METODO VOF/PLIC PER FLUSSI BIFASE

Valerio MARRA *

* *Ingegnere Nucleare, Dottorato di Ricerca in "Ingegneria delle Macchine e dei Sistemi Energetici"; esperto di modellazione e simulazione multifisica*

SOMMARIO

Nell'ambito delle applicazioni industriali avanzate ci sono diversi casi nei quali è necessario ricostruire o tracciare numericamente l'interfaccia di separazione tra fluidi non miscibili (flussi bi- o multi-fase). Si può citare ad esempio l'applicazione di metodi numerici nei seguenti ambiti industriali: dispositivi a getto fluido, bagni di saldatura, fusione di metalli, incisione di dispositivi a semiconduttore e combustione.
In questo articolo sarà descritto un algoritmo di tracciatura dell'interfaccia conosciuto come "Metodo VOF" (Volume Of Fluid). In tale metodo non è direttamente tracciata l'interfaccia ma il volume che ciascun fluido occupa in ogni cella computazionale: a partire da una configurazione iniziale tale grandezza è avanzata nel tempo mediante opportune tecniche, successivamente la ricostruzione dell'interfaccia nella nuova posizione è fatta utilizzando la distribuzione del volume al nuovo passo temporale. Per questa ragione ci si riferisce talvolta al Metodo VOF come a un metodo di tracciatura del volume.

IL METODO VOF PER FLUSSI BIFASE

Il metodo VOF è basato sulla funzione caratteristica χ, che assume valore 1 per la fase di riferimento e 0 nell'altra complementare. Poiché i fluidi considerati sono non miscibili e incomprimibili, la funzione caratteristica, che non cambia il suo valore nell'inseguire la particella di fluido elementare, è quindi trasportata passivamente dal flusso e soddisfa la seguente equazione:

(1) $$\frac{D\chi}{Dt} \equiv \frac{\partial \chi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\chi = 0$$

dove **u** è il campo di velocità condiviso dai fluidi. La funzione colore, o frazione di volume, C è la versione discreta di χ e rappresenta la frazione occupata dal fluido di riferimento di ogni cella appartenente alla griglia. Celle non interessate dall'interfaccia avranno un valore di C pari a 1 oppure 0 , mentre quelle tagliate dall'interfaccia esibiranno valori di C compresi tra 0 e 1 (in Figura 1 è mostrato il campo scalare C).

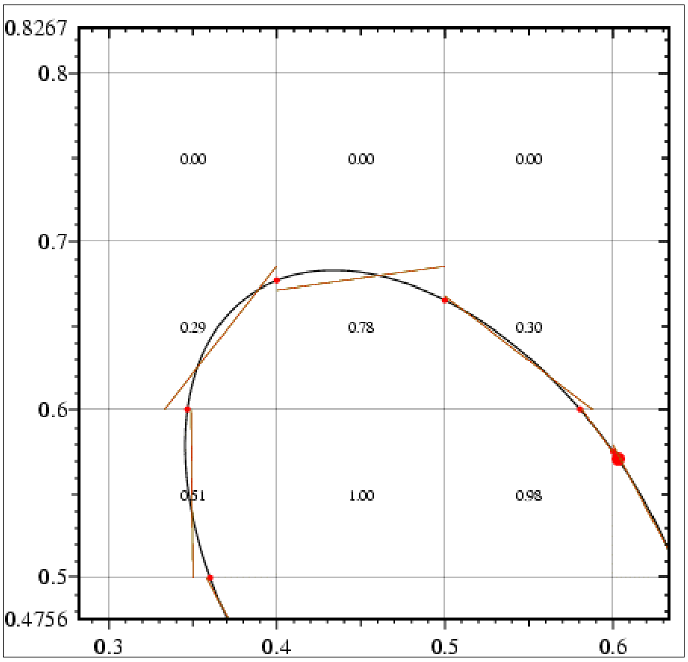

Figura 1

Ad ogni passo temporale della simulazione la posizione dell'interfaccia non è nota: la sua geometria deve essere dedotta dalla conoscenza del campo scalare C. Assumendo che C soddisfi l'equazione (1), è necessario integrare nel tempo tale equazione per conoscere i flussi della funzione colore attraverso i contorni delle celle.
Da questo si evince come la procedura di ricostruzione sia da eseguire in due passi. Il processo di ricostruzione non è unico, infatti data una certa distribuzione del campo scalare C la geometria assunta dall'interfaccia dipende dall'algoritmo di ricostruzione implementato. Secondo questo tipo di implementazione euleriana, il Metodo VOF è quindi di natura puramente geometrica.
La funzione colore C permette, mediante la formulazione ad un fluido, la simulazione di flussi bifase (anche non isotermi) risolvendo il sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali descritto nell'articolo dello scrivente *"Termofluidodinamica Bifase"*.

RICOSTRUZIONE DELL'INTERFACCIA: METODO VOF/PLIC

Il dominio computazionale considerato è bidimensionale e costituito da celle quadrate.

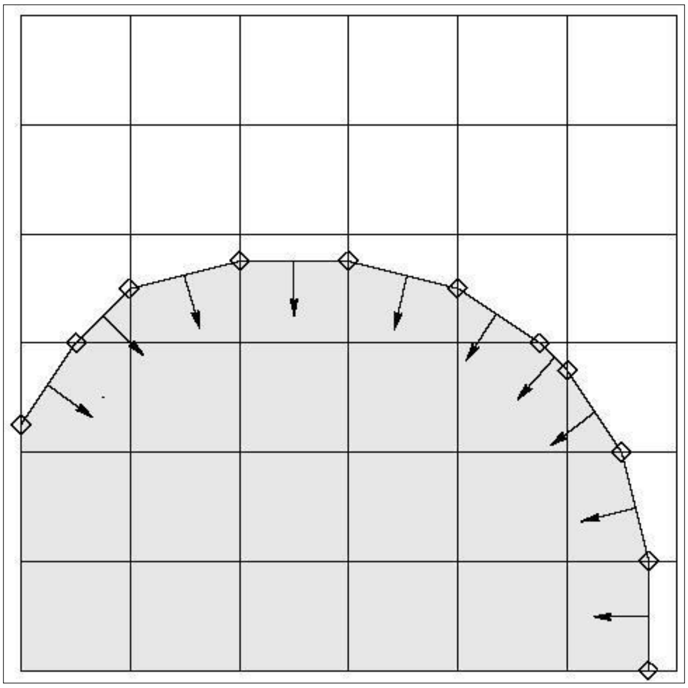

Figura 2

Il metodo descritto per la ricostruzione è il VOF/PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*) il quale approssima l'interfaccia mediante un segmento di retta definito (Figura 2), nel sistema di riferimento locale della generica cella, dall'equazione seguente:

(2) $$m_x x + \mathrm{l}$$

La determinazione delle costanti m_x, m_y e α dell'equazione (2) è effettuata adottando una procedura a due passi:

- *calcolo della normale all'interfaccia* ***m****=(m_x, m_y);*
- *determinazione della costante α in modo che la frazione di area della cella tagliata da tale linea e occupata dalla fase di riferimento sia uguale a C.*

Al fine di rendere più chiaro il significato delle costanti m_x, m_y e α, riscriviamo l'equazione (2) nel seguente modo:

(3) $$y = \tan(\theta)x + y(0) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta)}x + \frac{d}{\cos(\theta)} = \frac{-m_x}{m_y}x + \frac{\alpha}{m_y} = m'x + b$$

Analizzando l'equazione (3), la porzione di interfaccia ricostruita nella generica cella può quindi essere identificata come quella avente distanza α dal punto di origine del sistema di riferimento locale, situato nell'angolo in basso a sinistra della cella di riferimento, e coefficiente angolare m'.

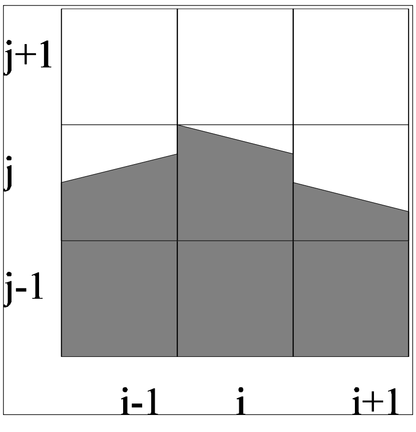

Figura 3

La determinazione di α, data la frazione di volume assegnata e la direzione normale nella cella computazionale considerata, è quindi un problema avente soluzione unica solubile mediante il soddisfacimento della condizione di conservazione della massa. Poiché sia m_x che m_y sono positive, la frazione di volume C è una funzione monotonamente crescente e non lineare di α.
Al contrario, la determinazione del vettore normale **m** non è unica. Nel metodo VOF/PLIC la ricostruzione della normale è determinata come gradiente della frazione di volume **m**=∇C. Il metodo qui descritto per il suo calcolo è una versione modificata di quello di Parker-Youngs detto CIAM (Calcul d'Interface Affine par Morceaux). Consideriamo un blocco di celle quadrate 3$\times$3 dove $\Delta x = \Delta y = h$ (Figura 3).

La normale **m** è valutata nei quattro angoli della cella centrale (i,j) mediante una formula alle differenze finite. Ad esempio per la componente m_x valutata nell'angolo in alto a destra si ha:

(4) $$m_{x,i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{2h}\left(C_{i+1.j+1} + C_{i+1.j} + C_{i.j+1} + C_{i.j}\right)$$

Analogamente si procede per la componente m_y e per le altre valutate nei rimanenti tre angoli. Il vettore richiesto, centrato nella cella, si ottiene mediando i quattro valori trovati nei quattro angoli della cella:

(5) $$m_{i,j} = \frac{1}{4}\left(m_{i+1/2,j+1/2} + m_{i+1/2,j-1/2} + m_{i-1/2,j+1/2} + m_{i-1/2,j-1/2}\right)$$

Se la risoluzione spaziale adottata è adeguata alla geometria dell'interfaccia da ricostruire, cioè se non siamo in presenza di fenomeni di frammentazione o coalescenza caratterizzati da raggi di curvatura molto più grandi del passo della griglia, la funzione colore C esibisce un andamento monotóno lungo la direzione della normale all'interfaccia. Tale caratteristica è un presupposto per la corretta interpretazione da parte dell'algoritmo dell'orientamento della normale all'interfaccia. Nelle situazioni nelle quali il raggio di curvatura dell'interfaccia non è comparabile con il passo della griglia, l'algoritmo CIAM (asintoticamente del primo ordine) prende in considerazione per il calcolo della normale **m** anche le celle il cui valore della frazione volumetrica non consente la verifica della caratteristica di monotonicità della funzione colore C: in tale contesto tali valori aggiungono informazioni sull'orientamento dell'interfaccia relativa a un fenomeno fortemente locale e quindi non modellizzabile mediante un approccio di tipo mediato (o globale).
Da quanto esposto si evince come tali metodi siano suscettibili di miglioramenti e ulteriore approfondimento da parte dei ricercatori attualmente impegnati sul fronte della fluidodinamica computazionale bifase. Tali sforzi hanno prodotto nuovi metodi e tecniche la cui descrizione esula dallo scopo introduttivo di questo articolo.