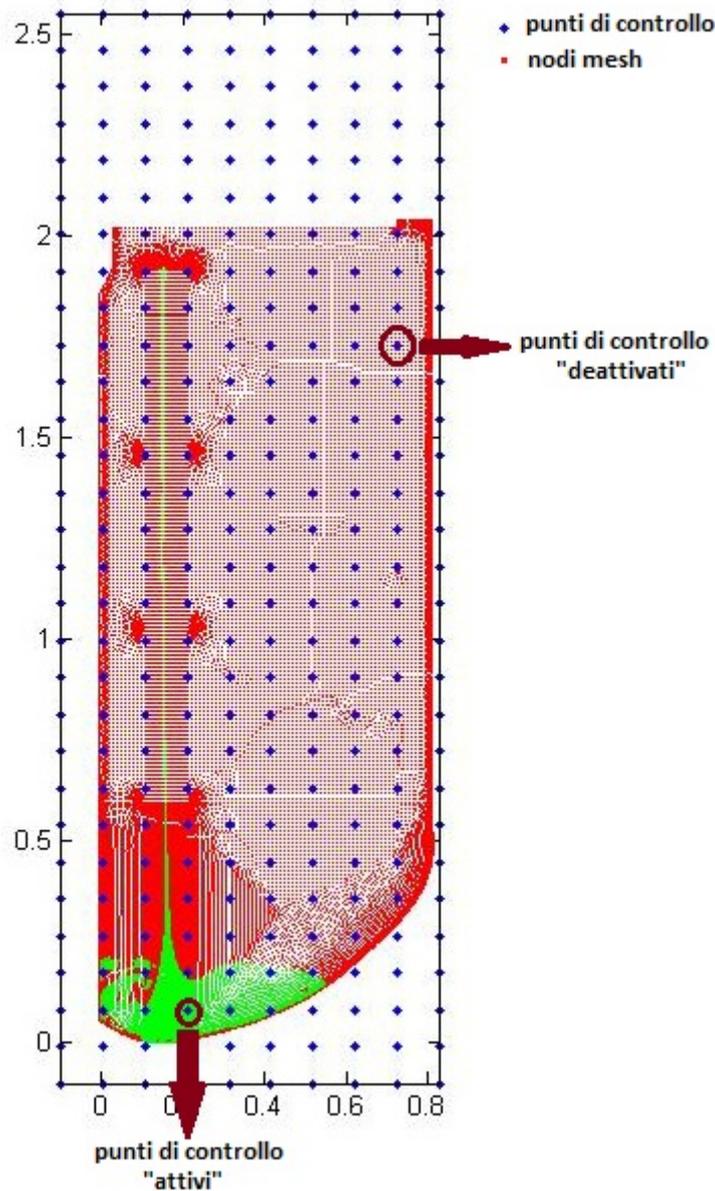


Figura 5.1: Rappresentazione punti di controllo

- Definizione delle probes: le probes sono dei punti del dominio che subiranno una successiva movimentazione sulla base dei dati di velocità ricavati dalle simulazioni CFD. Si tenga comunque presente che, ad ogni iterazione, le probes coincideranno con i punti di controllo, salvo poi distinguersene. I valori di velocità assunti dalle probes vengono ottenuti mediante interpolazione dei valori contenuti nei nodi della mesh.
- Inizializzazione del valore di concentrazione: all'istante iniziale, dal momento che si suppone che ancora non sia avvenuta alcuna separazione tra le fasi, alle probe viene assegnato un valore di concentrazione della fase solida pari al valore medio che si riscontra nelle fasi di produzione del propellente.

- **Movimentazione probes:** per aumentare la risoluzione temporale, senza dunque essere limitati ai valori di velocità acquisiti durante la simulazioni, (si tenga infatti presente che durante le simulazioni il salvataggio dei dati avviene dopo un certo numero di iterazioni temporali, questo per evitare di dover elaborare una quantità di dati difficilmente gestibile con le risorse di calcolo disponibili) lo step temporale tra un frame e l'altro viene suddiviso in un certo numero di step intermedi supponendo dunque che il campo di velocità, in tale intervallo, rimanga costante. In queste sotto-iterazioni la probe viene "forzata" a seguire il campo di velocità. Questa fase di movimentazione è funzionale alla successiva fase di interpolazione del valore di concentrazione nei punti di controllo. Tale fase si rende peraltro necessaria per poter seguire opportunamente l'evoluzione del fronte di colata.
- **Interpolazione valori di concentrazione:** in questa fase viene effettuata un'interpolazione del valore di concentrazione sui punti di controllo, a questo scopo si effettua una media pesata delle concentrazioni delle probes limitrofe al punto di controllo considerato. Poiché i batch vengono considerati immiscibili l'interpolazione viene fatta solamente tra probes appartenenti allo stesso batch. Si tenga presente che in un primo momento si era valutata l'ipotesi di considerare un approccio puramente lagrangiano nel quale le probes venivano originate in prossimità del piede del getto ad ogni step temporale. In seguito tuttavia si è visto che tale approccio non riusciva a garantire una certa omogeneità nella distribuzione delle sonde all'interno del dominio fluido perciò si è deciso di adottare un procedimento misto che permettesse alle probes di muoversi nella fase di sotto-iterazione per poi riportare le informazioni sulla concentrazione nei punti di controllo originariamente definiti.
- **Re-setting concentrazioni medie:** poiché in generale batch differenti vengono considerati immiscibili nella fase successiva di calcolo dei flussi particellari verrà impedito lo scambio tra batch diversi; ciò comporta che la concentrazione media sul batch deve rimanere costante e pari al valore prima del colaggio. Nella fase di interpolazione nei punti di controllo il rispetto del citato requisito (di media costante) viene meno. Si immagini di avere idealmente ad un certo istante temporale tre probes e di voler interpolare su due dati punti di controllo, si osservi la situazione rappresentata in figura 5.2 nel quale un punto di controllo cade più vicino alle due probes con concentrazione più elevata. Effettuando un'interpolazione lineare con i valori di concentrazioni noti nei punti dove si trovano le probes si otterrà in definitiva che il valore medio dei due punti di controllo non sarà più uguale al valore medio di concentrazione prima del colaggio (immaginiamo sia  $\phi_{pcolaggio} = 0.66$ ), ma nel caso particolare che si è considerato risulterà più grande del dovuto (pari a  $\phi = 0.665$ ).

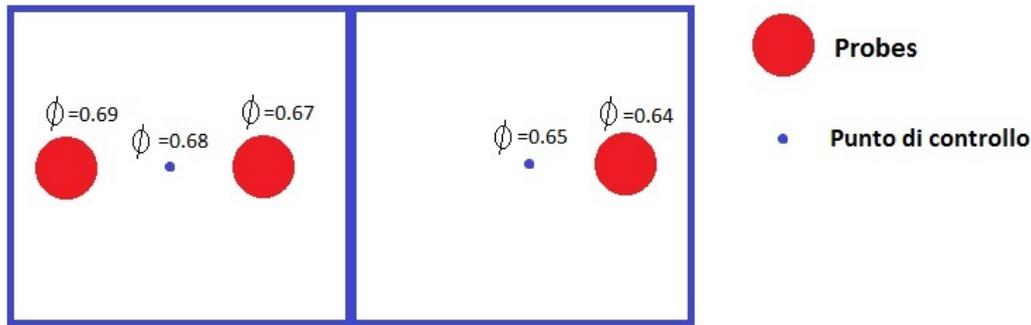


Figura 5.2: Interpolazione punti di controllo

Si provvede allora a correggere i valori interpolati introducendo un opportuno fattore di guadagno pari a:

$$f_{gain} = \phi_{interp} \cdot \frac{\phi_{pcolaggio}}{\phi_{medio}}$$

Dove:

- $\phi_{interp}$  è il valore di concentrazione nel punto di controllo ottenuto per interpolazione.
- $\phi_{pcolaggio}$  è il valore medio reale che ha il propellente prima di essere colato.
- $\phi_{medio}$  è il valore di concentrazione mediato tra tutti i punti di controllo appartenenti allo stesso batch, una volta effettuata l'interpolazione.

- Calcolo flussi particelle solide tra i punti di controllo: per ciascun punto di controllo vengono anzitutto trovati i punti limitrofi, sulla base delle informazioni reperite in letteratura, di cui si è già discusso nel capitolo 1, si è supposta una relazione di proporzionalità diretta tra la quantità di particelle solide scambiate tra punti di controllo vicini ed il rispettivo gradiente dello shear-rate. Nei casi di studio presenti in letteratura tuttavia lo shear-rate viene a coincidere sostanzialmente con il gradiente di velocità dal momento che la variabilità del campo di velocità è solo in una delle due direzioni, nel caso in esame invece si ha la variabilità del campo di velocità in entrambe le direzioni, per ricondursi allora al caso “monodimensionale” si è scelto di prendere in considerazione il modulo dello shear-rate.

La relazione scelta dunque è stata ricavata attraverso un parallelismo matematico con la ben nota legge di Fourier:

$$\vec{q} = -k \cdot \nabla T \quad (5.1) \quad \text{Dove: } \begin{cases} \vec{q} & \text{è il flusso termico} \\ k & \text{è la conducibilità termica} \\ T & \text{è la temperatura} \end{cases}$$

Immaginando allora che il modulo dello shear-rate ( $\|\dot{\gamma}\|$ ) giochi il ruolo della temperatura è possibile in definitiva riscrivere la legge implementata nel codice (5.2):

$$\frac{d\phi_j}{dt} = -\frac{1}{V_j} \cdot \underbrace{\sum_{i=1}^n k \cdot \frac{\|\dot{\gamma}\|_j - \|\dot{\gamma}\|_i}{\|\Delta\vec{x}\|}}_{\delta N_j} \quad (5.2)$$

Dove:

- $\delta N_j$  è il numero di particelle acquistate (se con il segno “-”) o cedute (se con il segno “+”) dal punto di controllo j-esimo
- $\phi_j$  è il valore di concentrazione di fase solida nel punto di controllo j-esimo.
- $n$  sono il numero di celle contigue a quella considerata
- $k$  è un fattore di proporzionalità che tiene conto della dimensione fisica delle particelle solide
- $\|\dot{\gamma}\|$  è il valore del modulo dello shear-rate associato al punto di controllo
- $\|\Delta\vec{x}\|$  è la distanza tra i centroidi dei punti di controllo su cui viene calcolato lo scambio
- $V_j$  è il volume del punto di controllo j-esimo (nel caso bi-dimensionale sarà l’area associata)

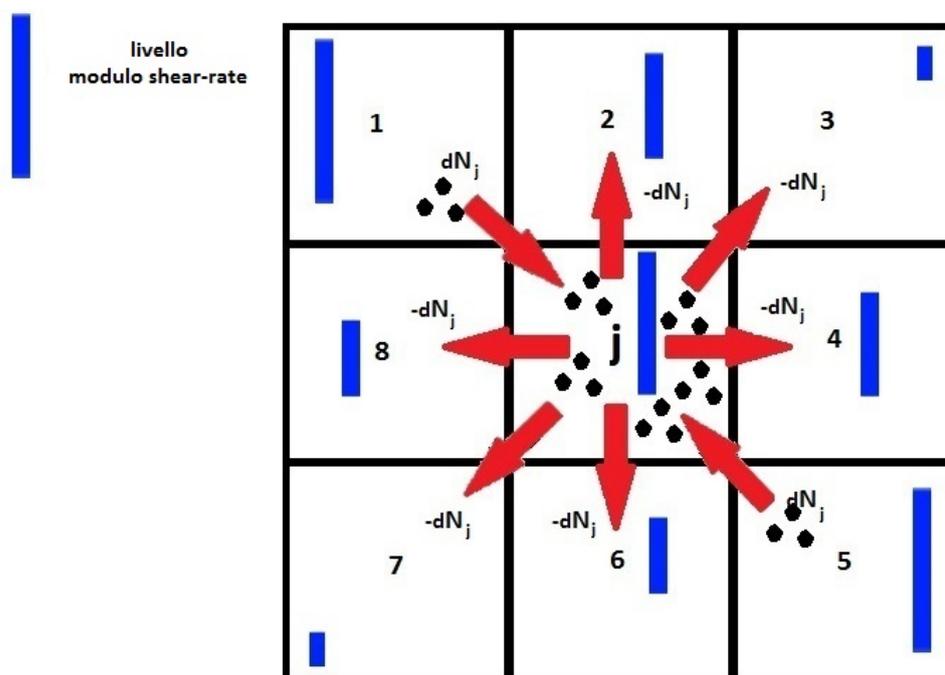


Figura 5.3: Rappresentazione flussi particelle solide tra celle contigue

Di seguito vengono riportati i risultati relativi al codice implementato.

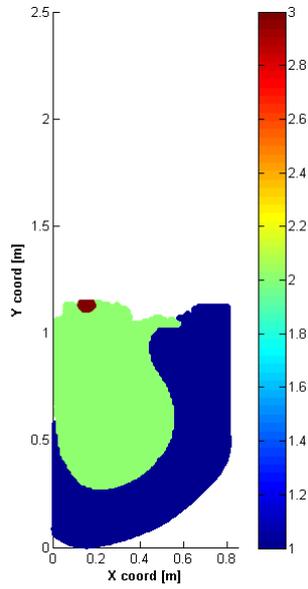


Figura 5.4: Profilo dei batch inizio 3<sup>a</sup> colata

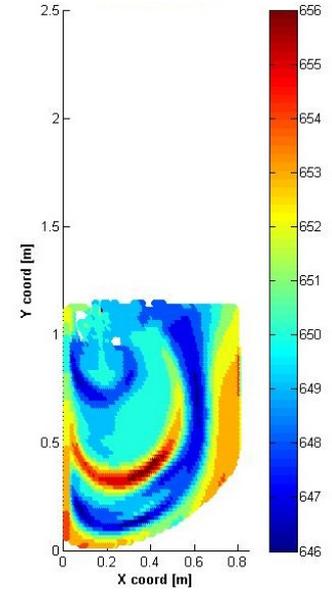


Figura 5.5: Concentrazioni inizio 3<sup>a</sup> colata

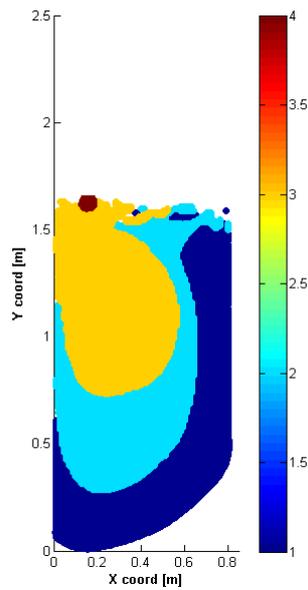


Figura 5.6: Profilo dei batch inizio 4<sup>a</sup> colata

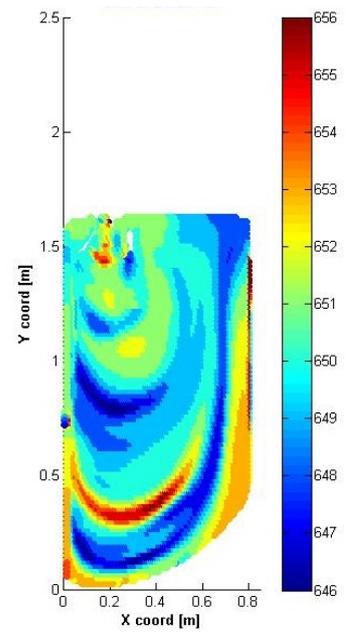
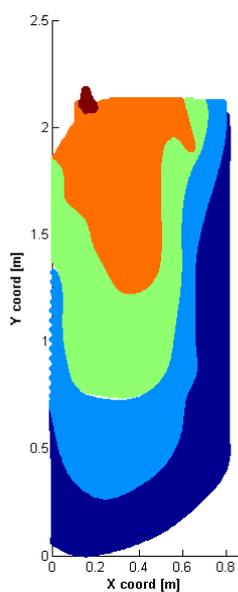
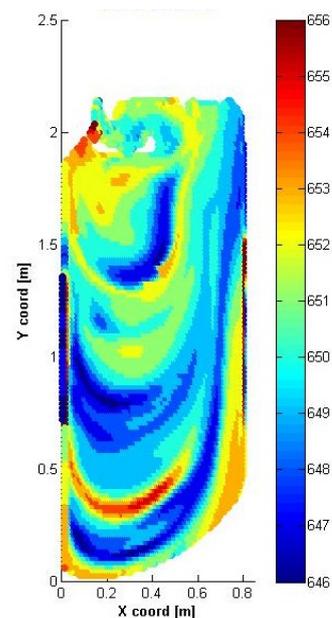


Figura 5.7: Concentrazioni inizio 4<sup>a</sup> colata

Figura 5.8: Profilo dei batch inizio 5<sup>a</sup> colataFigura 5.9: Concentrazioni inizio 5<sup>a</sup> colata

Ciò che si può in generale osservare in figura è la creazione di fasce in cui la concentrazione del particolato è maggiore alternato a fasce in cui la concentrazione è minore. Queste strutture a fasce seguono complessivamente l'andamento dei diversi batch. Il motivo risiede nel fatto che le zone con shear-rate maggiore sono quelle lungo le pareti e all'interfaccia dei batch, di conseguenza il particolato tende ad allontanarsi da queste zone inevitabilmente accumulandosi nelle vicinanze della mezzeria del profilo del batch. Questo trova riscontro sia con i dati sperimentali [3] sia con quelli presenti in letteratura [57] e [14].

Nell'immagine sottostante viene riportato l'andamento medio del valore di concentrazione lungo la coordinata radiale, tale andamento viene ricavato mediando lungo la quota i valori della concentrazioni di tutti i punti di controllo aventi la stessa coordinata radiale. Ovviamente questo costituisce un primo modo per stimare l'effetto sul rateo di combustione, propriamente occorrerebbe considerare anche la parte a stella tuttavia, essendo la parte cilindrica predominante, è possibile considerare che quella stellata assuma un peso relativo minore rendendo dunque valida l'approssimazione introdotta.

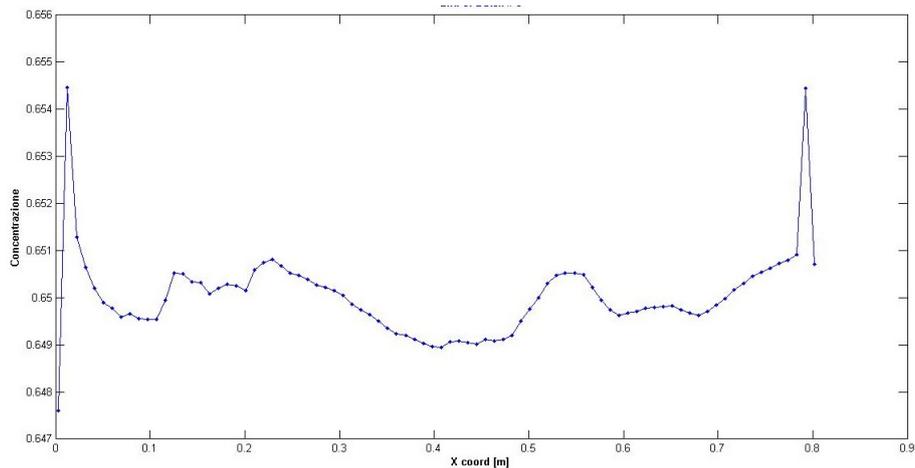


Figura 5.10: Andamento medio concentrazione lungo il web

Pur confermando alcune evidenze sperimentali (come il fatto che subito a ridosso delle pareti si abbia un impoverimento di fase solida dovuta all'elevato shear-rate che tende a far migrare il particolato verso le zone più interne determinando quei picchi di concentrazioni osservabili in figura 5.10) i risultati ottenuti non sono tali da giustificare l'effetto hump dal momento che il valore medio di concentrazione ottenuto è pressoché costante lungo tutto il web. Il motivo è forse da ricercare nella legge implementata la quale trascura diversi effetti che, alla luce dei risultati ottenuti, andrebbero forse tenuti in conto. In particolar modo viene trascurata l'ipotesi per cui alcune celle possano localmente raggiungere il limite di impacchettamento per cui non siano in grado di poter acquisire ulteriormente particolato al loro interno. Vengono trascurati alcuni meccanismi di trasporto, quali quello convettivo legati al gradiente stesso della concentrazione e quelli di natura diffusiva. Inoltre occorrerebbe anche indagare a fondo l'entità delle variazioni di concentrazione e comprendere se esse siano sufficientemente grandi da determinare delle variazioni locali di viscosità tali da modificare a loro volta i risultati delle simulazioni fluidodinamiche.

Alla luce dei risultati ottenuti si è deciso di rimandare ulteriori analisi nell'ambito della separazione tra le fasi e dunque non si è ancora sviluppato un codice Matlab che sia in grado di analizzare le concentrazioni nelle simulazioni tridimensionali.

## 5.2 Codice dell'orientamento

Gli step dell'algoritmo relativo all'analisi dell'orientamento particellare ricalca sommariamente quello delle concentrazioni, rimangono inalterate le prime tre fasi:

- Caricamento dei dati derivanti dalla simulazione fluidodinamica
- Definizione punti di controllo
- Definizione delle probes

Viene ovviamente modificata la fase di inizializzazione.

- Inizializzazione della posizione angolare: nella fase iniziale le probes vengono iniziate allineandole alla direzione del vettore di velocità, ottenuta interpolando le due componenti di velocità attraverso i valori, risultanti dalla simulazione fluidodinamica, contenuti nei nodi della mesh. Sono state effettuate anche delle prove nelle quali le probes venivano iniziate secondo una direzione randomica, ad ogni caso la configurazione iniziale veniva persa dopo poche iterazioni.

All'interno della fase di sotto-iterazione vengono alternativamente compiute le seguenti due operazioni:

- Movimentazione probes: questa fase è del tutto identica a quanto visto nel codice delle concentrazioni.
- Riorientamento particelle: ad ogni istante viene ricalcolata la direzione locale del flusso e il modulo dello shear-rate e dell'extensional-rate. Da alcuni studi condotti sulla dinamica delle particelle solide nelle miscele bifase, in particolar modo in due di essi [56] e [33], è emerso che il particolato tenda ad allinearsi nella direzione del flusso in presenza di elevati shear-rate ( $\dot{\gamma}$ ) e al contrario nelle zone in cui l'extensional-rate ( $\dot{\epsilon}$ ) assume valori significativi le particelle all'interno della miscela tendono sorprendentemente ad allinearsi in maniera ortogonale al flusso. C'è tuttavia da sottolineare il fatto che il primo dei due studi citati sia stato condotto considerando un microcanale a metà del quale era presente una corta strozzatura. Da osservazioni sperimentali è emerso che prima della strozzatura le particelle tendevano ad allinearsi lungo l'asse del canale, (concordemente al vettore di velocità), all'interno della strozzatura le particelle tendevano comunque a rimanere allineate dal momento che i valori di shear-rate erano comunque elevati, di seguito alla strozzatura invece le particelle tendevano ad allinearsi ortogonalmente poiché il rapporto tra shear-rate ed extensional-rate era più basso relativamente alle altre due zone del canale. Il secondo dei due articoli invece tratta il colaggio di materiali cementizi all'interno di opportuni stampi. Anche in questo caso il processo ricalca un

flusso all'interno di un canale, i risultati numerici e sperimentali hanno comunque confermato quanto precedentemente introdotto, nella zona vicina alle pareti dove lo shear-rate è predominante le particelle tendono ad orientarsi parallelamente al flusso, nella zona centrale, al contrario, le particelle tendevano a disporsi ortogonalmente ad esso. Resta comunque da sottolineare il fatto che la rapidità con il quale le particelle tendono ad allinearsi con il flusso sia una funzione direttamente proporzionale allo shear-rate e che difatti per molte applicazioni pratiche sia lecito effettuare l'approssimazione di fibra allineata [34] (tale approssimazione consiste nel considerare che l'allineamento sia quasi istantaneo). Questo giustifica in parte il metodo utilizzato per il trattamento della dinamica delle particelle considerando una successione di tanti stazionari. In ultimo dunque si vuole porre l'attenzione sul fatto che gli studi finora analizzati riguardano dei flussi relativamente "semplici" nel senso che i due termini ( $\dot{\gamma}$ ) e ( $\dot{\epsilon}$ ) sono nient'altro che la derivata della velocità rispettivamente lungo le direzioni ortogonale ( $\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$  e  $i \neq j$ ) e parallela alla velocità stessa ( $\frac{\partial v_i}{\partial x_i}$ ). Nel caso di studio invece il tensore delle deformazioni ( $E_{ij}$ ) è rappresentato da una matrice piena, in cui sono presenti tutte e quattro le componenti (nel caso bidimensionale). Si è dunque deciso di ricondursi al caso semplificato considerando i moduli delle due parti che compongono il tensore.

Nella fattispecie è possibile scrivere il tensore delle deformazioni nel seguente modo:

$$E_{ij} = \underbrace{\frac{1}{3} \left( \sum_k \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}}_{\text{expansion-rate tensor } D_{ij}} + \underbrace{\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \left( \sum_k \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right)}_{\text{shear-rate tensor } S_{ij}}$$

E dunque si può in sintesi considerare:

$$\|\dot{\gamma}\| = \sqrt{2 \cdot (S:S)}$$

$$\|\dot{\epsilon}\| = \sqrt{2 \cdot (D:D)}$$

La legge dinamica implementata allora assume la forma:

$$\theta_P^{new} = k_1 \cdot (\theta_f - \theta_p^{old}) + k_2 \cdot \left( \frac{\pi}{2} + (\theta_f - \theta_p^{old}) \right) \quad (5.3)$$

Dove:

- $\theta_f$  è l'angolo di orientamento del flusso
- $\theta_p^{old}$  è l'angolo di orientamento della particella allo step precedente
- $\theta_f$  è l'angolo che la direzione del vettore velocità forma con la direzione radiale del motore z9
- $k_1$  è un fattore di proporzionalità relativo alla componente del tensore delle deformazioni legata allo shear-rate
- $k_2$  è un fattore di proporzionalità relativo alla componente del tensore delle deformazioni legata all'expansion-rate

Sulla base di alcuni studi presenti in letteratura [51],[42] sebbene si sia visto nel capitolo 1 che il considerare il fluido con comportamento newtoniano non infici i risultati delle simulazioni fluidodinamiche (poiché i bassi livelli di shear-rate non modificano significativamente lo stato tensionale) non si è voluto ad ogni modo trascurare, quantomeno nella dinamica particellare, il fatto che globalmente il fluido esibisca un comportamento pseudo-plastico (per cui la viscosità tende a diminuire, man mano che lo shear-rate aumenta, rispetto al caso newtoniano), il quale potrebbe essere appunto spiegato con una tendenza generale del particolato ad orientarsi nella direzione locale del flusso offrendo di fatto meno resistenza. Inizialmente si è indagata l'influenza della prima delle due componenti, che esprime la tendenza della particella ad orientarsi con l'asse secondo la direzione del vettore velocità del flusso locale. Per modellare il coefficiente  $k_1$  si quindi scelta una legge di tipo esponenziale che ricalchi quella di Ostwald de Waele relativa al comportamento non-newtoniano del propellente:

$$k_1 = \left( \frac{\|\dot{\gamma}\|}{\|\dot{\gamma}_{ref}\|} \right)^n$$

Si è poi effettuata un'analisi di sensitività per indagare l'influenza di ciascuno dei due parametri (l'esponente ed il valore di riferimento) nella determinazione dell'orientamento finale del particolato e per definire una combinazione ottimale. Per far questo si è assunto che durante tutta la simulazione il vettore di regressione del grano si mantenga sempre in direzione radiale, per cui si è potuto calcolare una funzione di hump numerica come media (lungo la quota) dei coseni degli angoli di orientazione del particolato rispetto alla direzione di regressione del grano. In figura 5.11 viene illustrata la corrispondenza tra fattore di alterazione ed angolo, utile per la definizione della funzione di hump numerica.

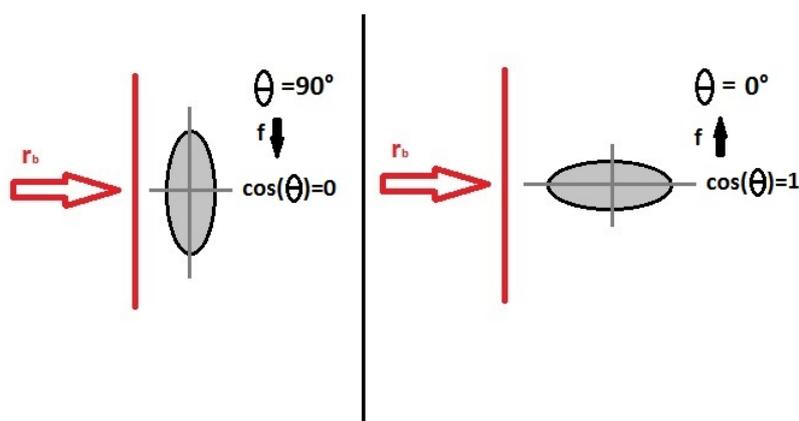


Figura 5.11: Corrispondenza tra angolo e fattore di alterazione

A seguito si sono confrontate le curve numeriche, ottenute con il metodo suddetto, con quelle sperimentali calcolando il valore "RMS". Di seguito vengono riportati i risultati delle mappe di orientazione ed il confronto fra la curva di hump numerica (in blu) e quella

sperimentale (in rosso). Nelle figure di seguito riportate il parametro  $j1$  indica  $||\dot{\gamma}_{ref}||$  mentre il parametro  $j2$  indica l'esponente  $n$ .

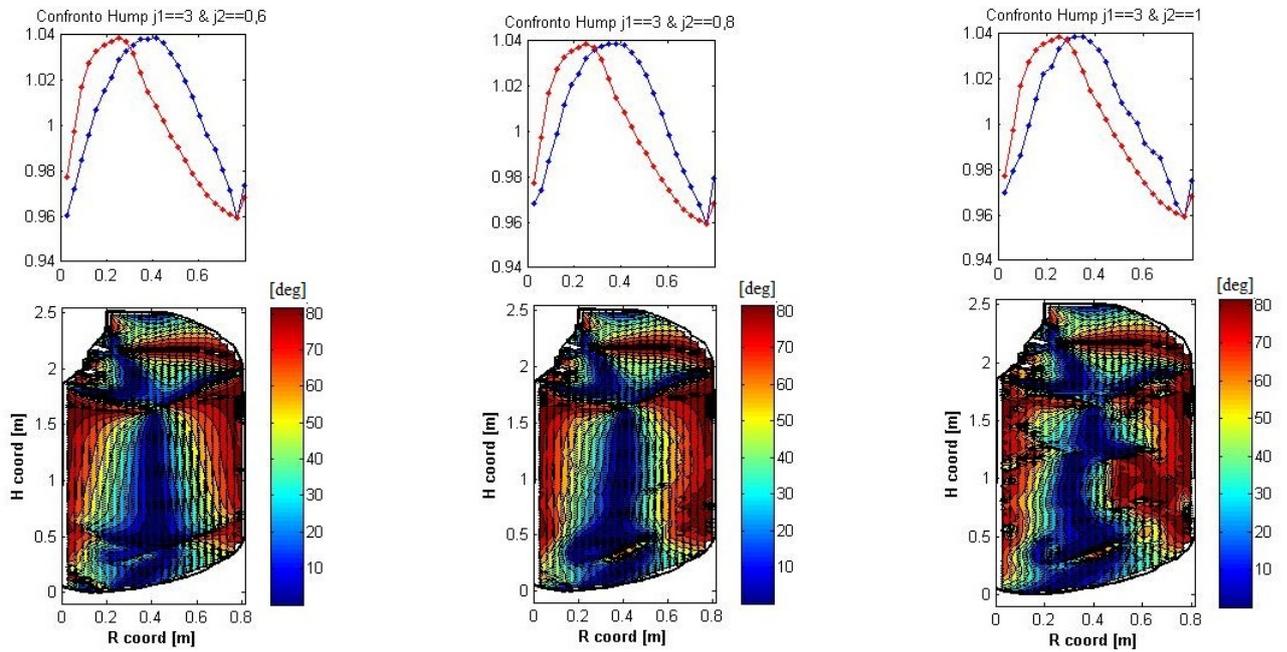


Figura 5.12: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione ( $j1=3$ ) ( $j2=0,6$   $0,8$   $1$ )

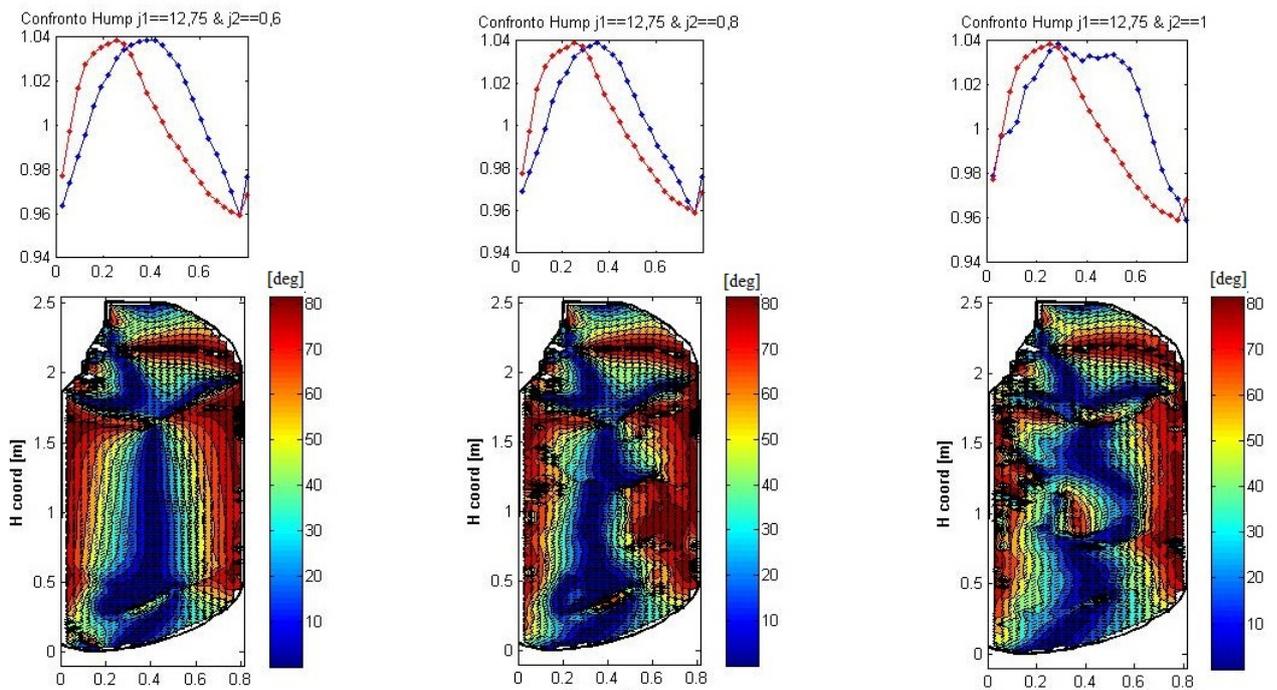


Figura 5.13: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione ( $j1=12,75$ ) ( $j2=0,6$   $0,8$   $1$ )

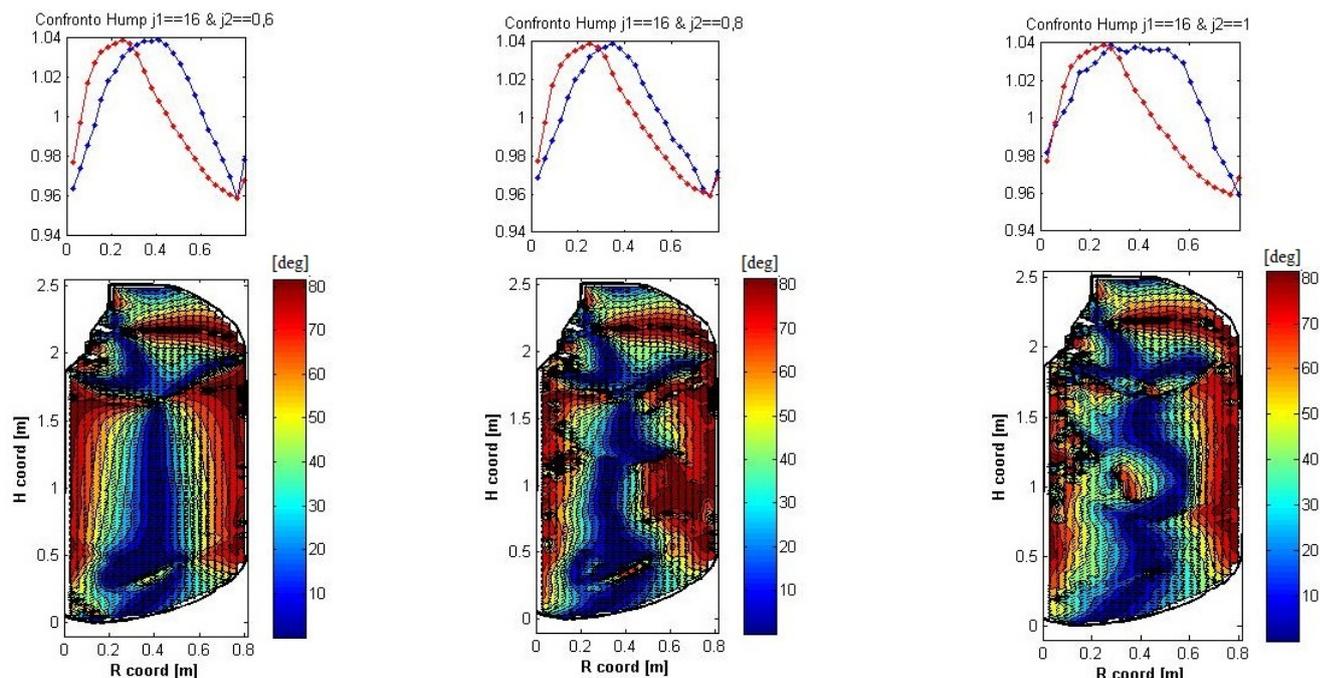


Figura 5.14: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione ( $j_1=16$ ) ( $j_2=0,6, 0,8, 1$ )

Come si può evidenziare dalle figure sovrastanti il parametro più influente nella determinazione dell'orientamento è l'esponente " $n$ " mentre al variare del valore di  $|\dot{\gamma}_{ref}|$  si ottengono dei risultati pressoché uniformi. Nel complesso tuttavia la corrispondenza tra la curva sperimentale e quella calcolata numericamente non è ottimale. In figura 5.15 viene riportata la mappa RMS. Si tenga presente che essa stata ottenuta per successiva interpolazione dei dati ottenuti dalle prove effettuate (che sono state in totale venticinque).

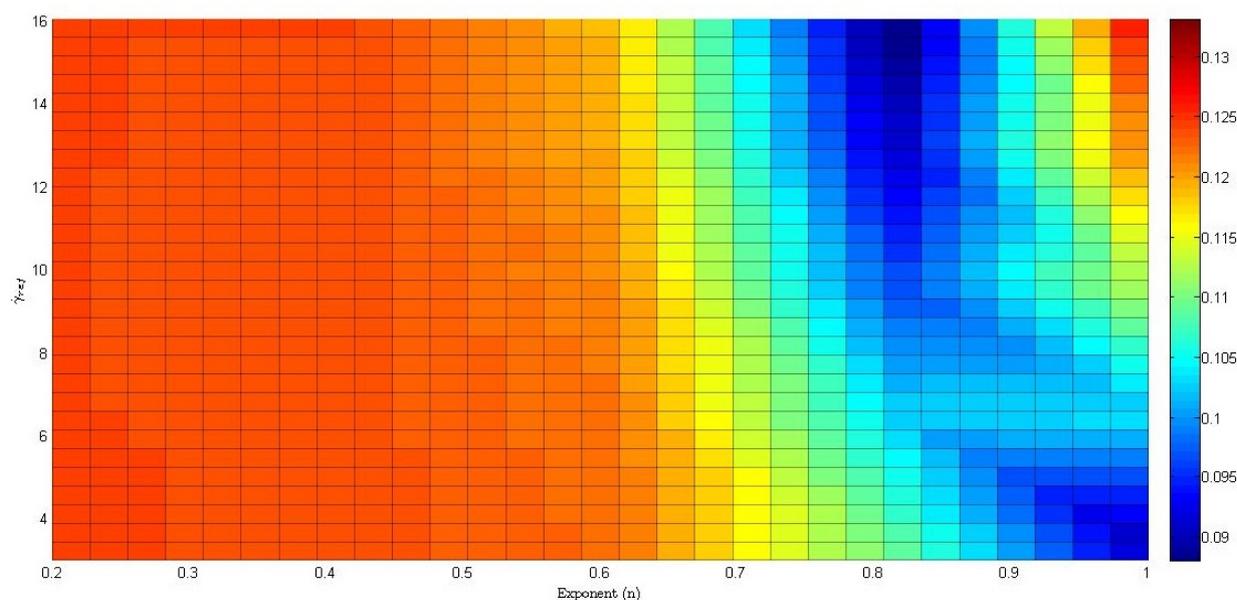


Figura 5.15: Mappa RMS al variare dei valori di  $|\dot{\gamma}_{ref}|$  e di  $n$

Si può osservare come i risultati migliori si ottengano per valori dell'esponente prossimi ad  $n=0.8$  mentre il valore di  $||\dot{\gamma}_{ref}||$  riveste un'importanza secondaria sebbene i valori ottimali di  $||\dot{\gamma}_{ref}||$  tendano ad essere vicini a sedici.

Di seguito vengono mostrati i risultati delle simulazioni numeriche di combustione ottenute implementando due delle mappe mostrate nelle figure precedenti. Le simulazioni numeriche sono state condotte attraverso il simulatore balistico ROOBOOST (ROcket BOost Simulation Tool), un software in grado di ricostruire la balistica interna alla camera di combustione di un SRM, in termini di gasdinamica interna e di interazione con il processo di combustione del grano propellente. Il software per sua natura richiede l'implementazione di una mappa tridimensionale, in prima approssimazione si è quindi scelto di ripetere la mappa bidimensionale (relativa ad un'unica sezione del motore) su tutti i  $360^\circ$ , consci del fatto di non riuscire a cogliere correttamente quanto accade in corrispondenza degli slot radiali. Per poter tradurre l'informazione sull'angolo in un valore numerico, in termini di fattore di alterazione, si sono considerate le direzioni locali di regressione del grano di una simulazione balistica isotropa e si è tradotto l'angolo tra la particella ed il vettore  $r_b$  in un valore numerico che garantisca peraltro che il tempo di simulazione coincidesse con il tempo reale che il propellente impiega per bruciare completamente. Tuttavia, in tale procedura si nasconde un'approssimazione legata al fatto che si suppone che il vettore  $r_b$  mantenga la stessa direzione del caso isotropo anche in quello anisotropo. In realtà così non sarebbe, in via teorica infatti occorrerebbe attuare una procedura iterativa per definire l'associazione tra l'angolo ed il fattore di alterazione, procedura che risulta però piuttosto onerosa in termini di tempi di calcolo (si consideri che per ciascuna simulazione balistica occorrono circa 4h) ma che ad ogni modo in futuro verrà certamente svolta.

Nelle due figure sottostanti vengono riproposti gli andamenti delle superfici di combustione nella simulazione isotropa rispettivamente rispetto al tempo e allo spessore di web bruciato.

Regressione superficie di combustione (Funzione del Tempo)

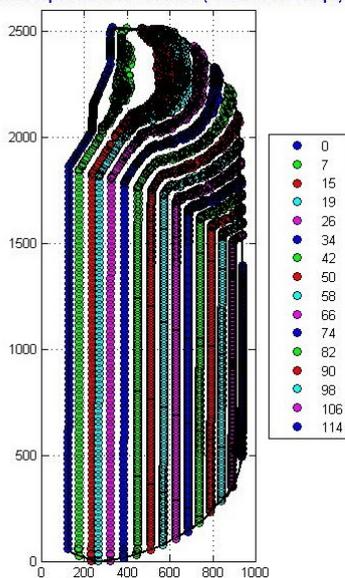


Figura 5.16: Andamento superfici di combustione (Funzione del tempo)

Regressione superficie di combustione (Funzione del Web)

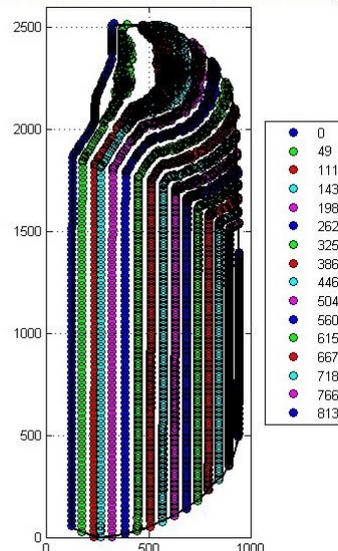


Figura 5.17: Andamento superfici di combustione (Funzione del web bruciato)

Mentre in figura 5.18 vengono mostrati i risultati della simulazioni balistiche e l'andamento della funzione di Hump calcolata a posteriori.

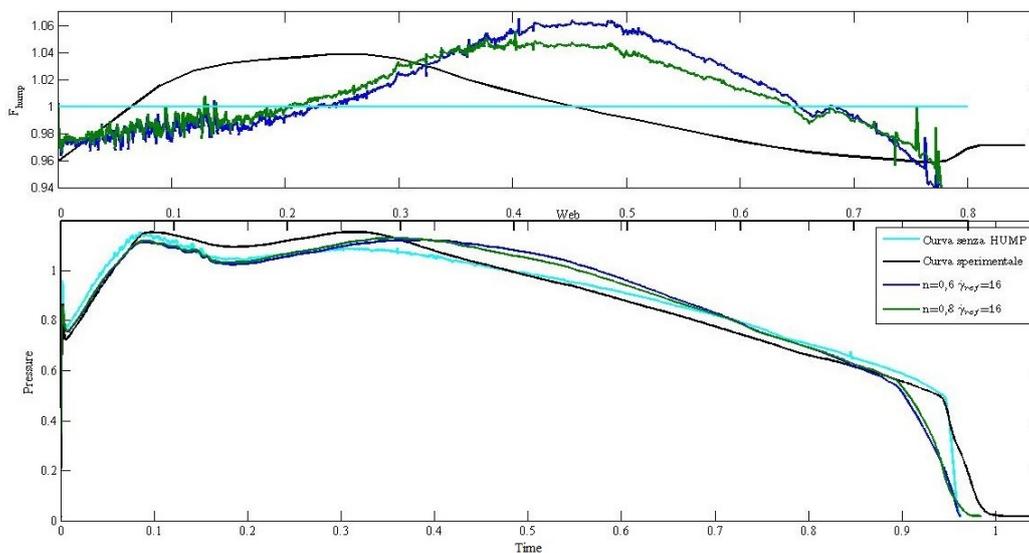


Figura 5.18: Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 privata del secondo contributo)

Come si può vedere i risultati delle simulazioni ottenute con la legge 5.3 privata del secondo contributo non riescono a cogliere complessivamente il fenomeno dell'Hump avendo il massimo della funzione spostato a destra rispetto alla posizione attesa. Ad ogni modo i risultati ottenuti erano in linea con le aspettative dal momento che osservando le figure (5.12,5.13,5.14) si può notare che la curva simulata rimanga sotto quella sperimentale fino al punto del web corrispondente alla coordinata 0.3 ed in seguito invece si trovi completamente sopra. Se si osserva la figura 5.18 (figura in alto) si può notare come questa tendenza venga complessivamente rispettata validando di fatto l'ipotesi relativa al fatto che mediamente la direzione del vettore di regressione del grano sia quella radiale anche nel caso di simulazione non isotropa.

Si tenga comunque presente che la differenza tra le curve rappresentate nelle figure (5.12,5.13,5.14) e quelle di figura 5.18 (figura in alto) è imputabile alla diverse modalità con il quale sono state ottenute; le ultime infatti sono state calcolate a posteriori attraverso la relazione (1.8) e coincidono difatti con la definizione vera e propria di fattore di Hump.

In seguito si è deciso dunque di inserire la seconda delle due componenti relative alla relazione (5.3) mantenendo comunque una legge di potenza anche per il coefficiente  $k_2$ . L'esponente scelto per entrambi i coefficienti è rimasto quello che nella prima serie di analisi aveva dato i migliori risultati ( $n=0.8$ ). In definitiva il termine  $k_2$  può essere quindi riscritto:

$$k_2 = \left( \frac{\|\dot{\epsilon}\|}{\|\dot{\epsilon}_{ref}\|} \right)^n$$

Anche in questo caso è stata effettuata una nuova analisi di sensitività rispetto ai parametri  $\|\dot{\gamma}_{ref}\|$  (indicato con j1 nelle figure) e  $\|\dot{\epsilon}_{ref}\|$  (indicato con j2). Nelle figure seguenti vengono riportati i risultati finali.

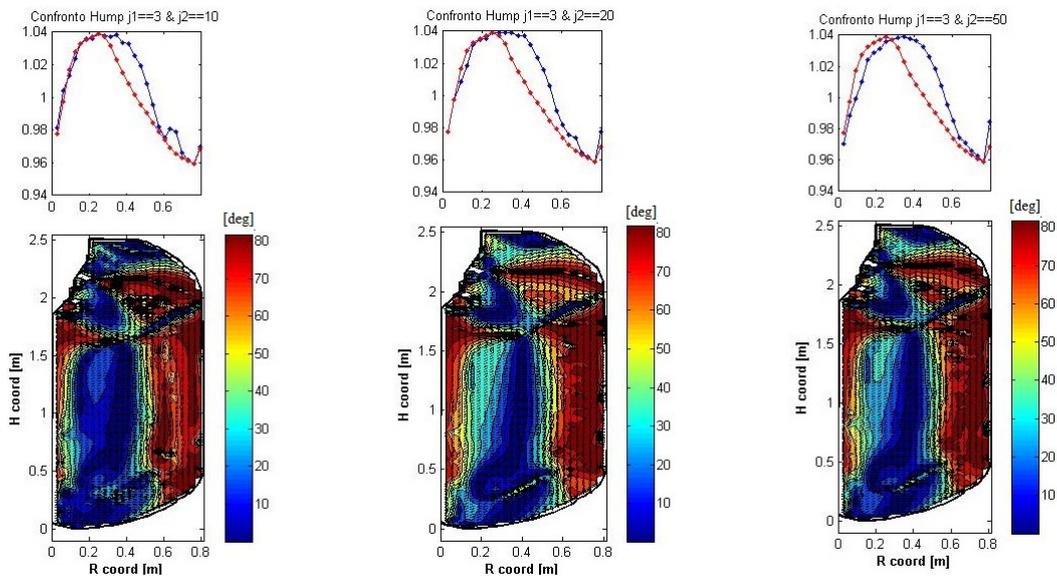


Figura 5.19: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione ( j1=3) ( j2=10,20,50)

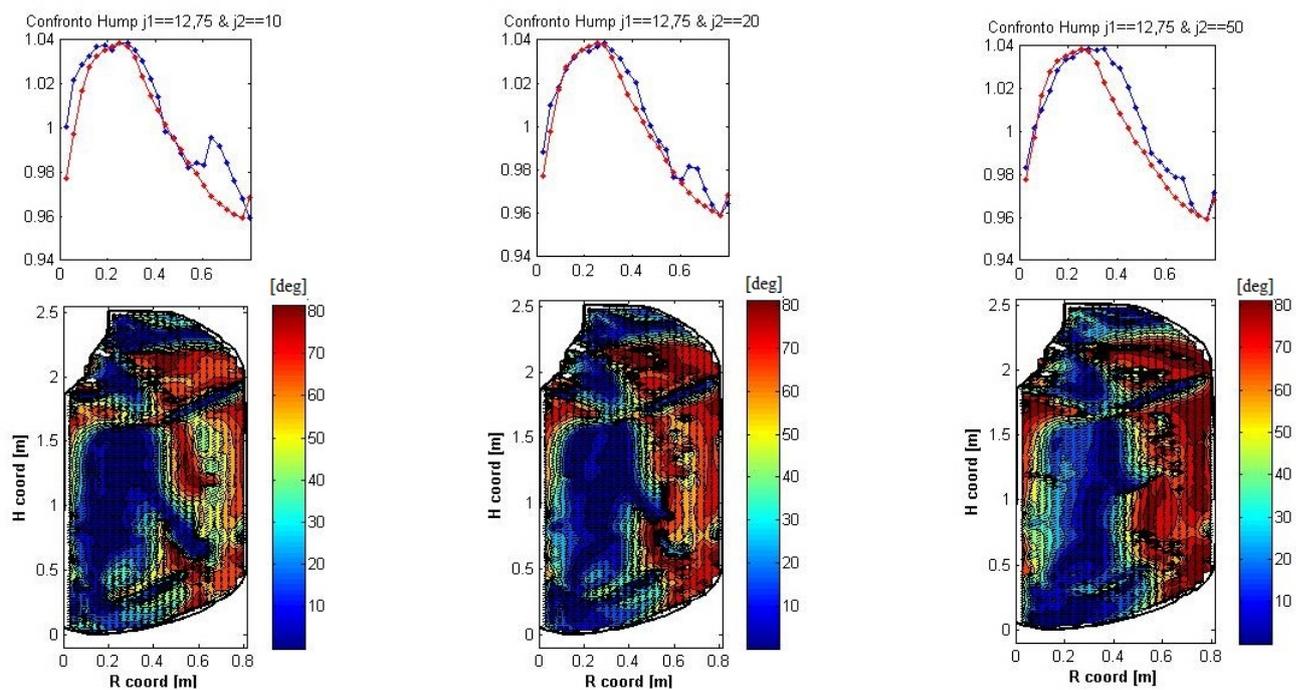


Figura 5.20: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (  $j_1=12,75$  ) (  $j_2=10,20,50$  )

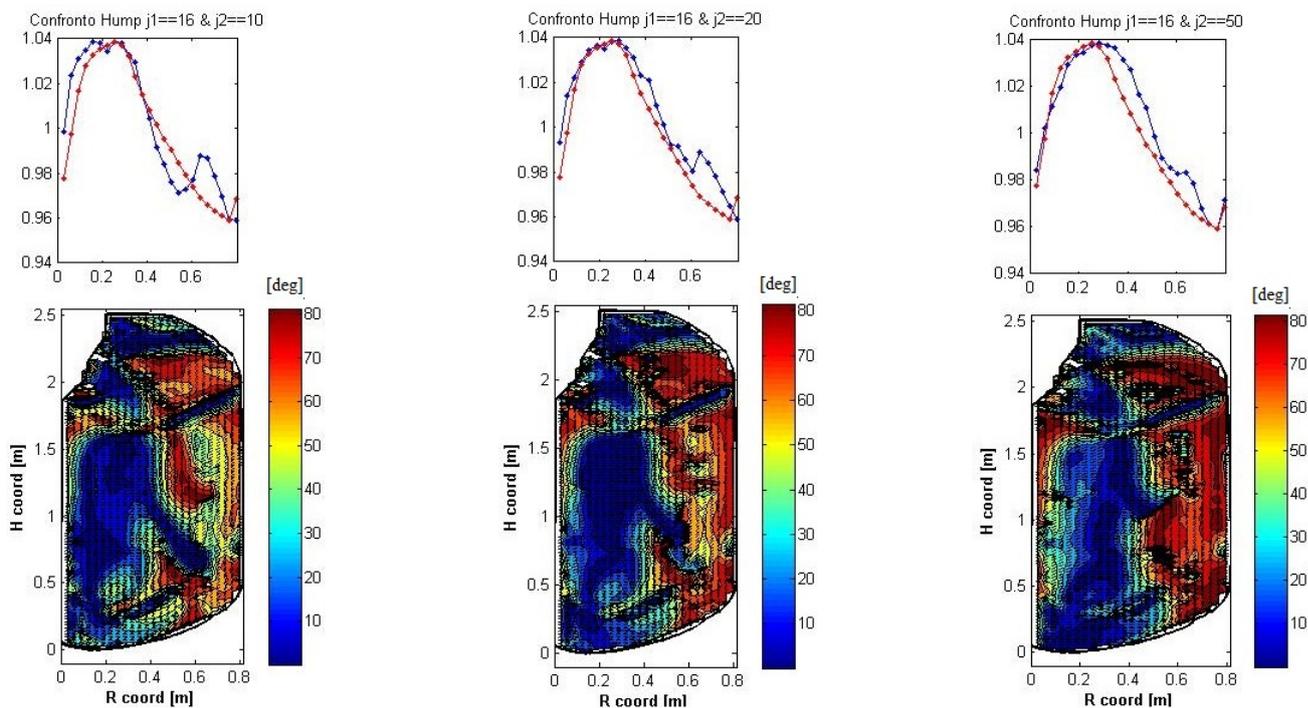


Figura 5.21: Mappe di orientamento degli angoli nella sezione (  $j_1=16$  ) (  $j_2=10,20,50$  )

Come si può osservare dalle figure a pagina precedente l'aggiunta del termine  $k_2$  modifica in maniera sostanziale la mappa dell'orientamento sia nella forma che nella posizione del massimo. Questa volta la corrispondenza tra la curva sperimentale e quella numerica

risulta migliore. Anche in questo caso si è calcolato il valore “RMS” in funzione dei due parametri  $j_1$  e  $j_2$ .

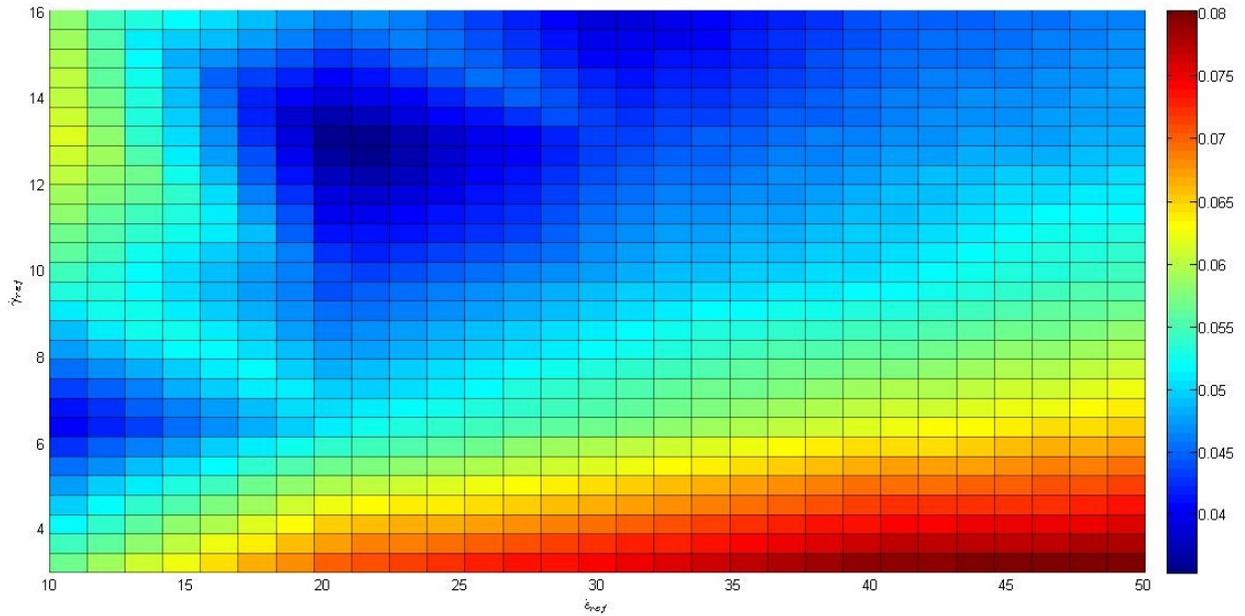


Figura 5.22: Mappa RMS al variare dei valori  $||\dot{\gamma}_{ref}||$  ed  $||\dot{\epsilon}_{ref}||$

Si noti anzitutto il fatto che in generale i valori “RMS” sono in questo caso più bassi rispetto al caso precedente, valori ottimali si ottengono per un valore di  $||\dot{\gamma}_{ref}||$  intorno a 13 e  $||\dot{\epsilon}_{ref}||$  intorno a 20.

Successivamente si sono dunque testate alcune delle mappe attraverso il sopraccitato software di simulazione balistica, nella figura sottostante vengono riproposti i risultati.

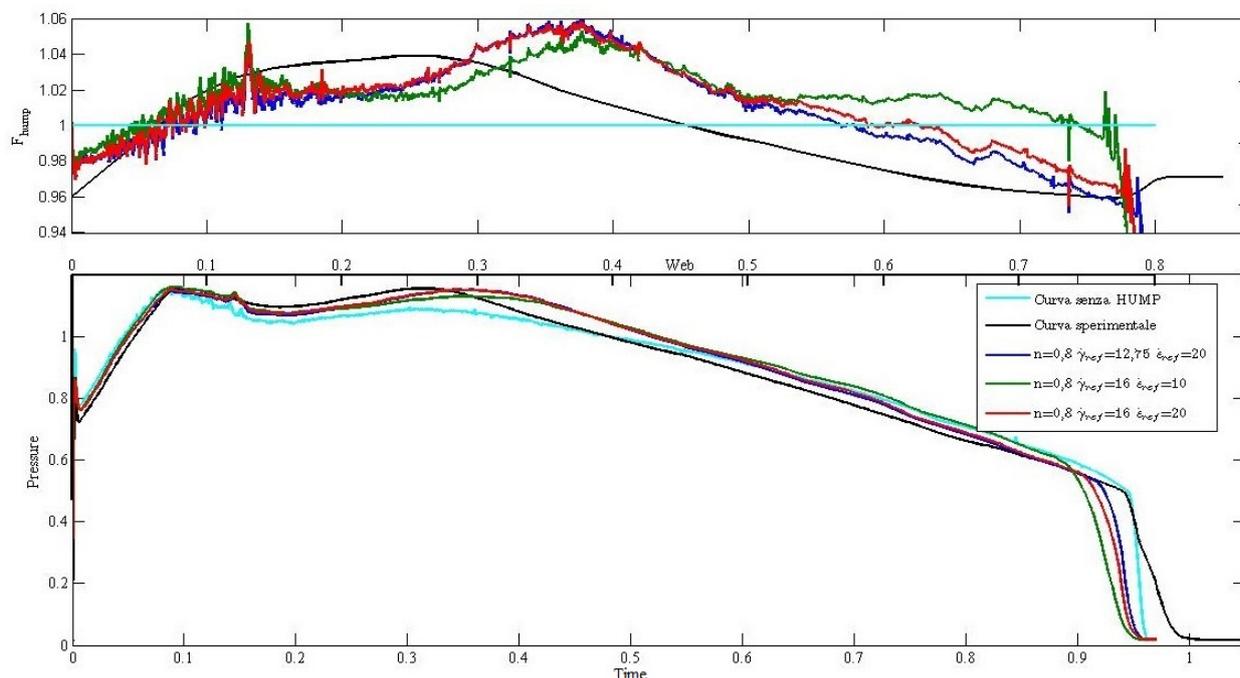


Figura 5.23: Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 completa)

Come si può osservare dalla figura soprastante i risultati ottenuti sono piuttosto buoni, c'è un'ottima corrispondenza con la curva sperimentale (in nero) nella prima parte sebbene vi sia un certo scostamento nella seconda, scostamento imputabile all'impossibilità di cogliere, con un approccio bidimensionale, quanto accade in corrispondenza degli slot del motore. Ad ogni modo si fa notare che se si confrontano i risultati ottenuti implementando la mappa delle orientazioni all'interno del simulatore si ottiene una stima complessivamente migliore relativamente a quella che si ottiene trascurando le eventuali anisotropie (curva azzurra).

Infine si è voluto confrontare i risultati della simulazione 2D con quelli ottenuti usando una singola sezione assiale della simulazione 3D. Essendo ad oggi ancora incompleta la simulazione tridimensionale si è confrontata solo la parte comune della sezione. Si è dunque presa in considerazione la sezione del motore z9 in corrispondenza della bocca di colata e si sono analizzati i risultati fluidodinamici ottenuti dalla simulazione 3D.

In ultima analisi si è implementato all'interno del simulatore la fase di calcolo del fattore di alterazione in funzione dell'angolo, conseguentemente si è dunque eliminata l'ipotesi che i vettori di regressione del grano, nel caso anisotropo, seguissero lo stesso andamento del caso isotropo. In figura 5.24 vengono riportati i risultati finali delle curve di pressione.

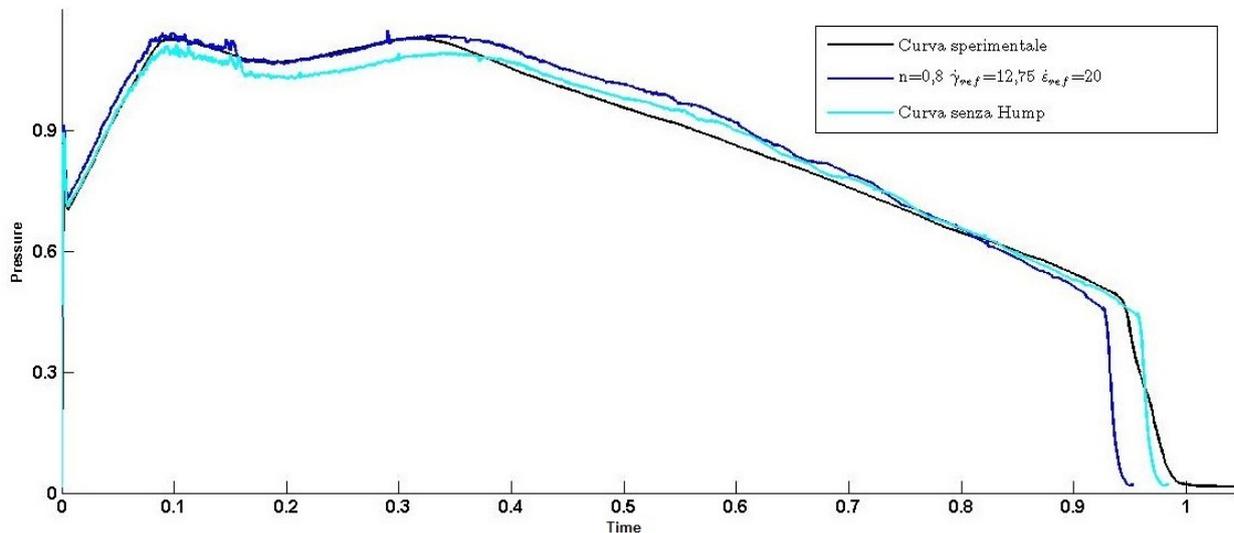


Figura 5.24: Risultati simulazioni balistiche (legge 5.3 completa & calcolo orientamento interno al simulatore)

Come si può vedere, rispetto al primo caso, l'aver introdotto il calcolo del fattore di alterazione all'interno del simulatore ha introdotto delle variazioni, in particolare si può notare come la stima della curva balistica sia in parte migliorata. Tuttavia occorre dire che si rendono necessarie ulteriori simulazioni numeriche (da effettuare variando il fattore di scala) al fine di rispettare il burning-time della prova sperimentale.

Come si può valutare dalle figure sottostanti, mantenendo invariati i valori dei vari parametri, la corrispondenza tra i risultati ottenuti con i dati delle simulazioni 2D e quelli ottenuti in quelle 3D è abbastanza buona. Questo confermerebbe ulteriormente che per l'orientazione una semplice analisi bidimensionale sarebbe sufficiente.

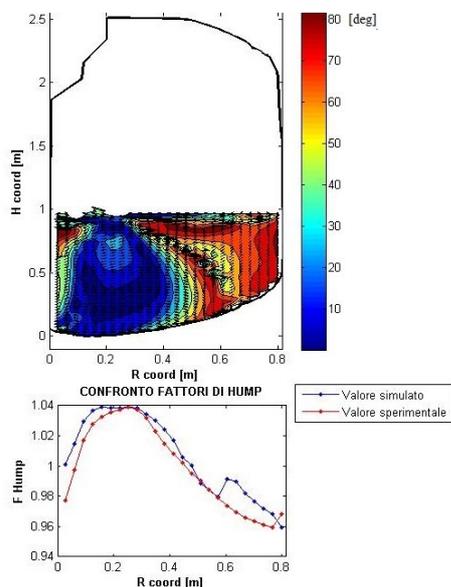


Figura 5.25: Simulazione 3D sezione sulla bocca di colata (  $j_1=12,75$  ) (  $j_2=20$  )

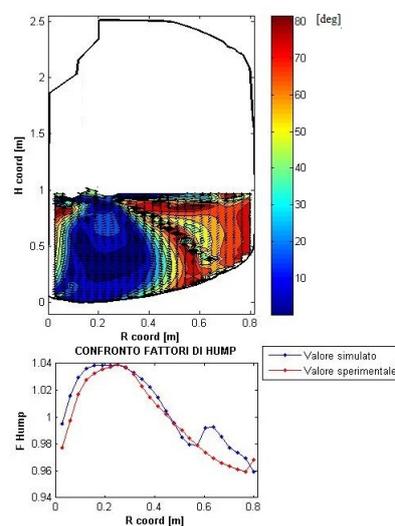


Figura 5.26: Simulazione 3D sezione sulla bocca di colata (  $j_1=16$  ) (  $j_2=20$  )

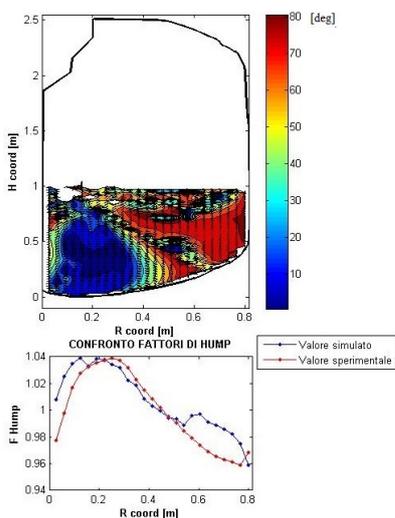


Figura 5.27: Simulazione 2D allo stesso livello del 3D (  $j_1=12,75$  ) (  $j_2=20$  )

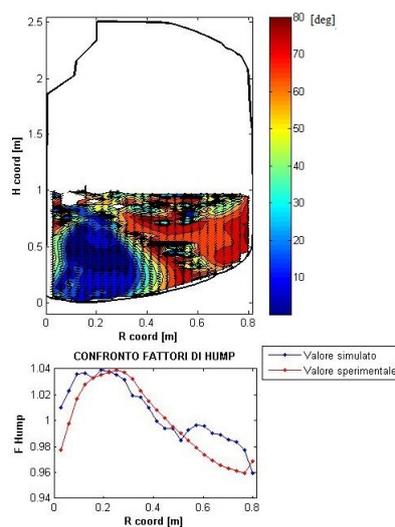


Figura 5.28: Simulazione 2D allo stesso livello del 3D (  $j_1=16$  ) (  $j_2=20$  )

### 5.3 Codice dell'orientamento 3D

Per avere un riscontro qualitativo, rispetto al caso bidimensionale, si è realizzato un ulteriore codice matlab in grado di ricostruire l'orientamento particellare con i dati provenienti dalla simulazione tridimensionale, gli step dell'algoritmo sono globalmente gli stessi del caso bidimensionale sebbene in questo caso sia stata eliminata la fase relativa alla movimentazione. Il motivo risiede nel fatto che nel codice 3D i nodi della griglia sono circa 20 volte di più rispetto al caso bidimensionale ed i tempi per l'interpolazione sarebbero eccessivamente lunghi. In prima approssimazione si è scelto quindi di considerare le probes coincidenti con i punti di controllo. Ad ogni modo si è deciso comunque di mantenere la fase di sotto-iterazione in modo da tenere in considerazione almeno la dinamica di orientazione delle particelle. Nel complesso dunque i vari step dell'algoritmo possono essere così riassunti.

- Caricamento dei dati derivanti dalla simulazione fluidodinamica
- Conversione dei valori di velocità da coordinate cilindriche a coordinate cartesiane. Avendo scelto per le simulazioni in Flow3D una mesh di tipo cilindrico le variabili fluidodinamiche vengono restituite in coordinate intrinseche. Considerando cioè una generica sezione del serbatoio la terna di versori  $(\hat{u}_r; \hat{u}_\theta; \hat{u}_z)$  sarà orientata in maniera tale che  $\hat{u}_r$  sia nella direzione radiale,  $\hat{u}_z$  lungo l'asse del motore e  $\hat{u}_\theta$  nella direzione ortogonale ai primi due (azimutale). Per ciascuna grandezza, e relativa derivata, sarà dunque necessario applicare di volta in volta una conversione dal sistema cilindrico di partenza a quello cartesiano  $(\hat{u}_x; \hat{u}_y; \hat{u}_z)$ .
- Definizione punti di controllo
- Inizializzazione della posizione angolare: rimane sostanzialmente invariata rispetto al caso 2D.
- Calcolo dell'angolo  $\theta$  compreso tra il versore velocità e quello relativo all'orientazione della particella: il calcolo viene effettuato ricavando l'angolo dal prodotto scalare tra i due versori e l'asse rispetto al quale deve avvenire la rotazione.
- Riorientamento particella: la legge implementata all'interno del codice è la medesima del codice 2D (eq. 5.3).

Si tenga inoltre presente che la fase di riorientazione avviene nel piano contenente i due versori, una volta che la particella verrà riorientata occorrerà ricalcolarne le coordinate relativamente alla terna di riferimento fissa.

Si consideri allora la terna solidale alla particella; questa terna avrà il primo asse  $(vt_1)$  solidale alla direzione relativa alla particella, il secondo asse  $(vt_2)$  sarà solidale con la

direzione della velocità e il terzo asse si otterrà come prodotto vettoriale tra i primi due ( $vt_3 = \frac{vt_1 \wedge vt_2}{\sin(\theta)}$ ). Per comprendere meglio l'orientamento degli assi si osservi figura 5.29.

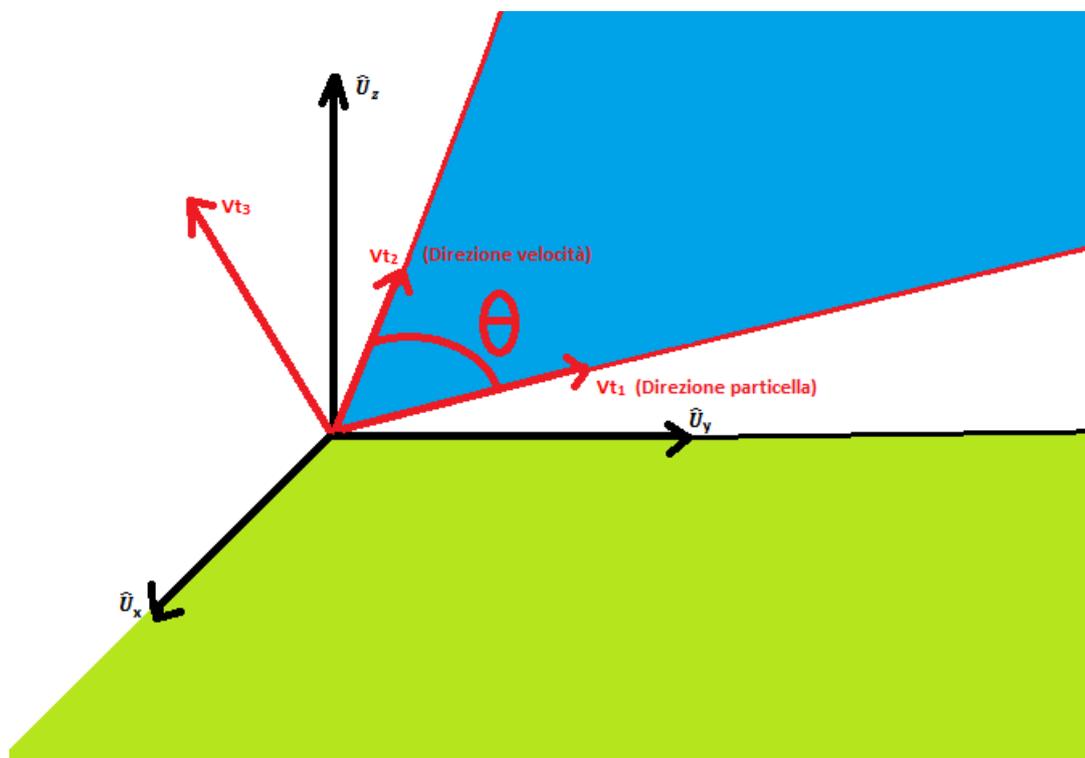


Figura 5.29: Rappresentazione terna relativa e terna fissa

Una volta nota la terna di versori ( $vt_1, vt_2, vt_3$ ) è possibile definire la matrice di cambiamento di base che permette di passare dalla base relativa alla particella a quella solidale con la terna fissa.

$$M_P^B = \begin{bmatrix} vt_{1,1} & vt_{2,1} & vt_{3,1} \\ vt_{1,2} & vt_{2,2} & vt_{3,2} \\ vt_{1,3} & vt_{2,3} & vt_{3,3} \end{bmatrix}$$

Dove  $vt_{1,1}$  ad esempio rappresenta la prima coordinata del versore  $vt_1$  e così per gli altri elementi della matrice dove il primo indice sta ad indicare il numero del versore ed il secondo la coordinata.

Ora rispetto al sistema di riferimento solidale alla particella, una volta che la particella avrà ruotato essa avrà come coordinate:  $v_{prot}^P = [\cos(\Delta\theta_{rot}), \sin(\Delta\theta_{rot}), 0]$ .

Per passare al sistema di riferimento fisso occorre dunque moltiplicare il vettore  $v_{prot}^P$  per la matrice  $M_P^B$  in modo da ottenere:

$$v_{prot}^B = [M_P^B] \cdot \{v_{prot}^P\}$$

Si tenga presente che questa metodologia appena illustrata cade in difetto nel momento in cui la particella ed il vettore di velocità risultino pressoché allineati, (in quel caso infatti

non possibile individuare un terzo vettore ortogonale ai primi due attraverso il prodotto scalare) ciò tuttavia non costituisce un vero e proprio problema dal momento che in quel caso la procedura di allineamento non necessita di essere svolta perchè la particella è già allineata con la direzione locale del flusso.

Di seguito vengono riportate due mappe dell'orientazione particellare fornite dal codice 3D. La prima (quella  $0^\circ$ ) è relativa alla sezione in corrispondenza della bocca di colata, l'altra è relativa alla sezione a  $16^\circ$  (vd. figura 5.30).

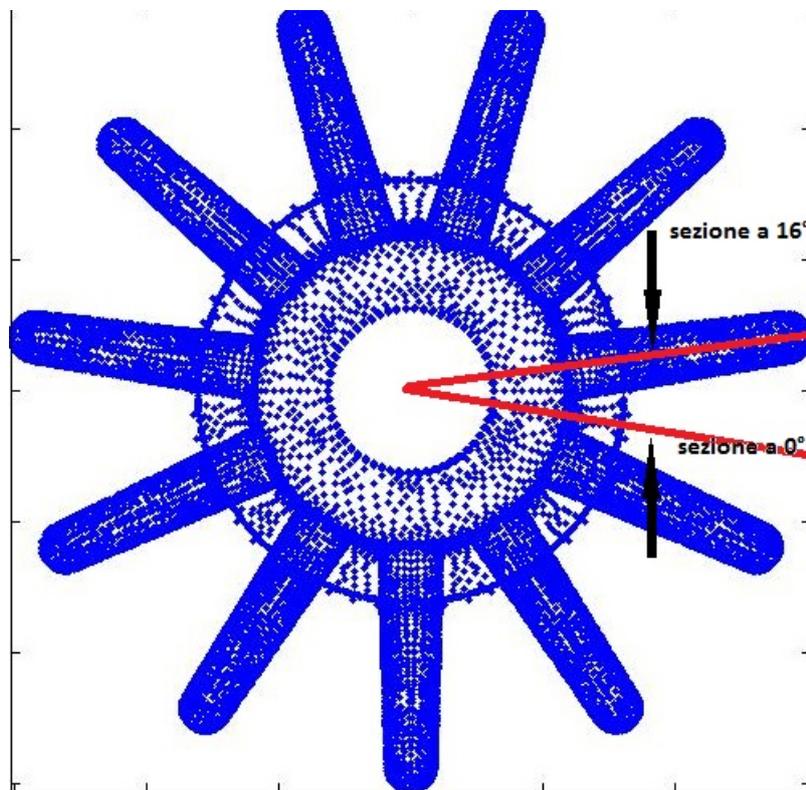


Figura 5.30: Rappresentazione sezioni risultati orientamento 3D

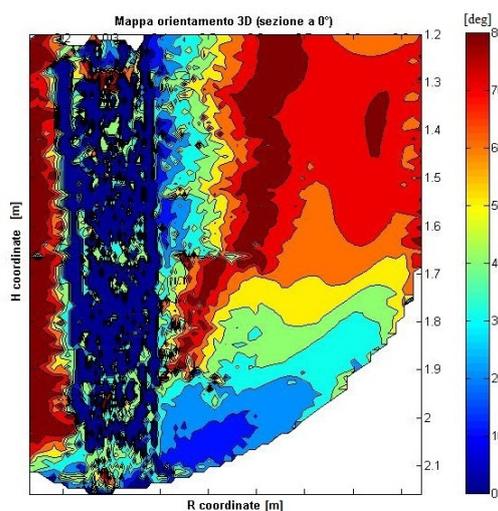


Figura 5.31: Mappe orientazioni particellari codice 3D (sezione a 0°)

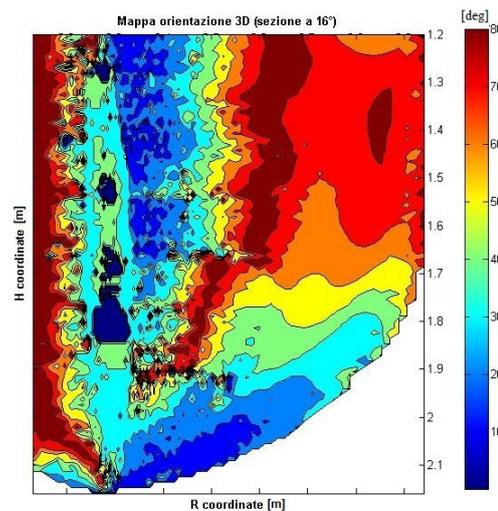


Figura 5.32: Mappe orientazioni particellari codice 3D (sezione a 16°)

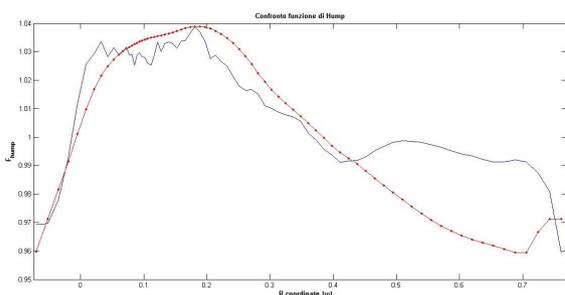


Figura 5.33: Confronto funzione di Hump codice 3D (sezione a 0°)

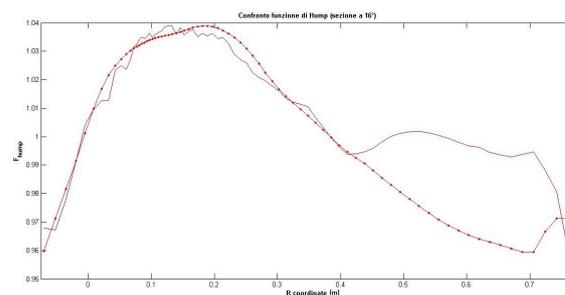


Figura 5.34: Confronto funzione di Hump codice 3D (sezione a 16°)

Come si può notare, anche nel caso tridimensionale, il codice ha restituito dei risultati sostanzialmente in linea con quanto sperato evidenziando una distribuzione degli orientamenti delle particelle tale da riuscire a giustificare l'andamento della funzione di Hump. Si nota tuttavia uno scostamento tra la curva sperimentale e quella numerica nella parte finale del tracciato. Questo è imputabile alla modalità con il quale viene ricavata la curva numerica (si veda paragrafo 5.2) ossia come media lungo la quota dei coseni degli angoli tra l'asse delle particella e la direzione radiale. Il fatto che nella parte bassa del motore il particolato è orientato nella direzione radiale fa innalzare il valore medio lungo il raggio della velocità di combustione. Tuttavia si prevede che man mano che la simulazione andrà avanti ed il serbatoio si sarà riempito, il peso relativo associato alla parte bassa del motore scenda, difatti migliorando la corrispondenza tra curva sperimentale e simulata. Si tenga comunque presente che anche nel codice 2D si era evidenziata la stessa problematica. In

aggiunta occorre dire che in futuro si prevede di uniformare i due codici introducendo le probes anche nella versione tridimensionale.

# Capitolo 6

## Conclusioni e sviluppi futuri

Gli obiettivi di questo lavoro di tesi sono stati duplici: da un lato la comprensione più nel dettaglio dei meccanismi che generano le anomalie nel rateo di combustione in motori a solido ottenuti mediante colaggio e dall'altro lo sviluppo di un codice di calcolo che permetta una analisi locale dei suddetti meccanismi e che costituisca un utile strumento per la stima prestazionale di tali motori.

Sulla base delle informazioni reperibili in letteratura, si è deciso di indagare più nel dettaglio due dei possibili aspetti che meglio potrebbero giustificare tali eterogeneità del rateo di combustione all'interno del propellente: la separazione tra fase solida e liquida e l'orientamento preferenziale del particolato (in quanto non di forma regolare) all'interno del propellente.

Per realizzare ciò, si è scelto di simulare il processo di colaggio e riempimento del motore Zefiro 9 attraverso codici CFD, sia con un approccio bidimensionale, con ovviamente tutte le semplificazioni ed approssimazioni che ne derivano, sia con un più realistico approccio tridimensionale. In particolare, le simulazioni fluidodinamiche bidimensionali sono state condotte mediante il codice commerciale "Fluent", grazie al quale è stato anche possibile ricostruire le interazioni che avvengono tra i diversi lotti di colata (configurazione multi-batch). Per quelle tridimensionali si è invece fatto uso del codice "Flow3D" limitando ad oggi l'analisi al colaggio del primo dei cinque batch di cui si compone il motore Zefiro 9, in relazione alle tempistiche computazionali richieste per il calcolo.

In una fase preliminare, si è reso necessario studiare ed individuare la tecnica numerica ottimale poter simulare la dinamica dei flussi multifase coinvolti. Tra le diverse possibilità analizzate la scelta è ricaduta sulla tecnica VOF in quanto oltre a garantire una buona flessibilità del metodo, risulta essere anche la più matura relativamente a questo genere di problematiche sulla fluidodinamica del colaggio per propellenti compositi.

I risultati fluidodinamici ottenuti con entrambi gli approcci sono stati globalmente in linea sia con dati sperimentali attualmente a disposizione sia con quelli reperibili in letteratura.

A partire dai dati fluidodinamici, sono stati elaborati in seguito dei codici di calcolo in ambiente MatLab per ricostruire le dinamiche particellari all'interno della massa fluida, validandoli principalmente sui risultati 2D e predisponendoli anche per la successiva analisi 3D. È stato sviluppato un algoritmo in grado di stimare le distribuzioni di fase solida all'interno del grain, correlando il flusso particellare tra celle di calcolo contigue con

il gradiente dello shear-rate locale. Sebbene si siano avute alcune conferme, relative alla creazione di una struttura “a fasce” della fase solida alternata a fase liquida e all’impoverimento di fase solida in prossimità della parete, tale analisi non è risultata essere in grado di giustificare in maniera soddisfacente il trend delle anomalie del rateo di combustione riscontrate sperimentalmente (funzione Hump).

Occorrerebbe indagare più a fondo i meccanismi di trasporto che avvengono all’interno di miscele concentrate per capire se eventuali gradienti di concentrazione giochino un ruolo rilevante nella determinazione dei flussi particellari tra celle contigue. Inoltre, occorrerebbe anche tenere in conto la possibilità che in alcune celle di calcolo si possa raggiungere il limite di saturazione ed inserire quest’aspetto all’interno del codice. Infine occorrerebbe valutare tramite un approccio sperimentale l’entità delle variazioni di concentrazione e comprendere se esse siano sufficientemente grandi da determinare delle variazioni locali di viscosità tali da modificare a loro volta i risultati delle simulazioni fluidodinamiche.

Un secondo algoritmo è stato invece realizzato per analizzare l’orientamento preferenziale del particolato, caratterizzato in generale da una morfologia prolata. Dapprima si è tentato di correlare tale orientamento ai valori di shear-rate che si generano localmente durante il processo di colaggio, ipotizzando una legge di proporzionalità diretta tra questa grandezza e la tendenza delle particelle ad orientarsi nella direzione locale del vettore velocità. Tuttavia, dalla letteratura è emerso come in presenza di valori elevati di extensional-rate le particelle tendono sorprendentemente ad orientarsi ortogonalmente al vettore velocità. Si è quindi introdotto un secondo termine che tenesse in conto questo ulteriore meccanismo. I risultati ottenuti in questo secondo caso sono stati molto soddisfacenti restituendo un’orientazione media del particolato in grado di giustificare l’andamento del fattore di hump lungo il web in maniera migliore rispetto al caso precedente.

Si sono dunque generate delle mappe di orientazione che sono state inserite all’interno del codice di simulazione di balistica interna “ROBOOST”, al fine di verificarne l’effetto ultimo sul profilo di pressione generato all’interno del motore. Le simulazioni ottenute hanno evidenziato una buona coerenza delle curve simulate con quelle sperimentali, sebbene alcuni perfezionamenti al metodo debbano comunque essere considerati in futuro.

Le simulazioni bidimensionali, infatti, non sono in grado di cogliere correttamente la fenomenologia dell’orientazione in corrispondenza degli slots e questo si evidenzia dalla non perfetta corrispondenza delle curve balistiche simulate con quelle sperimentali, specie negli istanti in cui il loro contributo risulta preponderante. Tale carenza verrà infatti colmata dall’analisi tridimensionale una volta completate le relative simulazioni fluidodinamiche, i cui risultati parziali hanno comunque fornito andamenti soddisfacenti ed in linea con quanto atteso.

Sulle base delle considerazioni fatte, gli sviluppi futuri di questo elaborato posso essere così riassunti:

- Introduzione del fenomeno di segregazione particellare (tra particelle grandi e piccole) all'interno del codice di calcolo della concentrazione.
- Prosecuzione della simulazione tridimensionale al fine di riuscire a cogliere la fenomenologia sull'orientamento anche in corrispondenza degli slot del motore.
- Verifica sperimentale dei dati ottenuti attraverso i codici di calcolo, validando di fatto il lavoro finora svolto. Analisi sperimentale volta anche ad indagare l'entità del fattore di forma del particolato all'interno del grain e della correlazione analitica tra angolo di orientazione e velocità del rateo di combustione.



# Appendice A

## Metodi di discretizzazione dei termini dell'equazione di NS

### Metodo ai volumi finiti

Il metodo dei volumi finiti (FVM) rappresenta uno degli approcci possibili per la discretizzazione delle equazioni differenziali alle derivate parziali (PDE).

L'ideazione di questa metodologia si deve a Mc. Donald (1971) e Mac Cormack e Paullay (1972), i quali indipendentemente lo utilizzarono per la soluzione delle equazioni di Eulero di un campo di moto bidimensionale ed instazionario.

Successive estensioni del metodo vennero introdotte da Rizzi ed Inouye per la soluzioni di campi di moto tridimensionali.

Sostanzialmente si può dire che il metodo FVM nasce dall'esigenza di risolvere flussi intorno a geometrie complesse, laddove cioè griglie di calcolo puramente cartesiane non sarebbero adatte a descrivere efficacemente il dominio e dove quindi i metodi di discretizzazione alle differenze finite riuscirebbero a caratterizzare la soluzione solo a fronte di un onere computazionale eccessivamente elevato.

Ad ogni modo è bene ricordare che i primi tentativi di risolvere flussi su geometrie complesse furono compiuti utilizzando proprio i metodi alle differenze finite ed effettuando delle trasformazioni di coordinate dallo spazio fisico a quello numerico (descritto da griglie cartesiane). Una volta risolta l'equazione, la soluzione veniva poi riportata nuovamente nello spazio fisico (per chiarezza si veda figura A.1).



Figura A.1: Definizione di spazio fisico e spazio computazionale

Da quanto detto si capisce che uno dei vantaggi principali del Metodo dei Volumi Finiti risiede nella sua natura integrale, ossia nella capacità di impiegare volumi di forma arbitraria per la suddivisione del dominio fisico. Questa proprietà fondamentale consente di evitare i 'salti' dallo spazio fisico a quello computazionale e viceversa, con tutti i relativi svantaggi, in termini di tempi di calcolo ed errori numerici derivanti dalla lunghezza dei codici di calcolo.

Consideriamo ora l'applicazione del metodo ai volumi finiti per una generica equazione di trasporto. Si indicherà con  $\psi$  la generica proprietà scalare da trasportare, da cui l'equazione di trasporto in forma generale si può riscrivere:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \psi}{\partial t}}_{\text{termine derivativo}} + \underbrace{\nabla(\rho \vec{u} \psi)}_{\text{termine convettivo}} - \underbrace{\text{div}(\rho \Gamma_{\psi} \psi)}_{\text{termine diffusivo}} = \underbrace{S_{\psi}(\psi)}_{\text{termine sorgente}} \quad (\text{A.1})$$

Dove  $\psi$  relativamente all'equazione di Navier-Stokes assume il significato di componente di velocità  $(u, v, w)$ . Il termine  $\Gamma_{\psi}$  è la viscosità  $\mu$  del fluido ed il termine sorgente, relativamente alle applicazioni di questa tesi, prende la forma del termine gravitazionale  $\rho \vec{g}$ . Una trattazione a parte verrà fatta per il termine di pressione dal momento che nei flussi incomprimibili non si può considerare una vera e propria variabile del problema, quanto più un parametro che serve a soddisfare la condizione di solenoidalità espressa dall'equazione di continuità.

Integrando allora la (A.1) su un generico volume di controllo (costituito da cella della nostra mesh) si può riscrivere:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \psi dV + \int_V \nabla(\rho \vec{u} \psi) dV - \int_V \text{div}(\rho \Gamma_{\psi} \psi) dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[ \int_V S_{\psi}(\psi) dV \right] dt \quad (\text{A.2})$$

Ciascun termine della (A.2) viene poi discretizzato in maniera opportuna, come si potrà vedere nei paragrafi successivi.

Applicando la metodologia al caso specifico delle equazioni di Navier-Stokes la (A.2) si può riscrivere:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho u dV + \int_S \rho u u \hat{i} \cdot \hat{n} dS + \int_S \rho v u \hat{j} \cdot \hat{n} dS = \\ \int_S \frac{\partial(\mu u)}{\partial x} \hat{i} \cdot \hat{n} dS + \int_S \frac{\partial(\mu u)}{\partial y} \hat{j} \cdot \hat{n} dS - \int_V \frac{\partial(p)}{\partial x} dV + \int_V \rho g_x dV \\ \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho v dV + \int_S \rho v v \hat{i} \cdot \hat{n} dS + \int_S \rho v v \hat{j} \cdot \hat{n} dS = \\ \int_S \frac{\partial(\mu v)}{\partial x} \hat{i} \cdot \hat{n} dS + \int_S \frac{\partial(\mu v)}{\partial y} \hat{j} \cdot \hat{n} dS - \int_V \frac{\partial(p)}{\partial y} dV + \int_V \rho g_y dV \end{array} \right. \quad (\text{A.3})$$

## Discretizzazione del termine convettivo

Consideriamo il termine convettivo dell'equazione (A.2) ed applichiamo il teorema di Gauss, sicchè si può riscrivere:

$$\int_V \text{div}(\rho \vec{u} \psi) dV = \oint_{\partial V} \rho \psi \vec{u} \cdot \vec{n} d\partial V \quad (\text{A.4})$$

Dividendo il contorno della cella nelle sue superfici costituenti (nel caso tridimensionale) o nei segmenti che la delimitano (nel caso bidimensionale), si può riscrivere il secondo membro della (A.4):

$$\oint_{\partial V} \rho \psi \vec{u} \cdot \vec{n} d\partial V = \sum_f \vec{S} \cdot (\rho \vec{u})_f \psi_f = \sum_f F_f \psi_f \quad (\text{A.5})$$

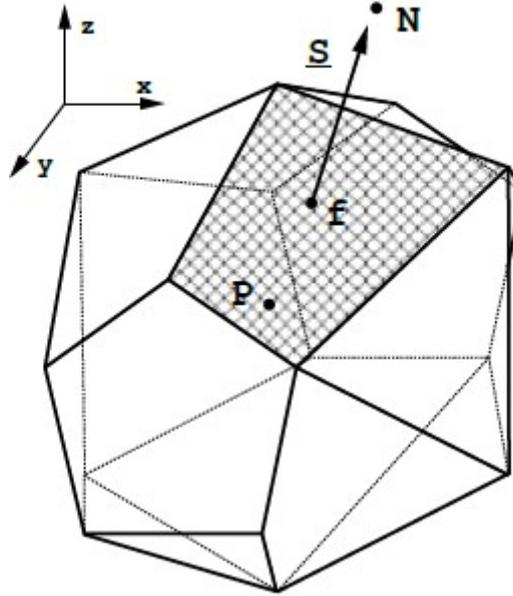


Figura A.2: Definizione volume di controllo

Dove, facendo anche riferimento alla figura A.2:

$$\sum_f \vec{S} \cdot (\rho \vec{u})_f \psi_f = \sum_{\text{Cella proprietaria}} \vec{S} \cdot (\rho \vec{u})_f \psi_f - \sum_{\text{Cella contigua}} \vec{S} \cdot (\rho \vec{u})_f \psi_f$$

E dove con  $F_f$  si indica il flusso di quantità di moto attraverso la superficie  $S_f$ :

$$F_f = \vec{S} \cdot (\rho \vec{u})_f$$

Il calcolo del suddetto flusso in genere può essere corretto attraverso opportuni algoritmi, in particolar modo ciò si rende necessario quando la direzione del vettore quantità di moto non risulti allineato con la normale alla superficie su cui si sta calcolando il flusso, tuttavia queste correzioni verranno specificate in seguito.

Si tenga inoltre presente che alcune delle variabili fluidodinamiche in gioco, vengono calcolate nei centroidi delle celle (es. Pressione, Densità, Frazione di volume, Stress Viscosi) altre invece vengono calcolate sui baricentri delle facce che delimitano la mesh (come illustrato in figura A.3), questo genere di griglie vengono denominate staggered, il

vantaggio che esse hanno è duplice, il primo sta nel forte accoppiamento tra le velocità e le pressioni che ne risulta e ciò aiuta ad impedire alcuni problemi di convergenza ed oscillazioni nei campi di pressione e di velocità, il secondo è che le variabili scalari vengono ad essere localizzate esattamente dove servono, rispettivamente sulle facce dei volumi di controllo e sui punti nodali della griglia.

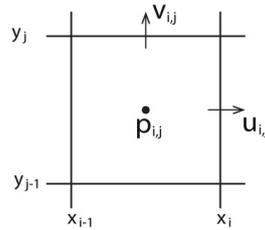


Figura A.3: Rappresentazione griglia staggered

Entriamo ora nel dettaglio del metodo di discretizzazione del termine convettivo utilizzato per le simulazione. Si consideri allora un generico volume di controllo come quello mostrato in figura A.4, per semplicità di trattazione si considererà il caso bidimensionale, alla luce della relazione (A.5) si può riscrivere il termine convettivo in questo modo:

$$\sum_f F_f \psi_f = F_w \psi_w - F_e \psi_e + F_n \psi_n - F_s \psi_s$$

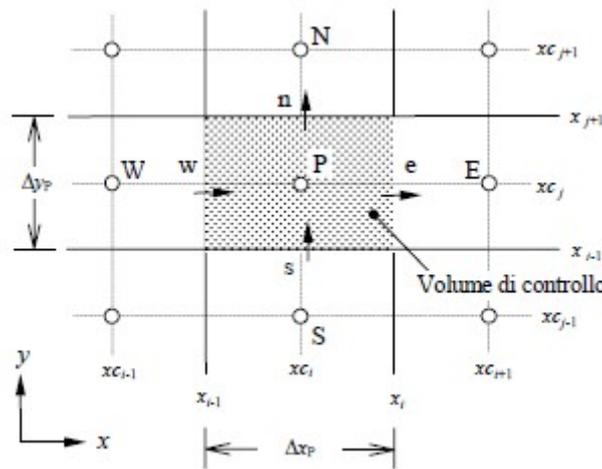


Figura A.4: Rappresentazione volume di controllo

In cui i flussi convettivi  $F$  valgono:

$$F_w = (\rho u)_w \Delta y_p; F_e = (\rho u)_e \Delta y_p; F_s = (\rho v)_s \Delta x_p; F_n = (\rho v)_n \Delta x_p$$

Si faccia attenzione al fatto che la generica variabile trasportata ( $\psi$ ) non è necessariamente nota nel punto in cui si va ad applicare il flusso, ciò comporta la necessità di andare ad utilizzare degli opportuni metodi di interpolazione che estraggono le informazioni sulla variabile da trasportare dai punti limitrofi (in cui la variabile è nota). Per le

simulazioni effettuate si è scelto come metodo di utilizzare il metodo MUSCL (Monotone Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws), questo metodo può essere applicato a qualsiasi tipologia di mesh ed ha il vantaggio di essere molto accurato e di ridurre significativamente i fenomeni di diffusività numerica.

Propriamente il metodo MUSCL può essere visto come una combinazione lineare dei metodi CD (Central difference) e SOU (Second Order Upwind).

Dacché si può scrivere:

$$\psi_{f_{MUSCL}} = \theta\psi_{f_{CD}} + (1 - \theta)\psi_{f_{SOU}}$$

Dove il termine  $\theta$  è un coefficiente di proporzionalità tale che  $0 < \theta < 1$ .

Andiamo allora a vedere nel dettaglio che espressione assumono i termini  $\psi_{f_{CD}}$  e  $\psi_{f_{SOU}}$ , riferendoci alla figura A.5, consideriamo di voler calcolare la variabile  $\psi$  sulla frontiera con i metodi CD e SOU.

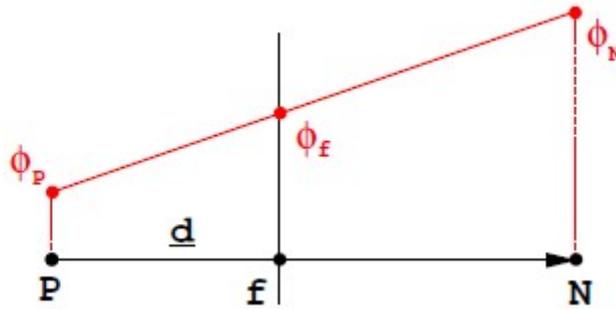


Figura A.5: Interpolazione sui punti di frontiera

Il metodo CD interpola la variabile prendendo i valori dei due centroidi limitrofi da cui:

$$\psi_{f_{CD}} = f_x\psi_P + (1 - f_x)\psi_N \quad (A.6)$$

Dove con ovvia notazione si è indicato:

$$f_x = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}$$

Sebbene con qualche dibattito Ferziger and Peric [15] dimostrarono che il metodo rimane del secondo ordine anche in mesh non uniformi.

Con il metodo SOU al contrario il valore di  $\psi$  viene determinato attraverso l'equazione che segue:

$$\psi_{f_{SOU}} = \psi + \nabla\psi \cdot \vec{r}$$

Dove  $\vec{r}$  è il vettore distanza tra centroide della cella ed il punto di frontiera (f) mentre  $\psi$  e  $\nabla\psi$  sono rispettivamente il valore della variabile da trasportare calcolata nel centroide della cella P (con riferimento alla figura A.4) ed il gradiente della medesima variabile calcolato nel centroide della cella sopravvento (quella per cui il flusso “F” risulta positivo).

Applicando questo schema è quindi ovvio che occorra calcolare ad ogni step il gradiente. Nel prossimo sottoparagrafo viene illustrata la metodologia impiegata nelle simulazioni.

## Metodo di discretizzazione dei gradienti

### (Least Square Cell Based)

La valutazione del gradiente mediante soluzione ad i minimi quadrati viene fatta assumendo che la generica variabile  $\psi$  da trasportare vari linearmente tra celle contigue. Con riferimento alla figura A.6 è quindi possibile scrivere:

$$\nabla(\psi)_{c0}\vec{r}_i = (\psi_{ci} - \psi_{c0})$$

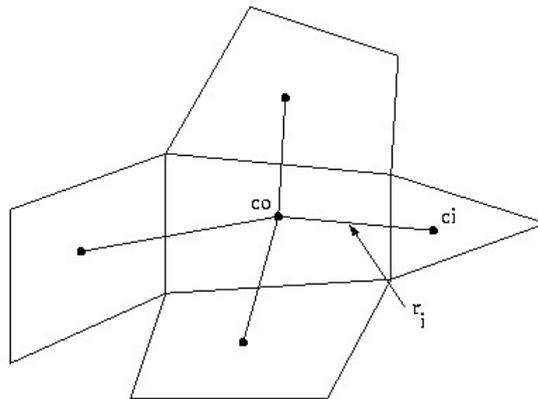


Figura A.6: Valutazione gradiente nel centroide della cella

Ovviamente il discorso deve essere ripetuto per tutte quante le celle adiacenti a quella considerata, ciò conduce alla scrittura di un sistema:

$$[J](\nabla\psi)_{c0} = \Delta\psi \tag{A.7}$$

Dove [J] rappresenta una matrice di coefficienti di dimensione [mx3] dove “m” è il numero di celle vicine a quella in esame, guardando alla figura A.6 si ha che m=4.

Risulta dunque ovvio che una soluzione in senso classico del sistema (A.7) non sia possibile, occorre quindi ricercare una soluzione nel senso dei minimi quadrati, dunque la soluzione può essere riscritta nella forma:

$$(\nabla\psi)_{c0} = ([J]^T[J])^{-1} [J]^T \Delta\psi$$

## Discretizzazione del termine diffusivo

Il termine diffusivo di un'equazione di trasporto può essere discretizzato in maniera simile a quello convettivo.

Normalmente si assume che la variabile trasportata  $\psi$  vari linearmente da cui si può riscrivere il termine diffusivo:

$$\int_V \text{div}(\rho \Gamma_\psi \nabla \psi) dV = \sum_f \vec{S} \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi)_f = \sum_f (\rho \Gamma_\psi)_f \vec{S} \cdot (\nabla \psi)_f$$

Per mesh non ortogonali i due vettori  $\vec{S}$  e  $(\nabla \psi)_f$  non sono allineati, si utilizza allora una correzione, detta correzione di non-ortogonalità, in modo tale che il prodotto scalare tra i due vettori venga decomposto in due contributi:

$$\vec{S} \cdot (\nabla \psi)_f = \underbrace{\vec{\Delta} \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{contributo ortogonale}} + \underbrace{\vec{k} \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{contributo non ortogonale}} \quad (\text{A.8})$$

Dove i due vettori  $\vec{\Delta}$  e  $\vec{k}$  sono tali da soddisfare la condizione:

$$\vec{S} = \vec{\Delta} + \vec{k}$$

A questo punto resta da definire la metodologia con il quale vengono calcolati i due vettori in questione.

Una di queste metodologie, chiamata “Over-relaxed approach”, consiste nel prendere il vettore  $\Delta$  in modo tale che si abbia:

$$\Delta = \frac{\vec{d}}{\vec{d} \cdot \vec{S}} |S|^2$$

Con riferimento alla figura A.7 il vettore  $\vec{d}$  è quello che congiunge i nodi delle due celle adiacenti ed  $\vec{S}$  è il vettore che ha come modulo la superficie di contatto tra le due celle e come direzione quella normale alla faccia.

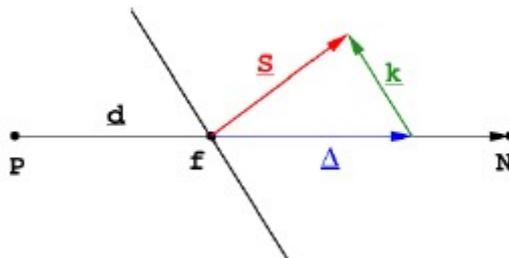


Figura A.7: Rappresentazione griglia staggered

Una volta definiti i due vettori  $\vec{\Delta}$  e  $\vec{k}$  la (A.8) può essere riscritta:

$$\vec{S} \cdot (\nabla\psi)_f \approx \vec{\Delta} \cdot (\nabla\psi)_f + [\vec{k} \cdot (\nabla\psi)_f]^{expl}$$

In cui la dicitura “expl” sta ad indicare una valutazione esplicita del gradiente mediante interpolazione lineare (equazione A.6) tra il valore del gradiente calcolato nel centroide della cella, valutato attraverso la metodologia illustrata in 6.

Si tenga inoltre presente che la correzione di non-ortogonalità richiede una procedura iterativa interna all’equazione di trasporto e nel caso in cui il contributo non ortogonale risulti più grande di quello ortogonale la procedura può non arrivare a convergenza, ciò che si fa di norma è dunque limitare il numero delle iterazioni introducendo come condizione di arresto la seguente:

$$\vec{\Delta} \cdot (\nabla\psi)_f > \lambda[\vec{k} \cdot (\nabla\psi)_f]$$

In cui  $\lambda = 0.333 \div 0.5$ , questa limitazione assicura la convergenza ma degrada l’ordine di accuratezza.

Ad ogni modo anche in assenza di tale correzione, l’ordine di accuratezza del metodo viene comunque degradato anche quando il vettore di skewness  $\vec{m}$  (si osservi figura A.8) non risulti identicamente nullo. Il più delle volte dunque viene utilizzato un altro tipo di correzione, e così si è fatto anche per le simulazioni oggetto di questa tesi, che viene chiamata “skewness-correction”.

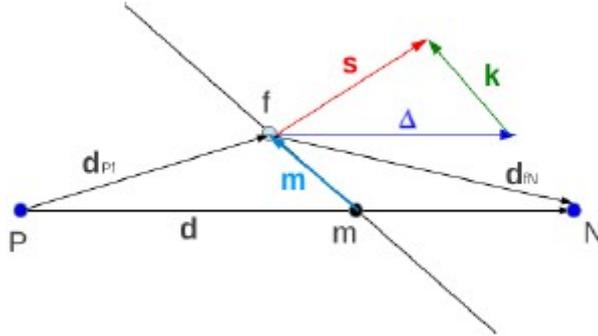


Figura A.8: Rappresentazione vettore di skewness  $\vec{m}$

Con questo genere di correzione anziché mediante interpolazione lineare, il valore del gradiente viene valutato attraverso uno sviluppo in serie di Taylor di  $\psi$  calcolata nel punto “f” all’interfaccia:

$$\psi_f = \psi_P + (\nabla\psi)_P \cdot \vec{d}_{Pf} = \psi_P + (\nabla\psi)_f \cdot \vec{d}_{Pf} \quad (\text{A.9})$$

Osservando figura A.8 quindi si deduce:

$$\vec{d}_{Pf} = \vec{d}_{Pm} + \vec{m} = (\vec{d} - \vec{d}_{mN}) + \vec{m} \quad (\text{A.10})$$

Dove  $\vec{d}_{P_m}$  è il vettore che punta nella direzione che congiunge P con m e,  $\vec{d}_{P_N}$  è quello che congiunge P con N.

Sostituendo la (A.10) nella (A.9) si ottiene:

$$\psi_f = \psi_P + (\nabla\psi)_P \cdot \vec{d} - (\nabla\psi)_f \cdot \vec{d}_{mN} + (\nabla\psi)_f \cdot \vec{m} \quad (\text{A.11})$$

In cui il secondo e terzo termine della (A.11) sono rispettivamente:

$$\begin{aligned} (\nabla\psi)_P \cdot \vec{d} &= \psi_N - \psi_P \\ (\nabla\psi)_f \cdot \vec{d}_{mN} &= \frac{\psi_N - \psi_P}{|\vec{d}|} |\vec{d}_{mN}| \end{aligned}$$

Che sostituite nella (A.11) permettono di riscrivere:

$$\psi_f = f_x \psi_P + (1 - f_x) \psi_N + \vec{m} \cdot (\nabla\psi)_f \quad (\text{A.12})$$

con  $f_x = \frac{|\vec{d}_{mN}|}{|\vec{d}|}$ .

Applicando l'operatore gradiente alla (A.12) si ottiene in definitiva:

$$\nabla\psi_f = f_x \nabla\psi_P + (1 - f_x) \nabla\psi_N + \nabla[\vec{m} \cdot (\nabla\psi)_f]$$

Anche in questo caso la “skewness correction” richiede una procedura iterativa interna all'equazione di trasporto similmente al caso precedente. In sostanza si può dire che i due metodi sopraccitati differiscano solamente nel metodo d'interpolazione della variabile  $\psi_f$ .

## Discretizzazione del termine sorgente

Il termine sorgente in generale può essere funzione della variabile da trasportare  $\psi$  sicchè normalmente può essere trattato attraverso un linearizzazione rispetto alla medesima variabile. Da cui si può riscrivere:

$$S_\psi(\psi) = S_u + S_p \psi \quad (\text{A.13})$$

In cui  $S_u$  e  $S_p$  possono dipendere da  $\psi$ . Integrando la (A.13) sul volume di controllo:

$$\int_V S_\psi(\psi) dV = S_u V + S_p \psi_P V \quad (\text{A.14})$$

Con riferimento all'equazione (6) il termine sorgente è quello in cui compare l'accelerazione gravitazionale è chiaro dunque che in questo caso non occorre linearizzare rispetto alla velocità e si può quindi riscrivere:

$$\int_V \rho g_{x_i} dV = g_{x_i} \sum_j M_j$$

Dove  $g_{x_i}$  è la generica componente dell'accelerazione gravitazionale, per il significato di  $M_j$  si veda il paragrafo 2.5.

## Discretizzazione temporale

Riprendiamo la relazione (A.2) al quale sostituiamo le discretizzazioni spaziali finora viste in modo da ottenere:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi)_P V_P + \sum_f F\psi_f - \sum_f (\rho\Gamma_\psi)_f \vec{S} \cdot (\nabla\psi)_f \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} [S_u V_P + S_p \psi_P V_P] dt \quad (\text{A.15})$$

Indichiamo inoltre:

$$\psi^{n+1} = \psi(t + \Delta t)$$

$$\psi^n = \psi(t)$$

$$\psi^{n-1} = \psi(t - \Delta t)$$

Si può allora procedere alla discretizzazione temporale della (A.15). Nello specifico si particolarizzerà la soluzione riportando la metodologia impiegata per le simulazioni, ossia un metodo d'integrazione esplicito del primo ordine (unica metodologia disponibile avendo impiegato un metodo esplicito per la discretizzazione delle "Volume Fraction"). La (A.15) può essere quindi riscritta:

$$\frac{\rho_P \psi_P^{n+1} - \rho_P \psi_P^{n-1}}{\Delta t} V_P = - \sum_f F\psi_f^n + (\rho\Gamma_\psi)_f \vec{S} \cdot (\nabla\psi)_f^n + S_u V_P + S_p \psi_P V_P \quad (\text{A.16})$$

A questo punto si può riscrivere la (A.16) sottoforma di sistema:

$$a_P \psi_P^n + \sum_{Nb} a_{Nb} \psi_{Nb}^n = R_P \quad (\text{A.17})$$

Dove l'indice "Nb" sta ad indicare le celle contigue alla "P".

Il sistema in esame può essere poi risolto attraverso metodi diretti (in generale poco utilizzati per l'elevato costo computazionale associato) o più in generale tramite metodi iterativi (per le simulazioni si è utilizzato il metodo SOR (Successive Over-Relaxation)).

## Equazione della pressione e funzionamento degli algoritmi Pressure-Based Segregated

Finora si sono visti i metodi di discretizzazione da applicare ai diversi termini della generica equazione di avvezione (A.1), tale equazione però rispetto a quella completa di Navier-Stokes deficiata del termine di pressione, che, come già si è accennato, nel caso incomprimibile non costituisce una vera e propria incognita del problema ma un parametro utile a soddisfare il vincolo di solenoidalità del campo di moto.

Normalmente una delle tecniche con il quale si cerca di superare il problema determinato dall'assenza di un'equazione di avvezione per il termine di pressione è quella di utilizzare i cosiddetti metodi di proiezione.

Di seguito viene descritto il metodo SIMPLEC (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent) dal momento che è stato quello utilizzato nelle simulazioni.

Riprendiamo allora il sistema (A.17), consideriamo che la variabile da trasportare sia ad esempio la velocità lungo l'asse x ( $u$ ), aggiungiamo inoltre al sistema anche il termine di pressione, da cui otteniamo <sup>1</sup>:

$$a_e u_e = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + R_e + (p_P - p_E) A_e \quad (\text{A.18})$$

Si faccia attenzione al fatto che nella (A.18) compare il pedice "e" perché la velocità  $u$ , nelle griglie di tipo staggered, è scritta relativamente al baricentro della faccia con normale l'asse x e non rispetto al centroide della cella.

Immaginiamo ora di risolvere la (A.18), dando una stima iniziale del campo di pressione, ciò che otterremo in generale sarà un campo di velocità che non rispetta la condizione di continuità, indichiamolo con  $u^*$ . Indichiamo con:

$$u' = u - u^*$$

$$p' = p - p^*$$

Dove  $p^*$  è il valore stimato del campo di pressione:

$$a_e u_e^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^* + R_e + (p_P^* - p_E^*) A_e \quad (\text{A.19})$$

Sottraendo la (A.19) alla (A.18) si ottiene l'equazione:

$$a_e u_e' = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb}' + (p_P' - p_E') A_e \quad (\text{A.20})$$

Sottraiamo ad ambo i membri della (A.20) il termine  $\sum a_{nb} u_e'$  così si ottiene:

$$(a_e - \sum_{nb} a_{nb}) u_e' = \sum_{nb} a_{nb} (u_{nb}' - u_e') + (p_P' - p_E') A_e \quad (\text{C1})$$

Trascurando il termine  $\sum_{nb} a_{nb} (u_{nb}' - u_e')$  si ottiene quindi la correzione sul termine di velocità:

$$u_e = u_e^* + \underbrace{d_e (P_P' - P_E')}_{u' \text{ (termine di correzione velocità)}} \quad (\text{C2})$$

Dove:

---

<sup>1</sup>Per maggiore chiarezza sui pedici P ed E si osservi figura A.4

$$d_e = \frac{A_e}{a_e - \sum_{nb} a_{nb}} \quad (C3)$$

La (C2) sostituita dentro l'equazione di continuità restituisce:

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + S_U^P \quad (C4)$$

Con:

$$a_E = (\rho A d)_e$$

$$a_W = (\rho A d)_w$$

$$a_S = (\rho A d)_s$$

$$a_N = (\rho A d)_n$$

$$a_P = a_N + a_S + a_W + a_E$$

$$S_U^P = (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n$$

Di seguito viene proposto uno schema che riassume gli step fondamentali dell'algoritmo:

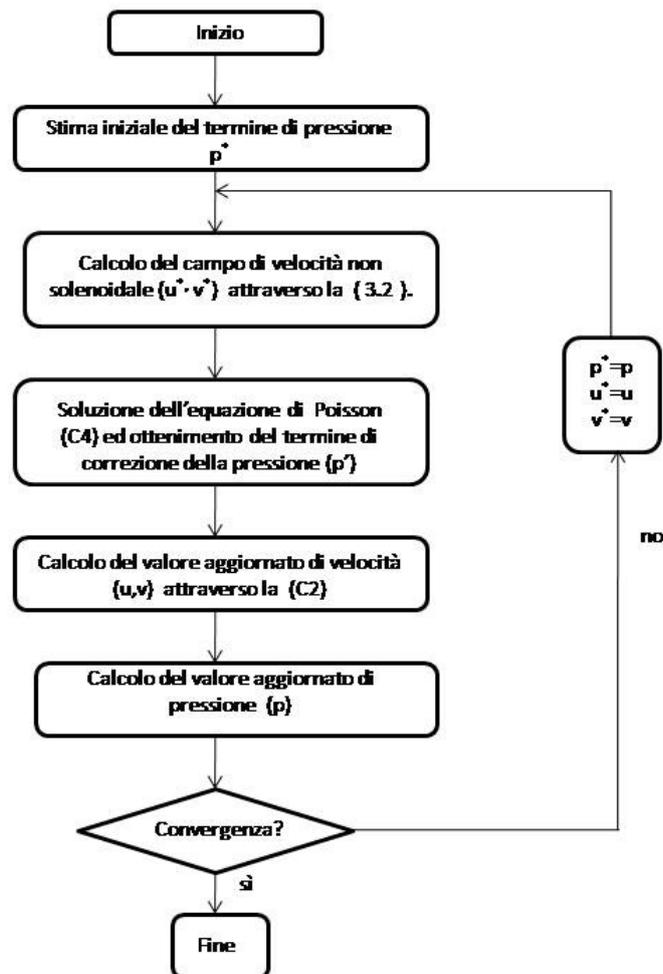


Figura A.9: Schema algoritmo SIMPLEC

## Discretizzazione spaziale per la “volume fraction”: metodo CISCAM

In conclusione resta da trattare il metodo utilizzato nelle simulazioni per la discretizzazione dell’equazione relativa all’avvezione della frazione volumetrica. In particolare si è scelto di utilizzare il metodo noto sotto il nome di CISCAM (Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes), dal momento che tale tecnica si caratterizza per una bassa diffusività numerica e dunque una maggiore capacità nel descrivere accuratamente le interfacce.

Come nel caso del metodo MUSCL il metodo CISCAM viene costruito ibridando altri due metodi numerici: HYPER-C e UQ (Ultimate-Quickest).

Prima di entrare più nel dettaglio però occorre quantomeno citare quali criteri dovrebbe soddisfare un metodo di discretizzazione per il trasporto delle frazioni volumetriche:

- Criterio della limitatezza: in breve identifica il fatto che il valore di una data proprietà all’interno del dominio fluido non può assumere valori maggiori o minori di quanto prescritto sul contorno del dominio. Tale criterio dunque vincola il valore di  $\alpha$  ad essere compreso tra zero ed uno.
- Criterio di disponibilità: Consideriamo una cella donatrice (D) in cui sono presenti ad un dato istante due fluidi; il fluido 1 è presente in quantità  $\alpha_D V_D$  mentre il fluido 2 sarà presente in quantità  $(1 - \alpha_D) V_D$ . Indichiamo con  $C_f = |u_f| \frac{\Delta t}{\Delta x}$  il numero di Courant sulla faccia lungo il quale avviene il trasporto dei fluidi tra le celle (A) e (D) (figura A.10).

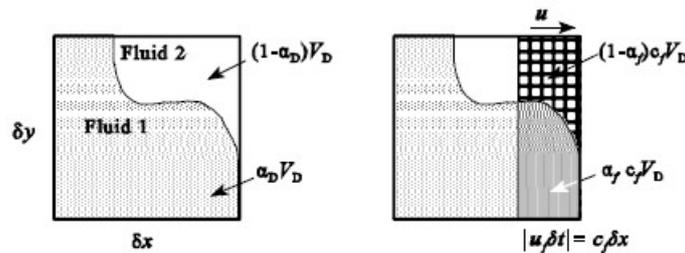


Figura A.10: Rappresentazione frazione volumetrica nella cella donatrice

La quantità di fluido scambiato tra le due celle nell’istante  $\Delta t$  sarà  $\alpha_f C_f V_D$  per il fluido 1 e  $(1 - \alpha_f) C_f V_D$  per il fluido 2. Il criterio di disponibilità prescrive che il fluido ceduto dalla cella donatrice sia inferiore o al più uguale a quello che essa contiene:

$$\alpha_f C_f V_D \leq \alpha_D V_D$$

$$\Rightarrow \alpha_f \leq \frac{\alpha_D}{C_f}$$

Analogamente per il fluido 2 deve valere che:

$$(1 - \alpha_f)C_f V_D \leq (1 - \alpha_D)V_D$$

$$\alpha_f \geq \frac{\alpha_D}{C_f} - \frac{1 - C_f}{C_f}$$

Combinando le due relazioni dunque si ottiene in via analitica il criterio:

$$\frac{\alpha_D}{C_f} - \frac{1 - C_f}{C_f} \leq \alpha_f \leq \frac{\alpha_D}{C_f}$$

- Criterio del “controlled downwinding”: tale criterio limita il massimo quantitativo di fluido disponibile nella cella donatrice ad essere inferiore a quella accettore da cui viene anche limitato il massimo quantitativo di fluido di scambio tra le due celle poiché al più può risultare  $\alpha_f = \alpha_A$ . Combinando tale criterio con quello precedente si ottengono in definitiva i seguenti limiti sulla quantità di fluido scambiato:

$$\begin{aligned} \alpha_f &= \min \left\{ \max \left\{ \frac{\alpha_D}{C_f} - \frac{1 - C_f}{C_f}, \alpha_A \right\}, \frac{\alpha_D}{C_f} \right\} \\ &= \min \left\{ \alpha_A + \max \left\{ (1 - \alpha_A) - \frac{(1 - \alpha_D)}{C_f}, 0 \right\}, \frac{\alpha_D}{C_f} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

La relazione (A.21) garantisce che in ogni punto del dominio (nel caso unidimensionale) non venga violato il criterio di limitatezza.

## Normalized Variable Diagram (NVD)

Leonard nel suo articolo [29] getta le basi per la costruzione di schemi numerici ad alta risoluzione. Nel citato articolo viene presentato un utile strumento per la generazione di schemi numerici che rispettino il criterio di limitatezza (spesso indicato con la sigla CBC: Convective Boundness Criterion), tale strumento è rappresentato da un diagramma su cui assi vi sono delle variabili normalizzate così definite:

$$\tilde{\alpha}_f = \frac{\alpha_f - \alpha_U}{\alpha_A - \alpha_U}$$

$$\tilde{\alpha}_D = \frac{\alpha_D - \alpha_U}{\alpha_A - \alpha_U}$$

Nel dettaglio furono però Gaskell & Lau [20] a presentare il criterio (CBC), sottoforma di variabili normalizzate, per formulazioni implicite.

Il criterio CBC si può allora riscrivere:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_f &= \tilde{\alpha}_D && \text{per } \tilde{\alpha}_D < 0 \text{ o } \tilde{\alpha}_D > 1 \\ \tilde{\alpha}_D &\leq \tilde{\alpha}_f \leq 1 && \text{per } 0 \leq \tilde{\alpha}_D \leq 1 \end{aligned}$$

Più tardi Leonard tradusse il criterio anche per le formulazioni esplicite introducendo una funzione di peso proporzionale al numero di Courant  $C_f$ :

$$\tilde{\alpha}_f = (1 - C_f)\tilde{\alpha}_f^* + C_f\tilde{\alpha}_D$$

Dove  $\tilde{\alpha}_f^*$  identifica il valore della variabile normalizzata ottenuta mediante la formulazione implicita.

In definitiva il criterio CBC nelle formulazioni esplicite può essere così riscritto:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_f &= \tilde{\alpha}_D && \text{per } \tilde{\alpha}_D < 0 \text{ o } \tilde{\alpha}_D > 1 \\ \tilde{\alpha}_D \leq \tilde{\alpha}_f \leq \min\left\{1, \frac{\tilde{\alpha}_D}{C_f}\right\} &&& \text{per } 0 \leq \tilde{\alpha}_D \leq 1 \end{aligned}$$

In figura A.11 viene presentato il diagramma NVD e la regione di limitatezza espressa dalle condizioni soprariportate.

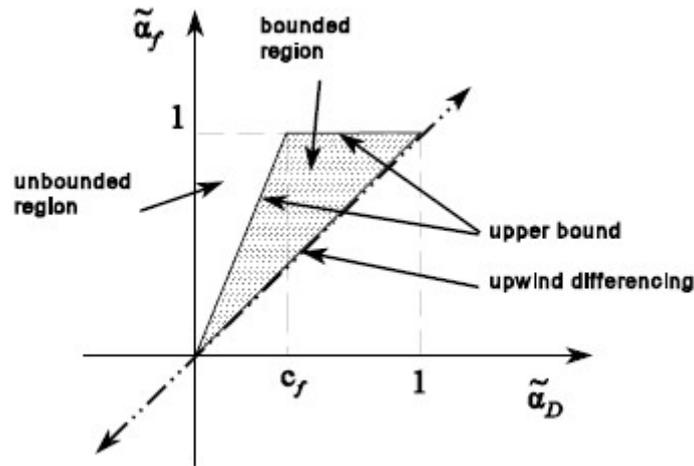


Figura A.11: Diagramma NVD e regione di limitatezza per formulazioni esplicite

## Schema HYPER-C

Consideriamo la generica equazione di avvezione nel caso unidimensionale:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

Integrando tale relazione rispetto al tempo si ottiene:

$$\phi_f = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \hat{\phi}_f(\tau) d\tau = \phi_f^n - \frac{u\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_f^n$$

Stimiamo il gradiente attraverso una semplice linearizzazione:

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_f^n = \frac{(\phi_f^n - \phi_D^n)}{\Delta x/2}$$

Sicchè è possibile riscrivere:

$$\phi_f = (1 - C_f)\phi_f^n + C_f\phi_D^n$$

O in forma normalizzata:

$$\tilde{\phi}_f = (1 - C_f)\tilde{\phi}_f^n + C_f\tilde{\phi}_D^n$$

Dove  $\tilde{\phi}_f^n = g(\tilde{\phi}_D^n)$

I vari metodi di discretizzazione si diversificano per la metodologia con il quale viene scritta la funzione  $g(\tilde{\phi}_D^n)$ .

In particolare nel metodo Hyper-C la funzione  $g(\tilde{\phi}_D^n)$  viene così definita:

$$g(\tilde{\phi}_D^n) = \min \left\{ \frac{\tilde{\phi}_{CD}^n}{C_f}, 1 \right\} \text{ per } 0 \leq \tilde{\phi}_D^n \leq 1$$

Nel caso in cui  $\tilde{\phi}_D^n$  ecceda i limiti prescritti, lo schema si riconduce al metodo upwind del primo ordine sicché:

$$g(\tilde{\phi}_D^n) = \tilde{\phi}_D^n \text{ per } \tilde{\phi}_D^n \leq 0 \text{ o } \tilde{\phi}_D^n \geq 1$$

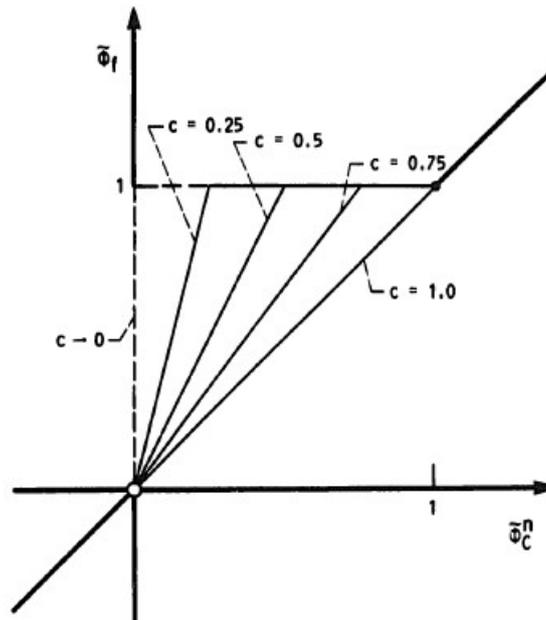


Figura A.12: Diagramma NVD del metodo HYPER-C

## Schema UQ

Nello schema Ultimate Quickest il termine  $\tilde{\phi}_f$  viene così valutato:

$$\tilde{\phi}_f \begin{cases} \tilde{\phi}_D^n & \text{per } \tilde{\phi}_D^n \leq 0 \text{ o } \tilde{\phi}_D^n \leq 1 \\ \min \left\{ \frac{8C_f\tilde{\phi}_D^n + (1-C_f)(6\tilde{\phi}_D^n + 3)}{8}, \tilde{\phi}_{fHYPER-C} \right\} & \text{per } 0 \leq \tilde{\phi}_D^n \leq 1 \end{cases}$$

## Schema CISCAM

Come già preannunciato lo schema CISCAM è ottenuto tramite una combinazione lineare dei metodi HYPER-C e UQ, in modo da ottenere uno schema che presenti i vantaggi di entrambi.

Il primo infatti è costruito in maniera da soddisfare il criterio CBC, di cui si è già parlato, inoltre esso presenta un forte carattere “compressivo”, ossia è in grado di riprodurre il gradiente della variabile  $\phi$  proprio come un gradino eliminando di fatto la zona di transizione da una cella all'altra. Questo carattere però non è sempre desiderabile, specialmente quando l'interfaccia giace parallelamente al flusso, in quanto tende a deformare artificialmente la forma dell'interfaccia. Ecco allora nasce l'esigenza di accoppiamento del metodo HYPER-C con lo schema UQ, attraverso un opportuno coefficiente  $\gamma_f$ . Lo schema che ne risulta si può quindi riassumere attraverso la relazione:

$$\tilde{\phi}_f = \gamma_f \tilde{\phi}_{fHYPER-C} + (1 - \gamma_f) \tilde{\phi}_{fUQ}$$

$$\gamma_f = \min \left\{ \frac{1 + 2\cos(2\theta_f)}{2}, 1 \right\} \quad (\text{A.22})$$

$$\theta_f = \arccos|\vec{d} \cdot \vec{n}|$$

Facendo riferimento a figura A.13  $\vec{d} = \frac{\vec{DA}}{|\vec{DA}|}$  e  $\vec{n} = \frac{\nabla\phi_D}{|\nabla\phi_D|}$  (ossia la normale all'interfaccia).

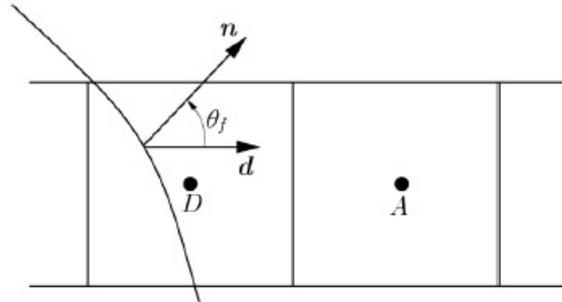


Figura A.13: Definizione del vettore normale all'interfaccia  $\vec{n}$  e del vettore  $\vec{d}$  congiungente i centroidi delle celle A e D



# Bibliografia

- [1] F. Auteri e L. Quartapelle, “*Fluidodinamica incompressibile*”, S.l, Casa Editrice Ambrosiana, (2013)
- [2] Y. B. Bao, J. Meskas, “*Lattice Boltzmann Method for Fluid Simulations*”, Department of Mathematics, Courant Institute of Mathematical Sciences, lecture notes, 14 April 2011
- [3] R. Bertacin, “*Modellazione Tridimensionale del Processo di Combustione di un Razzo a Propellente Solido*” Tesi di Dottorato di Ricerca in Ingegneria Aerospaziale ciclo XXV, 2013
- [4] S. Bianchi, F. Serraglia, F. Giliberti, F. Betti, C. Milana “*Vega Solid Rocket Motors Development and Qualification*” AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit 25 - 28 , Nashville, TN, July 2010
- [5] J. Breil, J. P. Caltagirone “*Three Dimensional Computer Simulation of Mould Filling with N Fluids by VOF PLIC and Projection Methods*” Computational Fluid Dynamics 2000 Proceedings of the First International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD, Kyoto, Japan, pp. 743-748, 10-14 July 2000
- [6] W. Cai, P. Thakre, and V. Yang “*A Model of ap/htpb Composite Propellant Combustion in Rocket-Motor Environments*” Combust. Sci. and Tech., 180: 2143–2169, (2008)
- [7] M. Capozzi, “*Introduzione alla Fluidodinamica Computazionale e al Metodo dei Volumi Finiti*”, S.l, Adepron, S.d
- [8] G. Chounet, C. Marraud, E. Giraud, P. Carrasquet, “*A5 Propellant suspension : Rheology control and particle migration during casting*”, Space Solid Propulsion, Rome, 21–24 November 2000
- [9] P. Crimmins, M. Cousineau, C. Rogers, V. shell “*The largest solid rocket motor ever tested*” AIAA paper 99-2951 Sacramento Ca, December 1999
- [10] S.M. Damián, “*Description and utilization of interFoam multiphase solver*” Available at <http://infotech.unl.edu.ar/upload/3be0e16065026527477b4b948c4caa7523c8ea52.pdf>

- 
- [11] F. Damiani “*Simulazione Fluidodinamica del Colaggio di Propellente in Endoreattori a Propellente Solido*” Tesi di Laurea, Roma, Università di Tor Vergata, A.A. 1996-1997
- [12] A. Davenas, J. Thépenier, “*Recent progress in the prediction and analysis of the operation of solid Rocket motors*”, Acta Astronautica Vol. 44, 01-1999
- [13] R. DeBar, “*Foundamentals of the KRAKEN code*” Tehnical Report UCIR-760, LLNL, (1974)
- [14] G. Dombe, M. Jan, P. P. Singh, K. K. Radhakrishnan & B. Bhattacharya, “*Pressure casting of composite propellant*”, Indian Journal of Chemical Technology Vol. 15, pp. 420-423, July 2008.
- [15] J.H. Ferziger, M. Peric, “*Computational Methods for Fluid Dynamics*”, 3th edizione, S.I, Springer-Verlag, 4 ottobre 2013
- [16] N. Forgione, “*Soluzione Numerica di Problemi di Flusso di Fluidi con Contemporaneo Scambio di Calore e/o di Massa*”, S.I., S. e., S. d.
- [17] M. P. Friedlander, F. W. Jordan “*Radial Variation of Burning Rate in Center Perforated Grains*”, AIAA paper 84-1442, Gainesville, Cincinnati, June 11-13-1984
- [18] F. Gadala-Maria and A. Acrivos, “*Shear-induced structure in a concentrated suspension of solid spheres*”. J Rheol. 24, pp. 799–814, (1980).
- [19] V. Garreffa, “*Metodo riduzione dati balistici dei test a fuoco BARIA per i Booster Ariane 5*”, Tesi di laurea, Roma, Università della Sapienza, A.A. (2008-2009)
- [20] P.H. Gaskell, A. K. C. Lau, “*Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm*”. Int. J. Numer. Methods Fluids, Vol. 8, pp. 617-641., (1988)
- [21] C.W. Hirt, B.D. Nichols, “*Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*”, J. Comp. Phys Vol. 39, pp. 201-225, (1981)
- [22] J. A. K. Horwitz, “*Lattice Boltzmann Simulations Of Multiphase Flows*”, Thesis Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in Mechanical Engineering in the Graduate College of the University of Illinois at Urbana-Champaign, (2013)
- [23] D.M. Husband, L.A. Mondy, E. Ganani, A.L. Graham, “*Direct measurements of shear-induced particle migration in suspensions of bimodal spheres*”, Rheol Acta 33, pp. 185-192, (1994).

- 
- [24] K. Kitagawa, T. Shimada, H. Hasegawa, M. Fukunaga, H. Miyachi, “*Correlation of Midweb Anomaly with Microstructure of Composite Propellant*”, 46th AIAA/A-SME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Nashville, TN, 25 - 28 July 2010.
- [25] C. Körner, T. Pohl, U. Råde, N. Thürey, T. Zeiser, “*Parallel Lattice Boltzmann Methods for CFD Applications*”, Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 51, pp 439-466, (2006).
- [26] I.M. Krieger, T. J. Dougherty “*A Mechanism for Non-Newtonian Flow in Suspensions of Rigid Spheres*”, Transaction Of The Society of Rheology III, pp. 137-152, (1959)
- [27] Z. Lala, L. Chusheng, Z. Yang, Y. Junxia, ”*Computer Simulation of Particle Segregation Process Using 3D Discrete Element Method*”, Chemical Engineering Science 01/2009; DOI: 10.1109/CISE.2009.5362967
- [28] S. Lanzoni, “*Soluzione numerica delle equazioni delle correnti a superficie libera*”. Dipartimento di Ingegneria Idraulica, Marittima e Geotecnica. Università di Padova, S.d.
- [29] B.P. Leonard., “*The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection*”. Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., Vol. 88, pp. 17-74, (1991)
- [30] P. Le Breton, D. Ribéreau, “*Casting Process Impact on Small-Scale Solid Rocket Motor Ballistic Performance*”, Journal of Propulsion And Power Vol. 18, No. 6, November-December 2002
- [31] M. Lenoble, P. Snabre, B. Pouligny, C. Barentin “*Sheraring a granular paste in a Couette device: flow and size segregation*”, Powders and Grains, Taylor & Francis Group, London, (2005)
- [32] A.K. Mahanta, Ila Dharmasaktu, P.K. Pattnayak, “*Rheological Behaviour of HTPB-based Composite Propellant: Effect of Temperature and Pot Life on Casting Rate*”, Defence Science Journal, Vol. 57, No. 4, pp. 435-442, July 2007
- [33] L. Martinie, J.-F. Lataste, N. Roussel, “*Fiber orientation during casting of UHP-FRC: electrical resistivity measurements, image analysis and numerical simulations*” Materials and Structures, DOI 10.1617/s11527-013-0205-3, November 2013
- [34] L. Martinie, N. Roussel, “*Simple tools for fiber orientation prediction in industrial practice*”, Cement and Concrete Research, DOI: 10.1016/j.cemconre, May 2011

- 
- [35] N. Méchitoua, B. Jennesson, Jean-Pierre Schneider, M. Luck, E. Valette “*Assessment of NEPTUNE\_CFD code for some Free Surface Flows interesting Fluvial Hydraulic*” 7<sup>th</sup>International Conference on Multiphase Flow ICMF 2010, Tampa, FL USA, May 30-June 4 2010
- [36] T. Ménard, S. Tanguy, A. Berlemont “*Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet*”. International Journal of Multiphase Flow Vol. 33, pp. 510-524, (2007)
- [37] J. Mewis, N. J. Wagner, “*Colloidal suspension rheology*” - Cambridge University Press, (2011)
- [38] R. R. Miller, E. Lee, R. L. Powell, “*Rheology of solid propellant dispersions*” J. Rheol Vol. 35, July 1991
- [39] N. Mitarai, H. Nakanishi, “*Hard-sphere limit of soft-sphere model for granular materials: Stiffness dependence of steady granular flow*”, Phys. Rev. E 67, 021301, 19 February 2003
- [40] W.F. Noh, P.R. Woodward, “*SLIC (Simple Line Interface Method)*”, in Lecture Notes in Physics 59, edited by A.I. Van de Vooren e P. J. Zandebergen , pp-330-340, (1976)
- [41] S. Osher and J.A. Sethian.,“*Front propagating with curvature-dependent-speed: Algorithms based on hamilton-Jacobi formulation. Journal Of Computational Physics*”, Vol. 79, No. 1, p. 12, (1988).
- [42] R. Pal, “*Rheology of Particulate Dispersions and Composites*”, S.I, CRC Press, pp. 115-117, 22 November 2006
- [43] B. J. Parker, D.L. Youngs “*Two and three dimensional simulation of fluid flow with material interface*”. Technical Report 01/92, UK Atomic Weapon Establishment, Aldermaston, Berkshire, February 1992
- [44] R. J. Phillips, R. C. Armstrong, R. A. Brown, A. L. Graham and J. R. Abbott, “*A constitutive equation for concentrated suspensions that accounts for shear-induced particle migration*”, Phys Fluids A. 4, pp. 30–40, July 2008.
- [45] M. Plaud, S. Gallier, M. Morel, “*Simulations of heterogeneous propellant combustion: Effect of particle orientation and shape*” Proceedings of the Combustion Institute, (2014)
- [46] A.Quarneroni, “*Modellistica Numerica per Problemi Differenziali*” 4th edizione, Milano, Springer-Verlag Italia, (2008)

- 
- [47] G. Rocco “*Simulazione numerica di moti a superficie libera mediante il metodo VOF*”, Tesi di Dottorato di Ricerca in Ingegneria Aerospaziale (XXII Ciclo), Novembre 2009
- [48] A. Rafi, H. Rakesh, T. Jayachandran, “*Numerical Simulation of Solid Propellant Casting Using Unstructured Finite Volume Method*” Proceedings of the 37th National & 4th International Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power, IIT Madras, Chennai, India, 16-18 December 2010
- [49] D. Ribéreau, P. Le Breton, E. Giraud “*SRM 3D Surface Burnback Computation Using Mixes Stratification Deduced From 3D Grain Filling Simulation*” 35th AIAA/A-SME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit Los Angeles, California, 20-24 June 1999
- [50] A. Saverna, “*Studio della Dipendenza della Velocità di Combustione del Propellente Solido dalla Modalità di Riempimento del Razzo*”, Tesi di Laurea in Propulsione Avanzata LS, Università degli studi di Bologna, 2009-2010
- [51] E.D Shchukin, A.V. Pertsov, E.A. Amelina, A.S. Zelenev, “*Colloid and Surface Chemistry*”, S.I, D. Möbius, R. Miller, Elsevier, pp. 692-693, 2 Jan 2008
- [52] T. Shimada, K. Kitagawa, H. Hasegawa, M. Fukunaga, H. Asakawa “*Development of Advanced Computer Science For Solid-Rocket-Motor Internal Ballistics: ACSSIB*” Transactions of the Japanese Society for Artificial Intelligence, Aerospace Technology Japan, Volume 8, pp. 29-37, (2010).
- [53] M. Sussman, E. G Puckett, “*A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows*”. Journal of Computational Physics 162 , pp. 301-337, (2000)
- [54] L. da Silva, G. Cuhna, A. Moraes, P. Cunha Lage “*Analysis of The Non-Orthogonality Correction of Finite Volume Discretization on Unstructured Meshes*”, 22nd International Congress of Mechanical Engineering, Ribeirão Preto, SP, Brazil, 3-7 November 2013
- [55] G. Sutton, O. biblarz, “*Rocket Propulsion Elements*” 7th Edition, S.I, Wiley & Sons, pp. 484-487, (2001)
- [56] M.Trebbina, D. Steinhauserb, J. Perlichd, A. Buffetd, S. V. Rothd, W. Zimmermann, J.Thielef, S. Förstera, “*Anisotropic particles align perpendicular to the flow direction in narrow microchannels*”, PNAS vol. 110 no. 17, pp. 6706-6711, March 2013
- [57] G. Uhrig, D. Ribereau, A. Hiss “*Processing Effects on Ballistic Response of Composite Solid Propellant*”, AIAA paper 95-2585, San Diego, July 10-12-1995.

- 
- [58] VEGA User's Manual
- [59] T. Waławczyk, T. Koronowicz, "*Comparison of CISCAM and HRIC High-Resolution Schemes for Interface Capturing*", Journal of Theoretical and Applied Mechanics 46, 2, pp. 325-345, Warsaw (2008)
- [60] R. Yin, W.K. Chow, "*Comparison of Four Algorithms for Solving Pressure-Velocity Linked Equations in Simulating Atrium Fire*", International Journal on Architectural Science, Volume 4, Number 1, pp. 24-35, (2003)





# Ringraziamenti

Al termine di questo lavoro di tesi desidero ringraziare il professor Fabrizio Ponti per la grande disponibilità e cortesia dimostratemi.

Un ringraziamento speciale va all'Ing. Roberto Bertacin per aver materialmente contribuito allo sviluppo di questo lavoro e per essersi sempre reso disponibile nel risolvere le numerose difficoltà incontrate durante il percorso di tesi.

Un grazie speciale va alla mia famiglia per avermi dato negli anni sostegno morale ed economico, senza i quali non avrei mai potuto raggiungere i traguardi conseguiti.

Ancora un grazie va a Larissa, compagna di vita, che ha saputo ascoltarmi, motivandomi e donando la luce ai momenti più bui della mia vita.

Infine desidero ringraziare i miei amici di sempre: Carlo, Daniele, Luca, Marco, Valerio ed il mio coinquilino Alberto, con i quali negli anni ho condiviso un tratto del mio percorso di vita e con i quali spero di continuare a farlo in futuro.