



UNIVERSITÀ DELLA CALABRIA

FACOLTÀ DI INGEGNERIA

Dipartimento di Ingegneria Chimica e Dei Materiali

DOTTORATO DI RICERCA IN INGEGNERIA CHIMICA E DEI MATERIALI
Settore Scientifico Disciplinare ING-IND/26 – Teoria dello Sviluppo dei Processi Chimici

TESI DI DOTTORATO

**ANALISI SU SCALA PARTICELLARE
DELL'INTERAZIONE FLUIDO-SOLIDO IN
LETTI FLUIDIZZATI POLIDISPERSI E
SIMULAZIONI IN AMBIENTE PARALLELO**

SUPERVISORI

Prof. Francesco Paolo DI MAIO

Ing. Alberto DI RENZO

CANDIDATO

Ing. Fernando CELLO

COORDINATORE DEL CORSO DI DOTTORATO

Prof. Raffaele MOLINARI

XXII Ciclo: Triennio 2007 - 2009

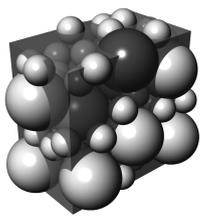


FONDO SOCIALE EUROPEO - FSE

Programma Operativo Nazionale 2000/06

"Ricerca, Sviluppo tecnologico ed Alta Formazione
nelle regioni dell'Obiettivo 1" - Misura 1.1 (F.S.E.)

*All'onestà che ha mani ruvide ed occhi stanchi seppur fieri,
all'umiltà che ardisce astute trame di conoscenza,
al sentire, che non ha le lunghe leve del cinismo, ma nemmeno la sua vigliaccheria,
al volo, quello reale che, sospeso nell'anima, ha congiunto Cielo e Mare.*



© Fernando Cello,

Laboratorio di Teoria dello Sviluppo dei Processi Chimici

UNIVERSITÀ DELLA CALABRIA, Facoltà di Ingegneria

Dipartimento di Ingegneria Chimica e dei Materiali

Arcavacata, Rende (CS), Novembre 2009

Sommario

SOMMARIO	V
INDICE DELLE FIGURE	IX
INDICE DELLE TABELLE	XIII
INTRODUZIONE	XV
PARTE I: FORMULAZIONE DI UN MODELLO GENERALE PER LA FORZA DI DRAG IN LETTI FLUIDI POLIDISPERSI	1
CAPITOLO 1: LO SCAMBIO DI QUANTITÀ DI MOTO TRA UN FLUIDO ED UN SOLIDO	
PARTICELLARE IN SISTEMI DENSI.....	3
1.1 Materiali solidi granulari.....	4
1.2 La fluidizzazione.....	5
1.3 Metodologie di studio delle interazioni fluido-solido.....	10
1.4 Strategie di modellazione numerica del contatto multifase.....	11
1.5 La fase fluida.....	12
1.5.1 Approccio Lagrangiano per un sistema mono- e multifase fluido.....	12
1.5.2 Approccio Euleriano in un sistema monofase.....	13
1.5.3 Fluido Euleriano in sistemi multifase.....	15
1.6 La fase solida.....	25
1.6.1 Solido Euleriano in un sistema mono- e multifase.....	25
1.6.2 Solido Lagrangiano in un sistema mono- e multifase.....	27
1.7 Approccio multilivello.....	42
1.8 Scopo della tesi.....	42
CAPITOLO 2: MODELLAZIONE DEM-CFD DI LETTI FLUIDIZZATI MULTICOMPONENTE.....	45
2.1 Metodo combinato DEM-CFD.....	46
2.2 Ipotesi base nella modellazione di un letto fluido.....	47
2.3 Composizione delle forze particellari.....	50

2.4	Calcolo della deformazione e della forza di contatto	53
2.5	Drag esercitato dal fluido sulla particella	55
2.6	Calcolo e distribuzione dei volumi particellari locali.....	59
2.7	Passaggio al tempo successivo e valutazioni a quello intermedio.....	61
2.8	La fase fluida.....	63
CAPITOLO 3: DRAG IN SISTEMI MONO- E POLI-DISPERSI		69
3.1	Definizioni generali per il calcolo della forza di drag.....	70
3.1.1	Sistema monodisperso	70
3.1.2	Sistema polidisperso	72
3.2	Modelli per il calcolo della forza di drag	75
3.2.1	Drag per moto intorno ad una singola sfera.....	75
3.2.2	Drag in matrici di particelle a diametro monodisperso.....	77
3.2.3	Modelli per il drag in matrici di particelle con diametro polidisperso.....	89
CAPITOLO 4: UN NUOVO MODELLO PER L'INTERAZIONE FLUIDO-SOLIDO IN SISTEMI MONO E POLIDISPERSI.....		103
4.1	Ricerca di un nuovo modello per sistemi mono e polidispersi.....	104
4.2	Scelta dell'approccio da usare per il nuovo modello monodisperso	105
4.3	Dati di letteratura selezionati per il modello monodisperso	105
4.4	Un nuovo modello per il drag in sistemi monodispersi.....	108
4.5	Considerazioni sull'accuratezza del modello monodisperso.....	111
4.6	Considerazioni sulla predittività del nuovo modello.....	117
4.7	Scelta dell'approccio da usare per il nuovo modello polidisperso	121
4.7.1	Effetti della definizione di un diametro medio	121
4.7.2	Effetti della definizione di una forza per la singola specie	125
4.7.3	Effetti della definizione di indici di polidispersione	127
4.7.4	Strategia scelta per la ricerca del nuovo modello	128
4.8	Modello per il drag in matrici di particelle polidisperse	129
4.8.1	Correzione e revisione del modello VBK.....	131
4.8.2	Regressione del modello.....	134
4.8.3	Distribuzione continua	140
4.9	Modalità di applicazione e limiti del modello proposto	144
4.9.1	Considerazioni sui casi limite di disomogeneità.....	146

CAPITOLO 5: VALIDAZIONE DEL NUOVO MODELLO	149
5.1 Validazione del modello attraverso simulazioni LBM di sistemi a diametri polidistribuiti.....	150
5.2 Inversione di un sistema binario fluidizzato da un liquido	157
5.2.1 Fenomenologia dell'inversione.....	157
5.2.2 Modelli di letteratura per la previsione del punto di inversione.....	161
5.2.3 Previsione dell'inversione mediante il nuovo modello	166
5.3 Validazione del nuovo modello mediante simulazioni DEM-CFD di sistemi bidispersi studiati in letteratura.....	170
5.3.1 Modalità di selezione dei dati di letteratura	170
5.3.2 Sistemi scelti per la simulazione.....	175
5.3.3 Strumenti di analisi	178
5.4 Simulazione del sistema [A].....	182
5.4.1 Prova a bassa velocità	183
5.4.2 Prova a media velocità.....	184
5.4.3 Prova a velocità elevata.....	185
5.4.4 Analisi dei risultati.....	186
5.5 Simulazione del sistema [B].....	187
5.5.1 Analisi delle prove effettuate	187
5.5.2 Effetto del modello per il drag	198
5.6 Simulazione del sistema [C].....	198
5.6.1 Risultati della simulazione.....	199
5.6.2 Effetti di temperatura e di griglia.....	206
PARTE II: PARALLELIZZAZIONE DEL CODICE DEM-CFD	209
CAPITOLO 6: SVILUPPO DI UNA VERSIONE PARALLELA A MEMORIA DISTRIBUITA MPI DEL CODICE DEM.....	211
6.1 Il calcolo parallelo.....	212
6.2 Classificazione delle architetture parallele.....	213
6.3 Modelli di programmazione parallela	214
6.3.1 Modello a memoria condivisa (OpenMP e Pthreads).....	214
6.3.2 Modelli a memoria distribuita: Message Passing (MPI)	216
6.3.3 Modello Data Parallel	216
6.3.4 Modello Ibrido.....	216

6.4	Modelli d'esecuzione	217
6.5	Prestazioni di un codice parallelo.....	217
6.6	Modelli prescelti	218
6.7	Strategia di parallelizzazione	219
6.7.1	Osservazione della geometria del sistema	219
6.7.2	Possibili approcci alla parallelizzazione ed effetti sul calcolo.....	220
6.8	Parallelizzazione delle procedure.....	224
6.8.1	Inizializzazione delle variabili e strutture dati.....	224
6.8.2	Calcolo della fase particellare.....	227
CAPITOLO 7: CONVALIDA E PRESTAZIONI DEL CODICE PARALLELO		235
7.1	Verifica della validità del codice e speedup.....	236
7.2	Speedup del codice parallelo.....	236
7.2.1	Hardware a disposizione.....	237
7.2.2	Prove effettuate e confronto dei tempi di calcolo	237
7.3	Confronto dello speedup	240
CONCLUSIONI.....		243
APPENDICE A: REGRESSIONE CON I DATI LBM.....		249
APPENDICE B: VALIDAZIONE CON I DATI LBM.....		271
SIMBOLOGIA.....		A
BIBLIOGRAFIA.....		E
RINGRAZIAMENTI.....		AA

Indice delle figure

<i>Fig. 1-I: Regimi di fluidizzazione.</i>	6
<i>Fig. 1-II: Vari tipi di fluidizzazione secondo Geldart (1973).</i>	8
<i>Fig. 1-III: Sistema monodisperso ad U_f ed ε uniformi e costanti.</i>	30
<i>Fig. 1-IV: Analisi multiscala di sistemi multifase.</i>	43
<i>Fig. 2-I: Scala di indagine relativa ad una cella computazionale.</i>	48
<i>Fig. 2-II: Geometria del sistema per la simulazione di un letto fluidizzato.</i>	49
<i>Fig. 2-III: Composizione delle forze agenti su una particella singola.</i>	52
<i>Fig. 2-IV: Forze agenti sulla particella i-esima.</i>	52
<i>Fig. 2-V: Sovrapposizione lineare degli effetti della forza normale e tangenziale.</i>	54
<i>Fig. 2-VI: Ricerca degli urti potenziali della particella i.</i>	55
<i>Fig. 2-VII: Funzione di distribuzione del volume della particella i.</i>	58
<i>Fig. 2-VIII: Celle computazionali nel dominio 3D.</i>	64
<i>Fig. 2-IX: Celle computazionali traslate per la fase fluida.</i>	65
<i>Fig. 2-X: Struttura dell' algoritmo DEM-CFD.</i>	66
<i>Fig. 3-I: Moto intorno una singola particella solida.</i>	77
<i>Fig. 3-II: Coefficiente di drag per moto intorno ad una singola sfera.</i>	78
<i>Fig. 3-III: Forza di drag sulla i-esima particella di un letto monodisperso.</i>	79
<i>Fig. 3-IV: Confronto tra modelli per sistemi monodispersi in regime viscoso.</i>	83
<i>Fig. 3-V: Confronto tra i modelli per la forza di drag per moto intorno una particella.</i>	87

<i>Fig. 3-VI: Confronto tra i modelli per la forza di drag per $Re \rightarrow 0$.</i>	88
<i>Fig. 3-VII: Confronto tra i modelli per la forza di drag per $\varepsilon = 0.342$.</i>	90
<i>Fig. 3-VIII: Forza di drag sulla specie particellare cui appartiene la particella i.</i>	91
<i>Fig. 4-I: Dominio di ricerca di un modello per la forza di drag.</i>	104
<i>Fig. 4-II: Dati di letteratura per il modello monodisperso.</i>	107
<i>Fig. 4-III: Andamento del modello monodisperso.</i>	110
<i>Fig. 4-IV: Sistemi estremamente diluiti ed in regime viscoso.</i>	113
<i>Fig. 4-V: Dettagli per $\varepsilon = 0.400$ (a) ed $\varepsilon = 0.500$ (b).</i>	114
<i>Fig. 4-VI: Dettagli per $\varepsilon = 0.600$ (a) ed $\varepsilon = 0.700$ (b).</i>	115
<i>Fig. 4-VII: Dettagli per $\varepsilon = 0.800$ (a) ed $\varepsilon = 0.900$ (b).</i>	116
<i>Fig. 4-VIII: Dettagli per $\varepsilon = 0.359$.</i>	117
<i>Fig. 4-IX: Dettagli per $\varepsilon = 0.432$ (a) ed $\varepsilon = 0.592$ (b).</i>	118
<i>Fig. 4-X: Dettagli per $\varepsilon = 0.776$ (a) ed $\varepsilon = 0.904$ (b).</i>	119
<i>Fig. 4-XI: Dettagli per $\varepsilon = 0.342$ (a) ed $\varepsilon = 0.970$ (b).</i>	122
<i>Fig. 4-XII: Confronto con dati sperimentali in sistemi densi.</i>	123
<i>Fig. 4-XIII: Modello bidisperso VBK teorico e corretto.</i>	131
<i>Fig. 4-XIV: Previsione dei valori di α_j.</i>	135
<i>Fig. 4-XV: Previsione dei valori di α_j.</i>	136
<i>Fig. 4-XVI: Previsione dei valori di α_j.</i>	137
<i>Fig. 4-XVII: Previsione dei valori di α_j.</i>	138
<i>Fig. 4-XVIII: Previsione dei valori di n_j.</i>	141
<i>Fig. 4-XIX: Previsione dei valori di n_j.</i>	142
<i>Fig. 4-XX: Previsione dei valori di n_j.</i>	143

<i>Fig. 5-I: Previsioni di α_j per distribuzioni gaussiane</i>	152
<i>Fig. 5-II: Previsioni di α_j per distribuzioni lognormali</i>	153
<i>Fig. 5-III: Previsioni di n_j per distribuzioni gaussiane</i>	154
<i>Fig. 5-IV: Previsioni di n_j per distribuzioni lognormali</i>	155
<i>Fig. 5-V: Confronto complessivo</i>	156
<i>Fig. 5-VI: Stadi successivi del fenomeno dell'inversione</i>	158
<i>Fig. 5-VII: Quote caratteristiche del fenomeno dell'inversione</i>	160
<i>Fig. 5-VIII: Previsione della velocità di inversione</i>	169
<i>Fig. 5-IX: Approssimazione del sistema reale</i>	172
<i>Fig. 5-X: Valutazione della quota di interfaccia</i>	180
<i>Fig. 5-XI: Prova a 0.3 mm/s</i>	184
<i>Fig. 5-XII: Prova a 1.8 mm/s</i>	185
<i>Fig. 5-XIII: Prova a 3.7 mm/s</i>	186
<i>Fig. 5-XIV: Prova a 10 mm/s</i>	189
<i>Fig. 5-XV: Quota di inversione a 20 mm/s</i>	190
<i>Fig. 5-XVI: Analisi dei risultati a 20 mm/s</i>	191
<i>Fig. 5-XVII: Analisi dei risultati a 25 mm/s</i>	192
<i>Fig. 5-XVIII: Analisi della simulazione a 30 mm/s</i>	193
<i>Fig. 5-XIX: Analisi della prova a 35 mm/s</i>	194
<i>Fig. 5-XX: Analisi dei risultati a 37 mm/s</i>	195
<i>Fig. 5-XXI: Confronto con i dati sperimentali</i>	196
<i>Fig. 5-XXII: Confronto col metodo DF a 30 mm/s</i>	197
<i>Fig. 5-XXIII: Simulazione a 27 °C</i>	200
<i>Fig. 5-XXIV: Analisi del punto di inversione</i>	201

<i>Fig. 5-XXV: Evoluzione del sistema.</i>	202
<i>Fig. 5-XXVI: Effetti della temperatura sui risultati.</i>	203
<i>Fig. 5-XXVII: Inversione a 25 °C.</i>	204
<i>Fig. 5-XXVIII: Effetti di griglia.</i>	205
<i>Fig. 6-I: Architetture di parallelizzazione disponibili.</i>	215
<i>Fig. 6-II: Discretizzazione del sistema.</i>	220
<i>Fig. 6-III: Suddivisione del problema fra i vari processi.</i>	222
<i>Fig. 6-IV: Struttura di parallelizzazione dell’algoritmo DEM-CFD.</i>	226
<i>Fig. 7-I: Convalida del codice parallelo.</i>	239
<i>Fig. 7-II: Prestazioni del codice parallelo.</i>	241

Indice delle tabelle

<i>Tab. 1-i: Caratteristiche dei gruppi di Geldart (1973)</i>	9
<i>Tab. 1-ii: Strategie di simulazione di sistemi multifase (van der Hoef et al. 2008)</i>	12
<i>Tab. 2-i: Distribuzione dei pesi frazionari del volume particellare</i>	61
<i>Tab. 4-i: Dati di letteratura selezionati per l'ottenimento del modello monodisperso</i>	106
<i>Tab. 4-ii: Dati di letteratura selezionati per l'ottenimento del modello polidisperso..</i>	130
<i>Tab. 5-i: Dati LBM di letteratura da Sarkar et. al (2009) per sistemi polidispersi</i>	151
<i>Tab. 5-ii: Confronto con dati di inversione</i>	167
<i>Tab. 5-iii: Dati di letteratura selezionati per la simulazione</i>	176
<i>Tab. 5-iv: Configurazione per la simulazione del sistema [A]</i>	183
<i>Tab. 5-v: Configurazione per la simulazione del sistema [B]</i>	188
<i>Tab. 5-vi: Configurazione per la simulazione del sistema [C]</i>	199
<i>Tab. 7-i: Simulazione mediante codice parallelo</i>	240
<i>Tab. A-i: Confronto tra i dati LBM VBK ed i vari modelli</i>	250
<i>Tab. A-ii: Confronto tra i dati LBM, HKL ed i vari modelli</i>	252
<i>Tab. A-iii: Confronto tra i dati TL ed i vari modelli</i>	259
<i>Tab. A-iv: Confronto tra i dati LBM bidispersi ed il nuovo modello (parte 1)</i>	262
<i>Tab. A-v: Confronto tra i dati LBM bidispersi ed il nuovo modello (parte 2)</i>	269
<i>Tab. B-i: Confronto tra i dati LBM polidispersi gaussiani ed il nuovo modello</i>	272
<i>Tab. B-ii: Confronto tra i dati LBM polidispersi lognormali ed il nuovo modello</i>	277

Tab. B-iii: Confronto tra i dati LBM polidispersi ed il nuovo modello282

INTRODUZIONE

INTRODUZIONE

I solidi particellari presentano una varietà di comportamenti che rendono affascinante quanto difficoltosa una loro modellazione, specie quando sono parte integrante di un flusso multifase. Nella progettazione di apparecchiature che trattano correnti a più fasi, largamente utilizzate nell'industria farmaceutica, petrolchimica ed alimentare, ma anche nella produzione dei materiali ceramici e dei cementi, risulta di fondamentale importanza la comprensione degli intimi meccanismi che regolano le interazioni fluido-solido.

Esempi di interazione tra un fluido ed un solido particellare fanno parte della nostra esperienza di vita quotidiana. Un classico caso è quello che si osserva quando il vento raccoglie lo strato di polvere che ricopre una strada, trascinando con sé le particelle di solido. Si definisce “forza di drag” l'azione che un fluido esercita su una particella solida che si muove attraverso esso o, più in generale, quella forza che un letto di particelle solide riceve da parte di un fluido che si insinua attraverso esso. Nell'ambito dell'ingegneria chimica la forza di drag riveste un ruolo fondamentale nel determinare le perdite di carico nelle singole apparecchiature.

Tutto ciò è sufficiente per comprendere la cruciale importanza di una profonda comprensione dell'interazione fluidodinamica tra le fasi e della possibilità di disporre di una correlazione accurata che permetta la valutazione della forza di drag in condizioni quanto più possibile generali.

L'approccio allo studio dei fenomeni che coinvolgono i solidi particellari è storicamente orientato ad un'analisi macroscopica, che, per la complessità dei fenomeni e le diverse scale spaziali e temporali in cui questi si sviluppano, nasce necessariamente empirica o semi-empirica. Ad integrazione di questo indirizzo di ricerca, ha recentemente riscosso notevole interesse un'analisi di tali fenomeni su una scala microscopico-particellare, favorita dall'enorme incremento delle capacità di simulazione delle architetture di calcolo.

Le strategie di simulazione fluidodinamica multifase presenti in letteratura sono differenti e tengono conto delle diverse scale di indagine. Ruolo fondamentale nella loro distinzione svolge proprio il modo in cui esse valutano l'interazione tra le particelle solide ed il fluido. I modelli più dettagliati (Direct Numerical Simulation DNS, Lattice-Boltzmann Model LBM), che operano su scale dimensionali più piccole, risolvono il campo di moto del fluido negli interstizi fra le particelle, ottenendo, secondo differenti modalità, la quantità di moto scambiata. Questi metodi presentano un onere di calcolo molto elevato, ciò che li rende adatti solo alla simulazione di sistemi con un numero di particelle limitato. Esistono poi altri approcci che permettono di rappresentare scale dimensionali maggiori (fino a sistemi di interesse industriale), inglobando i fenomeni agenti su scala sub particellare all'interno di appositi termini presenti nelle equazioni di modello. Questi metodi necessitano, dunque, di un modello per il calcolo della forza di interazione tra le fasi a partire dalla conoscenza delle grandezze caratteristiche (velocità superficiale, pressione, grado di vuoto) localmente mediate in una griglia determinata dalla discretizzazione del dominio di interesse.

I modelli di questa seconda categoria più utilizzati in letteratura si distinguono per il modo in cui viene analizzata la fase solida: il Two Fluid Model (TFM) considera solido e fluido come mezzi continui; il Distinct Elements Method (DEM), di onere computazionale maggiore, considera la fase solida come un insieme di entità discrete ed interagenti, demandando ad un algoritmo di tipo Computational Fluid Dynamic (CFD) la risoluzione della fase fluida, accoppiato al DEM. Quest'ultima strategia combinata, denominata nel suo complesso DEM-CFD, rappresenta lo strumento di riferimento in questo lavoro di tesi per l'analisi del flusso multifase in letti fluidizzati. Come precedentemente descritto, ciò implica la definizione di un modello per il calcolo della forza di interazione fluido-solido. Obiettivo di questo lavoro di tesi sarà, dunque, la ricerca di un'espressione analitica che permetta di valutare la forza di drag cui sono soggette le particelle solide interagenti con un mezzo fluido in regimi fluidodinamici

INTRODUZIONE

anche molto diversi (in ampio intervallo di valori del numero di Reynolds e del grado di vuoto) ed in presenza di dispersione dei diametri particellari, ovvero in presenza di specie solide a diverso diametro. Quest'ultima proprietà rappresenta la novità più rilevante rispetto ai tradizionali modelli per la valutazione della forza di drag. Buona parte del lavoro sarà destinato all'individuazione di correlazioni di validità generale e l'approccio partirà dal riferimento della singola particella immersa in una generica sospensione di solidi (eventualmente polidispersi), con la prospettiva di implementare il modello all'interno del codice DEM-CFD per la simulazione di letti fluidi multicomponente.

In effetti, molte sono le correlazioni di letteratura inerenti il calcolo della forza di drag in sistemi monodispersi, ma spesso la loro accuratezza è basata su osservazioni esclusivamente empiriche, nonché legata a limitati intervalli del Re o di ε . Come primo passo verso l'obiettivo che ci si pone, si discuterà l'ampliamento di questi campi di validità del dominio $\varepsilon-Re$, a partire da dati dettagliati LBM di letteratura sull'interazione fluido-particella. In particolare si illustrerà la procedura che consente di pervenire ad una formulazione relativamente semplice dal punto di vista analitico e poco onerosa dal punto di vista computazionale. Quest'ultimo non è un requisito trascurabile visto che la correlazione dovrà poi essere richiamata nell'algoritmo di calcolo DEM-CFD per ognuna delle particelle presenti e ad ogni istante di integrazione.

Per ciò che concerne i sistemi polidispersi, in letteratura si è fatto uso dei modelli ottenuti per sistemi monodispersi, modificandone, di volta in volta, l'espressione del numero di Reynolds o del grado vuoto, particolarizzandoli sulla specie solida in esame. Si dimostrerà, invece, come un approccio più accurato parte dall'uso di parametri indicanti la polidispersione nel sistema e da coefficienti che rendono specifica per ognuna delle specie solide presenti una forza di drag *media*. Tale approccio, già

proposto in letteratura per sistemi bidispersi, sarà ampliato per il caso di sistemi con più componenti solidi.

Il modello per il calcolo del drag sarà sviluppato a partire da considerazioni teoriche sul comportamento delle miscele solide e da regressione di dati LBM per matrici di particelle bidisperse e sarà validato in diverse configurazioni e su diverse scale di indagine. Una convalida iniziale del modello sarà effettuata verificandone l'accuratezza nella previsione della forza di drag agente su particelle disposte in matrici polidisperse, con un numero di specie superiore a due. In questo confronto si farà uso di ulteriori dati LBM disponibili in letteratura.

Successivamente si procederà ad una validazione basata su misure sperimentali in sistemi a due componenti in cui la forza di drag sia il fattore controllante: si analizzerà il fenomeno dell'inversione in letti bidispersi fluidizzati da liquidi. In tali sistemi, infatti, all'aumentare della velocità del fluido, si passa da una condizione in cui le particelle più grossolane e leggere sormontano uno strato miscelato in cui siano presenti anche quelle fini e pesanti, ad una condizione in cui siano quest'ultime ad occupare la zona alta del letto. Passando da una condizione all'altra esiste un punto critico in cui il sistema è completamente miscelato. L'equilibrio tra la forza di drag, la forza peso e quella di galleggiamento regola il comportamento dei sistemi che danno inversione: è possibile, partendo da questa osservazione, ottenere i valori della velocità e del grado di vuoto critici del sistema con un semplice bilancio di forze macroscopico su ognuna delle specie solide presenti. Si valuterà come l'introduzione in tale bilancio di forze del modello proposto renda le equazioni in grado di predire il punto di equilibrio di alcuni sistemi riportati in letteratura, sia in termini di velocità caratteristica che in termini di espansione del letto (e corrispondente grado di vuoto).

Su un fronte puramente numerico l'elevato onere computazionale delle simulazioni DEM-CFD richiede tempi di calcolo notoriamente estesi per rappresentare sistemi di interesse. Questa necessità ha spinto a dedicare parte del lavoro di tesi ad estendere il

INTRODUZIONE

codice di calcolo DEM-CFD utilizzato nelle simulazioni sviluppandone una versione parallela, secondo il paradigma MPI (Message Passing Interface). Grazie a questa possibilità, infatti, l'onere computazionale può essere ripartito tra più processori che operano in parallelo, ognuno dei quali analizzerà solo una parte del numero totale di particelle oggetto di indagine. Si analizzeranno quindi le strategie di parallelizzazione adottabili, si illustrerà la tecnica prescelta per la parallelizzazione dell'algoritmo DEM e se ne presenteranno i primi test di *scale up*

Il primo capitolo di questo lavoro di tesi pone l'accento sulle strategie comunemente utilizzate in letteratura per modellare la fase fluida e quella solida, al fine di simulare numericamente il comportamento dei sistemi multifase.

Nel secondo capitolo viene brevemente descritto l'algoritmo che governa il codice DEM-CFD. Saranno illustrate le caratteristiche del codice FORTRAN esistente che utilizza in maniera combinata gli algoritmi DEM e CFD, per la risoluzione alternata rispettivamente della fase solida e fluida.

Nel terzo capitolo si procede ad una rassegna dei principali modelli di letteratura per il calcolo della forza di drag a partire dalla conoscenza di parametri misurabili quali grado di vuoto, velocità superficiale del fluido e distribuzione delle diverse specie solide.

Il quarto capitolo espone il lavoro svolto, finalizzato all'ottenimento di un modello per il calcolo della forza di drag, con l'obiettivo di superare i limiti di quelli presenti in letteratura. Il modello, considerato nella sua forma finale, permette di valutare la forza in sistemi in cui i diametri particellari appaiano mono- e polidispersi.

Nel quinto capitolo si discute la convalida del modello proposto in confronto a dati provenienti da simulazioni dettagliate per sistemi polidispersi con più di due specie solide presenti. Viene riportato, inoltre, l'esito del confronto con dati sperimentali inerenti il fenomeno dell'inversione.

La seconda parte della tesi è incentrata sulla parallelizzazione del codice DEM-CFD. Il sesto capitolo illustra le modalità con cui si è affrontato il problema, le strategie e le architetture di parallelizzazione. Il settimo capitolo presenta la convalida, mediante una serie di test, del nuovo codice parallelizzato e le prestazioni in termine di *scale up*.

Parte I

**FORMULAZIONE DI UN MODELLO
GENERALE PER LA FORZA DI
DRAG IN LETTI FLUIDI
POLIDISPERSI**

Capitolo 1

Lo scambio di quantità di moto tra un fluido ed un solido particellare in sistemi densi

La comprensione delle fenomenologie legate al contatto fluido-solido è di cruciale importanza in molti processi dell'industria metallurgica, chimica e petrolchimica, nonché nell'industria alimentare ed energetica.

Ad esempio nei reattori catalitici l'intensità e la durata del contatto fluido-solido determinano le prestazioni dell'apparecchiatura. Per migliorare lo scambio di materia, energia e quantità di moto tra le fasi si ricorre spesso all'uso di reattori a letto fluidizzato (fluidised bed catalytic cracking FCC), in cui le particelle solide sono libere di muoversi sotto l'effetto dell'attrito col liquido o col gas, che determinano su di esse una "forza di drag". Si realizza una sospensione densa ad alta velocità di miscelazione, in cui la perdita di carico è inferiore a quella che si avrebbe in letti impaccati.

In questo capitolo si analizzano i diversi approcci presenti in letteratura finalizzati allo studio dell'interazione tra una particella solida ed il fluido che le conferisce una quantità di moto. Sono discussi ed elencati i metodi numerici finalizzati alla risoluzione delle due fasi a contatto, considerate, a seconda del modello prescelto, continue o discrete.

1.1 Materiali solidi granulari

Nell'ambito della produzione industriale sovente si ricorre all'uso di solidi di natura particellare che, in condizioni stazionarie o in flusso, rappresentino l'alimentazione, l'intermedio o il prodotto finale di un intero processo. Questo accade principalmente nella produzione di cementi e ceramiche, nella produzione farmaceutica o più strettamente chimica e petrolchimica. Si evince, dunque, come la movimentazione e lo stoccaggio di solidi particellari e di granulometria spesso variabile rivesta fondamentale importanza nelle attività produttive. Pur potendo osservare in molti fenomeni naturali come le colate laviche, le slavine e l'evoluzione delle coste, fenomeni che coinvolgono l'attività dei solidi in forma granulare, la natura fundamentalmente discontinua del solido granulare fa sì che una caratterizzazione delle loro proprietà ed una modellazione del loro comportamento risulti complessa, e che, dunque, molti dei meccanismi di interazione fra le particelle solide risultino ancora non completamente compresi. Al solido particellare non si può associare una reologia esclusivamente liquida né tantomeno solida, giacché sono noti alcuni comportamenti del tutto singolari dei solidi granulari, che li distanziano dal comportamento di liquidi o solidi puri (cumuli, segregazione, distribuzione degli sforzi in un silo). Un'osservazione importante va fatta circa la polidispersione dei diametri particellari di un solido: in natura non esistono solidi monodispersi e ciò rende ancora più ardua una loro modellazione.

Per quanto concerne i solidi granulari in flusso, una descrizione delle loro proprietà è stata condotta in termini macroscopici da Campbell (2004): si distinguono un flusso quasi-statico o lento per sistemi densi in cui le forze di contatto si trasmettono nel mezzo granulare in catena; c'è poi un flusso inerziale o veloce per sistemi diluiti associabili, per il meccanismo collisionale di trasferimento della quantità di moto, alle proprietà dei fluidi; c'è infine un flusso di tipo intermedio denominato elastico granulare in cui non vale né la teoria quasi-statica né quella collisionale.

Un'altra vasta area di interesse industriale coinvolge fenomenologie in cui siano presenti più fasi od anche più specie solide: è il caso, ad esempio, di apparecchiature in cui si verificano fenomeni di mixing, in cui sia necessario prevedere degli scarichi o del trasporto pneumatico, ma, soprattutto, è il caso delle reazioni catalitiche eterogenee e della fluidizzazione. In questi processi si introduce un'ulteriore complicazione alla modellazione dei sistemi, in quanto importanti meccanismi di interazione fluido-solido determinano le prestazioni delle apparecchiature e diventa necessario modellare lo scambio di quantità di moto tra le fasi presenti.

1.2 La fluidizzazione

Come apparecchiature principali in cui si faccia uso dei sistemi multifase si può citare quelle in cui avvenga fluidizzazione. Dal punto di vista operativo un solido particellare assume uno stato simile a quello di un fluido, per effetto della spinta verso l'alto indotta dal passaggio di un liquido o di un gas attraverso il mezzo granulare. Le basse perdite di carico e gli effetti positivi indotti nel trasporto di materia e di calore sono le peculiarità di questa pratica industriale. Il solido polverizzato viene depositato a formare un letto di materiale granulare. Il fluido fa il suo ingresso nel letto di particelle mediante una base semipermeabile e lo attraversa dal basso verso l'alto: al variare della sua portata e della granulometria si registrano comportamenti diversificati.

Per piccole portate di fluido il letto rimane fisso come illustrato in figura 1-I-(a); al crescere, però, della velocità di ingresso del fluido, diventa rilevante l'azione della forza di attrito sul solido; quando l'attrito pareggia lo scarto tra forza peso e forza di galleggiamento agenti sulla singola particella, si nota un'espansione del letto e ci si trova, dunque, nella condizione di minima fluidizzazione illustrata in figura 1-I-(b). Molti sono i lavori di letteratura volti alla predizione della velocità di minima

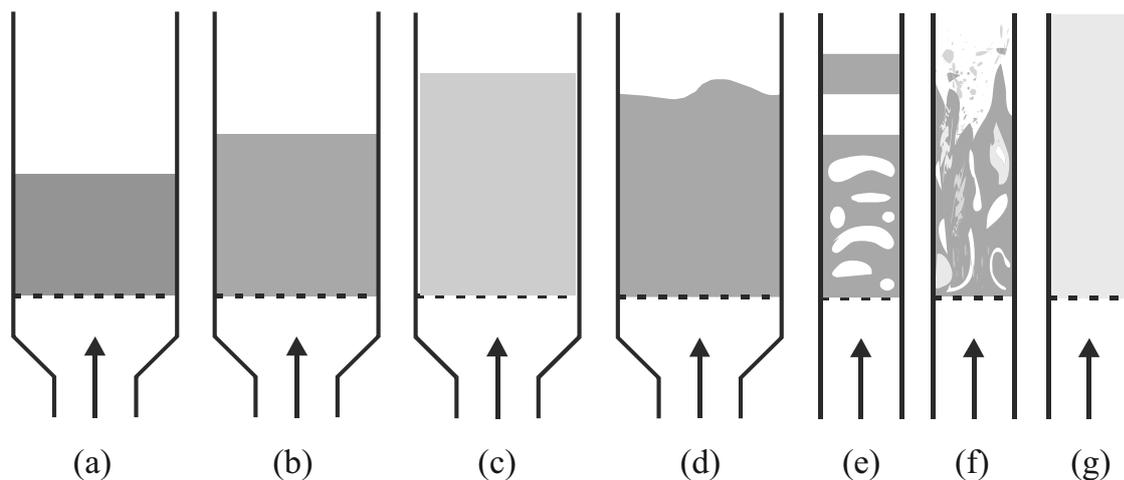


Fig. 1-I: Regimi di fluidizzazione. Letto fisso (a); minima fluidizzazione (b); fluidizzazione omogenea (c); fluidizzazione eterogenea (d); slug-flow (e); turbolenza (f); trasporto pneumatico (g).

fluidizzazione come quelli di Wen e Yu (1966) per dimensioni superiori ai $100\ \mu\text{m}$ o di Baeyens (1974) per particelle più fini. Altri modelli previsionali sono quelli di Ergun (1952) e Leva (1959).

A questo punto, nella fluidizzazione con liquido, si osserva che, incrementando ulteriormente la portata in ingresso, si realizza una “fluidizzazione particellare” o “omogenea”, in cui il grado di vuoto è uniformemente distribuito, come evidente in figura 1-I-(c). Nel caso, invece, venga alimentato un gas e la fase solida sia costituita da un solido non molto fine o leggero, aumentando la sua portata si evidenziano due zone di flusso differenziate: la figura 1-I-(d) evidenzia una zona che è possibile definire come “densa” ed un’altra caratterizzata da bolle. Questo tipo di comportamento si definisce “fluidizzazione aggregativa” o “eterogenea”.

Aumentando ulteriormente la portata, l’agitazione diventa violenta fino a formare il cosiddetto “slug-flow” di figura 1-I-(e), in cui si può osservare il moto oscillatorio di interi pistoni di solido. Quando il particolato è fluidizzato ad una velocità sufficientemente alta, il trascinarsi instaura un moto turbolento tra parti di polvere e

vuoti di fluido: si instaura un regime di letto fluido turbolento evidenziato in figura 1-I-(f). La transizione al regime turbolento avviene in corrispondenza della perdita di carico massima oppure al punto in cui la fluttuazione della pressione diventa indipendente dall'aumento della velocità del fluido. Il passaggio al regime turbolento è dato al meccanismo per cui le bolle si uniscono e si frantumano in un'alternanza continua ad una certa quota del letto. Questo fenomeno dipende da molti fattori come ad esempio la distribuzione granulometrica ed il calcolo della velocità corrispondente è stato affrontato in letteratura da molti ricercatori, tra i quali Cai et al. (1989).

Segue un regime di fluidizzazione detta “veloce”, mentre a velocità altissime di alimentazione fluida, il comportamento è identico che si utilizzi un liquido o un gas: in questi casi si parla di “trasporto pneumatico”, visibile in figura 1-I-(g).

Come accennato, non solo la velocità con cui il fluido viene inviato in colonna influenza il comportamento del solido, ma anche la sua stessa granulometria.

La figura 1-II riporta il famoso grafico che Geldart (1973) ha tracciato da uno studio sugli effetti che la granulometria e la densità del materiale comportano sui fenomeni di fluidizzazione. Si tratta di una classificazione del materiale particellare in quattro gruppi.

I solidi del gruppo A danno origine ad un'ampia espansione del letto per velocità comprese tra la velocità di minima fluidizzazione e quella di comparsa delle prime bolle. Le particelle appartenenti al gruppo B, presentando forze interparticellari relativamente deboli, non danno luogo ad un'espansione apprezzabile del letto e cominciano a bollire appena sopra la velocità di minima fluidizzazione. Il fenomeno predominante è la coalescenza tra le bolle, la cui dimensione aumenta linearmente con la distanza dal distributore e con l'eccesso di portata di gas rispetto a quella di minima fluidizzazione. Esse risalgono il letto ad una velocità superiore a quella interstiziale del gas e di conseguenza gli scambi con la fase densa sono modesti. I solidi del gruppo C sono coesivi, le loro forze interparticellari vincono quella di attrito col fluido e, di

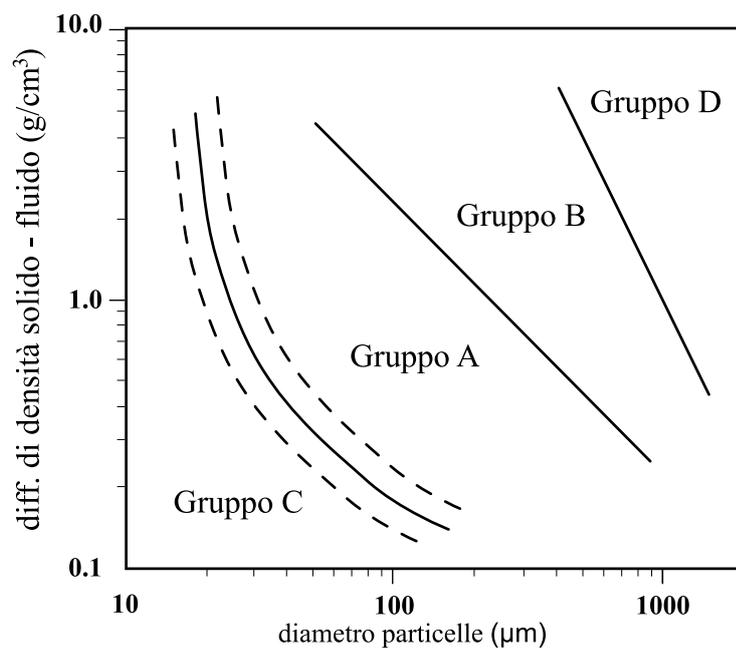


Fig. 1-II: Vari tipi di fluidizzazione secondo Geldart (1973).

conseguenza, si verificano fenomeni di canalizzazione e risultano difficilmente fluidizzabili. Presentano miscelazione della fase solida e trasferimento di energia fra le fasi molto ridotti. Al gruppo D appartengono i solidi più grossolani e/o densi. Sono caratterizzati da una velocità del gas in fase densa sempre più alta di quella di ascesa delle bolle, per cui la loro miscelazione è molto scarsa. Per letti alti si può instaurare il classico regime denominato “spouted bed”.

Le caratteristiche dei vari gruppi appena esposte sono riassunti nella tabella 1-i.

Il complesso universo di interazioni tra le bolle e la fase densa, da un lato è indice della ricchezza fluidodinamica e delle proprietà di scambio termico uniche di questo processo, ma da un altro punto di vista comporta innumerevoli difficoltà nella sua modellazione. Un’analisi del fenomeno, condotta ai principi primi, parte dall’osservazione che la singola particella determina la sua traiettoria sotto l’azione della forza peso, della forza di attrito col fluido (forza di drag) e delle forze di contatto con le pareti e con le altre particelle. Come visto, possono, inoltre, rivestire un ruolo di

Tab. 1-i: Caratteristiche dei gruppi di Geldart (1973).

<i>Proprietà</i>	<i>Gruppo A</i>	<i>Gruppo B</i>	<i>Gruppo C</i>	<i>Gruppo D</i>
Definizione descrittiva	Aerabile	Pronto per le bolle	Coesivo	Grossolano
Espansione del letto	Alta	Moderata	Molto bassa	Bassa
Tipo di bolle	Presenti ad alta velocità del gas	Grandi e coalescenti	Assenti per canalizzazioni	Lente in risalita
Miscelaz. fase solida	Alta	Moderata	Molto bassa	Bassa
Effetto spouting	Assente	Per letti bassi	Assente	Per letti alti

primo piano altre tipologie di forze come quelle coesive, od anche legate al transitorio o ad accelerazione reciproca degli elementi fluidi e/o solidi. La composizione di tutte queste forze spinge al moto le particelle ed esse a loro volta influenzano il percorso del fluido, innescando la formazione delle bolle e l'interscambio di materia granulare, di quantità di moto ed energia tra le bolle ed il mezzo denso.

Altri parametri che influenzano le caratteristiche della fluidizzazione sono, ovviamente, le composizioni delle diverse specie solide presenti (Formisani et al., 2001) e la temperatura (Girimonte e Formisani, 2009).

È anche per questi motivi descritti, che nel complesso risultano fortemente favorevoli allo scambio di materia e di energia, che la fluidizzazione trova largo impiego, dunque, in moltissimi processi come le apparecchiature FCC (Theologos e Markatos, 1993; Martignoni e de Lasa, 2001; Souza et al., 2009), ma anche nel campo delle biomasse (Zhong et al., 2009), della produzione dei nanotubi (Zhang et al., 2008), e molti altri ancora.

Di seguito si farà riferimento alla fluidizzazione, non solo come area di fondamentale interesse industriale, ma anche come operazione unitaria che meglio di altre permetta la comprensione dei fenomeni di interazione fluido-solido oggetto di studio di questo lavoro di tesi.

1.3 Metodologie di studio delle interazioni fluido-solido

Gli sforzi della ricerca si sono mossi da alcuni decenni verso l'ideazione di accurati modelli previsionali delle interazioni nei sistemi mono- e multifase, in apparecchiature in scala di laboratorio (ad esempio Carman 1937, Ergun 1952, Gibilaro 2001). Questo ha permesso al progettista di poter attingere ad un'ampia serie di dati sperimentali, ma, d'altro canto, si è ancora ben lontani da una determinazione univoca di modelli teorici che descrivano accuratamente i reali meccanismi di interazione.

Più recente è un approccio microscopico che richiede la risoluzione numerica di modelli fisico-matematici complessi, possibile grazie al progressivo potenziamento delle architetture procedurali, delle quantità di memoria e, conseguentemente, delle prestazioni dei calcolatori. Questo indirizzo di ricerca (le cui basi analitiche, nei vari approcci, sono state studiate, tra gli altri, da Anderson e Jackson 1967, Cundall e Strack 1979, Tsuo e Gidaspow 1990, Kuipers et al. 1992, Tsuji et al. 1993, Anderson et al. 1995, Hoomans et al. 1996, Xu e Yu 1997, Maier et al. 1999, Hill et al. 2001a e 2001b, Wylie et al. 2003, van der Hoef et al. 2005, Beetstra et al. 2007a) trova riscontro in una maggiore riproducibilità degli esperimenti ed è indirizzata, per sua stessa natura, ad una superiore flessibilità e versatilità alle più disparate applicazioni; sono presenti in letteratura studi legati alla distribuzione del grado di vuoto e dei componenti (Owoyemi et al. 2007, Di Renzo et al. 2008), nonché analisi di sistemi in cui si combini l'aspetto fluidodinamico e quello termico (Di Maio et al. 2009, Zhou et al. 2009).

Il limite principale risiede nei tempi di calcolo (relativamente) lunghi se raffrontati al singolo esperimento di laboratorio, ma il calcolo infinitesimale permette di scendere ad un dettaglio altissimo, acquisendo una notevole mole di dati, difficilmente accessibili per altra via, ciò che consente una migliore interpretazione e comprensione della complessità delle interazioni dei sistemi mono- e multifase.

Proprio nel senso di un approccio microscopico e computazionale, agendo su più scale dimensionali caratteristiche, si è deciso di operare per perseguire l'obiettivo finale di questo lavoro, ovvero l'ottenimento di un modello per il calcolo della tipologia di interazione fluido-solido riconducibile alla forza di drag.

1.4 Strategie di modellazione numerica del contatto multifase

Una classificazione delle strategie in uso in letteratura volte alla risoluzione del problema del contatto multifase per via numerica, può essere effettuata in accordo con quanto esposto da van der Hoef et al. (2008): la tabella 1-ii illustra le principali cinque categorie individuate.

La strategia che fa capo al Discrete Bubble Model (DBM in tabella 1-ii), in cui gli elementi discreti sono le bolle, prevede che le traiettorie di quest'ultime siano tracciate istante per istante, così come sono registrati gli eventi che le investono, come coalescenza, rottura, crescita e collasso. Questa strategia di calcolo esula dagli obiettivi proposti ed inoltre muove ancor oggi i suoi primi passi (Bokkers et al. 2006).

Sempre prendendo a riferimento la tabella 1-ii, il TFM (Two Fluid Model), l'UDPM (Unresolved Discrete Particle Model), l'RDPM (Resolved Discrete Particle Model) ed i metodi MD (Molecular Dynamics), saranno trattati nei paragrafi seguenti mediante gli approcci risolutivi per la fase fluida e solida che li contraddistinguono. Da un'analisi dei sistemi contenente un'unica fase si amplierà il panorama delle metodologie anche a sistemi multifase, sottolineandone le differenze.

Tab. 1-ii: Strategie di simulazione di sistemi multifase (van der Hoef et al. 2008).

<i>Nome</i>	<i>Descrizione fase gas</i>	<i>Descrizione fase solida</i>	<i>Tipo di accoppiamento gas-solido</i>	<i>Dimensioni della scala</i>
DBM	Lagrangiano	Euleriano	Modello per il drag delle bolle	Industriale (10 m)
TFM	Euleriano mediato	Euleriano mediato	Modello per l'interazione gas-solido	Ingegneristica (1 m)
UDPM	Euleriano mediato	Lagrangiano	Modello per l'interazione gas-singola particella di solido	Laboratorio (0.1 m)
RDPM	Euleriano dettagliato	Lagrangiano	Condizioni al contorno della superficie della particella	Laboratorio (0.01 m)
MD	Lagrangiano	Lagrangiano	Urto elastico sulla superficie della particella	Mesoscopica (<0.001 m)

1.5 La fase fluida

La descrizione teorica di un fluido si basa sull'ipotesi di continuità, ciò permette di associare proprietà macroscopiche a qualsiasi volume che ne contenga una parte, ivi rimanendo un aggregato continuo delle sue molecole. Le ipotesi di mezzo continuo decadono, ovviamente, qualora si consideri una scala di dimensioni confrontabile con quella molecolare. Proprio queste due scale descritte sono alla base di un possibile approccio Lagrangiano od Euleriano.

1.5.1 Approccio Lagrangiano per un sistema mono- e multifase fluido

Una modellazione di tipo Lagrangiano per la fase fluida implica un descrizione dettagliata dei fenomeni che avvengono su base molecolare; ne consegue che un tale approccio richiede risorse di calcolo molto onerose e, d'altro canto, si sfocia in una serie di dati non sempre utili ai fini pratici. Per questo motivo i metodi MD si sono orientati, evolvendosi nel tempo, ad una maggiore semplificazione. Ad esempio invece di prendere in considerazione tutti i possibili urti molecolari si è pensato ad un'alternanza,

una rotazione stocastica in pratica, dei vettori velocità del campo di moto fluido (Malevanets e Kapral 1999). Solo a titolo di esempio, perché esulano dagli obiettivi preposti, si citano i metodi Monte Carlo (Bird 1976 e 1994, Seibert e Burns 1996), LGCA (Frisch et al. 1986, Jankovic e Wolf-Gladrow 2006) ed SPH (Liu e Liu 2003, Monaghan 2005).

1.5.2 Approccio Euleriano in un sistema monofase

In questo paragrafo si partirà da considerazioni inerenti un sistema ad un'unica fase fluida, le quali si estenderanno poi, con le dovute correzioni, ai sistemi multifase. Nei modelli che prevedano un'unica fase fluida, solitamente il punto di partenza è rappresentato dalle equazioni di conservazione della massa e della quantità di moto; per un fluido comprimibile sono:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{U}_f) = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial (\rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_f + \rho_f \mathbf{g}, \quad (1.2)$$

dove \mathbf{g} , ρ_f , \mathbf{U}_f indicano, rispettivamente, l'accelerazione di gravità, la densità del fluido e la sua velocità; $\tilde{\mathbf{S}}_f$ è il tensore degli sforzi che si è soliti scindere nel contributo di pressione ed in quello deviatorico $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$:

$$\tilde{\mathbf{S}}_f = -P \tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f, \quad (1.3)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f = \left[\left(\mu_f^* - \frac{2}{3} \mu_f \right) \nabla \cdot \mathbf{U}_f \right] \tilde{\mathbf{I}} + \mu_f \left[\nabla \mathbf{U}_f + (\nabla \mathbf{U}_f)^T \right], \quad (1.4)$$

in cui si è indicato con $\tilde{\mathbf{I}}$ la matrice identità, con μ_f la viscosità a taglio del fluido e con μ_f^* quella di massa (Bird et al., 1960).

Nel caso in cui ρ_f e μ_f siano costanti le (1.1) ed (1.2) prendono il nome di equazioni di Navier-Stokes, proprio perché sviluppate da Navier nel 1822 (Bird et al., 1960).

Queste equazioni, di natura Euleriana, ben si prestano ad essere discretizzate in una griglia fissa, in quanto possono ritenersi valide anche in un volume di controllo di opportune dimensioni; possono, inoltre, essere applicate ad un qualsiasi tipo di mezzo, anche solido, purché la fase sia una sola e continua. L'analisi computazionale può essere condotta numericamente con algoritmi CFD (computational fluid dynamics) o, in alternativa, da una soluzione indiretta delle equazioni del moto, affrontata mediante metodi LBM (Lattice-Boltzmann Method).

Le equazioni (1.1) ed (1.2) nei metodi CFD sono risolte numericamente con metodi alle differenze, agli elementi od ai volumi finiti, utilizzando delle griglie di discretizzazione. Molti sono i metodi di discretizzazione presenti in letteratura (Fletcher 1988a e 1988b), ma in genere si usano griglie traslate per le grandezze vettoriali (per questioni di stabilità della soluzione), le quali sono individuate sui bordi delle celle, mentre quelle scalari sono individuate al centro delle celle. Le equazioni risultanti dalla discretizzazione sono risolte mediante algoritmi del tipo SIMPLE (Patankar, 1980).

Attraverso l'LBM (McNamara e Zanetti 1988, Chen e Doolen 1998, Succi 2001), le equazioni (1.1) ed (1.2) sono risolte in maniera implicita, partendo dall'equazione base di Boltzmann:

$$\frac{\partial \xi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \xi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = -\frac{1}{\zeta} (\xi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - \xi^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, T)), \quad (1.5)$$

dove \mathbf{r} e \mathbf{v} sono i vettori posizione e velocità e ξ è la funzione distribuzione per la singola particella, il cui integrale (o sommatoria nel discreto) esteso alle velocità rappresenta la densità ρ_f . ξ^{eq} è la funzione di distribuzione di equilibrio locale e ζ è il tempo di rilassamento. L'equazione (1.5) nell'LBM viene risolta alle differenze finite, considerando che nel singolo step temporale ξ propaghi in una griglia, salvo poi

rilassare all'equilibrio. Molto usata in sistemi 3D è la griglia cubica denominata D3Q19 (van der Hoef et al. 2005).

Si ricorda che entrambi gli approcci descritti valgono anche nel caso si consideri una fase solida particellare assunta come mezzo continuo, per cui valgono ancora le (1.1) ed (1.2) in cui, però, le variabili caratteristiche siano riferite alla fase solida (velocità, densità, pressione, viscosità).

1.5.3 Fluido Euleriano in sistemi multifase

Come la tabella 1-ii illustra, il TFM, l'UDPM e l'RDPM, ovvero le strategie più usate per sistemi multifase, si fondano, con differenti implementazioni del codice, su un approccio Euleriano. In realtà, il TFM e l'UPDM (con particolare riferimento al DEM-CFD) usano la stessa strategia CFD nel definire l'approccio al fluido, detta "unresolved"; i codici RPDM usano un approccio definito "resolved", ma all'interno di questa stessa famiglia di codici si notano differenze di approccio: alcuni di essi usano metodologie CFD, altri l'LBM. In ogni modo, tutte le differenze citate constano del modo in cui si definisce l'interazione tra fluido e solido sulla superficie di ognuna delle particelle appartenenti a quest'ultima fase, ciò che rappresenta una condizione al contorno: i metodi UPDM e TFM non risolvono tali condizioni al contorno del fluido intorno alla superficie di ogni singola particella: si ricorre a grandezze mediate per la fase fluida ed a modelli che descrivano l'interazione con la singola particella. Ciò non accade per i metodi RDPM ma anche all'interno di questa classe di metodi, come accennato, si distinguono diverse soluzioni al problema dell'interazione.

- ***Metodi RPDM***

Sono comunemente indicati con l'acronimo di DNS (Direct Numeric Simulation) e si distinguono, in merito alla fase fluida, dagli altri metodi per l'obiettivo di definire una soluzione per il moto del fluido, e della conseguente interazione, in prossimità della superficie di ogni particella solida supposta sferica.

Le soluzioni adottate sono tante in letteratura, ma se si vuole applicare delle condizioni al contorno sulla singola particella attraverso un metodo CFD, la strada principalmente scelta è quella della Immersed Boundary (IB, Feng et al. 1994a e 1994b, Glowinski et al. 2001, Peskin 2002, Mittal e Iaccarino 2005) in combinazione con un metodo diretto per le forze sviluppato da Uhlmann (2005). L'equazione (1.2) diventa:

$$\frac{\partial(\rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_f + \mathbf{S}_w + \rho_f \mathbf{g}, \quad (1.6)$$

in cui \mathbf{S}_w tiene conto delle forze puntuali e Lagrangiane distribuite lungo la superficie particellare, in particolare racchiude la forza complessiva che la fase particellare esercita su quella fluida per unità di volume. Il passaggio dalle forze puntuali, dislocate sulle superficie, a quella complessiva sulla particella avviene mediante una funzione di distribuzione delle forze; la sommatoria delle forze sulle singole particelle fornisce la forza per unità di volume, cui va cambiato il segno per ottenere \mathbf{S}_w .

Per ciò che concerne l'LBM, Ladd (1994a e 1994b) ha introdotto un metodo molto semplice per l'applicazione delle condizioni al contorno della singola particella: siccome lo spazio nelle simulazioni lattice-Boltzmann è discreto, è necessario mappare le curve inerenti le superfici particellari, facendo uso dei nodi di griglia già presenti. La variazione di quantità di moto da parte del fluido che intercetta i nodi che individuano un contorno particellare determina la forza di interazione tra fluido e solido. Un problema si pone se si considera che la forma risultante delle particelle non sarà precisamente sferica e questo induce delle fluttuazioni nella soluzione (Nguyen e Ladd 2002), soprattutto nel momento in cui le sferette si muovono all'interno del fluido. Per un sistema monodisperso, una possibile soluzione può essere quella di operare una simulazione con singola particella in regime di moto laminare e determinare un diametro equivalente mediante legge di Stokes, valida, appunto, come soluzione analitica per il drag, in tali condizioni fluidodinamiche. Queste fluttuazioni sono, però,

generalmente piccole, specialmente se si considerano sfere grossolane: se poi si considera che i risultati sono mediati, anche in sistemi polidispersi, su una molteplicità di particelle e per un lungo periodo di tempo, allora queste fluttuazioni possono ritenersi poco influenti nel computo generale (Beetstra, 2005).

Ovviamente altri metodi in RDPM sono stati sviluppati in letteratura ma una loro trattazione approfondita esula dagli obiettivi di questo lavoro, si citano soltanto per conoscenza i metodi PHYSALIS (Zhang e Prosperetti, 2005) e DLM (Glowinski et al. 2001, Sharma e Patankar 2005).

- **Metodi TFM ed UPDM**

I metodi UDPM possono essenzialmente individuarsi col metodo combinato DEM-CFD (discrete element method affiancato dal CFD), e condividono con il TFM la tipologia di approccio verso la fase fluida. La strategia multifase tra il TFM ed il DEM-CFD consta di differenze incentrate essenzialmente nel modo in cui il solido viene trattato: nel primo caso come un mezzo continuo, nel secondo come un'entità discreta soggetta alle leggi della meccanica. La griglia prescelta, invece, è in tutte e due i casi solitamente dell'ordine di qualche diametro particellare.

Ovviamente sussistono piccole differenze nella trattazione Euleriana della fase fluida, ma, essenzialmente, rispetto all'RPDM precedentemente visto, non c'è una risoluzione del campo di moto fluido attorno alla singola particella.

Per ciò che concerne il DEM-CFD, rispetto al CFD-IB precedentemente visto, la fase fluida vede le particelle solide come puntiformi sorgenti di forze che entrano nel bilancio della quantità di moto, e non già i singoli punti appartenenti alle loro superfici. Nel novero delle particelle da prendere in considerazione, entrano tutte quelle appartenente al volume di controllo disegnato dalla griglia CFD. Per quanto riguarda il TFM, invece, gli scambi con la fase solida avvengono nel rispetto della continuità di

quest'ultima: si tratta di due mezzi continui che si scambiano, interagendo, quantità di moto.

Nell'approccio Euleriano su base CFD alla fase fluida, si conservano le caratteristiche già enunciate in precedenza per il caso monofase: anche il SIMPLE rimane come strumento risolutivo, ma cambiano le equazioni da discretizzare, che non possono essere riproposte nella forma (1.1) ed (1.2). Mentre sulle modalità risolutive ci si soffermerà nel prossimo capitolo, in questa sede si vuole dimostrare che le equazioni di Navier-Stokes comunemente utilizzate per la fase fluida con approccio Euleriano CFD, particolarizzate al caso di interazione con una fase solida (Xu e Yu, 1997 e 1998; Gidaspow, 1994), hanno un fondamento analitico (Anderson e Jackson 1967).

Quel che fisicamente avviene è che il fluido entra negli interstizi lasciati vuoti dal solido granulare, e fluendo interagisce con la superficie di ogni singola particella. Il cuore di un approccio Euleriano CFD è che il fluido deve risentire della presenza del solido, senza che, tuttavia, vengano integrati gli sforzi determinati dal campo di moto fluido intorno alla superficie delle sferette; l'interazione interfase rimane irrisolta nel dettaglio. Quel che accade per il DEM è che l'azione del fluido sulle particelle viene, dunque, demandata a modelli che, a partire da parametri misurabili, come grado di vuoto o numero di Reynolds, forniscano il valore della forza risultante e su di esse agente. L'azione della massa particellare sul solido è ottenuta come sommatorie di forze calcolate sul solido. Il TFM, invece, intende quella solida come una fase continua e nel rispetto di tale ipotesi il fluido interagisce con essa.

Da quanto descritto emerge il nodo cruciale: sia nel DEM-CFD che nel TFM, in queste condizioni, al livello di cella CFD, è necessario utilizzare equazioni che non descrivano una fase pura come la (1.1) e (1.2), ma che siano "localmente mediate". Ogni variabile (velocità, pressione, ecc.) che muti il proprio valore nel dominio volumetrico di riferimento, deve, dunque, poter essere localmente mediata: deve, cioè, essere possibile ottenerne un valor medio in un punto prescelto appartenente alla griglia

CFD; tale punto diventa il crogiuolo in cui fondono i valori che la variabile assume nel suo intorno. Proprio per tener conto della presenza di due fasi nel volume di controllo Anderson e Jackson (1967) introducono una funzione peso $A(\mathbf{s}-\mathbf{s}_f)$; essa dipende da un vettore posizione \mathbf{s} , che partendo dall'origine, individui un punto del dominio volumetrico complessivo ζ , in corrispondenza del quale si vuole conoscere il valor medio locale di una grandezza ν , la quale vari con continuità nel volume totale; la funzione peso dipende anche dal vettore posizione \mathbf{s}_f , il quale indica un volume infinitesimo $d\zeta$ che ospita la variabile ν . In pratica la funzione peso dipende da un vettore $\mathbf{r} = \mathbf{s} - \mathbf{s}_f$, che va dal volume infinitesimo $d\zeta$ fino al punto in cui si vogliono raccogliere e concentrare le informazioni per la variabile ν , rendendola localmente mediata. Analiticamente, definendo con $\zeta_f(t)$ la totalità del volume occupato dal fluido al tempo t , si ottengono le seguenti relazioni:

$$\int_{\zeta} A(\mathbf{s}-\mathbf{s}_f) d\zeta = 1, \quad (1.7)$$

$$\varepsilon(\mathbf{s}, t) = \int_{\zeta_f(t)} A(\mathbf{s}-\mathbf{s}_f) d\zeta, \quad (1.8)$$

$$\varepsilon(\mathbf{s}, t) \nu(\mathbf{s}, t) = \int_{\zeta_f(t)} \nu(\mathbf{s}_f, t) A(\mathbf{s}-\mathbf{s}_f) d\zeta. \quad (1.9)$$

La (1.7) definisce una proprietà della funzione peso, ovvero quella di essere normalizzata nel dominio di riferimento; la (1.8) definisce il grado di vuoto mediato nel punto che ha come vettore posizione \mathbf{s} ; la (1.9) definisce analiticamente una variabile ν localmente (nel punto \mathbf{s}) mediata, raccogliendo ed integrando i suoi valori dall'insieme delle posizioni \mathbf{s}_f occupate dal fluido al tempo t .

Dalle (1.8) e (1.9) è possibile ridefinire le equazioni per singola fase in una forma localmente mediata, valida per la presenza contemporanea di più fasi. In particolare l'equazione di continuità assume la forma

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f \mathbf{U}_f) = 0, \quad (1.10)$$

mentre l'equazione per la quantità di moto diventa

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_f + \mathbf{S}_w + \rho_f \varepsilon \mathbf{g}. \quad (1.11)$$

Tutte le grandezze coinvolte nelle (1.10)-(1.11) si intendono mediate secondo le modalità che avevano condotto alle (1.8)-(1.9). Nelle equazioni (1.10)-(1.11) in forma mediata, che raccolgono informazioni da un campo multifase in un punto preciso della griglia, compare il grado di vuoto ε ad indicare la frazione sul volume complessivo, lasciata a disposizione della fase oggetto di indagine, in questo caso quella fluida. Come si vedrà, la trattazione è analoga nel caso la fase di interesse sia quella solida: per indicare la frazione di volume occupata si farà uso di ϕ , e non più di ε . Può capitare che le specie solide a contatto con quella fluida siano più di una: in tal caso, come si vedrà più avanti, si ricorre all'uso di ϕ_j per indicare il volume a disposizione della j -esima specie, che assume al ruolo effettivo di ulteriore fase dispersa in quella fluida. Nella (1.11) ricompare, inoltre, il termine \mathbf{S}_w , ovvero l'azione complessiva di interazione, comprendente le forze di drag e galleggiamento che, per unità di volume di controllo ψ , l'insieme delle Mp particelle solide ivi comprese esercita sul fluido.

Anderson e Jackson (1967), hanno cercato di dare fondamento teorico alla forma mediata delle equazioni del moto che più spesso viene utilizzata in letteratura (Xu e Yu, 1997 e 1998; Gidaspow, 1994; van der Hoef et al., 2008), partendo dalle equazioni (1.10)-(1.11), ottenute mediante le (1.8)-(1.9) e che rimangono valide in assoluto. Essi hanno considerato che complessivamente la massa particellare esercita sul fluido una forza per unità di volume \mathbf{S}_w , scomponibile in un contributo di puro drag \mathbf{S}_d ed in uno di galleggiamento generalizzato, legato alla divergenza del tensore degli sforzi (il quale a sua volta consta di una parte deviatorica ed una isotropica):

$$\mathbf{S}_w = \mathbf{S}_d - \sum_{i=1}^{Mp} \frac{V_i (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_f)}{\psi}, \quad (1.12)$$

dove Mp è il numero totale di particelle e con ψ e V_i si sono indicati rispettivamente il volume di controllo e quello della singola particella. Dalla definizione di grado di vuoto discende

$$\frac{\sum_{i=1}^{Mp} V_i}{\psi} = 1 - \varepsilon, \quad (1.13)$$

per cui la (1.12) diventa:

$$\mathbf{S}_w = \mathbf{S}_d - (1 - \varepsilon) \cdot (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_f). \quad (1.14)$$

Sostituendo nella (1.11) e ricordando la (1.3) si ottiene:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = -\varepsilon \nabla P + \varepsilon \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f + \mathbf{S}_d + \rho_f \varepsilon \mathbf{g}. \quad (1.15)$$

L'equazione (1.15) differisce leggermente dalla forma solitamente utilizzata per la quantità di moto in un approccio Euleriano CFD (Xu e Yu, 1997 e 1998; Gidaspow, 1994; van der Hoef et al., 2008):

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = -\varepsilon \nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f) + \mathbf{S}_d + \rho_f \varepsilon \mathbf{g}. \quad (1.16)$$

Le due correlazioni coincidono nel solo caso di ε e/o \mathbf{U}_f uniformi nello spazio o nel caso di $\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$ trascurabile. Nelle applicazioni di maggiore interesse la (1.15) e la (1.16) forniscono gli stessi risultati, in quanto, ad esempio nella fluidizzazione, la parte deviatorica del tensore degli sforzi, nella sua forma mediata, non subisce grosse variazioni spaziali: la divergenza di $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$ o di $\varepsilon \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$ risulta essere trascurabile e le due

equazioni vengono a coincidere. Le differenze tra la (1.15) e la (1.16) si assottigliano ulteriormente se si considera che le forze di interazione fluido-fluido costituiscono una parte solitamente trascurabile nel computo generale delle forze agenti in un sistema poroso attraversato da un fluido: risultano preponderanti, infatti, le interazioni fluido-particella. Inoltre, nel tensore deviatorico degli sforzi definito attraverso la (1.4), la viscosità di massa (o di bulk), che si è indicata con μ_f^* , risulta solitamente trascurabile (Bird et al. 1960, Xu e Yu 1997, Gelderbloom et al. 2003).

Per questi motivi il percorso formale solitamente scelto in letteratura (van der Hoef et al. 2008) per giungere alla (1.16) a partire dalla (1.11) passa per la definizione di alcune quantità quali \mathbf{W}_i , ovvero la forza che il fluido complessivamente esercita sulla i -esima particella, ed $\mathbf{F}_{d,i}$, ovvero il solo contributo di puro drag all'interazione fluido-particella. In particolare, come affermato dallo stesso Jackson (2000), la differenza tra le due forze citate fornisce quella di galleggiamento: essa viene definita in maniera non inequivocabile in letteratura, in cui le differenze di approccio constano, essenzialmente, dal fatto che essa possa dipendere dalla divergenza della sola parte isotropica del tensore degli sforzi o anche di quella deviatorica: nel primo caso (Anderson e Jackson 1967, Zhang e Prosperetti 2005, Owoyemi et al. 2007) si approda alla (1.15), nel secondo (Xu e Yu 1997 e 1998, Gidaspow 1994, van der Hoef et al. 2005) alla (1.16). Recuperando, dunque, le osservazioni di Anderson e Jackson (1967), ma tenendo in conto per il galleggiamento il solo gradiente di pressione, si ottiene la seguente relazione tra la forza complessiva e quella di puro drag:

$$\mathbf{W}_i = \mathbf{F}_{d,i} - V_i \nabla P. \quad (1.17)$$

È possibile ridefinire in maniera analoga le forze di cui risente la totalità della massa solida, ovvero \mathbf{S}_w (legata alla forza complessiva) ed \mathbf{S}_d (frutto di quelle di puro drag) come:

$$\mathbf{S}_w = -\frac{\sum_{i=1}^{Mp} \mathbf{W}_i}{\psi}, \quad (1.18)$$

$$\mathbf{S}_d = -\frac{\sum_{i=1}^{Mp} \mathbf{F}_{d,i}}{\psi}. \quad (1.19)$$

Sostituendo la (1.17), e successivamente la (1.19) e la (1.13) nell'equazione (1.18) si ottiene:

$$\mathbf{S}_w = \mathbf{S}_d + (1 - \varepsilon) \nabla P, \quad (1.20)$$

in cui compare la divergenza della sola parte isotropica del tensore degli sforzi, al contrario da quanto visto nella (1.14). L'ultimo passo che porta alla (1.16) a partire dalla (1.11) richiede una modifica della definizione del tensore deviatorico degli sforzi $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$: analogamente a quanto fatto per la densità della fase fluida al membro sinistro della (1.11), anche $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f$ va ridefinito mediante la frazione volumetrica della fase fluida, ovvero attraverso ε :

$$\tilde{\mathbf{S}}_f = -P \tilde{\mathbf{I}} + \varepsilon \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f. \quad (1.21)$$

Si verifica che, sostituendo la (1.20) e la (1.21) nella (1.11), si ottiene la (1.16), ovvero la forma dell'equazione per la quantità di moto solitamente usata in letteratura in un approccio Euleriano CFD (Xu e Yu, 1997 e 1998; Gidaspow, 1994). Questa derivazione è valida anche per fluido comprimibile e può essere applicata anche alle fasi a contatto col fluido (una o più fasi solide considerate continue), sostituendo il grado di vuoto con la frazione volumetrica assoluta (concentrazione).

In letteratura (Feng e Yu, 2004) la (1.16) viene denominata “Modello A”, mentre la (1.11) contenente la definizione (1.21), ovvero

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f\mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f\mathbf{U}_f\mathbf{U}_f) = -\nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f) + \mathbf{S}_w + \rho_f\varepsilon\mathbf{g}, \quad (1.22)$$

prende il nome di “Modello B”: come si è visto i due modelli sono del tutto analoghi.

Altra osservazione sulla valutazione delle quantità in gioco può essere fatta tenendo conto della pressione netta p (al netto, cioè, del contributo idrostatico); si può, infatti, definire una perdita di carico “unrecoverable” (Clift et al. 1978), ovvero di tipo dissipativo come

$$\nabla p = \nabla P - \rho_f\mathbf{g}, \quad (1.23)$$

laddove si sono scissi il contributo idrostatico e quello dovuto al gradiente della pressione assoluta P . Da questa distinzione discende la definizione di “forza netta” \mathbf{N}_i che il fluido esercita sulla i -esima particella come

$$\mathbf{N}_i = \mathbf{F}_{d,i} - V_i\nabla p = \mathbf{W}_i + \rho_f V_i\mathbf{g}. \quad (1.24)$$

La “forza netta” \mathbf{N}_i , come sarà meglio puntualizzato più avanti, è stata spesso confusa in letteratura con la forza di puro drag (Hasimoto 1959, Clift et al. 1978, Sangani e Acrivos 1982, Hill et al. 2001a e 2001b), ma al contrario di questa, tiene anche conto del gradiente di pressione dissipativo.

La (1.24) permette di semplificare ulteriormente la (1.16) nella forma

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f\mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f\mathbf{U}_f\mathbf{U}_f) = -\varepsilon\nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f) + \mathbf{S}_d. \quad (1.25)$$

Qualora si ipotizzi che la forza di drag sia dovuta alla sola velocità di scorrimento (slip velocity) tra solido e fluido, si può definire il coefficiente d’attrito specifico per unità di volume β , che rappresenta anche un coefficiente di trasferimento interfase della quantità di moto:

$$-\mathbf{S}_d = \frac{\sum_{i=1}^{M_p} \mathbf{F}_{d,i}}{\psi} = \beta(\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_s), \quad (1.26)$$

dove, appunto, \mathbf{U}_f e \mathbf{U}_s sono le velocità del fluido e del solido granulare mediate localmente. Si definisce velocità superficiale di scorrimento relativo la quantità $\mathbf{u} = \mathcal{E}(\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_s)$.

Ulteriore contributo alla quantità di moto scambiata tra le fasi può essere dovuto alla differenza tra la velocità del fluido \mathbf{U}_f e quella \mathbf{U}_j di ognuna delle M_s specie particellari di diverso diametro presenti nel volume di controllo (per $j = 1..M_s$). In questo caso si dovrà tener conto di una matrice dei coefficienti β quadrata e di dimensioni $M_s \times M_s$ (Yin e Sundaresan 2009a). Questa tipologia di indagine, come si vedrà, rientra in maniera indiretta nel novero delle forze di lubrificazione.

1.6 La fase solida

Alle equazioni per la fase fluida vanno necessariamente accoppiate delle equazioni per la fase solida, in modo da saturare il problema. La fase solida, in presenza di un'altra fluida, può essere vista ed analizzata con approccio Euleriano o Lagrangiano.

1.6.1 Solido Euleriano in un sistema mono- e multifase

Si è detto che le equazioni (1.1) ed (1.2) sono generalmente valide qualora si consideri un'unica fase continua presente nel sistema, fosse anche solida: le variabili di velocità, densità, viscosità e pressione saranno però riferite alla fase solida.

Per ciò che concerne i sistemi multifase, è soprattutto il metodo dei due fluidi (TFM, vedere tra gli altri Anderson e Jackson 1967, Ding e Gidaspow 1990) che fa uso di un approccio Euleriano alla fase solida, considerandola come mezzo continuo. In questo caso è possibile scrivere delle equazioni analoghe a quelle di variazione localmente

mediate, già viste in riferimento alla fase fluida, riadattate nel senso del contatto multifase alla fase inerente il solido granulare: è infatti possibile ripetere una trattazione del tutto analoga a quella fatta per il fluido in merito alle variabili localmente mediate (Anderson e Jackson, 1967) e che portava alle (1.10)-(1.11). Dunque, in analogia alle (1.10) ed (1.11), l'equazione di continuità per la j -esima delle M_s specie particellari presenti nel volume di controllo diventa

$$\frac{\partial(\phi_j \rho_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_j \rho_j \mathbf{U}_j) = 0, \quad (1.27)$$

mentre l'equazione per la quantità di moto si può scrivere nella forma

$$\frac{\partial(\phi_j \rho_j \mathbf{U}_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_j \rho_j \mathbf{U}_j \mathbf{U}_j) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j + \frac{\mathbf{W}_j}{\psi} + \sum_{k=1, k \neq j}^{M_s} \frac{\mathbf{F}_{c,j-k}}{\psi} + \phi_j \rho_j \mathbf{g}. \quad (1.28)$$

Nelle due equazioni precedenti con ρ_j e ϕ_j si sono rispettivamente indicate la densità e la frazione volumetrica assoluta della j -esima specie; quest'ultima grandezza discende da altre due, ovvero dalla frazione volumetrica del solido $\phi = 1 - \varepsilon$ e dalla frazione volumetrica relativa della j -esima specie x_j , essendo valida la relazione $\phi_j = x_j \cdot \phi$. Altre grandezze introdotte nella (1.28) sono il tensore degli sforzi per la fase particellare legata alla j -esima specie $\tilde{\mathbf{S}}_j$ e le forze di contatto $\mathbf{F}_{c,j-k}$ che quest'ultima specie esercita su ogni k -esima delle altre presenti.

Il metodo TFM prevede, però, la definizione e l'uso di grandezze difficilmente misurabili o modellabili e di dubbia valenza fisica, come, ad esempio, la pressione o la viscosità solide. Questo colloca spesso il metodo TFM alla fine di un approccio multilivello, che passi prima per altri metodi di indagine numerica basati su approssimazioni meno forti di quella che vede la fase solida assimilata ad un mezzo continuo. I dati tratti da questi metodi intermedi saranno utilizzati per la valutazione di grandezze come la pressione e la viscosità solide che si citavano in precedenza.

Sforzi nella ricerca di definizioni valide per la pressione solida e le viscosità solide di shear e di bulk sono stati effettuati in letteratura tra gli altri da Tsuo e Gidaspow (1990), Kuipers et al. (1992) ed Anderson et al. (1995): in questi modelli più datati la viscosità è definita in maniera empirica, così come da esperimenti è definita la sua dipendenza dalla pressione solida e dalla frazione volumetrica assoluta. Una teoria più consolidata permette di esprimere le grandezze citate in forma chiusa attraverso correlazioni analitiche: questo tipo di approccio basato sulla teoria cinetica del flusso granulare (KTGF) vede tra i pionieri Ding e Gidaspow (1990).

1.6.2 Solido Lagrangiano in un sistema mono- e multifase

A parte i metodi legati alla dinamica molecolare, sono quelli RDPM (spesso legati all'LBM per la fase fluida) ed il DEM-CFD (Hoomans et al. 1996, Xu e Yu 1997, Di Renzo e Di Maio 2007) a fare uso di un approccio Lagrangiano per la fase solida. Il concetto base è quello di esprimere un bilancio di forze sulla singola particella: nel caso dell'RDPM l'applicazione di questo principio della dinamica permette, previa valutazione intorno alle superfici delle particelle (dislocate fra i nodi della griglia) della variazione della quantità di moto, una descrizione deterministica del moto particellare; per ciò che concerne il DEM, in cui la definizione di "elementi distinti" è riferita proprio alle particelle, il bilancio di forze permette non solo di determinare la traiettoria delle particelle, ma anche di valutare il termine di accoppiamento S_d della (1.25), frutto della sommatoria della risultante delle forze agenti su ognuna delle sferette solide. L'approccio "lagrangiano" per entrambi i metodi si traduce nell'immaginare delle sorgenti puntiformi di forze distribuite nel mezzo fluido: nel caso del DEM tali entità puntiformi sono proprio le particelle, nel caso dell'LBM sono i nodi che descrivono la superficie particellare.

Riassumendo la fase solida è immaginata come discreta, e l' i -esima particella viene seguita in maniera distinta. L'integrazione delle equazioni di bilancio meccanico di

forze per il solido granulare, applicazioni dirette della legge di Newton, disegna la traiettoria ed il comportamento di ogni singolo elemento solido. L'argomento sarà trattato in maniera più approfondita nel prossimo capitolo, essendo il DEM-CFD lo strumento di indagine microscopica di cui ci si è dotati in questo lavoro, ma si propone comunque la forma generale che assume l'equazione alla traslazione per la i -esima delle Mp particelle presenti nel volume di controllo CFD:

$$m_i \frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \sum_{k=1, k \neq i}^{Mp} \mathbf{F}_{c,i-k} + \mathbf{F}_{d,i} + \mathbf{F}_{b,i} + \mathbf{F}_{g,i} + \dots \quad (1.29)$$

Nell'equazione (1.29) con $\mathbf{F}_{c,i-k}$ si è indicata l'eventuale forza di contatto tra la particella i ed un k -esimo ostacolo, potenzialmente rappresentato dalle altre particelle presenti, dalle pareti della colonna o da eventuali ostacoli interni. Con i pedici d , b e g si sono indicate rispettivamente la forza di drag, quella di galleggiamento e la forza peso agenti sulla particella. Alla (1.29) si affianca un'analogia equazione che esprime il bilancio alla rotazione. Ogni singolo contributo di forze che entra nella (1.29) va esplicitato e modellato: nei paragrafi che seguono tali forze sono descritte nel dettaglio e si elencano le possibilità di modellazione.

- **Forza di drag e galleggiamento**

A prescindere che si scelga il metodo TFM o DEM-CFD, per l'analisi della fase solida, come si evince dalle (1.28) e (1.29), è necessario definire un modello per il calcolo della forza di drag agente su ogni particella, o analogamente della forza complessiva, che inglobi anche il galleggiamento, ciò che rappresenta proprio l'obiettivo finale di questo lavoro. L'entità della forza di drag è direttamente legata alla quantità di moto scambiata tra le fasi e dipende tra l'altro dalla differenza di velocità tra fluido e solido (slip velocity), così come dal grado di vuoto che il solido particellare offre al passaggio del fluido, nonché dalla distribuzione delle dimensioni e della composizione delle specie solide.

Sulla definizione di “forza di drag”, come indicato nella review di Di Felice (1995), spesso in letteratura si è fatta confusione, in quanto alcuni ricercatori (Hasimoto 1959, Clift et al. 1978, Sangani e Acrivos 1982, Hill et al. 2001a e 2001b) applicano l’appellativo di forza di drag a quella che qui si è definita come “forza netta” \mathbf{N} . Altri autori (Foscolo et al. 1983, van der Hoef et al. 2005) in letteratura convergono nel definire la grandezza \mathbf{F}_d come forza di drag, cui in questo lavoro si è aggiunto l’appellativo di “puro”. Per meglio comprendere le differenti definizioni Di Felice (1995) riporta un esempio chiarificatore delle diverse posizioni: si immagini di operare un bilancio di forze in uno strato di letto solido, con particelle monodisperse di volume V e densità ρ_s , fluidizzato imponendo nella direzione verticale y (individuata dal versore \mathbf{i}_y orientato verso l’alto) un gradiente dissipativo di pressione da cui scaturisca conseguentemente una forza pari a $-V(\partial p/\partial y)\cdot\mathbf{i}_y$. Se sul sistema agisce la forza di gravità mediante l’accelerazione $-g\cdot\mathbf{i}_y$, allora è possibile esprimere il bilancio di forze proiettato in direzione y :

$$\rho_s V g = \underbrace{\overbrace{\widehat{\mathbf{F}}_d}^{\text{drag Foscolo}} - V \frac{\partial p}{\partial z}}_{\text{drag Clift}} + \rho_f V g . \quad (1.30)$$

La (1.30) mette in rilievo come la forza totale agente possa essere scissa in un contributo di drag ed in uno di galleggiamento, variamente definiti in letteratura. Poiché per la singola particella vale $W = \rho_s V g$, la (1.30) in termini vettoriali diventa:

$$\mathbf{W} = \underbrace{\overbrace{\widehat{\mathbf{F}}_d}^{\text{drag Foscolo}} - V \nabla p}_{\text{drag Clift}} - \rho_f V \mathbf{g} = \mathbf{N} - \rho_f V \mathbf{g} , \quad (1.31)$$

che conferma le relazioni già introdotte con la (1.24) e che la differenza di notazioni può essere ridotta alle quantità definite in questo lavoro come forza netta e di puro drag.

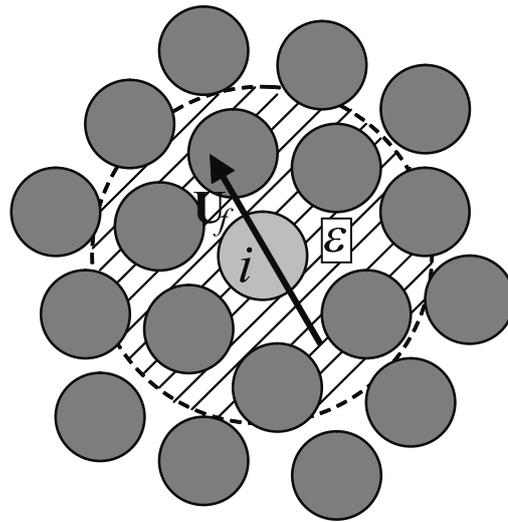


Fig. 1-III: Sistema monodisperso ad U_f ed ε uniformi e costanti.

Nel suo lavoro Jackson (2000) introduce una serie di esempi per comprendere le differenze fra le varie definizioni analitiche della forza di galleggiamento Galileiana. L'esempio forse più chiarificatore, fra quelli riportati, rappresenta anche un'inequivocabile definizione della quantità che si è indicata come forza di puro drag: si tratta del caso semplice in cui un fluido attraversa un letto particellare monodisperso (Mp particelle di pari diametro D e volume V), con velocità e grado di vuoto costanti nel tempo ed uniformi nello spazio (figura 1-III). Applicando la (1.25) in combinazione con la (1.13) si ottiene:

$$0 = -\varepsilon \nabla p - \frac{Mp \mathbf{F}_d}{\psi} = -\varepsilon \nabla p - \frac{(1-\varepsilon) \mathbf{F}_d}{V}, \quad (1.32)$$

da cui

$$-\nabla p = \frac{(1-\varepsilon) \mathbf{F}_d}{\varepsilon V}. \quad (1.33)$$

Sostituendo la (1.33) nella (1.24) otteniamo la relazione che intercorre in questo caso particolare tra la forza netta e quella di drag,

$$\mathbf{N} = \mathbf{F}_d + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \mathbf{F}_d = \frac{\mathbf{F}_d}{\varepsilon}, \quad (1.34)$$

ovvero si distinguono solo per il valore del grado di vuoto. Si osserverà nel terzo capitolo come questo risultato sia ancora valido qualora si considerino in un sistema polidisperso quantità medie di forza di drag e netta, nonché di diametro particellare. Lo stesso non si potrà affermare se ci si dovesse riferire alla singola specie solida.

È bene sottolineare il risultato fornito dalla (1.34), poiché dà una misura dell'errore che si potrebbe commettere, anche solo nel caso di sistema monodisperso, qualora si confondessero le definizioni di puro drag e forza netta. Come lo stesso Jackson (2000) dimostra in un altro esempio chiarificatore, le due quantità coincidono qualora ci si ritrova nelle classiche condizioni idrostatiche, di particella e fluido in quiete od in moto relativo nullo. Un altro esempio in cui le due forze coincidono è quello teorico di moto intorno una singola particella (o analogo problema di particella in caduta in un fluido). Infatti, a sufficiente distanza dal corpo immerso, vale che il gradiente di pressione totale sia dato dal solo contributo idrostatico per cui:

$$\begin{cases} \mathbf{W} = \mathbf{F}_d - V\nabla P = \mathbf{N} - \rho_f V \mathbf{g} \\ V\nabla P = \rho_f V \mathbf{g} \end{cases} \Rightarrow \mathbf{F}_d = \mathbf{N}. \quad (1.35)$$

Si ritiene utile mostrare come le quantità vettoriali precedentemente illustrate assumano un segno concorde a quello che l'esperienza suggerisce quando si analizzi un caso noto alla letteratura dell'ingegneria chimica. Nel caso della fluidizzazione di un sistema monodistribuito a velocità e grado di vuoto costanti ed uniformi, con un sistema di riferimento che vede l'asse y partire dal fondo della colonna e puntare verso la

sommità, trascurando il contributo della divergenza del tensore deviatorico degli sforzi in uno strato di letto spessore ∂y , la proiezione del bilancio di forze sull'asse y fornisce:

$$-\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{F_d}{V}, \quad (1.36)$$

perfettamente concorde con la (1.33), ma anche con l'evidenza sperimentale, per cui la caduta di pressione irrecuperabile (l'opposto della variazione lungo y) è direttamente proporzionale all'attrito dissipato dal fluido che attraversa le particelle. Vale poi

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial y}\right) = \left(-\frac{\partial P}{\partial y}\right) - \rho_f g, \quad (1.37)$$

analoga alla (1.23) che evidenzia come per calcolare il contributo dissipativo alla perdita di carico assoluta vada detratto il gradiente di pressione idrostatica lungo l'asse verticale y .

Muovendo da queste osservazioni, come si approfondirà nel prossimo capitolo, per decenni il calcolo del drag si è fondato sulle equazioni di Ergun (1952)

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial y}\right) = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu u}{D^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_f u^2}{D}, \quad (1.38)$$

e da Wen e Yu (1966)

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial y}\right) = 0.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_f u^2}{D} C_d(Re) \cdot \varepsilon^{-0.65}, \quad (1.39)$$

rispettivamente per basso ($\varepsilon \leq 0.8$) ed alto ($\varepsilon > 0.8$) grado di vuoto.

Queste correlazioni, basate su forti approssimazioni e ricavate semi-empiricamente per sistemi monodispersi, perdono notevolmente in accuratezza soprattutto quando utilizzate in sistemi polidispersi. Nei prossimi capitoli si tenterà di elaborare un nuovo modello con l'obiettivo di superare tali limiti, analizzando gli altri presenti in letteratura

che permettano il calcolo della forza di interazione a partire da variabili misurabili del sistema, come la velocità superficiale e di scorrimento relativo \mathbf{u} , il grado di vuoto ε ed il grado di polidispersione del sistema.

Per il momento è utile soffermarsi sulle differenze formali ed analitiche che sopraggiungono qualora nel sistema i diametri particellari presentino polidispersione. In particolare si analizza ciò che accade quando siano presenti M_s categorie di particelle a diverso diametro. Per valutare la forza di puro drag agente su una particella i appartenente alla specie j , alcuni tra i modelli più utilizzati in letteratura, di cui un'attenta rassegna sarà fornita nel prossimo capitolo, assumono, particolarizzandosi nelle funzionalità a seconda dell'approccio e del caso in esame, la forma:

$$\mathbf{F}_{d,j} = \mathbf{F}_{d,j}(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m), \quad (1.40)$$

analogamente esprimibile in termini di forza netta (\mathbf{N}_i) o complessiva (\mathbf{W}_i) ed in cui

$$\overline{Re} = \frac{\rho_f u \overline{D}}{\mu}, \quad (1.41)$$

$$y_j = \frac{D_{s,j}}{D}, \quad (1.42)$$

$$\overline{D} = \left[\sum_{k=1}^{M_s} (x_k / D_{s,k}) \right]^{-1}, \quad (1.43)$$

$$y_m = \sum_{k=1}^{M_s} (x_k \cdot y_k). \quad (1.44)$$

Con \overline{Re} , $D_{s,j}$ e \overline{D} si sono indicati rispettivamente il numero di Reynolds medio, il diametro della particella i appartenente alla j -esima specie solida e quello medio di Sauter. La polidispersione comporta l'introduzione, dunque, di grandezze misurabili rappresentative dell'intera massa particellare. Come diametro medio rappresentativo

dell'insieme delle particelle considerate si è scelto di usare il diametro di Sauter in quanto sperimentalmente (Gibilaro et al. 1986) esso sembra essere il migliore in tal senso, come sarà più ampiamente discusso nel terzo e quarto capitolo, dove si tenterà di fornire anche una motivazione analitica alla scelta.

In quanto al ruolo che riveste il parametro y_j (indice di polidispersione specifico per la specie j), esso fornisce una misura della “distanza frazionaria” tra il diametro della specie cui appartiene la singola particella e quello medio del volume di controllo scelto (van der Hoef et al. 2005) e descrive, congiuntamente al valore di y_m (indice di polidispersione media, introdotto nel nuovo modello proposto in questo lavoro), il grado di polidispersione del sistema in analisi. Si noti che y_m fornisce una misura media e complessiva della distribuzione delle specie nel sistema: è, infatti, possibile che due sistemi a differente distribuzione generino su una singola particella il medesimo valore y_j ; sui due sistemi agirà, però, un differente valore di y_m . Questa differenziazione si manifesta solo nel caso in cui siano presenti più di due specie solide, in caso contrario sarà dimostrato come sia sufficiente il solo indice di polidispersione specifico a descrivere il sistema in esame.

Tra i vari modelli di letteratura che saranno presi in considerazione, è consuetudine prendere come riferimento quello frutto di soluzione analitica nel caso semplice di moto di “creeping flow”, ovvero di flusso laminare di un fluido a velocità \mathbf{u} , intorno ad una singola particella sferica di diametro D . Dall'integrazione del tensore degli sforzi sulla superficie particellare in questo caso particolare si ricava una forza di drag di valore pari a

$$\mathbf{F}_{Stokes} = 3\pi\mu D\mathbf{u}, \quad (1.45)$$

nota come equazione di Stokes. Prendendone come riferimento il modulo, si definiscono le forze adimensionali di puro drag f_j , netta n_j e complessiva w_j agenti su una particella della specie j e di diametro pari a $D_{s,j}$:

$$f_j = \frac{|\mathbf{F}_{d,j}|}{|\mathbf{F}_{Stokes,j}|} = \frac{F_{d,j}}{3\pi\mu D_{s,j}u} = f_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m), \quad (1.46)$$

$$n_j = \frac{|\mathbf{N}_j|}{|\mathbf{F}_{Stokes,j}|} = \frac{N_j}{3\pi\mu D_{s,j}u} = n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m), \quad (1.47)$$

$$w_j = \frac{|\mathbf{W}_j|}{|\mathbf{F}_{Stokes,j}|} = \frac{W_j}{3\pi\mu D_{s,j}u} = w_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m). \quad (1.48)$$

Alcune considerazioni, alla luce delle nuove definizioni introdotte, possono risultare interessanti. Ad esempio, nelle condizioni restrittive di sistema omogeneo, costante e monodisperso precedentemente illustrate, dalle (1.33), (1.46) e (1.26) si può calcolare il coefficiente di interscambio di quantità di moto fra la fase fluida e quella solida in funzione della forza adimensionale di puro drag:

$$\beta = 18\mu\varepsilon(1-\varepsilon)\frac{f}{D^2}. \quad (1.49)$$

Si può ridefinire la (1.34) ottenendo:

$$n = \frac{f}{\varepsilon}. \quad (1.50)$$

- ***Altre forze di natura fluidodinamica***

I puntini sospensivi presenti nella (1.29) indicano la possibilità di considerare altre tipologie di forze agenti sulla singola particella: si tratta di forze legate alla natura del solido od a quelle del fluido. In questo paragrafo si prenderà in considerazione quest'ultima tipologia, con particolare attenzione a fenomeni legati ad un transitorio.

Le forze sinora descritte sono state definite in corrispondenza di un moto stazionario, in assenza di moto accelerato, ovvero trascurando nei dintorni della particella variazioni della velocità del fluido, di quella delle particelle stesse o di quella superficiale.

Pionieri nello studio dell'influenza di un transitorio furono Boussinesq (1885), Basset (1888) e Oseen (1927), il cui modello viene spesso indicato con l'acronimo di BBO: si trattava di uno studio, con soluzione analitica, del moto transitorio rettilineo, in regime di creeping flow, di una singola sfera in un fluido stagnante, viscoso ed incompressibile. Maxey e Riley (1983) hanno successivamente rimosso l'ipotesi di moto uniforme ottenendo:

$$m \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = -3\pi\mu D \mathbf{u} - \frac{V\rho_f}{2} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + V\rho_f \frac{D\mathbf{U}_f}{Dt} + \left. -\frac{3}{2} D^2 (\pi\rho_f\mu)^{0.5} \int_0^t \left(\frac{d\mathbf{u}}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \right) \right. + (\rho - \rho_f) \mathbf{g} V, \quad (1.51)$$

in cui con ρ ed m si è indicato rispettivamente la densità e la massa della singola particella di diametro D presa in considerazione; τ rappresenta un tempo caratteristico. Si nota come il primo termine dopo l'uguale rappresenti l'opposto della forza di drag nel caso di creeping flow derivata da Stokes. Il secondo membro prende il nome di massa aggiunta o virtuale, in cui è preponderante il termine della densità, per cui diventa significativo soprattutto per i liquidi compendiare questo contributo. Il terzo termine compendia la non uniformità del flusso mentre il quarto rappresenta l'integrale di Basset della storia pregressa: anche questo termine, legato a viscosità e densità del fluido, diventa particolarmente significativo per i liquidi. Si registrano tentativi in letteratura finalizzati ad estendere la validità della (1.51) anche ad altri regime di moto: ad esempio Berlemont et al. (1990) intervennero attraverso un coefficiente di drag, dipendente dal numero di Reynolds, proprio sul primo termine di Stokes prima citato, al fine di renderlo adatto ad altri regimi di moto, lasciando invariato il resto dell'equazione. Oltre al problema del regime di moto (Mei et al. 1991) i problemi tuttora aperti sono legati alla presenza di un insieme di particelle piuttosto che una isolata (Cate e Sundaresan 2006), o al caso di sistemi polidispersi. Un interessante e

recente lavoro è quello di Mabrouk et al. (2007), in cui, attraverso un metodo basato sulla radioattività, è stato ottenuto il tracciamento delle particelle, valutando l'effetto delle forze di transitorio e ricavando una relazione per la loro dipendenza da Re .

Oltre alle forze già citate, legate ad un transitorio, ne esistono di altre il cui contributo bisognerebbe tenere in dovuta considerazione.

Clift et al. (1978) evidenziano come una particella immersa in un flusso a taglio in rotazione ortogonale alla direzione del fluido, generi non solo una forza di drag, ma anche un'altra forza ad essa perpendicolare che prende il nome di "forza di lift". Il vettore della forza di lift è generato dal prodotto vettoriale tra la velocità angolare della particella e quella lineare in direzione del drag. Lo stesso fenomeno si verifica quando, ad esempio, una particella si muove vicino ad una parete solida (cioè in un ambiente con forte gradiente di velocità): si può verificare una forza di lift che cerca di spostare la particella, avvicinandola od allontanandola dalla parete stessa. In ogni caso la forza generata è perpendicolare ad \mathbf{u} . Ovviamente anche eventuali bolle sono soggette a questo tipo di azione meccanica. Molteplici sono i lavori di letteratura in cui si fa uso di simulazioni che compendino anche questa tipologia di forze (Giusti et al. 2005, Ran et al. 2006).

La forza di "lubrificazione" scaturisce dalla pressione idrodinamica negli interstizi fluidi "spremuti" al di fuori dell'intercapedine tra due superfici solide che si avvicinano l'un l'altra. Il valore di questa forza, essendo legato a proprietà viscosive del fluido, è elevato nei sistemi liquido-solido, ma non può essere trascurato nei sistemi gas-solido laddove si abbiano particelle leggere e piccole (Zhang et al. 2004). Yin e Sundaresan (2009a) descrivono questa forza come indiretto effetto del moto relativo tra le particelle.

- **Forze di contatto**

Nell'equazione (1.29), $\mathbf{F}_{c,i-k}$ indica la forza che scaturisce dal contatto tra la particella i ed un k -esimo ostacolo fra quelli presenti nel sistema, ovvero un'altra particella o una

parete. Dei modelli per il calcolo di questa tipologia di forze a partire da una deformazione indotta, ci si occuperà nel prossimo capitolo; a questo punto della trattazione si pone, invece, l'accento sui due principali possibili approcci al problema collisionale: quello a "sfera rigida" e quello a "sfera deformabile". Entrambi i metodi muovono da considerazioni di dinamica molecolare introdotte da Alder e Wainwright negli anni '50 e '60, poi ripresi ed adattati a sistemi granulari.

Il primo approccio viene descritto da Hoomans et al. (1996): si assume ogni urto binario ed istantaneo, nonché moto libero particellare fra un urto ed un altro. Sono trascurate le forze di natura non impulsiva e, quindi, per determinare la correlazione tra le velocità iniziali e finali (sia lineari che angolari) viene utilizzato il teorema dell'impulso. Sarà possibile ottenere la componente normale della forza di contatto mediante il coefficiente di restituzione, e quella tangenziale, per la quale si distinguono due casi: se l'angolo di collisione è maggiore di un certo valore critico, si considera una condizione di scivolamento; in pratica le particelle slittano relativamente l'un l'altra fino alla fine dell'urto. Se invece si incontrano con un angolo di valore inferiore a quello critico si suppone esse aderiscano completamente durante l'urto (puro rotolamento); di conseguenza si utilizza la legge di Coulomb sull'attrito e si considera che le particelle si abbandonino dopo l'urto senza velocità relativa di slittamento.

La tipologia di approccio a "sfera deformabile" (usata ad esempio in simulazioni DEM da Di Renzo e Di Maio 2005), rende la particella deformabile solo meccanicamente e non dal punto di vista della forma, che si suppone immutata dopo l'urto. Le forze sono calcolate a partire dalla deformazione consecutiva e perdurante l'impatto. Queste assunzioni sono rese possibili solo grazie al concetto di "overlap", ovvero di sovrapposizione concessa nel punto di contatto fra le particelle supposte sferiche. Questo modello presenta il vantaggio, rispetto al primo, di una maggior robustezza, dovuta al fatto che si possono considerare più collisioni contemporanee senza distinzione tra tempo di moto libero e tempo di impatto. Lo svantaggio è che

bisogna porsi il problema accessorio del passo da utilizzare nell'integrazione nel tempo: esso dovrà essere necessariamente una frazione del tempo complessivamente necessario affinché l'urto si completi, se si vuole che l'urto stesso sia descritto nella sua dinamica e che l'overlap non degeneri alla totalità del diametro particellare. L'uso dell'uno o dell'altro modello è funzione del tipo di sistema che si intende analizzare.

- ***Forze che determinano coesività interparticellare***

Si tratta di una serie di possibili contributi nella (1.29) strettamente legati alle caratteristiche ed alla natura del solido, come la sua coesività, le proprietà superficiali, igroscopiche, magnetiche ed elettriche. La difficoltà di una loro implementazione nei codici di diversa natura risiede proprio nel fatto che non si tratta di forze che per svilupparsi abbiano necessità di un effettivo contatto, ma che sono legate ad un campo e quindi ad un potenziale: agiscono anche quando tra le particelle intercorra una distanza superiore alla somma dei loro raggi. Tale difficoltà è sicuramente superiore qualora si voglia implementare questo tipo di forze in un approccio di tipo euleriano per il solido (Weber e Hrenya 2006). I metodi Euleriani, come detto, si basano infatti su una teoria cinetica: questa richiede che le interazioni tra le particelle siano istantanee e binarie, mentre le forze coesive sono funzione della distanza che le separa e si possono perpetuare nel perdurare del contatto. Uno dei tentativi più interessanti per superare il problema è quello proposto da McKeen e Pugsley (2003), i quali suggeriscono di inglobare, mediante modello cinetico, la presenza di forze coesive nella correlazione per il calcolo della forza di drag, considerando un diametro particellare incrementato. Di seguito, oltre ad una descrizione delle forze in gioco, saranno citati i numerosi tentativi di letteratura finalizzati ad implementarle in approcci di tipo Lagrangiano per la fase solida.

Quando due particelle sono poste ad una distanza critica, anche superiore alla somma dei loro raggi equivalenti, sono sottoposte a forza di natura capillare, elettrostatica e di van der Waals (Castellanos 2005).

Le forze capillari sono causate da umidità condensata sulla superficie della particella (si parla anche di ponti liquidi), di conseguenza possono, in caso di particolato secco, ritenersi trascurabili rispetto alle altre due citate in precedenza. Ne consegue che, in alcune circostanze sperimentali particolari, in cui si voglia che queste forze siano ridotte al minimo, devono essere adottate delle precauzioni per evitare l'umidità ambientale: è possibile effettuare un controllo sull'entità della forza attraverso la quantità di liquido libero, influenzando tensione superficiale e viscosità (McLaughlin e Rhodes 2001). Le forze dovute a capillarità sono dissipative (al contrario di quelle di van der Waals) ed esibiscono una componente dinamica ed una statica: per una trattazione analitica e modellistica dei due contributi si rimanda alla review di Seville et al (2000), mentre dal punto di vista del DEM si citano Mikami e al. (1998), i quali hanno condotto simulazioni incorporando forze scaturite dalla formazione di ponti liquidi.

Quando particelle solide entrano in contatto scambiano carica elettrica. Le forze elettrostatiche dipendono dalla carica acquisita dalle particelle. Ad esempio, una polvere elettricamente neutra in media possiede una distribuzione delle cariche dei due segni, con particelle singolarmente cariche positivamente o negativamente. Dal momento che le particelle tendono a riorientarsi tra loro al fine di minimizzare l'energia elettrostatica esse daranno vita ad un'interazione di tipo elettrostatico. Necessita valutare la distribuzione delle cariche per ottenere una stima di questa forza. In generale vale che, per polveri neutre fini a secco, la forza elettrostatica è trascurabile rispetto a quella di van der Waals (Gady et al. 2005).

Le forze di Van Der Waals sono forze di campo che interessano particolarmente le polveri del gruppo C nella classificazione di Geldart (1973), mentre risultano generalmente poco significative per diametri particellari superiori ai 100 μm . Le forze

di van der Waals che coinvolgono due particelle scaturiscono dalle loro molecole costituenti, le quali manifestano generalmente attrazione solo se neutre. L'origine di un tale comportamento va ricercata nella formazione di dipoli dovuti alla disposizione istantanea degli elettroni attorno ai protoni del nucleo degli atomi. I dipoli, a loro volta, originano un campo elettrico nella molecola: due molecole sono soggette a causa di tutto ciò ad una forza di tipo attrattivo-repulsivo. Si evince che tale forza attinge alla quantomeccanica ed all'elettrodinamica.

Castellanos (2005) suggerisce un modello per il calcolo della forza di van der Waals, partendo dal potenziale di Lennard–Jones \mathcal{E} tra due molecole, separate da una distanza r :

$$\mathcal{E} = -\frac{c}{r^6} + \frac{d}{r^{12}}, \quad (1.52)$$

in cui c e d sono rispettivamente la costante di London e quella di repulsione. È possibile, qualora si escludano effetti di ritardo nella propagazione dei dipoli, integrare la (1.52) su due semispazi, in dipendenza della loro distanza r' . Si ottiene un potenziale che, derivato in r' , fornisce la forza di van der Waals tra due particelle appartenenti ai semispazi:

$$F_{VDW}(r') = -\frac{A_1}{6 \cdot (r')^3} + \frac{8A_2}{(r')^9}. \quad (1.53)$$

Per una trattazione più dettagliata dei diversi casi in cui si particolarizza il modello e per una spiegazione dei parametri A_1 e A_2 si rimanda al lavoro di Castellanos (2005), mentre si cita un'altra interessante modellazione, corredata da simulazione, eseguita da Lin et al. (2000). Altre simulazioni disponibili, tra le altre, in letteratura, che compendino le forze coesive sono: Rhodes et al. (2001a e 2001b), Xu et al. (2002) e Ye et al. (2004).

Le forze di sinterizzazione sono di tipo diverso rispetto a quelle discusse in precedenza. La sinterizzazione è un processo dipendente dal tempo, ed induce migrazione di materia fino al punto di contatto, ciò che porta alla formazione di un cosiddetto “collo”. Tale collo di adesione particellare aumenta con la temperatura e resiste al movimento del solido nel fluido e può condurre a fenomeni di defluidizzazione (Seville et al 2000). Simulazioni numeriche che facciano uso di modelli per la sinterizzazione, sono state condotte, tra gli altri da Kuwagi et al. (2000).

1.7 Approccio multilivello

Come visto, il DEM è un metodo appartenente alla classe degli UDPM ed è lo strumento di analisi numerica di cui ci si è dotati per perseguire gli obiettivi preposti; esso ha una sua validità indipendente ed appurata in letteratura come visto in precedenza e potrebbe già essere punto di approdo finale di un’analisi multiscala, una volta noto un modello per il calcolo del drag. Tuttavia, come illustrato in figura 1-IV si può approdare sino al TFM, qualora si voglia procedere ad una scala ancora superiore che consenta anche un notevole risparmio in onere di calcolo. Al TFM dovranno essere consegnati i valori di pressione e viscosità solida valutati attraverso il DEM e, comunque, un modello per il calcolo del drag proveniente dalla scala LBM.

In questo lavoro di tesi si è inteso il DEM-CFD come strumento di analisi più adeguato per la validazione di un modello microscopico.

1.8 Scopo della tesi

Scopo ed obiettivo di questo lavoro di tesi è quello di contribuire all’ideazione di un modello finalizzato al calcolo della forza di drag in sistemi multifase, valido per sistemi

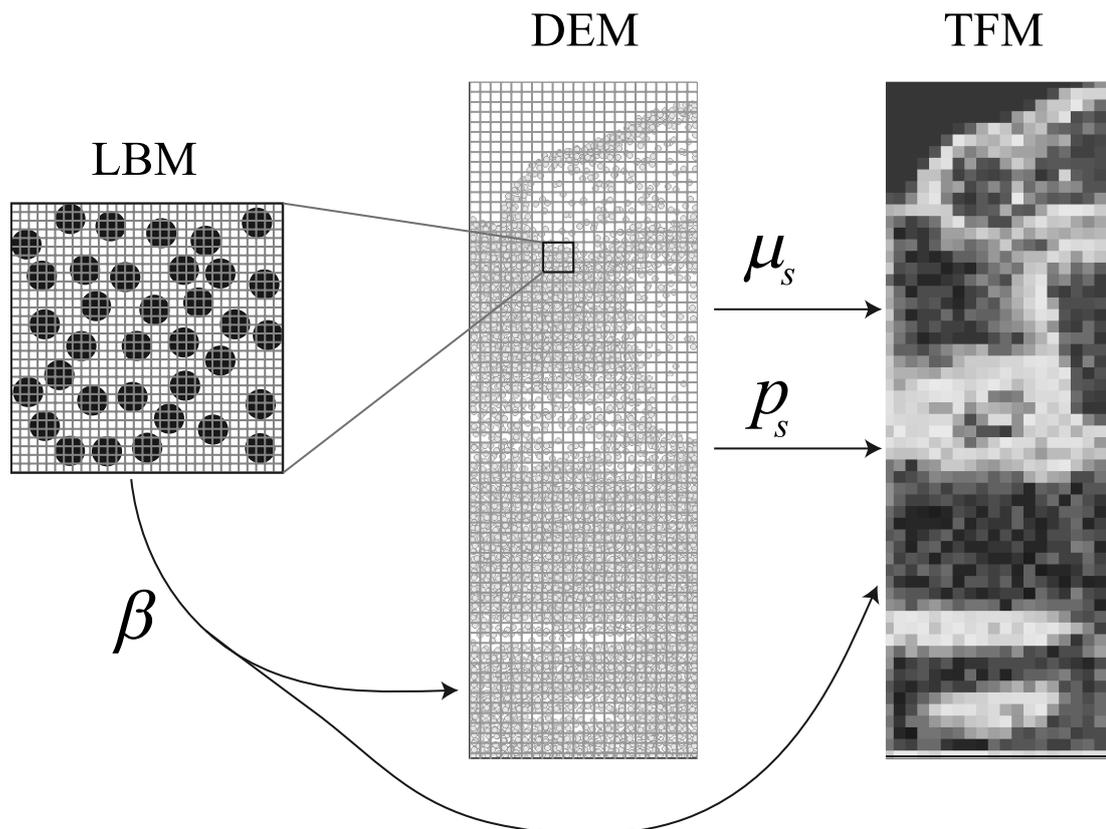


Fig. 1-IV: Analisi multiscala di sistemi multifase. La figura mostra la strategia per un approccio multiscala al problema dell'interazione fluido-solido in un sistema multifase. L'LBM permette la soluzione numerica delle condizioni al contorno della superficie particellare, consentendo l'elaborazione di un modello per il calcolo del drag. Il passo successivo è quello di utilizzare tale modello nel DEM o ad una scala ancora superiore nel TFM: quest'ultimo necessita di ulteriori informazioni provenienti dal DEM, quali pressione e viscosità solida.

mono- e polidispersi ed in un ampio range di variazione del numero di Reynolds e del grado di vuoto. Da un punto di vista computazionale tale modello potrebbe rappresentare uno strumento di calcolo che un algoritmo numerico possa richiamare ogni qual volta sia necessario valutare la forza di interazione agente su una particella solida, senza porsi troppi limiti in merito al campo di applicabilità.

L'obiettivo sarà perseguito con l'ausilio di un approccio che operi su due scale dimensionali. In un primo stadio si farà ricorso a dati di letteratura di simulazioni lattice-Boltzmann, che al variare della fluidodinamica, del grado di vuoto e della

composizione di una miscela solida forniscano il valore medio della forza di drag su una singola particella del solido granulare. Da questi dati e dalla conseguente elaborazione di un modello per il calcolo diretto della forza drag, si passerà ad una scala in cui sia possibile simulare, col metodo degli elementi distinti (DEM), sistemi sperimentali in cui proprio il drag rappresenti la causa promuovente la fenomenologia da apprezzare.

Capitolo 2

Modellazione DEM-CFD di letti fluidizzati multicomponente

Gli algoritmi di fluidodinamica computazionale sono uno strumento emergente per l'ottimizzazione di apparecchiature in cui si faccia uso di flussi multifase. In questo capitolo si illustrerà il metodo DEM-CFD che si pone nell'approccio multiscala ad un livello immediatamente superiore all'LBM: si evidenzierà infatti la necessità di un modello per la forza di drag, poiché il metodo DEM richiede di esplicitare tutte le forze agenti sulla singola particella, l'elemento discreto a cavallo del quale si viaggia con un approccio Lagrangiano e deterministico per descriverne la storia delle traiettorie. A corredo, un metodo CFD, il SIMPLE, si occupa della risoluzione della fase fluida.

Come visto nel precedente capitolo, le metodologie di approccio ad uno strumento di analisi numerica possono essere svariate. In particolare, il codice descritto in questo capitolo è stato ideato e sviluppato nelle sue peculiarità presso il laboratorio di Teoria dello Sviluppo dei Processi Chimici dell'Università della Calabria.

2.1 Metodo combinato DEM-CFD

Il metodo degli elementi discreti (DEM) fu introdotto da Cundall e Strack (1979). Gli elementi fisicamente distinti e discreti sono appunto le particelle solide, le traiettorie ed interazioni delle quali vengono calcolate singolarmente in maniera deterministica.

L'accoppiata DEM-CFD per lo studio di processi di fluidizzazione compare nelle simulazioni di Tsuji et al. (1993), di Hoomans et al. (1996) e di Xu e Yu (1997), in cui si propone una scala di investigazione particellare, per quanto concerne il solido, ed a livello di cella computazionale per la fase fluida.

L'algoritmo prevede l'imposizione di una condizione iniziale sia per la fase fluida che per quella particellare. Note che siano la posizione e le velocità delle particelle ed il campo di moto iniziale del fluido, si possono determinare tutte le forze in gioco e comporre, in funzione della seconda legge di Newton della dinamica, le loro azioni esercitate su tutti gli elementi solidi. Si integra, dunque, l'equazione differenziale di bilancio delle forze. Ne deriva la conoscenza, nell'istante di tempo successivo al primo, della posizione di tutte le particelle e di conseguenza del grado di vuoto in ogni zona del letto. Con un algoritmo iterativo di tipo CFD si procede alla risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes per la continuità e la quantità di moto della fase fluida, in forma localmente mediata, finché non vadano a convergenza, rimanendo entrambe soddisfatte. Si passa quindi ad affrontare il problema per il terzo istante di tempo e via di seguito.

Si può, dunque affermare che per quanto concerne il DEM, la scala di indagine è particellare. In figura 2-I sono evidenti i vettori delle forze che agiscono su una singola particella: la forza peso ed il drag sono direttamente applicati al suo centro di massa, mentre le forze di contatto agiscono sul punto dell'urto e sono scindibili in una componente normale ed una tangenziale. Anche queste forze sono traslate al centro di massa quando si tratta di fare un bilancio alla traslazione, ma determinano un momento ed una rotazione della particella stessa.

Il metodo CFD, affronta un livello di indagine su una scala poco più che particellare, evidenziata nella figura 2-I, analizzando stavolta un mezzo continuo, il fluido, e non più discreto come la fase granulare. Si utilizza una cella computazionale grande abbastanza da contenere un numero di particelle che renda significativo il grado di vuoto, ma piccola abbastanza da rendere il volume approssimativamente infinitesimo.

La figura 2-I mostra come al centro geometrico della cella saranno riferite tutte le grandezze scalari come pressione e densità del fluido. Le componenti delle velocità saranno, invece, calcolate nei punti medi dei quattro lati della cella (o analogamente al centro di celle sfalsate per metà rispetto a quelle originali). Questa scelta permette di evitare casi particolari di soluzione, come quella banale a scacchiera che sarebbero ammissibili qualora le velocità venissero calcolate al centro della cella computazionale. La scelta corretta del posizionamento delle variabili sulla griglia e della dimensione ottimale delle celle determina la fedeltà della simulazione.

Per la rigidità delle particelle si sceglie il “modello a sfera deformabile”. Pur essendo meccanicamente deformabile, la particella mantiene la sua forma sferica e si prende atto, tramite il concetto di “overlap” (sovrapposizione concessa nel punto di contatto), solo delle forze che la deformazione, consecutiva e perdurante l’impatto, determina. La deformazione sarà, dunque meccanica, ma non geometrica. Come conseguenza diretta, dato un intervallo di tempo necessario perché l’urto si completi, bisognerà scegliere un passo di integrazione che ne sia una frazione: tra un passo e l’altro l’urto deve avere il tempo di dipanarsi completamente (Di Renzo e Di Maio 2005).

2.2 Ipotesi base nella modellazione di un letto fluido

La 2-II-b mostra la struttura del sistema che il codice DEM-CFD deve simulare. Il codice ipotizza moto bidimensionale lungo le coordinate x ed y per la fase fluida,

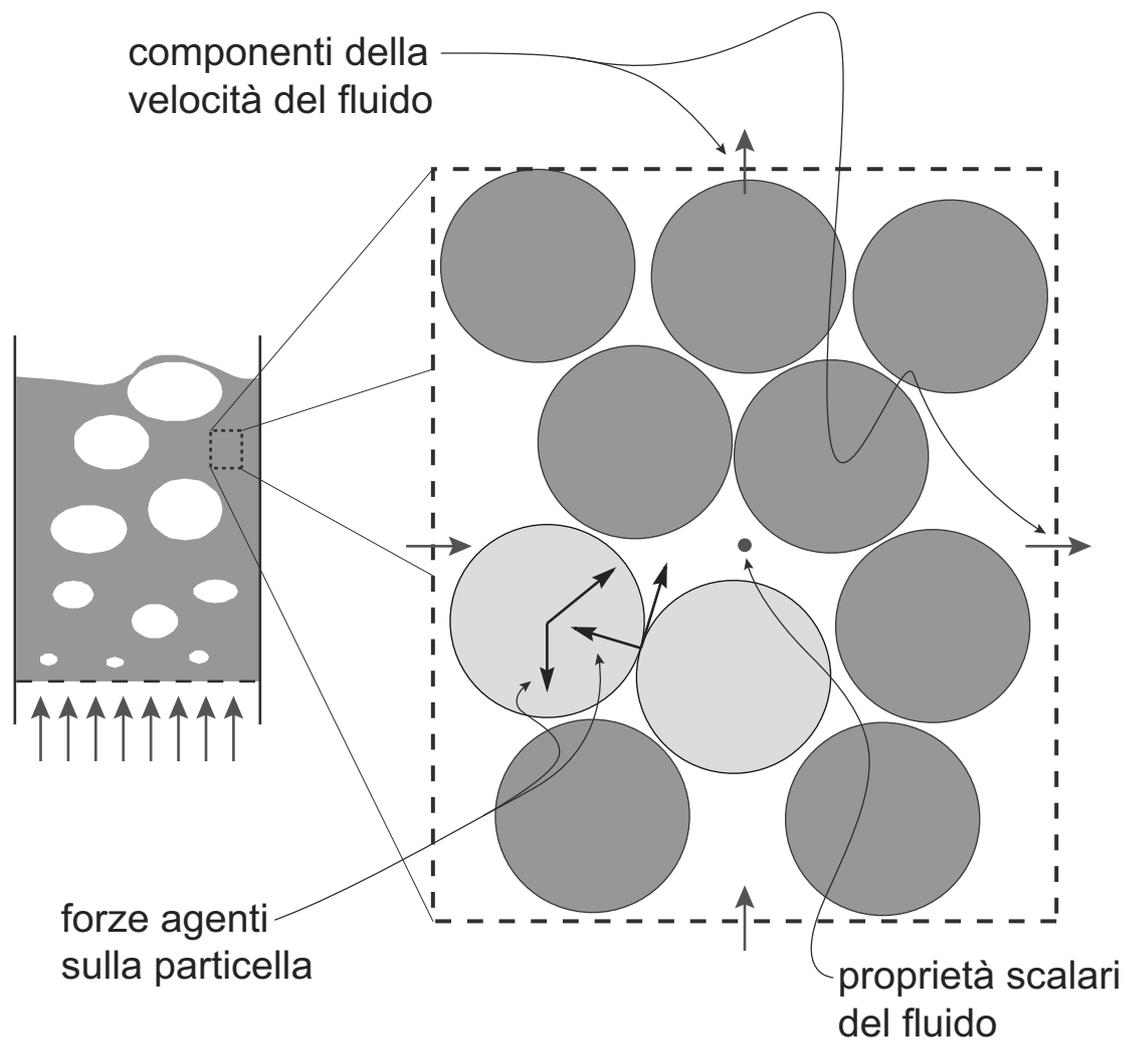


Fig. 2-I: Scala di indagine relativa ad una cella computazionale.

assumendo anche l'ipotesi di profondità (B) del sistema trascurabile rispetto ad altezza (H) e larghezza (L); si è scelto di operare con uno spessore B del letto pari almeno a due volte il diametro massimo tra quelli delle particelle presenti (figura 2-II-a).

Dalla figura 2-II-a si evince che alla fase solida particellare è stata conferita la possibilità di moto anche nella direzione "z" del sistema: questo come si vede comporta una migliore occupazione dello spazio e, di conseguenza, una valutazione più realistica del grado di vuoto (e del drag come si vedrà in seguito). Se si vuole simulare sistemi in

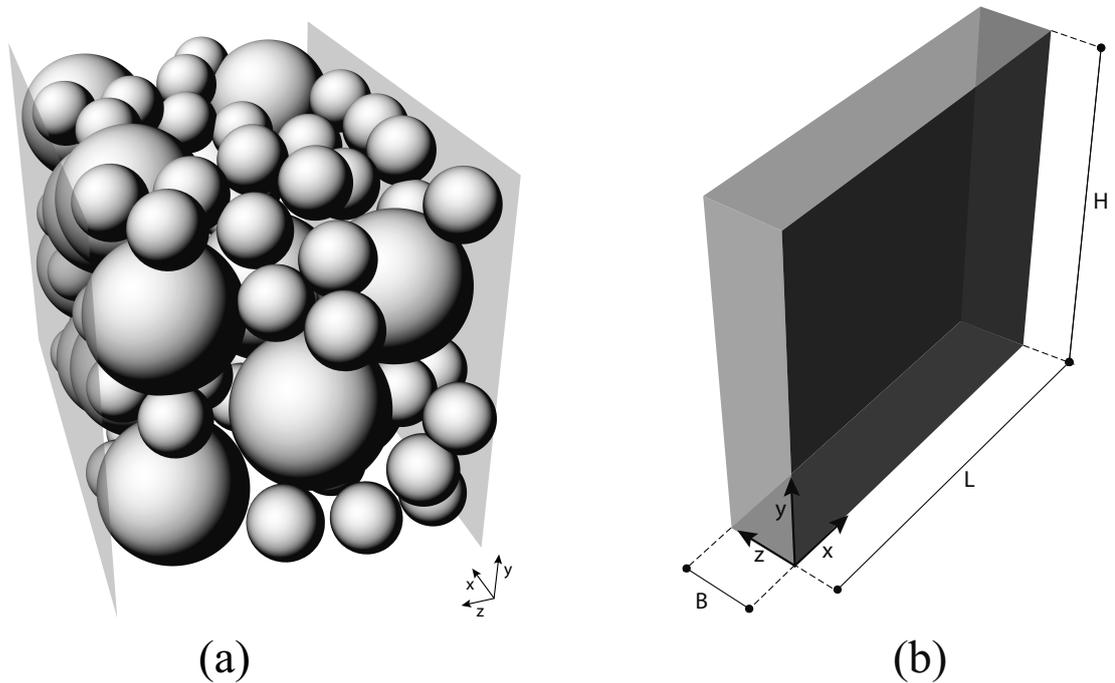


Fig. 2-II: Geometria del sistema per la simulazione di un letto fluidizzato. Profondità del letto posta pari almeno a due volte il diametro massimo particellare (a); terna levogira e dimensioni caratteristiche (b).

cui siano presenti particelle di diverso diametro, la scelta di rendere tridimensionale il moto delle particelle risulta essere obbligata: se alle particelle fosse consentito il solo moto aderente ad un piano perpendicolare all'asse z , sarebbe impossibile poi estrapolare un grado di vuoto aderente alla realtà. Questa ipotesi, più forte, di moto bidimensionale particellare è presente in una versione del codice in cui le particelle hanno diametri monodispersi, per cui il grado di vuoto effettivo si può estrapolare. Nella versione 2D del codice si può simulare la sola differenza delle densità delle specie particellari.

Altra ipotesi che conferisce maggiore fedeltà alle simulazioni è quella di considerare le pareti anteriore e posteriore del sistema come periodiche: esse sono permeabili alla sola fase solida e restituiscono una particella che le attraversi alla parete diametralmente opposta. In questo modo si supera la limitazione imposta di dimensione trascurabile

della profondità del sistema. In questo trova giustificazione l'aver scelto una profondità B del letto pari a due diametri della specie più grossolana presente: ciò impedisce che, a causa dell'ipotesi di pareti periodiche, una particella possa urtare con se stessa, o peggio ancora con un'altra particella che affacci contemporaneamente da una parete e da quella opposta.

2.3 Composizione delle forze particellari

Da quanto esposto sinora si è compreso il principio su cui si basa l'algoritmo combinato DEM-CFD. Come precedentemente anticipato, nucleo dell'analisi sarà l'integrazione della seconda legge di Newton per la dinamica. Ciò richiede la composizione dinamica di tutte le forze agenti sulla singola sferetta. Si considerano forze che coinvolgono solo l'ambiente che direttamente abbraccia la particella, la quale scambia energia e quantità di moto con le particelle che la circondano, con eventuali pareti e col fluido, ma non risente dell'azione di onde propaganti un disturbo creato da particelle in regioni distanti.

Basandosi su quanto appena discusso e sulle assunzioni fatte, è possibile scrivere l'equazione del moto di Newton che governa il moto traslazionale della i -esima particella:

$$m_i \frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \sum_{k=1, k \neq i}^{Mp+Mw} (\mathbf{F}_{c,i-k}^N + \mathbf{F}_{c,i-k}^T) + \mathbf{F}_{d,j} + \mathbf{F}_{b,j} + \mathbf{F}_{g,j} + \dots \quad (2.1)$$

Nell'equazione (2.1), \mathbf{U}_i ed m_i sono velocità e massa della i -esima particella, con l'apice "N" e "T" si sono indicate la componente normale e quella tangenziale della forza di contatto della particella i con un eventuale ostacolo k , che può essere rappresentato da un'altra delle Mp particelle totalmente presenti o da una delle Mw pareti laterali o interne disposte nel sistema. La sommatoria delle forze di contatto è

estesa al numero M_w+M_p : difatti M_w+M_p-1 è il numero massimo di urti cui la particella può incorrere; ne consegue che alcuni elementi della sommatoria potranno nulli. Col pedice “ d ”, “ b ” e “ g ” si sono, rispettivamente, indicate la forza di drag puro, quella di galleggiamento e quella di gravità agenti sulla particella i appartenente alla specie j -esima.

Come si vede sono stati aggiunti dei puntini sospensivi, per indicare altre possibili tipologie di forze applicabili alla singola particella i -esima: forze di lubrificazione, di massa virtuale dovuta ad effetti di transizione, di lift, coesive, ecc.

Nella figura 2-IV-(a), in una rappresentazione grafica del piano dell’urto, perpendicolare a quello tangente nel punto di contatto: sono state indicate le forze agenti sul centro di massa della particella e quelle di contatto; nella figura 2-IV-(b) si evidenzia, invece, come la componente tangenziale possa essere traslata perpendicolarmente a partire dal punto di contatto (teorema di Huygens-Steiner), generando un momento \mathbf{T} . La figura 2-III mostra una rappresentazione tridimensionale della composizione delle forze, in cui è possibile osservare il piano tangente nel punto di contatto e perpendicolare a quello dell’urto.

Se con $\mathbf{R}_{c,i-k}$ si indica il vettore orientato che va dal punto di contatto con l’ostacolo k fino al centro della particella i -esima interessata all’urto, con $\boldsymbol{\omega}_i$ e I_i rispettivamente la velocità angolare ed il momento d’inerzia della medesima particella, è possibile scrivere l’equazione che governa la rotazione:

$$\begin{cases} I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{k=1, k \neq i}^{M_p+M_w} \mathbf{T}_{c,i-k} = \sum_{k=1, k \neq i}^{M_p+M_w} (\mathbf{F}_{c,i-k} \times \mathbf{R}_{c,i-k}) \\ I_i = \frac{1}{10} m_i D_i^2 \end{cases} \quad (2.2)$$

Le (2.1) e (2.2) precludono alle relazioni cinematiche che, integrate, forniranno il vettore posizione \mathbf{s}_i e quello rotazione $\boldsymbol{\theta}_i$ della particella i -esima:

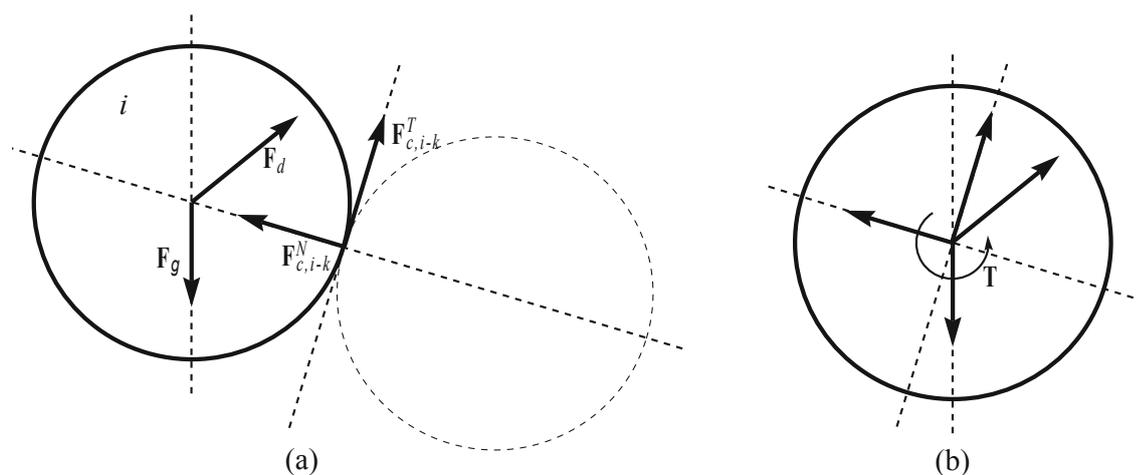


Fig. 2-IV: Forze agenti sulla particella i -esima.

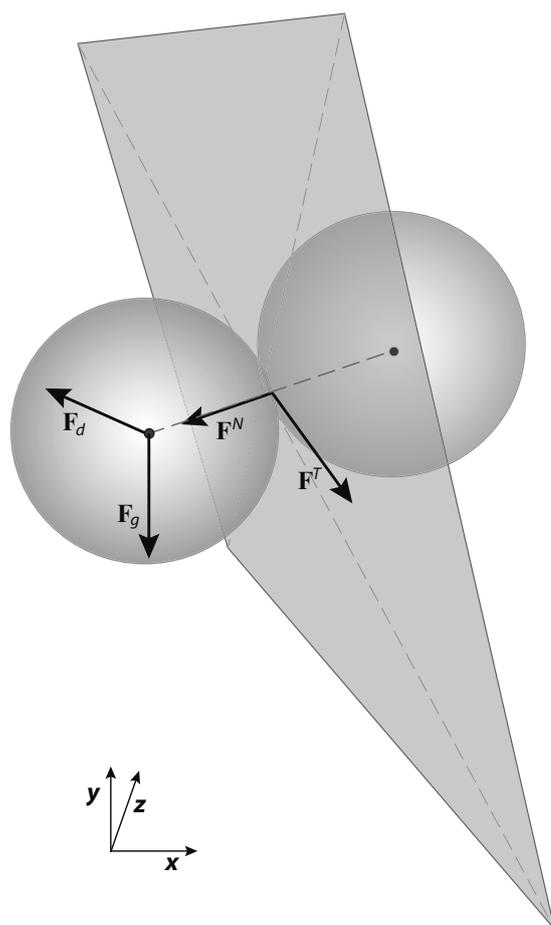


Fig. 2-III: Composizione delle forze agenti su una particella singola.

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{s}_i}{dt} = \mathbf{U}_i \\ \frac{d\boldsymbol{\theta}_i}{dt} = \boldsymbol{\omega}_i \end{cases} \quad (2.3)$$

Non rimane che inserire un modello che permetta di calcolare i singoli contributi di forza sinora evidenziati, ed in particolare quello di contatto e quello di drag.

2.4 Calcolo della deformazione e della forza di contatto

Tra i vari contributi dell'equazione (2.1), riveste particolare rilievo il termine delle forze di contatto, molto più improvvise ed intense rispetto alla forza gravitazionale. I modelli disponibili in letteratura che ne forniscano il valore muovono dalla conoscenza della deformazione generata dall'urto. Si calcola, dunque, per prima cosa la deformazione nelle sue componenti tangenziale e normale, determinata dalle posizioni particellari al passo temporale n ; avendo scelto il modello a "sfera deformabile" si tiene traccia infatti delle deformazioni meccaniche subite dalle particelle, il cui valore attuale viene calcolato mediante l'overlap generato dall'urto individuato al passo n . In seguito, dalla conoscenza della deformazione, si ottiene il valore della forza di contatto, scissa nelle sue componenti tangenziale e normale.

Uno dei possibili modelli è quello lineare: si applica una sovrapposizione lineare di effetti, cercando una relazione lineare tra le forze di contatto e le deformazioni. Nella figura 2-V si può notare un'illustrazione schematica in cui per modellare il contatto normale si sono inseriti in parallelo una molla, che racchiude in sé il contributo elastico, ed uno smorzatore viscoso, che comprende gli effetti dissipativi. Per modellare gli effetti tangenziali si aggiunge alla molla ed allo smorzatore anche uno slider in serie, che simula lo slittamento possibile tra le superfici di contatto della particella i con l'ostacolo k .

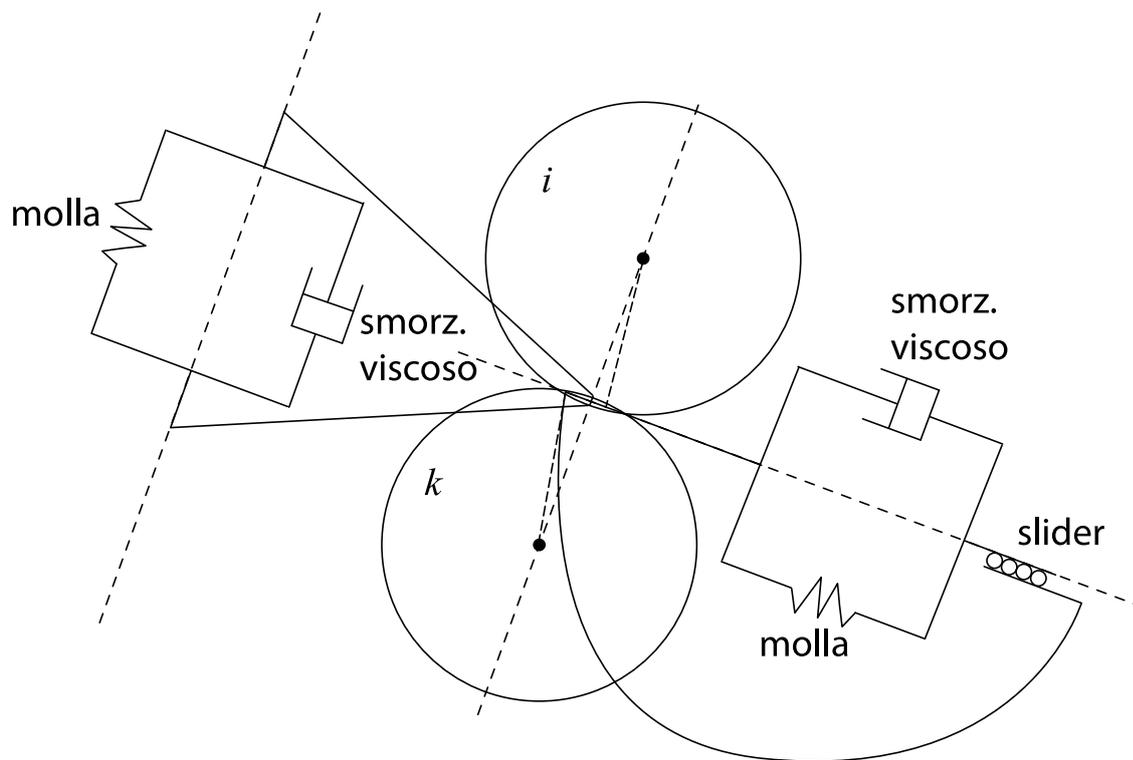


Fig. 2-V: Sovrapposizione lineare degli effetti della forza normale e tangenziale.

L'argomento esula dagli obiettivi di questo lavoro di tesi, per cui ci si limita a sottolineare come nel codice DEM attualmente usato si faccia uso del modello di Hertz-Mindlin migliorato (H-DD, Di Renzo e Di Maio, 2005). Si sottolinea solo come possa verificarsi la condizione di slittamento tra le superfici della particella e dell'ostacolo a contatto, in questo caso è necessario un viaggio a ritroso nel tempo che scorpori dall'angolo di rotazione calcolato il contributo del rotolamento relativo.

Molto importante per la riduzione dei tempi di calcolo è l'algoritmo con cui si ricercano gli urti che una particella può effettuare con altre particelle. L'onere di una ricerca di tutte le possibili combinazioni binarie sarebbe elevatissimo, ma facendo leva sul principio di azione e reazione è possibile analizzare ogni urto una sola volta: si esegue un'indagine progressiva, considerando che una i -esima particella possa

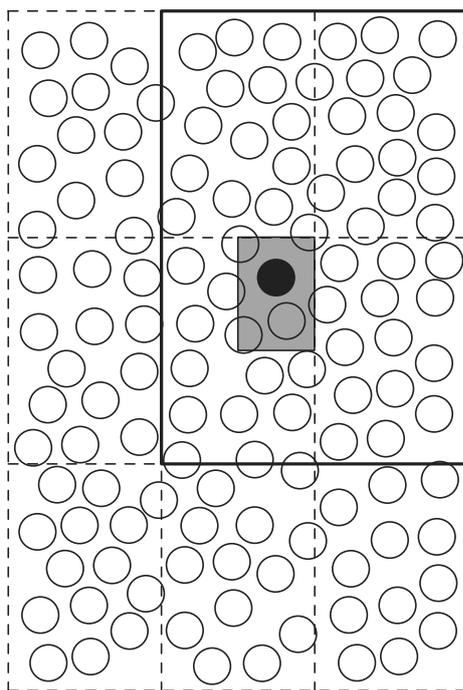


Fig. 2-VI: Ricerca degli urti potenziali della particella i .

ingenerare urti solo con particelle di indice $k > i$. Si osserva inoltre dalla figura 2-VI che una particella può produrre un urto solo con le particelle viciniori, per cui si restringe lo spazio di indagine alla cella di appartenenza ed alle otto confinanti. Si intuisce come ci si riferisca al quarto di cella (in grigio) in cui giace la particella i -esima (in nero) per far scendere ulteriormente l'onere di calcolo: solo tre delle celle confinanti possono essere interessate da un ipotetico urto.

2.5 Drag esercitato dal fluido sulla particella

Come anticipato in precedenza, per integrare la seconda legge di Newton delle equazioni (2.1) e (2.2), è necessario trovare, a partire dalla conoscenza della fluidodinamica del sistema, una correlazione che fornisca il termine \mathbf{F}_d relativo alla forza di trascinamento (drag) che il fluido esercita sulla singola particella solida

considerata sferica. I modelli che ne permettono il calcolo saranno analizzati nei capitoli successivi, ma nell'ambito del metodo DEM, è necessario chiedersi se allo step n -esimo attuale si conosce il valore delle variabili necessarie al calcolo del drag.

All'istante temporale discreto n conosciamo la fluidodinamica del sistema e la distribuzione spaziale delle particelle. Dall'equazione (1.46) risulta chiaro che i modelli previsionali della forza di drag muovono dalla conoscenza, localizzata nella regione che circonda la particella i , principalmente del numero di \overline{Re} e del grado di vuoto ε . Le equazioni (1.41), (1.42) e (1.43) mostrano che, di conseguenza, serve siano disponibili i dati di diametro medio di Sauter \overline{D} e frazione volumetrica relativa o assoluta (x_j o ϕ_j con $j = 1..Ms$), nonché, sempre nell'intorno della particella, i dati relativi alla polidistribuzione delle specie particellari (i valori di y_j ed y_m).

Come discusso nel precedente capitolo, partendo dalle considerazioni di Anderson e Jackson (1967), le equazioni (1.10) e (1.16) di Navier-Stokes, della continuità e della conservazione della quantità di moto rispettivamente, sono espresse in forma localmente mediata in un algoritmo CFD per il fluido. Ciò vuol dire che non si conoscono le quantità negli interstizi tra particella e particella, ma che queste vengono mediate ed il loro valore concentrato sui punti di uno spazio individuato da una griglia CFD. La figura 2-I mette chiaramente in risalto proprio come la fluidodinamica del sistema sia risolta in maniera discretizzata attraverso le celle computazionali.

Se questo è l'approccio, è evidente che non si conoscono i valori immediatamente prossimi alla particella delle variabili precedentemente elencate. Ad esempio non si conosce la velocità interstiziale ed, in aggiunta, il quadro si complicherebbe ulteriormente qualora il grado di vuoto o la frazioni volumetriche delle Ms specie presenti venissero calcolati in maniera omogenea in tutta la cella di volume ψ , ed ad essa venissero associati univocamente: in quel caso tutte le particelle ivi comprese risentirebbero del medesimo ε e l'identico \overline{D} .

Se, però, conoscessimo un valore più realistico dei volumi totali delle differenti specie ($V_{t,k|i}$ con $k=1..Ms$) che circondano una particella i (appartenente alla specie solida di diametro $D_{s,j}$) in un intorno volumetrico di estensione pari proprio a ψ (area grigia in figura 2-VII, centrata sulla sferetta), ed un valore più coerente e mediato della velocità superficiale e di scorrimento relativo $u|i$, sempre nello stesso intorno osservato, allora potremmo calcolare:

$$x_j|i = \frac{V_{t,j|i}}{\sum_{k=1}^{Ms} V_{t,k|i}}, \quad j = 1..Ms, \quad (2.4)$$

$$\overline{D}|_i = \left(\sum_{k=1}^{Ms} V_{t,k|i} \right) \cdot \left(\sum_{l=1}^{Ms} \frac{V_{t,l|i}}{D_{s,l}} \right)^{-1}, \quad (2.5)$$

$$\overline{Re}|_i = \frac{\rho_f u|i \overline{D}|_i}{\mu}, \quad (2.6)$$

$$y_j|i = \frac{D_{s,j|i}}{\overline{D}|_i}, \quad y_m|i = \frac{1}{\overline{D}|_i} \sum_{k=1}^{Ms} (x_k|i \cdot D_{s,k|i}), \quad (2.7)$$

$$\varepsilon|i = 1 - \frac{\sum_{k=1}^{Ms} V_{t,k|i}}{\psi}. \quad (2.8)$$

A questo punto sostituendo queste variabili nell'equazione (1.46) sarà possibile calcolare il drag che scaturisce sulla particella da una condizione fluidodinamica e di disposizione particellare riferita al passo temporale n .

Per ottenere le grandezze delle equazioni (2.4)–(2.8) bisogna ideare una funzione che distribuisca con dei pesi $r_{i,k}$ il volume della particella i -esima nella cella adiacente o di appartenenza k , in maniera direttamente proporzionale alla posizione che la sferetta stessa occupa nella cella computazionale. Gli stessi pesi saranno poi riutilizzati per

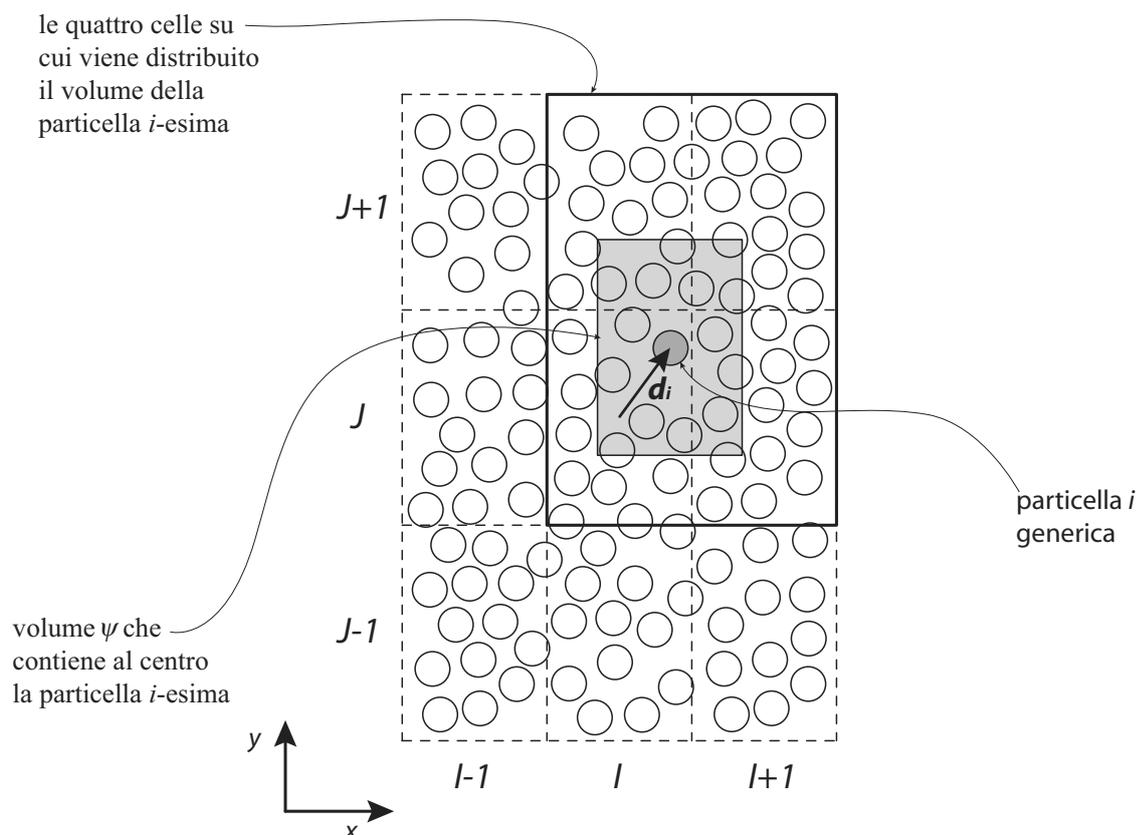


Fig. 2-VII: Funzione di distribuzione del volume della particella i .

ricomporre le informazioni dalle celle viciniori o di appartenenza attorno alla particella su cui si focalizza l'attenzione: saranno ricomposti così volumi delle specie e velocità superficiali provenienti dalle celle citate. Si otterranno così i valori già citati di $u|_i$ e $V_{t,j}|_i$ con $j=1..Ms$.

La funzione che si occupa di tutto ciò sarà descritta nel prossimo paragrafo e viene denominata funzione di distribuzione (e di ricomposizione) dei volumi particellari locali. Essa diventa determinante se pensiamo a quanto la forza di drag sia sensibile a variazioni di grado di vuoto e velocità: renderle il più possibile "interstiziali" aumenta il grado di accuratezza della simulazione. Si opera, in pratica, nel senso descritto nel capitolo precedente mediante le (1.7)–(1.9), ovvero si ottiene in forma analitica la

funzione peso A pensata nel lavoro di Anderson e Jackson (1967), funzione che concentrava i valori delle quantità variabili in tutto il dominio in un punto ben preciso dello spazio, rendendole medie: questo punto coincide nel caso in esame con la posizione della singola particella i .

2.6 Calcolo e distribuzione dei volumi particellari locali

Rimane da definire come operi la funzione di distribuzione dei volumi. In una data cella di indici I, J (figura 2-VII), il cui volume è $\psi = \Delta x \Delta y \Delta z$, è possibile che si ponga il problema di valutare il grado di vuoto e quindi volume totale di particelle quando una di queste non sia completamente contenuta nel volume di controllo. Per evitare di addentrarsi in valutazioni sulla frazione del volume V_i della i -esima sferetta da prendere in considerazione per il calcolo, si può, invece, pensare di distribuire con continuità frazioni del volume in questione alle celle direttamente confinanti: più una sferetta si approssima al bordo di una cella, più su di essa scarica frazioni crescenti del proprio volume. Ciò rende anche meno brusca la variazione di volume in una cella quando essa venga abbandonata da una particella, con indubbi vantaggi sulla stabilità dell'algoritmo di calcolo.

Se si osserva una particella in una qualsiasi cella, questa potrà scaricare frazioni del proprio volume solo sulle otto celle viciniori. Osservando la figura 2-VII si può, però, osservare come solo quattro celle delle potenziali nove siano realmente interessate alla distribuzione del volume V_i dalla i -esima sfera: una cella delle quattro è quella in cui giace la particella solida sotto osservazione; le restanti tre confinano col quarto di cella in cui è inscritta la i -esima sferetta. Sarà, dunque, necessario usare solo quattro pesi frazionari per l'operazione descritta.

Quando verrà richiesto dal codice di calcolare ad esempio il grado di vuoto attorno alla i -esima particella, si dovranno mediare i valori dei volumi delle specie particellari delle quattro celle selezionate in precedenza, utilizzando gli stessi pesi usati per distribuire il volume della stessa, ed applicando infine la (2.8). Il risultato è quello di ottenere virtualmente una cella con al centro la particella di interesse (area grigia in figura 2-VII e di volume pari proprio a ψ), in cui si concentrino le proprietà mediate delle celle viciniori, ovvero i volumi totali delle singole specie particellari ed anche le velocità superficiali. A quel punto si potranno applicare le (2.4)–(2.8) ed infine la (1.46) per calcolare il drag.

Si possono facilmente calcolare i pesi nelle due direzioni spaziali per la particella i :

$$\begin{cases} r_{i,x} = 1 - \frac{|d_{i,x}|}{\Delta x} \\ r_{i,y} = 1 - \frac{|d_{i,y}|}{\Delta y} \end{cases} \quad (2.9)$$

essi variano tra 0 e 0.5 (a seconda che la particella risieda al centro della cella o sul confine con quella viciniore nella direzione considerata).

La tabella 2-i mostra tutte le possibili combinazioni e le frazioni di volume particellare distribuite. La stessa tabella è utile per ricomporre le proprietà: se ad esempio ci trovassimo nel caso 2, e volessimo conoscere il volume totale della specie particellare j che circonda la particella i dovremmo calcolare

$$\begin{aligned} V_{t,j}|_i &= V_{t,j}|_{I,J} \cdot r_{i,x} r_{i,y} + V_{t,j}|_{I+1,J} \cdot (1-r_{i,x}) r_{i,y} + V_{t,j}|_{I,J-1} \cdot r_{i,x} (1-r_{i,y}) + \\ &+ V_{t,j}|_{I+1,J-1} \cdot (1-r_{i,x})(1-r_{i,y}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

dove con $V_{t,j}|_{I,J}$ si è indicato il volume totale della specie j nella cella di indice I,J .

Tab. 2-i: Distribuzione dei pesi frazionari del volume particellare.

<i>Condizione per il quarto di cella interessato</i>	<i>Indici delle celle interessate</i>	<i>Volume da sottrarre alla cella</i>
Caso 1: $d_{i,x} \geq 0, d_{i,y} \geq 0$	(I, J)	$r_{i,x} \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I+1, J)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I, J+1)$	$r_{i,x} \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
	$(I+1, J+1)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
Caso 2: $d_{i,x} \geq 0, d_{i,y} < 0$	(I, J)	$r_{i,x} \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I+1, J)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I, J-1)$	$r_{i,x} \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
	$(I+1, J-1)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
Caso 3: $d_{i,x} < 0, d_{i,y} \geq 0$	(I, J)	$r_{i,x} \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I-1, J)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I, J+1)$	$r_{i,x} \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
	$(I-1, J+1)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
Caso 4: $d_{i,x} < 0, d_{i,y} < 0$	(I, J)	$r_{i,x} \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I-1, J)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot r_{i,y} \cdot V_i$
	$(I, J-1)$	$r_{i,x} \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$
	$(I-1, J-1)$	$(1 - r_{i,x}) \cdot (1 - r_{i,y}) \cdot V_i$

2.7 Passaggio al tempo successivo e valutazioni a quello intermedio

È possibile far partire il codice da una condizione iniziale inerente la posizione particellare, ed in questo caso alla partenza si calcola il campo di moto fluido, o dai risultati di una precedente prova, in cui risulta nota anche la fluidodinamica: in entrambi i casi, con i metodi sinora discussi, è possibile calcolare la forza totale agente al passo temporale $n = 0$ su ogni particella ($\mathbf{F}_{tot,i}^n$). Se, invece, ci si ritrova già nel ciclo principale

e si è reduci dal calcolo al passo n , corrispondente al tempo t , sono note non solo fluidodinamica, posizioni e velocità particellari, ma anche $\mathbf{F}_{tot,i}^n$. A questo punto, per poter passare al passo temporale successivo si applica un metodo di tipo multi-step predictor-corrector per passare al tempo $n+1$. Si usa uno schema noto come formula di Verlet (1967). Si calcolano

$$\begin{cases} \mathbf{U}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{U}_i^n + \mathbf{F}_{tot,i}^n \frac{\Delta t}{2m_i} \\ \mathbf{s}_i^{n+1} = \mathbf{s}_i^n + \mathbf{U}_i^{n+\frac{1}{2}} \Delta t \end{cases} \quad (2.11)$$

Ottenendo in pratica le velocità nel tempo intermedio $n+\frac{1}{2}$ e le posizioni particellari in quello $n+1$; in quest'ultimo istante è possibile valutare le forze dovute agli urti ed il grado di vuoto dovuti alle nuove posizioni particellari. Sono ricalcolati anche il diametro e la velocità superficiale relativa medi intorno ad ogni particella e dunque anche la forza di drag (frutto del grado di vuoto e del diametro medio al passo $n+1$, ma campo di moto fluido al passo n , ovvero di \mathbf{u}^n). Si ricalcolano anche eventuali forze coesive o di altra natura, la cui sommatoria fornisce

$$\mathbf{F}_{tot,i}^{n+1} = \mathbf{F}_{tot,i}^{n+1}(\mathbf{s}_i^{n+1}, \mathbf{U}_i^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}^n). \quad (2.12)$$

È ora possibile ottenere la velocità particellare che sarà utilizzata al prossimo ciclo, nella formula di Verlet:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{F}_{tot,i}^{n+1} \frac{\Delta t}{2m_i}. \quad (2.13)$$

Dalle $\mathbf{F}_{tot,i}^{n+1}$ agenti sulle singole particella, è possibile ricavare l'azione complessiva della massa particellare sulla fase fluida, e si calcola il campo di moto fluido al passo $n+1$. In questo istante temporale è ora tutto noto, e si riparte col ciclo per il passo $n+2$ in maniera iterativa, finché non si copra l'intero arco temporale che si è deciso di simulare.

2.8 La fase fluida

Si può affermare di aver scelto un riferimento “Lagrangiano” per quanto concerne la fase particellare; per quanto concerne, invece, la fase fluida si sceglie un riferimento “Euleriano”: volumi di controllo fissi nello spazio, di opportune dimensioni, come punto di osservazione dei fenomeni in atto. Il collegamento fisico tra la fase discreta particellare e quella continua particellare è rappresentato dal grado di vuoto. L’approccio CFD Euleriano per un sistema mono- o multifase è stato descritto nel precedente capitolo.

Si è scelto di mantenere un campo di indagine 3D per la fase particellare e 2D per il fluido, il quale sviluppa il suo moto prevalentemente lungo x e y (figura 2-II-b). Si è in precedenza sottolineato come, per ritenere valida questa approssimazione, sia necessario scegliere una profondità B del sistema trascurabile rispetto alla larghezza L ed all’altezza H . Le grandezze legate al fluido resteranno invarianti lungo z ; in questa direzione si collocano solo tre celle computazionali: due per le condizioni al contorno ed una strutturata effettivamente nel letto. La figura 2-VIII chiarisce le considerazioni effettuate sinora ed evidenzia, come anticipato nel capitolo precedente, che grandezze scalari come densità, pressione e grado di vuoto, saranno riferite al centro geometrico delle celle, mentre le due componenti di velocità del fluido saranno dislocate ai bordi, in direzione normale alle superfici del contorno laterale della cella computazionale.

Si riprendono, approfondendole, alcune considerazioni già introdotte circa le celle computazionali per la fase fluida per un approccio Euleriano CFD. La 2-VIII mostra che le velocità del fluido vengono calcolati ai bordi della cella: questo corrisponde alla scelta di utilizzare per la fase fluida celle computazionali traslate di mezza cella in avanti. La scelta rimane obbligata onde evitare la soluzione banale e problemi di convergenza della fase fluida. Se, ad esempio, lungo l’asse x le celle per la fase solida sono Mx , cui se ne aggiungono due virtuali ai lati per imporre condizioni al contorno e

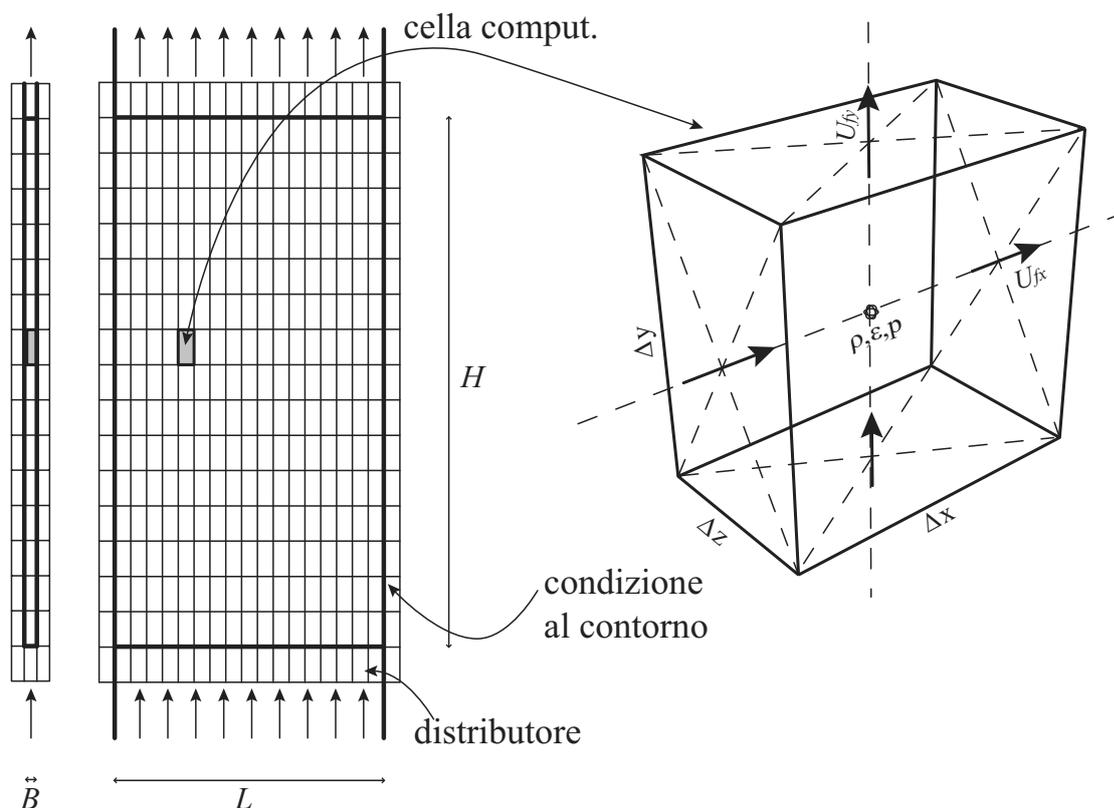


Fig. 2-VIII: Celle computazionali nel dominio 3D.

simulare le pareti, le celle per la fase fluida saranno in totale $Mx+1$; la prima e l'ultima fila di queste saranno riempite solo per metà dalla fase solida. Al centro di queste celle verrà riferita la velocità del fluido in direzione x . I centri delle celle traslate in direzione x , rappresentano le pareti delle celle per la fase solida, come raffigurato nella 2-VIII (in cui proprio sulla parete si è indicata la componente di velocità del fluido U_{fx}).

In direzione y , le celle in totale saranno My , e tutto funziona in maniera analoga a quanto descritto per la direzione x : la velocità del fluido nella sua componente verticale viene calcolata al centro di queste celle, che corrisponde sul bordo delle celle raffigurate nella 2-VIII alla U_{fy} . Come si evince da quest'ultima illustrazione, la pressione è sempre riferita al centro delle celle non traslate.

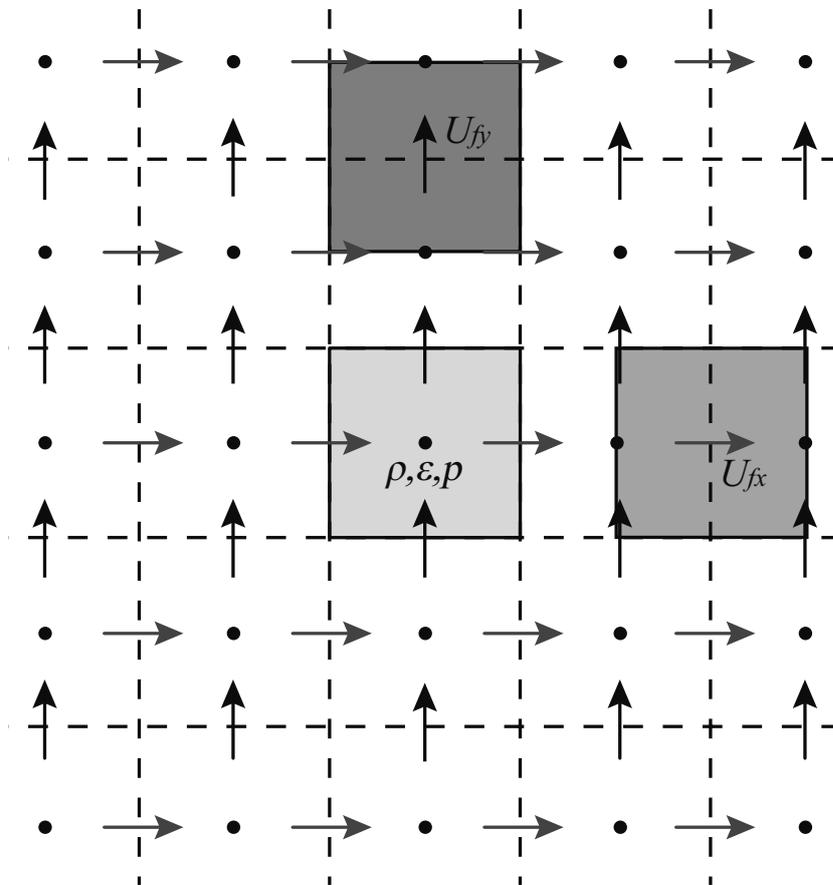


Fig. 2-IX: Celle computazionali traslate per la fase fluida.

La figura 2-IX illustra graficamente quanto si è discusso sinora circa la necessità di traslare le celle computazionali per la fase fluida. Le celle più chiare indicano quelle per la fase solida contenenti anche variabili scalari come pressione relativa e densità del fluido; quelle più scure sono riferite alla velocità nella sua componente orizzontale; le altre contengono la velocità del fluido nella sua componente verticale.

La fase fluida rappresenta un continuo fisico, ogni sua parte, sebbene infinitesima, è essa stessa un mezzo continuo. Nel volume di controllo introdotto si ritiene, dunque, valida l'equazione di continuità (1.10) (accoppiata ad un'equazione costitutiva per la fase fluida che ne definisca la densità) e l'equazione (1.16) di conservazione della quantità di moto. Sono le equazioni di Navier-Stokes localmente mediate ed, in

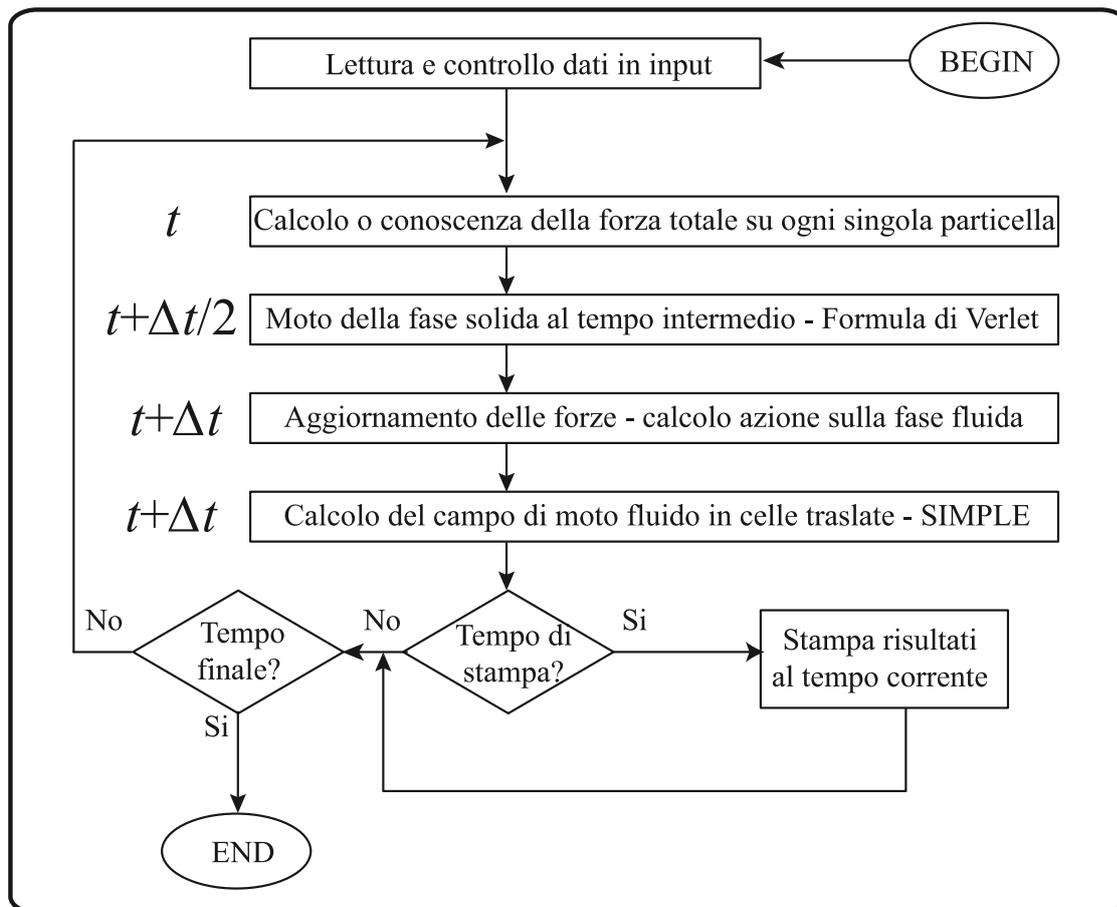


Fig. 2-X: Struttura dell'algoritmo DEM-CFD.

particolare, la (1.16) contiene al suo interno il termine S_d che è possibile calcolare tramite la (1.19) solo dopo aver ottenuto la forza di drag al passo temporale $n+1/2$.

Il metodo scelto per l'integrazione delle equazioni di Navier-Stokes in forma localmente mediata è quello dei volumi finiti, mediante l'algoritmo denominato SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations).

Si ottiene così il campo di moto fluido al passo $n+1$ e si è pronti a reiterare risolvendo di nuovo la fase solida. La figura 2-X chiarisce tutti i passaggi necessari all'algoritmo di calcolo: esso si presenta in forma sequenziale nella risoluzione DEM della fase solida e CFD di quella fluida. Questo apre prospettive di parallelizzazione

molto difficoltose, ma la seconda parte di questo lavoro di tesi si occuperà di distribuire l'onere di calcolo tramite parallelizzazione su più processi. La figura 2-X evidenzia inoltre come, al fine di diminuire i tempi di calcolo, la stampa dei risultati intermedi non avviene ad ogni iterazione ma viene temporizzata.

Il codice, implementato in Fortran90 e compilato attraverso il pacchetto commerciale Intel® Fortran Compiler 10.0.025, genera in output dei files binari contenenti una notevole quantità di dati sulla fase fluida e su quella solida, istante per istante. Tali files vengono processati mediante script di visualizzazione in linguaggio MATLAB® che interpreta i dati e realizza un plotting, istante per istante, delle posizioni delle particelle e del capo di moto fluido, della pressione, del grado di vuoto, ecc.

Capitolo 3

Drag in sistemi mono- e poli-dispersi

Questo capitolo contiene le principali correlazioni di letteratura attualmente in uso per il calcolo del drag; si tratta di una breve introduzione allo stato dell'arte in cui si pone l'attenzione sui principali limiti e vantaggi dei diversi modelli disponibili per le applicazioni ingegneristiche.

Per prima cosa saranno però approfondite per distribuzioni particellari a diametro polidisperso le equazioni generali per il calcolo della forza di interazione fluido-solido, dopo averle introdotte nel primo capitolo per sistemi monodispersi.

3.1 Definizioni generali per il calcolo della forza di drag

L'equazione (1.49) fornisce, per un sistema monodisperso, il valore del coefficiente di trasferimento di quantità di moto fra la fase fluida e quella solida, inteso come specifico volumetrico (van der Hoef et al. 2005). Facendo uso della (1.33) è possibile, sotto forti ipotesi di omogeneità del letto particellare monodisperso, calcolare la perdita di carico che si registra in un volume di controllo ψ : questo termine, come già accennato nei precedenti capitoli, rappresenta un contributo di tipo dissipativo, al netto della pressione idrostatica ed è di cruciale importanza ottenerne una stima al fine di progettare apparecchiature che facciano uso di letti particellari, impaccati o fluidizzati. L'equazione (1.33) fornisce una stima di tale parametro di progetto a partire da un modello che permetta la valutazione della forza di puro drag in funzione di grandezze misurabili del sistema.

Le equazioni che sono alla base dei modelli per il drag muovono da considerazioni differenti a seconda del sistema a cui si fa riferimento e cercano di differenziare le dipendenze funzionali dei diversi parametri del sistema.

3.1.1 Sistema monodisperso

Dalle (1.46) ed (1.33), per un letto di particelle di uguale diametro in cui si registri un flusso costante ed uniforme del fluido, tale da garantire un grado di vuoto omogeneo (figura 1-III), si può ricavare (van der Hoef et al. 2005) una relazione che leghi il gradiente di pressione dissipativo alla forza di puro drag adimensionale:

$$-\nabla p = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{f}{D^2}. \quad (3.1)$$

Questa correlazione trova uso in letteratura anche in sistemi che si distanziano dalle ipotesi in cui è stata ricavata, non solo in caso di mancata omogeneità di ε e di variazione di \mathbf{u} , ma addirittura nel caso di sistemi polidispersi.

Nel caso più semplice di moto intorno una singola particella, $\varepsilon \rightarrow 1$, F_d dipende esclusivamente dal numero di Reynolds. Difatti, essendo presente un'unica specie solida, si verifica anche che la frazione volumetrica relativa e l'indice di polidispersione specifico per la particella, nonché l'indice y_m hanno valore unitario. Tradizionalmente per il calcolo ci si riferisce al coefficiente di drag C_d , in una formulazione che tiene conto dell'energia cinetica e della superficie particellare di impatto col fluido:

$$F_d = C_d(Re) \frac{\pi D^2}{4} \frac{\rho u^2}{2}. \quad (3.2)$$

Qualora invece si faccia riferimento ad un insieme di particelle, i modelli per il calcolo di F_d fanno uso di una funzione del vuoto relativo $\Gamma(\varepsilon)$ per tenere conto dell'interazione particellare (Wen e Yu 1966, Di Felice 1994), demandando al coefficiente di drag la dipendenza esclusiva dal regime fluidodinamico:

$$F_d = C_d(Re) \frac{\pi D^2}{4} \frac{\rho u^2}{2} \cdot \Gamma'(\varepsilon), \quad (3.3)$$

o in termini di forza di puro drag reso adimensionale attraverso la forza di Stokes:

$$f(\varepsilon, Re, y_j, y_m) = \frac{Re}{24} C_d(Re) \cdot \Gamma'(\varepsilon) = f(1, Re, 1, 1) \cdot \Gamma'(\varepsilon), \quad (3.4)$$

in cui si è evidenziata la forza in condizioni di $\varepsilon \rightarrow 1$, $y_j \rightarrow 1$ ed $y_m \rightarrow 1$ (monodispersione). Esistono altre possibilità di scorporre le funzionalità (Ergun 1952, Fand et al. 1987, Beetstra et al. 2007b) come

$$f(\varepsilon, Re, y_j, y_m) = f(\varepsilon, 0, 1, 1) + Re \cdot \Gamma''(\varepsilon, Re), \quad (3.5)$$

in cui si è evidenziata la forza di drag in un sistema particellare monodisperso ($y_j \rightarrow 1$ ed $y_m \rightarrow 1$) in regime di moto viscoso ($Re \rightarrow 0$), scindendola dal contributo inerziale.

3.1.2 Sistema polidisperso

Per un letto di particelle in cui sia presente polidispersione dei diametri particellari si cerca una correlazione analoga alla (3.1). Si parte dall'ipotesi che siano presenti M_s specie solide di diverso diametro e ben miscelate, a grado di vuoto uniforme.

A partire dalle equazioni di Navier-Stokes, in analogia alla (1.32) e sotto le stesse ipotesi di uniformità e costanza del grado di vuoto e della velocità con cui è stata ricavata, si ottiene

$$0 = -\varepsilon \nabla p - \sum_{j=1}^{M_s} \frac{Mp_j \mathbf{F}_{d,j}}{\psi}, \quad (3.6)$$

in cui si è indicato con Mp_j il numero di particelle nel volume ψ appartenenti alla specie j -esima, di diametro pari a $D_{s,j}$. Mp_j è calcolabile come

$$Mp_j = \frac{\phi_j \psi}{\pi D_{s,j}^3 / 6} \quad (3.7)$$

$$\phi_j = x_j \phi, \quad \sum_{j=1}^{M_s} \phi_j = \phi. \quad (3.8)$$

Sviluppando la (3.6) si evince che le perdite di carico, subite dal fluido nell'attraversare il letto particellare, sono calcolabili dalla sommatoria dei contributi medi delle singole specie solide, espressi dalla (3.1) e pesati attraverso la loro frazione volumetrica relativa (van der Hoef et al. 2005):

$$-\nabla p = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j=1}^{M_s} \frac{Mp_j \mathbf{F}_{d,j}}{\psi} = \sum_{j=1}^{M_s} x_j \cdot 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{f_j}{D_{s,j}^2} = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \left(\sum_{j=1}^{M_s} \frac{x_j f_j}{D_{s,j}^2} \right), \quad (3.9)$$

dove si è indicato con f_j la forza adimensionale di puro drag che in media insiste su ciascuna delle Mp_j particelle appartenenti alla j -esima specie solida di diametro $D_{s,j}$. In analogia con la (3.1) si introducono diametro e forza medi

$$-\nabla p = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\bar{f}}{\bar{D}^2}. \quad (3.10)$$

Il problema è, quindi, determinare quale tipologia di diametro medio, tra quelli presenti in letteratura, sia più efficace nel condensare le proprietà del sistema particellare. Una volta definito il diametro medio ne resterà automaticamente definita la forza media adimensionale di puro drag \bar{f} . Considerazioni su base empirica (Bird et al., 1960) eleggono al ruolo di diametro più rappresentativo quello di Sauter definito attraverso la (1.43), altrimenti noto come diametro superficie-volume:

$$\bar{D} = \frac{\sum_{j=1}^{Ms} Mp_j D_{s,j}^3}{\sum_{j=1}^{Ms} Mp_j D_{s,j}^2} = \left[\sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j}{D_{s,j}} \right]^{-1}. \quad (3.11)$$

Il diametro di Sauter, come si dimostrerà nel prossimo capitolo, racchiude come detto una valenza sperimentale (Foscolo et al. 1983, Gibilaro et al. 1986), ma anche analitica: esso viene definito anche “diametro di superficie volume” a richiamare il fatto che scaturisce direttamente dalla definizione di raggio idraulico in un mezzo poroso (Carman 1937).

Dalla (3.9), moltiplicando e dividendo per \bar{D}^2 , si ricava che

$$-\nabla p = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \frac{\bar{D}^2}{\bar{D}^2} \cdot \left(\sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j f_j}{D_{s,j}^2} \right) = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{\bar{D}^2} \left(\sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j f_j}{y_j^2} \right). \quad (3.12)$$

Infine dal confronto tra la (3.10) e la (3.12) si evince la definizione di forza adimensionale media ponderale di puro drag (van der Hoef et al. 2005):

$$\bar{f} = \sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j}{y_j^2} f_j. \quad (3.13)$$

Combinando le equazioni (1.24), (1.46) e (1.47) è possibile valutare, in corrispondenza di una j -esima specie particellare, la forza di drag netta adimensionale in funzione del modulo del gradiente di pressione e della forza di puro drag adimensionale:

$$n_j = f_j - \frac{V_{s,j} \nabla p}{F_{Stokes,j}} = f_j - \frac{D_{s,j}^2 \nabla p}{18\mu u} = f_j + \phi y_j^2 \left[-\frac{\overline{D}^2 \nabla p}{18\mu u \phi} \right], \quad (3.14)$$

dove $V_{s,j}$ è il volume della singola particella appartenente alla j -esima specie solida. Sostituendo la (3.10) nella (3.14) si evidenzia la relazione tra la forza adimensionale netta e quella di puro drag agenti su una singola specie particellare j (Beetstra et al. 2007c, Sarkar et al. 2009):

$$n_j = f_j - \frac{V_{s,j} \nabla p}{F_{Stokes,j}} = f_j - \frac{D_{s,j}^2 \nabla p}{18\mu u} = f_j + \frac{\phi y_j^2 \overline{f}}{\varepsilon}, \quad (3.15)$$

dove si vede che in un sistema polidisperso forza netta e di drag puro agenti su una singola specie non scalano fra loro attraverso il solo grado di vuoto come invece indica la (1.34) per un sistema monodisperso. La (3.15) degenera nella (1.34) nel caso $Ms = 1$ e conseguentemente $y_j = 1$. Se però, in analogia alla (3.13) si definisce forza adimensionale media netta la grandezza

$$\overline{n} = \sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j}{y_j^2} n_j, \quad (3.16)$$

ed ivi si sostituisce la (3.15), si ottiene che (Sarkar et al. 2009)

$$\overline{n} = \overline{f} + \frac{\phi \overline{f}}{\varepsilon} \cdot \sum_{j=1}^{Ms} \frac{x_j y_j^2}{y_j^2} = \frac{\overline{f}}{\varepsilon}, \quad (3.17)$$

del tutto analoga alla (1.34): forza netta e di drag puro si rapportano fra loro attraverso il solo grado di vuoto solo se si considerano quantità medie della miscela solida, e non nel caso delle singole specie solide (Beetstra et al. 2007).

3.2 Modelli per il calcolo della forza di drag

I modelli per il calcolo della forza di interazione fluido-particella possono essere suddivisi in due ampie categorie. Alcuni modelli (ad esempio Carman 1937, Ergun 1952, Gibilaro 2001) muovono da considerazioni di tipo empirico, nascono da misurazioni sperimentali e da osservazioni macroscopiche. Questa tipologia di modelli fornisce equazioni semplici e di immediata applicazione nella progettazione di apparecchiature in flusso multifase. Il loro svantaggio risiede, però, proprio nella loro semplicità: è infatti solo a livello microscopico, con un approccio numerico, che si può scorporare da altri contributi quello dovuto alla forza di drag.

Negli ultimi anni simulazioni dirette a livello numerico (DNS) sono state utilizzate per comprendere e modellare con un elevato grado di accuratezza le intime relazioni che intercorrono tra la fase fluida e quella solida (tra gli altri Hill et al. 2001a e 2001b, Beetstra et al. 2007b, Sarkar et al. 2009) ed anche l'influenza sulla forza di interazione del moto relativo fra le stesse particelle solide (Yin e Sundaresan 2009b).

Molti sono stati anche i tentativi di semplificazione per unificare in un insieme di relazioni parametriche le innumerevoli formulazioni presenti in letteratura, spesso distinte per regimi di moto ed intervalli di grado di vuoto (Benyahia et al. 2006).

3.2.1 Drag per moto intorno ad una singola sfera

Quando una particella solida, considerata sferica, cade in un mezzo fluido, per effetto della sola forza peso essa subisce un'accelerazione verticale osteggiata dalle sole forze di attrito e di galleggiamento. La particella solida, in condizioni stazionarie, raggiunge

una velocità denominata “terminale di caduta” che ne rappresenta una proprietà fisica (una volta fissata la tipologia di fluido). Lo stesso problema può essere osservato da un riferimento diverso, fisso proprio sulla particella in questione: essa risulta investita da un flusso fluido che, lambendone la superficie, determina su quest’ultima degli sforzi normali e tangenziali (figura 3-1). Qualora il regime di moto fluido sia laminare ($Re < 0.1$, regime di Stokes), è possibile integrare tali sforzi nel dominio della superficie della sfera, ottenendo (Bird et al., 1960)

$$\lim_{Re \rightarrow 0} C_d(Re) = \frac{24}{Re}, \quad (3.18)$$

nota come relazione di Stokes-Einstein: nel ricavarla si sono considerati sia un contributo dissipativo dovuto alla forma, sia uno dovuto all’attrito puro; sostituendola nella (3.2) si ritrova la (1.45).

Molte sono le correlazioni che forniscono un valore del coefficiente d’attrito, e conseguentemente della forza di drag, nel caso in cui il regime di moto non sia più di scorrimento o laminare. Da ricordare in tal senso sono le correlazioni di Clift et al. (1978), di Dallavalle (1948) e quella di Schiller e Naumann (1933).

Spesso l’intero campo dei numeri di Reynolds viene suddiviso in molte regioni, anche fino a dieci, con altrettante funzioni parametriche molto complesse. Una correlazione unica, a soli cinque parametri, fu fornita da Turton e Levenspiel (1986, denominato, in forma abbreviata, in questo lavoro di tesi “modello TL”).

$$f(1, Re, 1, 1) = \left(1 + 0.173 Re^{0.657}\right) + \frac{Re}{24} \cdot \frac{0.413}{1 + 16300 Re^{-1.09}}, \quad (3.19)$$

La (3.19) copre bene tutto il range di variazione del Re , senza tuttavia dover utilizzare un numero eccessivo di regioni di indagine.

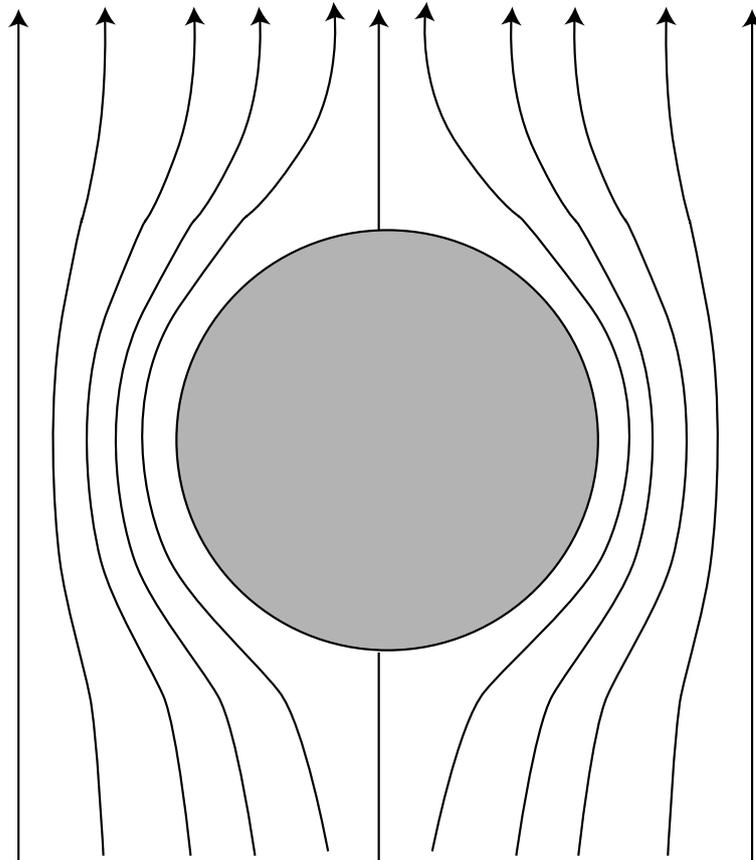


Fig. 3-I: Moto intorno una singola particella solida. La figura illustra il caso semplice di una particella in caduta libera in un fluido; il problema può essere indifferentemente osservato dal punto di vista della particella solida, ipotizzata come fissa e lambita dal flusso fluido: ciò ingenera sulla sua superficie sforzi tangenziali e normali, i quali determinano, rispettivamente una resistenza di forma ed una di attrito puro. L'integrazione sulla superficie di tali sforzi restituisce la forza di puro drag agente sul centro di massa della particella.

La figura 3-II opera un confronto tra alcuni dei modelli di letteratura sinora visti finalizzati alla previsione del coefficiente di drag per moto intorno ad una singola particella.

3.2.2 Drag in matrici di particelle a diametro monodisperso

Ci si pone ora il problema del calcolo della forza di interazione fluido-particella quando il sistema sia denso, ovvero quando la concentrazione di solido (frazione volumetrica assoluta ϕ) sia elevata e le particelle si dispongano come una matrice dello

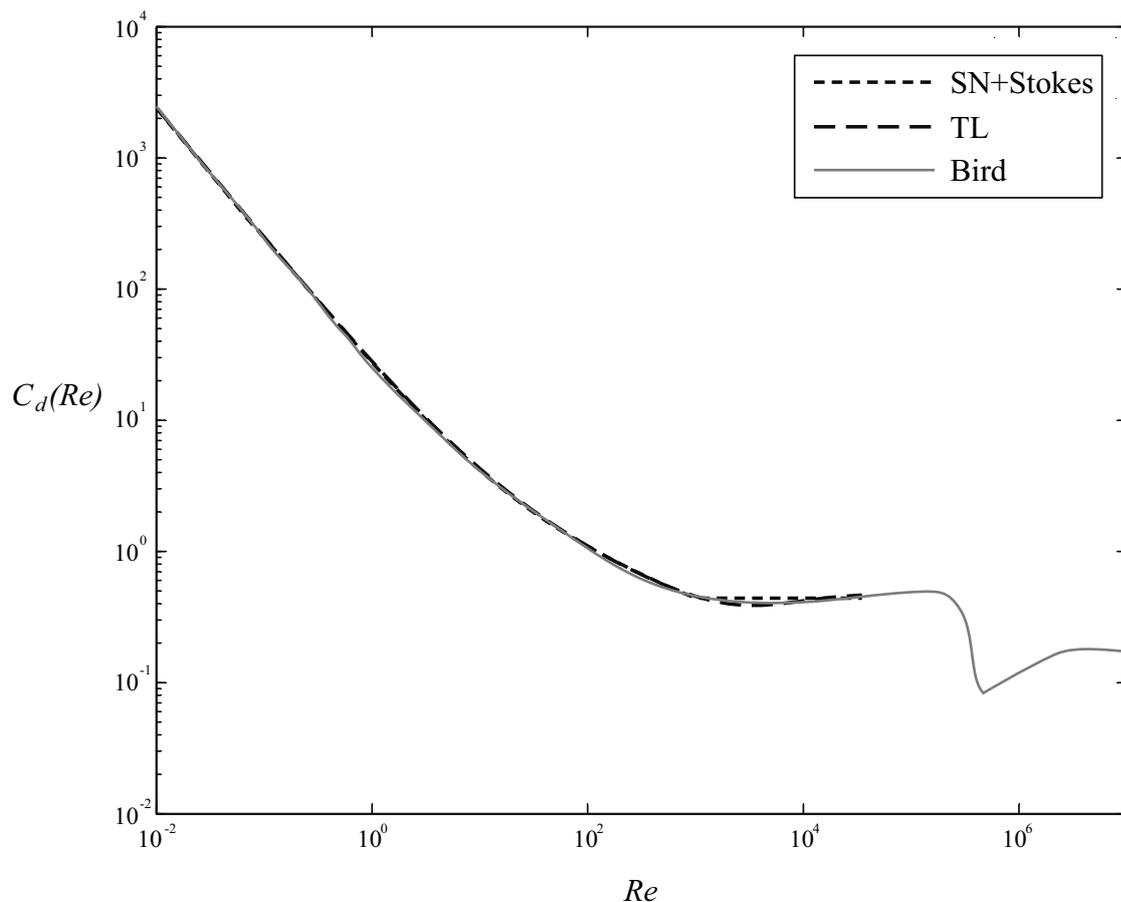


Fig. 3-II: Coefficiente di drag per moto intorno ad una singola sfera. Si confrontano i dati tratti da Bird et al. (1960) per moto intorno ad una singola sfera di solido, con le previsioni del coefficiente di drag effettuate mediante i modelli di Schiller e Naumann (1933) (in combinazione col modello di Stokes) e di Turton e Levenspiel (1986), indicati in figura rispettivamente con le sigle SN e TL.

stesso diametro. Si tratta di un'extrapolazione, in cui non solo $y_j \rightarrow 1$, ma anche complessivamente $y_m \rightarrow 1$.

Con riferimento alla figura 3-III, si sottolinea come nell'ambito di un algoritmo numerico come quello DEM-CFD, il focus computazionale ricada ciclicamente su una generica i -esima particella delle Mp presenti. Bisogna poter esprimere la forza di drag che il fluido esercita su di essa, quando questo, fluendo nel letto, incontra un grado di vuoto determinato dalla disposizione della matrice particellare.

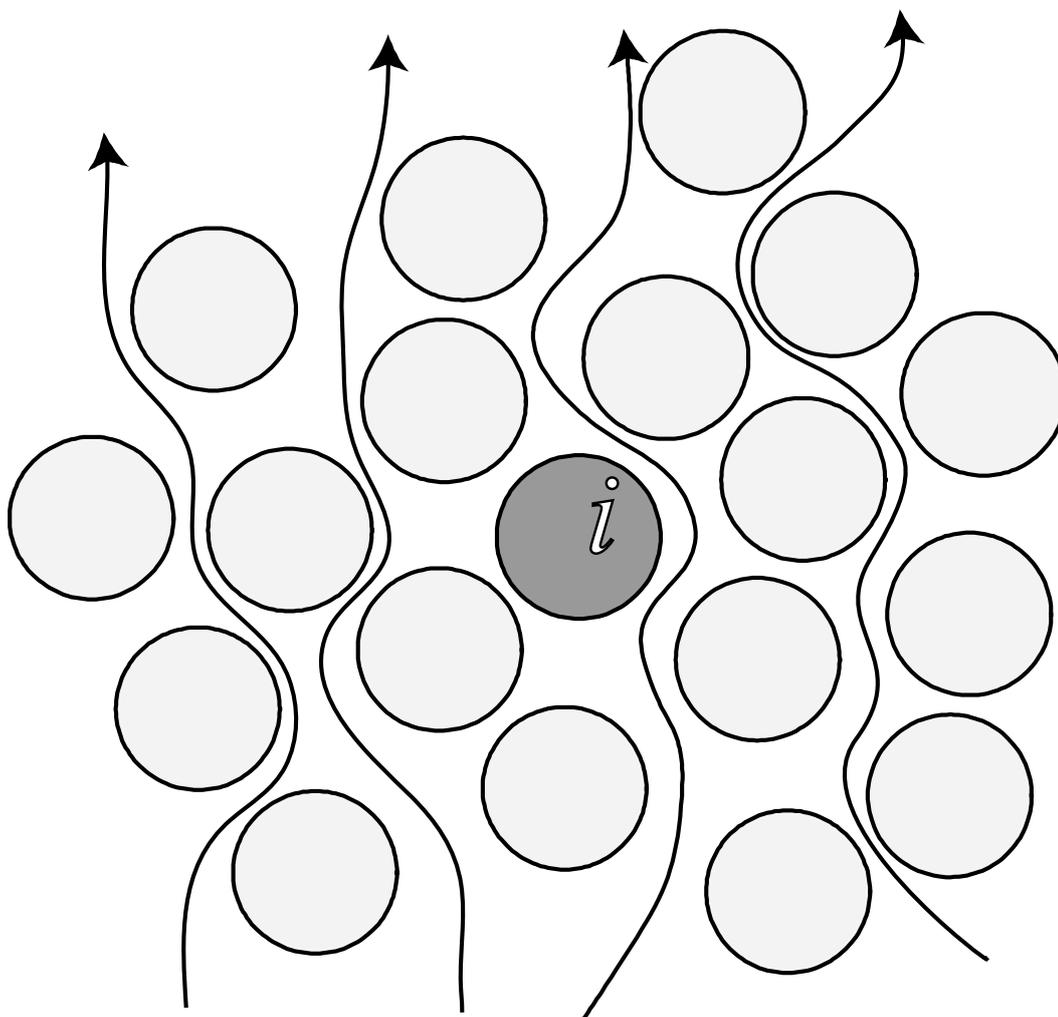


Fig. 3-III: Forza di drag sulla i -esima particella di un letto monodisperso. La particella colorata di grigio scuro è immersa in una matrice di altre particelle, disposte casualmente, del medesimo diametro; la loro presenza induce una variazione nelle traiettorie dei filetti fluidi: in pratica il campo di moto fluido risente di una perturbazione imputabile alla variazione del grado di vuoto. Le modificate condizioni fluidodinamiche comportano che il valore della forza di drag muti rispetto al caso di singola particella esposta all'azione del fluido.

In effetti, ai nostri scopi, si immagina che la forza di interazione sia influenzata in maniera trascurabile dal moto relativo delle particelle: si traggono i modelli per la forza immaginando il sistema congelato in un istante di tempo e, quindi, fisso. Ampliare il campo di indagine può essere un obiettivo di prospettiva futura visto che, come già detto, esistono studi preliminari che, a partire da simulazioni DNS col metodo lattice-

Boltzmann (LBM), permettono la valutazione del contributo dovuto al moto relativo particellare (Yin e Sundaresan 2009b).

Un'osservazione è necessaria sul fatto che, per indicare che il sistema sia monodisperso, in generale non basti che $y_j \rightarrow 1$. Questo perché, per $Ms > 2$, è sempre possibile trovare una distribuzione dei diametri “centrata” attorno al diametro $D_{s,j}$: in questo caso $y_j \rightarrow 1$, pur essendo il sistema polidisperso. Affinché il sistema sia effettivamente assimilabile a monodisperso deve valere $y_k \rightarrow 1$, con $k = 1..Ms$. Si supponga, però, che esista una specie j tale che $y_j \rightarrow 1$, che siano finiti i valori x_k per $k = 1..Ms$ e che valga anche $y_m \rightarrow 1$, allora

$$\sum_{l=1}^{Ms} x_l y_l = x_j + \sum_{k=1, k \neq j}^{Ms} x_k y_k = 1 \Rightarrow \sum_{k=1, k \neq j}^{Ms} x_k (y_k - 1) = 0. \quad (3.20)$$

Nelle ipotesi di frazioni volumetriche relative finite e non nulle, la (3.20) accetta soluzioni solo se $y_k \rightarrow 1$ per $k = 1..Ms$. Dunque, per indicare che un sistema sia monodisperso, non basta dire che $y_j \rightarrow 1$, ma necessita aggiungere che $y_m \rightarrow 1$.

Van der Hoef et al. (2005) sostengono basti solo la prima condizione, meno restrittiva, ad indicare che il sistema sia monodisperso: questo perché gli autori si riferivano a sistemi bidispersi; in effetti questo rappresenta un caso particolare della (3.20). Se, ad esempio, si suppone che in un sistema bidisperso $y_1 \rightarrow 1$, allora varrà

$$\frac{D_{s,1}}{D} \rightarrow 1 \Rightarrow \frac{1-x_2}{D_{s,1}} + \frac{x_2}{D_{s,2}} = \frac{1}{D_{s,1}} \Rightarrow D_{s,1} = D_{s,2}. \quad (3.21)$$

Lo stesso si ottiene nel caso in cui $y_2 \rightarrow 1$ ed $Ms = 2$.

Questa osservazione spiega il perché, nella prospettiva di ideare un nuovo modello per il drag valido per sistemi in cui $Ms > 2$, si è introdotto nella (1.46) ed analoghe il parametro y_m , diversamente a quanto presente in letteratura.

- ***Matrici ordinate di particelle***

La disposizione delle particelle riveste un ruolo fondamentale per l'ottenimento del drag. Parte della letteratura (Hasimoto 1959, Sangani e Acrivos 1982, Hill et al. 2001a) si è concentrata sulla ricerca di correlazioni valide per matrici di particelle disposte in maniera ordinata. In queste condizioni, l'interazione fluido-particelle assume valori diversi in funzione dell'angolo con cui il fluido entra nella matrice di particelle. Le disposizioni analizzate sono in genere quella cubica semplice (SC), quella a corpo centrato (BCC) o quella a faccia centrata (FCC).

In regime di moto laminare è possibile ottenere una correlazione in forma chiusa ed analitica, utilizzando la serie di Fourier, come fatto da Hasimoto (1959) e da Sangani e Acrivos (1982).

Hill et al. (2001a), nelle loro simulazioni condotte in LBM, ottennero un risultato molto interessante: trovarono analiticamente verificata una dipendenza della forza di interazione dal numero di Reynolds che passa da quadratica a bassi valori di Re , a lineare ad alti valori di Re .

- ***Matrici casuali di particelle***

Per le applicazioni che interessano questo lavoro di dottorato, però, vanno indagate le correlazioni in cui si faccia riferimento ad una disposizione casuale delle particelle nel sistema, configurazioni per le quali l'interazione non dipenda, quindi, in maniera così accentuata dalla direzione del moto fluido (figura 3-III). In questi casi, non potendo fruire di una formulazione analitica in forma chiusa, si distinguono due principali direzioni di ricerca. Per sistemi densi si immagina il letto particellare come un mezzo poroso assimilabile ad un insieme di tubi, le cui pareti sono appunto tracciate dalla disposizione delle particelle, mentre all'interno, nello spazio vuoto lasciato dal solido, scorre il fluido. Quando il sistema, però, diventa più diluito, questo approccio perde consistenza e veridicità, per cui ci si ricollega ad equazioni nella forma delle (3.4) e

(3.5), in cui sia presente un qualche termine correttivo che tenga conto della presenza di altre particelle intorno a quella presa in esame.

Per quanto concerne i campi di moto in cui $Re \rightarrow 0$, va menzionata la correlazione di Batchelor (1972), valida per sistemi diluiti e che presenta un punto di singolarità per $\varepsilon = 0.853$,

$$f(\varepsilon, 0, 1, 1) = \frac{\varepsilon}{1 - 6.55(1 - \varepsilon)}. \quad (3.22)$$

L'equazione (3.22) segue l'approccio degli oggetti sommersi con fattore correttivo. Se, invece, si segue l'approccio dei canali lasciati liberi dal solido al passaggio del fluido, per sistemi densi vale la legge di Darcy e dalla definizione di raggio idraulico si ottiene l'equazione di Carman-Kozeny (che per semplicità sarà indicata come CK):

$$f(\varepsilon, 0, 1, 1) = 2\kappa \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^2}. \quad (3.23)$$

I valori della costante k possono variare, da analisi sperimentali, da $\kappa = 5$ (Carman 1937) a $\kappa = 5.34$ (Fand et al. 1987). La (3.23) soffre di alcune limitazioni di fondo: essendo stata ricavata per sistemi densi non rispetta il valore di $f = 1$ per grado di vuoto unitario, non degenera cioè nel caso di limite di moto intorno ad una singola sfera in regime di Stokes. Ulteriori forti ipotesi restrittive sono quella di flusso isotropo e di porosità uniformemente distribuita in tutto il letto solido. La figura 3-IV opera un confronto tra le equazioni (3.22) e (3.23) per sistemi a regime di moto viscoso, nel range di variazione tipico del grado di vuoto in letti impaccati.

Se si allarga il campo di indagine ad un regime di moto a valori di Re intermedi o alti, storicamente la relazione più utilizzata è quella di Ergun (1952):

$$f(\varepsilon, Re, 1, 1) = \frac{150}{18} \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^2} + \frac{1.75}{18} \frac{Re}{\varepsilon^2}. \quad (3.24)$$

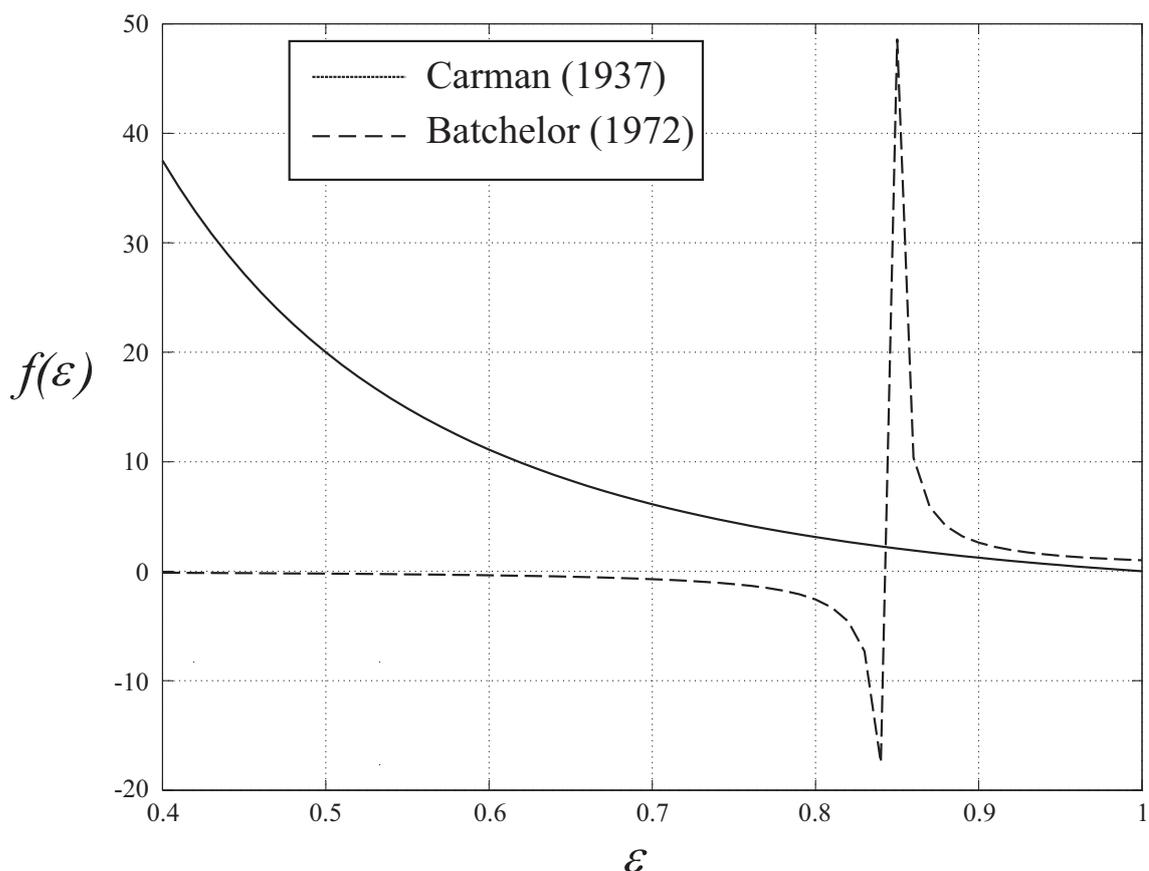


Fig. 3-IV: Confronto tra modelli per sistemi monodispersi in regime viscoso. La figura mette a confronto i valori previsti della forza adimensionale di puro drag previsti dal modello di Batchelor (1972) e da quello di Carman (1937), validi rispettivamente per sistemi monodispersi diluiti e densi a regime di moto laminare.

La (3.24) segue l'approccio già esposto con la (3.5): nel primo termine si riconosce il contributo delle forze viscoso della correlazione di Carman-Kozeny; il secondo contributo fornisce, invece, una misura delle forze inerziali (per la presenza del Re). Questa equazione, pur partendo da molte approssimazioni, le più rilevanti delle quali sono quelle di considerare l'omogeneità della fase solida e fluida e l'uniformità nel letto del grado di vuoto, è stata applicata per decenni fornendo risultati validi per la progettazione di apparecchiature finalizzate alla fluidizzazione. Viene attualmente

utilizzata per valori di grado di vuoto inferiori a 0.80, anche se è stata ricavata nel range 0.43–0.54.

Una diretta derivazione di questa equazione, ancora scomposta nel contributo viscoso e quello inerziale, è quella proposta da Fand et al. (1987), per alcuni regimi di moto (con valori di $Re \leq 408$) e per porosità nel range 0.342–0.360:

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\varepsilon, Re, 1, 1) = \frac{A(1-\varepsilon)}{18\varepsilon^2} + \frac{B Re}{18\varepsilon^2} \\ \left\{ \begin{array}{l} Re < 2.3: A = 210, B = 0 \\ 5 < Re < 80: A = 182, B = 1.92 \\ Re > 120: A = 225, B = 1.61 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.25)$$

La legge di espansione di Richardson-Zaki (1954) lega il grado di vuoto alla velocità superficiale e di scorrimento relativo u nell'insieme di particelle ed a quella terminale di una singola particella u_t :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{u}{u_t} = \varepsilon^q \\ \left\{ \begin{array}{l} Re \leq 0.2: q = 4.65 \\ 0.2 < Re \leq 1: q = 4.35Re^{-0.03} \\ 1 < Re \leq 500: q = 4.45Re^{-0.1} \\ Re > 500: q = 2.39 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.26)$$

In analogia a quanto detto per la (3.4), partendo dai valori di q della (3.26) e da semplici osservazioni sulla dipendenza sperimentale di f da Re

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{bassi } Re: f \propto Re \Rightarrow f = \frac{Re}{24} C_d(Re) \varepsilon^{-(q-1)} \\ \text{alti } Re: f \propto Re^2 \Rightarrow f = \frac{Re}{24} C_d(Re) \varepsilon^{-(2q-1)} \end{array} \right. \quad (3.27)$$

si ottiene:

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\varepsilon, Re, 1, 1) = \frac{Re}{24} C_d(Re) \varepsilon^{-p} \\ \left\{ \begin{array}{l} Re < 0.2 \Rightarrow p = 3.65 \\ Re > 500 \Rightarrow p = 3.78 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.28)$$

La correlazione ricavata da Wen e Yu (1966),

$$f(\varepsilon, Re, 1, 1) = \frac{Re}{24} C_d(Re) \varepsilon^{-3.65}, \quad (3.29)$$

utilizzata nella pratica comune a complemento di quella di Ergun (1952) per valori del grado di vuoto superiori a 0.8, prevede un valore di p fisso e pari sempre a 3.65; se, dunque, questo valore venisse utilizzato, come spesso accade in letteratura, anche per regimi di moto a Re elevati si commetterebbe un consistente errore.

Per ovviare a questo problema, Di Felice (1994) propone una funzionalità per l'esponente p che, seguendo le indicazioni fornite dalle (3.27), dovrebbe coprire l'intero campo di moto:

$$p = 3.7 - 0.65 \exp \left[-\frac{(1.5 - \log_{10} Re)^2}{2} \right], \quad (3.30)$$

Makkawi e Wright (2003), mediante valori sperimentali registrati in prove di laboratorio, ed anche Beetstra et al. (2007b), tramite simulazioni LBM, hanno recentemente criticato la validità della (3.30), osservando che l'accuratezza dei valori previsti diminuisce all'aumentare della frazione di vuoto.

Fin qui modelli che partono da osservazioni empiriche. Come precedentemente discusso esiste anche un'altra categoria di correlazioni che nascono da osservazioni nel microscopico, possibili solo grazie a simulazioni DNS. Il modello sviluppato da Hill et al (2001b) che nel proseguo sarà indicato come HKL, rientra in questo secondo gruppo di equazioni, partendo da simulazioni dettagliate in lattice-Boltzmann di sistemi porosi con $\varepsilon > 0.36$:

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\varepsilon, Re, 1, 1) = f_0 + \frac{1}{2} f_3 Re \\ f_0 = \begin{cases} \phi > 0.4: 10 \frac{\phi}{(1-\phi)^2} \\ \phi < 0.4: (1-\phi) \frac{1 + (3/\sqrt{2})\sqrt{\phi} + (135/64)\phi \ln \phi + 16.14\phi}{1 + 0.681\phi + 8.48\phi^2 + 8.16\phi^3} \end{cases} \\ f_3 = (1-\phi) \left(0.0673 + 0.212\phi + \frac{0.0232}{(1-\phi)^5} \right) \end{array} \right. \quad (3.31)$$

La (3.31) è stata ottenuta da simulazioni LBM fino a Re appena superiori ad un valore di 150. Come già anticipato, per ogni valore ε simulato, la forza di drag mostra una zona di transizione, passando da una dipendenza dal Re di tipo quadratico, ad una dipendenza lineare. Il valore del numero di Reynolds in corrispondenza del quale tale dipendenza muta, varia al variare del grado di vuoto cui la prova si riferisce. Per ogni prova effettuata gli autori individuano due fitting possibili, uno a funzionalità lineare con Re ($f = f_0 + \frac{1}{2} f_3 Re$), l'altro, mediante l'uso di un ulteriore parametro f_2 , a funzionalità di tipo quadratico ($f = f_0 + \frac{1}{4} f_2 Re^2$). Benyahia et al. (2006) suggeriscono di individuare, per ogni ε , il valore del numero di Reynolds in corrispondenza del quale avviene la transizione, attraverso l'intercetta delle due dipendenze funzionali descritte.

Per valori di Re nell'intervallo 0–1050, sempre a partire dalle simulazioni dettagliate in lattice-Boltzmann e per grado di vuoto appartenente al range 0.40–0.90, van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) hanno ottenuto il seguente modello, che verrà indicato successivamente con l'abbreviazione VBK:

$$\begin{aligned} f(\varepsilon, Re, 1, 1) = & 10 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \varepsilon^2 \left(1 + 1.5\sqrt{(1-\varepsilon)} \right) + \\ & + \frac{0.413Re}{24\varepsilon^2} \left[\frac{1/\varepsilon + 3\varepsilon(1-\varepsilon) + 8.4Re^{-0.343}}{1 + 10^{3(1-\varepsilon)} Re^{-0.5-2(1-\varepsilon)}} \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Volendo osservare quali siano gli aspetti migliorabili degli ultimi due modelli elencati, la prima critica che può essere mossa è che essi non degenerano, per grado di

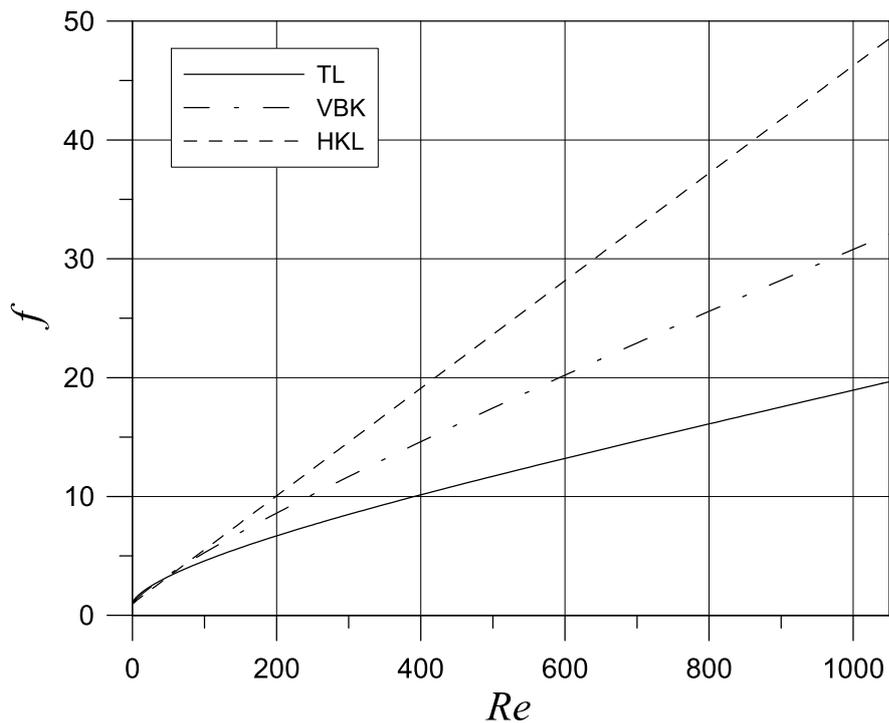


Fig. 3-V: Confronto tra i modelli per la forza di drag per moto intorno una particella.

vuoto unitario (sistemi estremamente diluiti), al caso di moto intorno una singola sfera (se non per $Re \rightarrow 0$). Il grafico in figura 3-V mostra chiaramente la differenza nei valori predetti dai modelli VBK e HKL in confronto con i valori di TL.

In particolare, per quanto riguarda il modello VBK, nella zona tipicamente a dipendenza quadratica della forza di drag ed a ridosso di quella di transizione ($0 < Re < 20$) gli autori non hanno condotto simulazioni LBM, se non proprio nei valori estremi del range citato. Il valore massimo del grado di vuoto in cui van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) hanno effettuato simulazioni in lattice-Boltzmann è 0.9. Dati LBM per grado di vuoto più alto sono riportati solo da Hill et al. (2001a e 2001b), ma per $Re \rightarrow 0$.

Nel caso di sistemi molto diluiti ($\varepsilon > 0.90$), i valori predetti dal modello VBK si discostano sensibilmente dalle correlazioni presenti in letteratura. Per sistemi molto

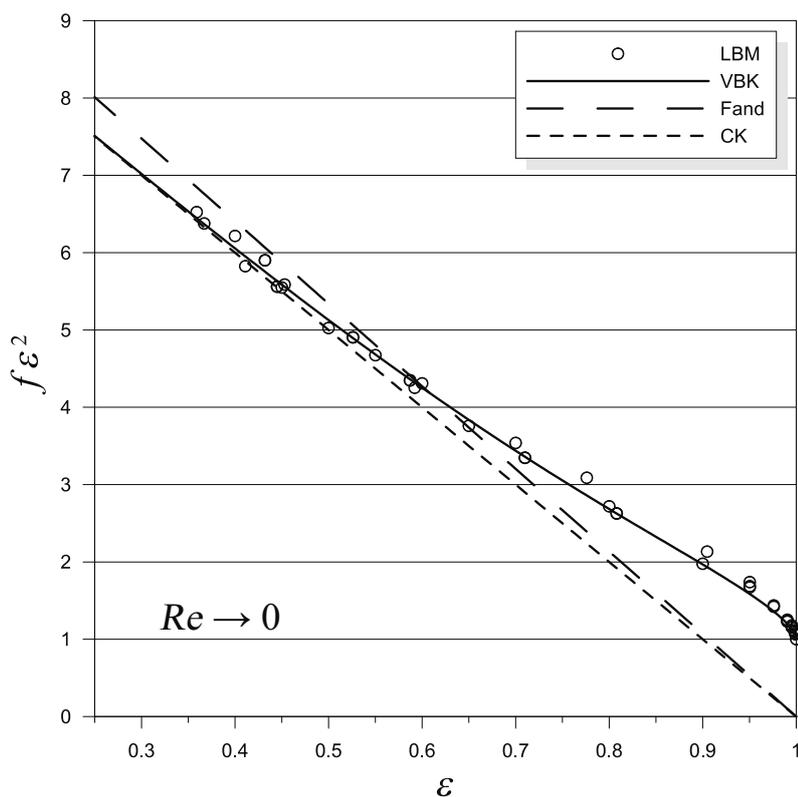


Fig. 3-VI: Confronto tra i modelli per la forza di drag per $Re \rightarrow 0$. Il grafico mette a confronto, per regime di moto viscoso, i modelli di Fand, VBK e CK con i dati di simulazioni LBM provenienti da Hill et al. (2001a e 2001b), Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b). Il modello VBK predice correttamente i valori previsti dalle simulazioni LBM. Nei punti in cui mancano dati LBM, a bassi valori del grado di vuoto, per costruzione il modello VBK segue quello CK: ciò comporta che si distanzia, per valori di $\epsilon < 0.36$, fin oltre il 20% dal modello di Fand, che come visto è il più preciso in questa regione, essendo stato ricavato con esperimenti condotti in letti densi ed array casuali di particelle ($\epsilon = 0.342-0.360$).

densi ($\epsilon < 0.36$), i valori ottenuti mediante i due modelli rappresentano delle estrapolazioni e, per costruzione analitica, tendono al modello CK. In particolare, il modello VBK mostra delle deviazioni da quello di Fand et al. (1987), che possono arrivare fin oltre il 20%.

Ad avvalorare quanto appena affermato, la figura 3-VI mostra come per sistemi in regime di scorrimento il modello VBK tenda correttamente al valore unitario (forza di Stokes) per sistemi molto diluiti, ma si distanzi per $\epsilon < 0.36$ dai valori predetti dal

modello di Fand et al. (1987). La differenza continua a sussistere anche a valori di Re elevati, come evidenziato in figura 3-VII, ottenuta per il valore limite di validità della legge di Fand et al. (1987), ovvero per $\varepsilon = 0.342$.

I modelli VBK e HKL presentano un onere computazionale molto alto, appesantendo la CPU con calcoli in cui sono presenti radici e potenze di numeri reali, ed in cui le variabili si trovano anche all'esponente. Questi modelli non si prestano dunque ad essere usati nel metodo DEM-CFD, laddove è richiesto un numero elevatissimo di valutazioni della funzione che fornisce la forza di drag.

Nel prossimo capitolo si proporrà un nuovo modello per il calcolo della forza di drag in sistemi monodispersi: partendo proprio dalle critiche fin qui loro mosse saranno riformulati i modelli di letteratura, cercando anche di recuperarne gli aspetti positivi. Prima di procedere in tal senso, nei prossimi paragrafi si elencheranno i modelli di letteratura per sistemi polidispersi, evidenziandone le qualità e discutendone i limiti. Anche questa analisi sarà ripresa nel prossimo capitolo. Essa indurrà alla formulazione di un nuovo modello per il calcolo della forza di interazione anche in presenza di polidispersione dei diametri particellari.

3.2.3 Modelli per il drag in matrici di particelle con diametro polidisperso

La figura 3-VIII illustra il caso di moto in un sistema poroso caratterizzato da polidispersione dei diametri particellari. Il drag in un sistema polidisperso non potrà certo essere paragonabile a quello di un sistema monodisperso: sia per la diminuzione del grado di vuoto complessivo che l'aver particelle di diverso volume comporta, ma anche per la forte deviazione dalle ipotesi poste alla base delle correlazioni viste in precedenza. Al sistema polidistribuito si aggiunge un grado di libertà, dato dalla frazione volumetrica delle singole specie dislocate nel letto solido: questo toglie omogeneità allo spazio messo a disposizione del fluido per attraversare il mezzo poroso. Di questi effetti bisogna, in qualche modo, tener conto.

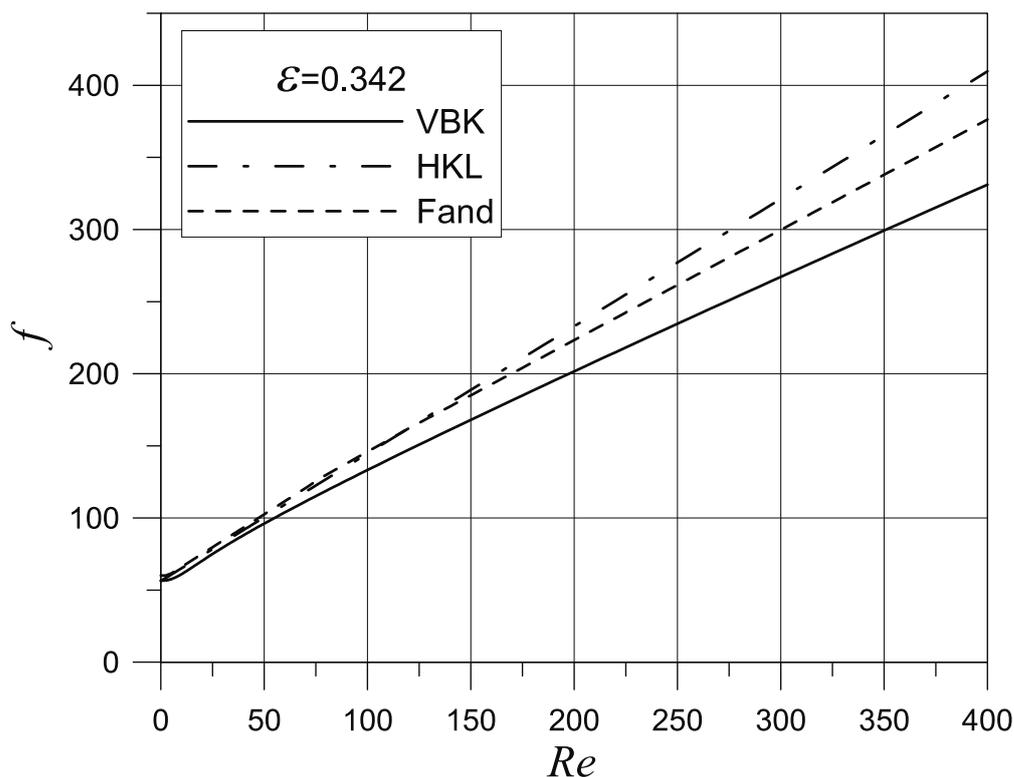


Fig. 3-VII: Confronto tra i modelli per la forza di drag per $\varepsilon = 0.342$.

La figura 3-VIII mostra in grigio scuro la j -esima specie particellare cui appartiene la particella i della quale si vuole calcolare la forza di interazione. Necessariamente la f_j sarà la media delle forze agenti sulle Mp_j particelle appartenenti alla specie j .

Gli approcci teorici al calcolo della forza media agente su una specie solida presente nel sistema seguono principalmente due percorsi. Il primo di questi approcci propone delle modifiche alle stesse correlazioni viste per sistemi monodispersi, introducendo correzioni che compendino la mutata distribuzione granulare. Il secondo percorso presenta un approccio di tipo statistico: nel rispetto del bilancio globale di forze agenti sulla massa particellare, si individuano nuovi parametri rispetto a quelli usati nel caso monodimensionale, finalizzati a tener conto della polidispersione del sistema.

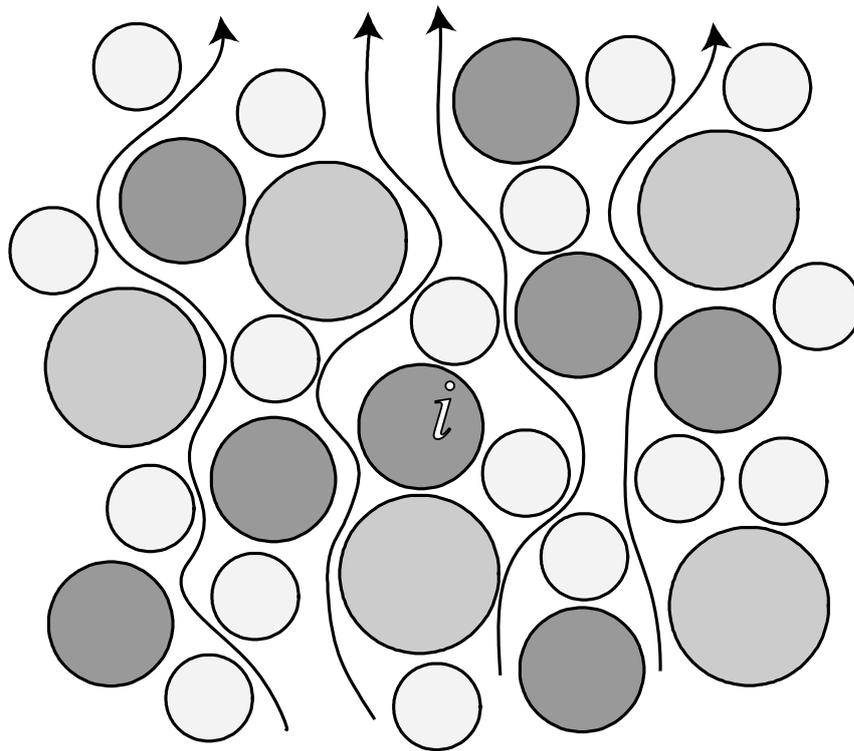


Fig. 3-VIII: Forza di drag sulla specie particellare cui appartiene la particella *i*. La figura illustra il caso in cui il fluido debba insinuarsi in un sistema particellare che preveda più specie solide a diverso diametro, le cui particelle siano disposte in maniera casuale. Si pone particolare attenzione al fatto che la *i*-esima particella, appartenente alla specie *j* (indicata in figura in grigio scuro), risente della presenza delle altre non solo attraverso il grado di vuoto, ma anche attraverso la perturbazione al moto fluido indotta dalla polidispersione.

- **Modelli correttivi di quelli ottenuti per sistemi monodispersi**

In questo insieme di modelli di letteratura rientrano i lavori di Batchelor (1982) e di Batchelor e Wen (1982) per sistemi diluiti, in cui si modifica la (3.22), sostituendo il coefficiente pari a -6.55 con uno b_{jk} che, volta per volta, lega la specie *j* con quella *k*:

$$f_j = \frac{\varepsilon}{1 + \sum_{k=1}^{M_s} b_{jk}(1 - \varepsilon)}, \quad (3.33)$$

dove $b_{jk} (\neq b_{kj})$ dipende dal rapporto dei diametri e delle densità delle specie particellari *j* e *k*.

Altri modelli correggono il grado di vuoto al fine di adattare modelli già esistenti per il caso monodisperso. Ad esempio, Patwardhan e Tien (1985) e successivamente Bhattacharya e Dutta (2002) e Koo e Sangani (2002) hanno elaborato una teoria secondo la quale ogni particella risente intorno a sé di un grado di vuoto inversamente proporzionale al proprio diametro. Le equazioni per il calcolo del drag, specifico per la specie j , saranno le stesse usate per il caso monodisperso, ma sostituendo nelle loro funzionalità al grado di vuoto, per ogni specie, il valore relativo ε_j . La teoria prevede che la particella i -esima, appartenente alla specie j , di diametro $D_{s,j}$ sia immersa in una sfera concentrica di fluido di diametro pari a $D_{s,j} + \delta$. Il grado di vuoto ε_j di cui risente la particella in analisi sarà pari al rapporto tra il suo volume e quello della sfera fluida che la circonda:

$$\varepsilon_j = 1 - \frac{\pi D_{s,j}^3}{6} \cdot \frac{6}{\pi (D_{s,j} + \delta)^3} = 1 - \left(1 + \frac{\delta}{D_{s,j}}\right)^{-3}. \quad (3.34)$$

La (3.34) necessita di una definizione del parametro δ . In una miscela solida a diversi diametri, si fa riferimento ad un diametro D_{avg} per stabilire il volume medio particellare V_{avg} . Si suppone che il grado di vuoto sia uniformemente distribuito nel letto, in maniera tale da poter suddividere il volume totale in un numero di sfere di fluido di ugual volume V_{sfera} , pari al numero di particelle Mp . In ogni volume V_{sfera} si immagina sia presente una particella di volume medio V_{avg} . In tal modo si dimostra che

$$\varepsilon = 1 - \frac{Mp V_{avg}}{Mp V_{sfera}} = 1 - \frac{\pi D_{avg}^3}{6} \cdot \frac{6}{\pi (D_{avg} + \delta)^3} \Rightarrow \delta = D_{avg} \left[(1 - \varepsilon)^{-1/3} - 1 \right]. \quad (3.35)$$

Il problema adesso si sposta sulla definizione di D_{avg} . Tra i lavori di letteratura citati in precedenza molte sono le definizioni, ma quella originale fa capo a:

$$D_{avg} = \sum_{k=1}^{M_s} x_k D_{s,k} \cdot \quad (3.36)$$

È dimostrato sperimentalmente come, specie nelle condizioni di sistema denso e alta differenza nei diametri delle specie, si ottenga un miglior accordo con i dati sperimentali se si fa uso del diametro di Sauter (Foscolo et al. 1983, Gibilaro et al. 1986).

Sempre nell'intento di ottenere la forza di interazione attraverso una modifica delle equazioni già disponibili per il caso monodisperso, è presente in letteratura (Syamlal 1985) un approccio che modifica le correlazioni di Ergun (1952) e Wen e Yu (1966) attraverso le relazioni:

$$\begin{cases} f_j(\varepsilon, Re, y_j, y_m) = x_j \left[\frac{150}{18} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \frac{1.75}{18} \frac{Re}{\varepsilon^2} \right] \\ f_j(\varepsilon, Re, y_j, y_m) = x_j \frac{Re}{24} C_d(Re) \varepsilon^{-3.65} \end{cases} \quad (3.37)$$

Le (3.37) pesano le (3.24) e (3.29) attraverso le frazioni volumetriche relative. Ciò è in contraddizione evidente con le (3.9) e (3.10) quando si voglia calcolare la perdita di carico complessiva subita nel letto. Stessa contraddizione si verifica quando si voglia utilizzare un numero di Reynolds modificato $Re_j = (\rho_f u D_{s,j})/\mu$, pratica anch'essa in uso in letteratura (Hoomans 1999).

- **Modelli con indice di polidispersione**

Una strada alternativa a quelle sinora esposte è quella di introdurre la dipendenza della forza di drag da alcuni coefficienti che tengano conto della polidispersione del sistema. Si individuano tali coefficienti in y_j ed y_m , precedentemente introdotti. Sarebbe conveniente isolare la dipendenza della forza adimensionale netta (o analogamente di quella di puro drag) da questi parametri, separandola dagli altri attraverso una forma funzionale riconducibile a:

$$n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \Gamma_s(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot \Gamma_g(\varepsilon, \overline{Re}). \quad (3.38)$$

Osservando la (3.38) si può dedurre che il contributo dovuto a Γ_s è strettamente legato a caratteristiche di distribuzione delle specie solide a diverso diametro, mentre quello dovuto a Γ_g esprime dipendenza da grandezze globali e medie, rappresentative dell'intera massa particellare. Γ_g risulta indipendente anche dalla distribuzione complessiva y_m , mentre è direttamente riconducibile (mediante \overline{Re}) al diametro medio di Sauter. Volendo associare Γ_g a qualcuna delle grandezze fin qui introdotte, quella che maggiormente ne richiama le caratteristiche è la \bar{n} definita dalla (3.16): essa è frutto di una sommatoria delle forze adimensionali nette specifiche pesate dalle proprietà delle singole specie e come tale rappresenta una caratteristica complessiva del sistema, scevra da dipendenza dagli indici di polidispersione. Ci si attende, invece, che \bar{n} dipenda dal grado di vuoto determinatosi del sistema e dal numero di Reynolds calcolato attraverso un diametro pari a quello della particella statisticamente rappresentativa dell'intero insieme particellare. Dalle considerazioni effettuate è possibile porre

$$n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \alpha_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot \bar{n}(\varepsilon, \overline{Re}), \quad (3.39)$$

in cui si è definito il “coefficiente di specificazione della forza netta adimensionale” α_j (ponendo $\alpha_j \equiv \Gamma_s$): esso dipende strettamente dalla distribuzione dei diametri particellari e, applicato alla forza media adimensionale netta attraverso la (3.39), la rende specifica per la j -esima specie. Ripetendo analogamente lo stesso percorso di separazione delle funzionalità, partendo stavolta dalla forza adimensionale di puro drag, mediante la (3.15), è possibile scrivere

$$f_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \frac{\alpha_j(\varepsilon, y_j, y_m) - (1 - \varepsilon)y_j^2}{\varepsilon} \cdot \bar{f}(\varepsilon, \overline{Re}) = \Omega_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot \bar{f}(\varepsilon, \overline{Re}). \quad (3.40)$$

Ω_j è il “coefficiente di specificazione della forza di puro drag adimensionale”: esso dipende esclusivamente dal grado di vuoto e dalla distribuzione delle specie solide e non dalla fluidodinamica del sistema; attinge attraverso la (3.40) alla forza adimensionale media di puro drag agente nel sistema in esame, specificizzandola sulla classe di particelle con diametro D_j .

Le (3.39) e (3.40) necessitano di un ulteriore modello che fornisca il valore della forza media adimensionale. Si è immaginata, infatti, una dipendenza dal grado di vuoto e dal numero di Reynolds medio, ma non è possibile ancora ottenere il valore della forza a partire dalla conoscenza di questi parametri.

Van der Hoef et al. (2005) hanno eseguito una serie di simulazioni dettagliate LBM in cui, partendo da configurazioni casuali di sistemi bidispersi hanno ottenuto, al variare di ε , y_j e \overline{Re} , il valore della forza adimensionale netta specifica su ognuna delle due specie e quella media. Dall’elaborazione dei dati da loro ottenuti hanno ricavato un modello per la forza media:

$$\begin{cases} \overline{n}(\varepsilon, \overline{Re}) \equiv n_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}) = n(\varepsilon, \overline{Re}, 1, 1) \\ \overline{f}(\varepsilon, \overline{Re}) \equiv f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}) = f(\varepsilon, \overline{Re}, 1, 1) \end{cases} \quad (3.41)$$

Porre la (3.41) significa affermare che la forza media sia calcolabile attraverso un modello qualsiasi per sistemi monodispersi in cui si consideri un grado di vuoto pari a quello determinatosi effettivamente nel sistema in esame ed un numero di Reynolds pari a quello medio. La forza media, in pratica, è quella che si registrerebbe in un sistema di pari grado di vuoto e velocità superficiale qualora tutte le particelle avessero un diametro pari quello di Sauter. Queste posizioni sono in accordo con quanto solitamente si riscontra sperimentalmente nel valutare la perdita di carico complessiva espressa dalla (3.9). Se, come detto, si fa uso del diametro di Sauter (Bird et al., 1960) si ottiene la (3.10); sostituendovi la (3.41) si ottiene un modello per il calcolo della perdita di carico complessivamente registrata nel sistema (Gibilaro et al. 1986):

$$-\nabla p(\varepsilon, \overline{Re}) = 18\mu \mathbf{u} \frac{(1-\varepsilon) f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re})}{\varepsilon \overline{D}^2}. \quad (3.42)$$

La (3.42) viene utilizzata in letteratura usando di volta in volta modelli diversi per f_{mono} (Di Felice 2007), ma mostra ottimo accordo con i dati sperimentali, a riprova della validità delle (3.41).

Se il problema dal punto di vista della forza complessiva risulta definito, rimane ancora da ricavare una correlazione per il calcolo dei coefficienti di specificazione. Van der Hoef et al. (2005) hanno proposto delle funzionalità di f_j ed n_j tali da rispettare la (3.13) e la (3.16), esponendo una teoria per la simulazione di sistemi bi-dispersi, in accordo con la strategia sinora descritta. Proprio perché pensata per sistemi in cui $M_s = 2$, tale teoria non compendia l'uso di y_m , ma del solo coefficiente y_j , ciò che è sufficiente secondo la (3.21) a descrivere la distribuzione dei diametri nel sistema. In pratica si ipotizza che per la j -esima specie valga:

$$n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j) = \alpha_j(\varepsilon, y_j) \cdot \bar{n}(\varepsilon, \overline{Re}), \quad (3.43)$$

$$f_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j) = \Omega_j(\varepsilon, y_j) \cdot \bar{f}(\varepsilon, \overline{Re}). \quad (3.44)$$

Il problema si sposta ora sulla determinazione di un modello per i coefficienti di specificazione. Si può ricavare questa funzionalità a partire dalle proprietà che i coefficienti devono rispettare. Dalle (3.13), (3.16), (3.43) e (3.44) è necessario valga:

$$\sum_{j=1}^{M_s} \frac{x_j}{y_j^2} \alpha_j = \sum_{j=1}^{M_s} \frac{x_j}{y_j^2} \Omega_j = 1. \quad (3.45)$$

Dalle proprietà

$$\begin{cases} \sum_{j=i}^{Ms} \frac{x_j}{y_j^2} y_j = 1 \\ \sum_{j=i}^{Ms} \frac{x_j}{y_j^2} y_j^2 = 1 \end{cases} \quad (3.46)$$

è possibile imporre per α_i (e conseguentemente per Ω_i) un'espressione parametrica in λ (van der Hoef et al. 2005) che rispetti le (3.45):

$$\alpha_j = \lambda y_j + (1 - \lambda) y_j^2. \quad (3.47)$$

A questo punto per completare il modello rimane da esprimere la dipendenza di λ dal grado di vuoto. Il valore del parametro λ può essere ricavato in una condizione limite, ovvero quando, mantenendo costanti le frazioni volumetriche relative ed il grado di vuoto del sistema, si abbia una differenza estrema tra il diametro della specie j e quello delle restanti $Ms - 1$ specie, ovvero $D_{s,j} / D_{s,k} \rightarrow 0$ con $k \neq j$. In queste condizioni si può immaginare la specie j confinata nel resto del sistema, complessivo del fluido e delle altre specie presenti, libera di muoversi in un volume pari a $\psi - \sum_{k \neq j} V_{t,k}$. Il grado di vuoto corretto ε^* che vede attorno a sé una particella di specie j sarà calcolabile come

$$\varepsilon^* = 1 - \frac{\sum_{k=1, k \neq j}^{Ms} V_{t,k}}{\psi - \sum_{k=1, k \neq j}^{Ms} V_{t,k}} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + x_j(1 - \varepsilon)}. \quad (3.48)$$

Anche la velocità superficiale di cui risente la specie con diametro infinitesimo rispetto agli altri andrà corretta col nuovo grado di vuoto:

$$u^* = \varepsilon^* (U_f - U_j) = \frac{u}{\varepsilon} \varepsilon^*. \quad (3.49)$$

È possibile calcolare la forza netta agente sulla specie j usando un modello per sistemi monodispersi in cui si consideri un grado di vuoto ed una velocità corretti.

Ponendosi nella condizione in cui $\overline{Re} \rightarrow 0$ (moto viscoso e forza di drag dipendente dal solo ε) si può utilizzare il modello CK dell'equazione (3.23). Ne scaturisce che

$$\begin{aligned}
 \lim_{D_j/D_k \rightarrow 0} N_j(\varepsilon, \overline{Re} \rightarrow 0, y_j, y_m) &= n_{mono}(\varepsilon^*, Re_j^* \rightarrow 0) \cdot F_{Stokes,j}(1, Re_j^*) = \\
 &= 2\kappa \frac{(1-\varepsilon^*)}{(\varepsilon^*)^3} \cdot 3\pi\mu D_{s,j} \frac{u}{\varepsilon} \varepsilon^* = \\
 &= 2\kappa \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \cdot [\varepsilon x_j + (1-\varepsilon)x_j^2] \cdot 3\pi\mu D_{s,j} u = \\
 &= \bar{n}(\varepsilon, \overline{Re}, 1) \cdot F_{Stokes,j}(\varepsilon, Re_j) \cdot [\varepsilon x_j + (1-\varepsilon)x_j^2],
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

da cui (van der Hoef et al. 2005)

$$\lim_{D_j/D_k \rightarrow 0} n_j(\varepsilon, Re, y_j, y_m) = [\varepsilon x_j + (1-\varepsilon)x_j^2] \cdot \bar{n}(\varepsilon, \overline{Re}, 1, 1). \tag{3.51}$$

Quando il diametro della specie j -esima è infinitesimo rispetto agli altri, dalla definizione di diametro medio si Sauter, si dimostra che $y_j \rightarrow x_j$. Quindi dalla (3.47):

$$\lim_{D_j/D_k \rightarrow 0} \alpha_j = \lambda x_j + (1-\lambda)x_j^2. \tag{3.52}$$

Dal confronto tra la (3.51) e (3.52) emerge che $\lambda = \varepsilon$, per cui, la derivazione del modello di van der Hoef et al. (2005) risulta completa e teoricamente fornisce:

$$\alpha_j(\varepsilon, y_j) = \varepsilon y_j + (1-\varepsilon)y_j^2 \quad \text{e} \quad \Omega_j(\varepsilon, y_j) = y_j. \tag{3.53}$$

Tuttavia, gli stessi autori e Beetstra et al. (2007b), per ottenere un miglior accordo con i dati delle simulazioni LBM da loro effettuate, suggeriscono di usare per i coefficienti di specificazione la formulazione

$$\alpha_j(\varepsilon, y_j) = \varepsilon \cdot y_j + (1-\varepsilon) \cdot y_j^2 + 0.064 \varepsilon \cdot y_j^3 \quad \text{e} \quad \Omega_j(\varepsilon, y_j) = y_j + 0.064 \cdot y_j^3. \tag{3.54}$$

Il coefficiente di 0.064 scaturisce dal fitting dei dati estratti dalle simulazioni LBM, condotte dagli autori per valori di $0.44 \leq y_j \leq 2.52$, $0.35 \leq \varepsilon \leq 0.90$ e $Re = 0, 10, 100, 500$.

Tuttavia, oltre a modificare i valori dei coefficienti di specificazione ricavati teoricamente, la (3.54) contraddice le (3.45), introducendo un errore fisso nella valutazione della perdita di carico complessiva del sistema del 6.4%, come si evince sostituendo Ω_j nella (3.12). Lo stesso errore percentuale si commette, ovviamente, nella valutazione della forza adimensionale media di puro drag. Inoltre le (3.43) e (3.44), qualora si faccia uso delle definizioni (3.54), non degenerano nei casi di particelle monodisperse (ovvero nel caso valga $y_j \rightarrow 1$, trattandosi di modello per sistemi bidispersi) e di moto in sistemi estremamente diluiti ($\varepsilon \rightarrow 1$): sul valore della forza adimensionale di puro drag, in questo caso, si commette ad esempio ancora un errore del 6.4%.

Altro modello di grande interesse, ricavato per sistemi bidispersi in regime di moto laminare, con l'ausilio di simulazioni LBM per $0.36 \leq y_j \leq 3.25$, $0.60 \leq \varepsilon \leq 0.90$ e $Re \rightarrow 0$, è quello proposto da Yin e Sundaresan (2009b):

$$f_j(\varepsilon, 0, y_j, y_m) = \frac{1}{\varepsilon} + \left[\bar{f}(\varepsilon, \overline{Re} \rightarrow 0, 1, 1) - \frac{1}{\varepsilon} \right] \cdot \{ a(\varepsilon) \cdot y_j + [1 - a(\varepsilon)] \cdot y_j^2 \}, \quad (3.55)$$

dove il parametro $a(\varepsilon)$ scaturisce da regressione lineare e vale

$$a(\varepsilon) = 1 - 2.660(1 - \varepsilon) + 9.096(1 - \varepsilon)^2 - 11.33(1 - \varepsilon)^3. \quad (3.56)$$

Ancora una volta la condizione necessaria e sufficiente ad indicare che il sistema sia monodisperso è quella che $y_j \rightarrow 1$ (infatti $Ms = 2$). Sostituendo questo valore nella (3.55), si verifica che il modello degenera correttamente nel caso di sistema monodisperso ($f_j = \bar{f} = 1$ quando $y_j \rightarrow 1$). Questo risultato si può estendere, in realtà, anche per altri regimi di moto fluido, diversi da quello viscoso: in questi casi la (3.55) fornisce $f_j = \bar{f}$ quando $y_j \rightarrow 1$.

Altra conseguenza del modello in esame è che quando il sistema è estremamente diluito ($\varepsilon \rightarrow 1$), nel caso di moto in regime di Stokes, per sistemi sia mono- che

polidistribuiti, la particella appartenente alla specie j risente della forza di puro drag che si avrebbe per moto intorno a singola particella: questo si traduce in $f_j = 1$. Questo appare verosimile, però, solo nel caso monodisperso, in quanto, se il sistema è anche estremamente diluito, ogni particella vede le altre di diametro uguale talmente distanti da non influire col moto del fluido intorno alla sua superficie: decade, in pratica, la perturbazione indotta al campo di moto fluido sia dal grado di vuoto, sia dalla polidispersione dei diametri; nel caso i diametri delle specie siano confrontabili, ci si aspetta che la distribuzione dei diametri abbia un'influenza importante sulla singola particella, anche se le particelle sono molto distanti fra loro ($\varepsilon \rightarrow 1$), cosa non prevista dalla (3.55).

Risulta interessante verificare cosa accadrebbe se si volesse estendere la validità anche agli altri regimi di moto fluido. Se oltre ad essere estremamente diluito ($\varepsilon \rightarrow 1$), il sistema fosse anche monodisperso, dalla (3.55), per qualsiasi regime di moto, scaturirebbe $f_j = \bar{f}$: ogni particella, in pratica, risentirebbe di una forza di puro drag adimensionale pari a quella che il fluido eserciterebbe su di essa nelle stesse condizioni di grado di vuoto (quasi unitario), ma per un numero di Reynolds calcolato attraverso il diametro medio, che in questo caso coincide con quello particellare; ciò significa che su tutte le particelle agisce la medesima forza di drag che il fluido eserciterebbe su di esse qualora fossero isolate (TL col diametro particellare e non quello medio), ciò che viene tradotto analiticamente dalle (3.53), ma non dalle (3.54) a causa della correzione. La cosa appare verosimile poiché, in un sistema monodisperso ed estremamente diluito, come detto, le altre particelle non influenzano quella analizzata, né attraverso una variazione del grado di vuoto, né attraverso una disomogeneità nei diametri. Qualora, invece, il sistema sia bidisperso, il modello descritto dalla (3.55), contrariamente a quanto accadeva per il caso di moto esclusivamente viscoso, prevede una correzione alla forza media: come detto, ciò è verosimile poiché la presenza di disomogeneità nei

diametri, tutti confrontabili tra loro, incide sulla forza di drag e bisogna, quindi, specificare sulla specie j la forza media. Il modello VBK applica a quest'ultima un coefficiente premoltiplicativo, mentre la (3.55) prevede $f_j = \bar{f} \cdot y_j + (1 - y_j)$.

Altro spunto di riflessione che propone la (3.56) nasce dal fatto che, quando $y_j \rightarrow 0$, $f_j = 1 / \varepsilon$. Gli autori, infatti, sostengono che se $y_j \rightarrow 0$ allora anche $D_{s,j} \ll D_{s,k}$ e $x_j \ll x_k$ per $k = 1..Ms$. Questo è assolutamente vero in un sistema bidisperso come quello analizzato da Yin e Sundaresan (2009b), ma in un sistema polidisperso dire che l'indice di polidispersione di una specie si annulla corrisponde in realtà ad una posizione più forte di quella proposta in merito alla frazione volumetrica relativa. Infatti nel caso $D_{s,j} \ll D_{s,k}$ per $k = 1..Ms$:

$$y_j = x_1 \underbrace{\frac{D_{s,j}}{D_{s,1}}}_{\downarrow 0} + x_2 \underbrace{\frac{D_{s,j}}{D_{s,2}}}_{\downarrow 0} + \dots + x_j \underbrace{\frac{D_{s,j}}{D_{s,j}}}_{\downarrow 1} + \dots + x_{Ms-1} \underbrace{\frac{D_{s,j}}{D_{s,Ms-1}}}_{\downarrow 0} + x_{Ms} \underbrace{\frac{D_{s,j}}{D_{s,Ms}}}_{\downarrow 0} \cong x_j \quad (3.57)$$

Quindi in un sistema polidisperso $y_j \rightarrow 0$ solo se $D_{s,j} \ll D_{s,k}$ per $k = 1..Ms$ e $x_j \rightarrow 0$: in queste condizioni la (3.55) fornisce $f_j = 1 / \varepsilon$. Stavolta questa assunzione è verosimile solo nel caso di moto in regime di Stokes e non può essere generalizzata ai casi in cui le forze inerziali incidano nel sistema. La particella i , una delle pochissime appartenenti alla specie j , vede attorno a sé a distanza infinite tutte le altre di specie diverse con diametri molto più grandi del proprio. Si può supporre, dunque, che risenta di grado di vuoto unitario, cosa che scaturisce anche dalla (3.48) per $x_j \rightarrow 0$. Sotto queste ipotesi, la forza di puro drag effettivamente agente su di essa sarà $F_{d,i} = 3\pi\mu D_i (U_f - U_j)$, dove si è considerato che la velocità superficiale di scorrimento coincide con quella locale in quanto come detto si ipotizza $\varepsilon^* \rightarrow 1$ e la (3.49) fornisce $u^* = U_f - U_j$. Per ottenere la forza adimensionale f_j specifica per la specie j , la forza $F_{d,i}$ va adimensionalizzata con la forza di puro drag che invece agirebbe su una particella dello stesso diametro, ma

immersa in un sistema con lo stesso grado di vuoto complessivo ε , ovvero con una forza di valore pari a $3\pi\mu D_i (U_f - U_j)\varepsilon$. Quindi, in regime di Stokes, $f_j = 1 / \varepsilon$.

La dimostrazione appena effettuata potrebbe essere estesa al caso in cui anche le forze inerziali siano importanti: se si indica con $f_{TL}(Re)$ la forza adimensionale di puro drag ottenibile mediante il modello TL, a grado di vuoto unitario si ottiene:

$$\lim_{y_j \rightarrow 0} f_j = \frac{f_{TL}(Re^*) \cdot 3\pi\mu D_{s,j} u^*}{3\pi\mu D_{s,j} u} = \frac{1}{\varepsilon} f_{TL}\left(\frac{\rho u D_{s,j}}{\mu \varepsilon}\right). \quad (3.58)$$

Diventa interessante immaginare cosa accadrebbe se il focus si stringesse solo attorno alla particella di specie j , ovvero se si definisse un volume di controllo contenente la sola sferetta solida. In questo caso il risultato sarebbe in contrasto con la (3.58), poiché sarebbe logico immaginare valga TL tal quale senza alcuna correzione sul numero di Reynolds. Si tratta di uno dei problemi di disomogeneità del volume di controllo di cui si discuterà più ampiamente in seguito.

Rimane da sottolineare come la (3.56) contraddica la derivazione teorica della (3.53) ricavata per $D_{s,j} / D_{s,k} \rightarrow 0$ e non rispetti il bilancio complessivo della perdita di carico imposto dalla (3.45).

Capitolo 4

Un nuovo modello per l'interazione fluido-solido in sistemi mono e polidispersi

Nel capitolo precedente si è illustrato l'uso in letteratura dei modelli per il calcolo della forza di drag, illustrando, per ognuno di essi, i principali vantaggi ed i limiti di applicabilità. Sarebbe utile ottenere una formulazione per il calcolo della forza di drag, per quanto più possibile svincolata da regioni di validità, che permetta ad un eventuale metodo numerico di richiamarla senza prima indagare i limiti fluidodinamici o di grado di vuoto in cui essa sia valida. L'obiettivo che ci si è posti in questo capitolo è quello di ottenere un modello applicabile in ampie regioni di Re ed ε , valido per sistemi mono- e polidispersi in un range di y_j utile per le applicazioni di comune interesse e che tenga conto di un ulteriore parametro y_m in cui si concentrano le caratteristiche globali della distribuzione particellare solida. I metodi numerici come il DEM-CFD richiedono, inoltre, elevate risorse di calcolo, per cui il modello dovrà anche avere una forma semplice, che riduca il tempo di calcolo della CPU.

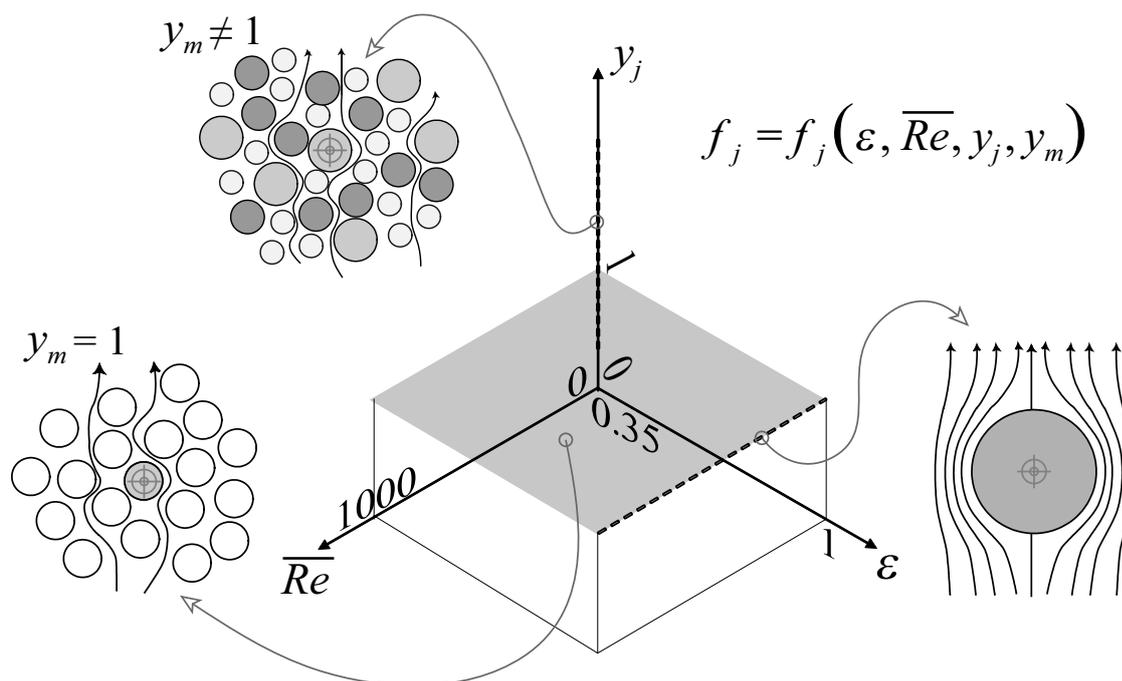


Fig. 4-I: Dominio di ricerca di un modello per la forza di drag.

4.1 Ricerca di un nuovo modello per sistemi mono e polidispersi

L'obiettivo di questo capitolo è quello di ideare un modello in grado di fornire la forza adimensionale di interazione fluido-solido nel dominio $\varepsilon\text{-}\overline{Re}\text{-}y$ più ampio possibile (figura 4-I).

Nella figura 4-I si è indicato per semplicità come unico parametro di polidispersione quello specifico per la specie j , ovvero y_j , anche se, come discusso e dimostrato nel precedente capitolo, attraverso la (3.20), per descrivere un sistema polidisperso (con $M_s > 2$) nella sua globalità, necessita conoscere anche y_m . La figura 4-I mostra come se ci si ferma nel piano $y_j = 1$, si avrà moto in un sistema monodisperso (per $M_s > 2$ dovrà valere anche $y_m = 1$) ed il calcolo sarà focalizzato sulla particella individuata dal crocino, di eguale diametro rispetto alle altre presenti. Ai bordi di tale piano, per $\varepsilon = 1$, si otterrà moto intorno ad una singola sfera.

Se ci si muove lungo l'asse y_j , al variare, dunque, dell'indice di polidispersione, la figura 4-I mostra (crocino in due cerchi concentrici in grigio) che l'obiettivo di indagine si sposta su una delle particelle di diverso diametro presente nel sistema che è diventato polidisperso (ciò stavolta è vero indipendentemente dal valore di y_m).

4.2 Scelta dell'approccio da usare per il nuovo modello monodisperso

Nel precedente capitolo si sono illustrate le diverse strade percorribili per l'ottenimento di un modello per il calcolo della forza di interazione fluido-solido, sia nel caso di particelle dello stesso diametro che nel caso di diametri polidistribuiti. Tra le varie possibilità per sistemi monodispersi si è scelto di ricercare un modello che più che attingere a dati sperimentali, in cui concorrono molti fattori avulsi al drag e difficilmente ponderabili, sia in accordo con dati di simulazioni DNS (LBM). Come già detto si tratta di un approccio multiscala, che parte dalla scala dimensionale più piccola, quella molecolare per trarre informazioni di interesse per le scale superiori di indagine. Come si vedrà l'accuratezza del modello valido nel monodisperso sarà cruciale anche per il calcolo dell'interazione nel caso polidisperso.

4.3 Dati di letteratura selezionati per il modello monodisperso

Si è detto che il primo obiettivo di questo capitolo è quello di ottenere un modello per il calcolo della forza di interazione in sistemi monodispersi che abbia la più ampia regione di validità al variare del grado di vuoto e del numero di Reynolds (in questo caso entrambi gli indici di polidispersione rimangono unitari). Poiché si vuole un metodo che sia scevro da influenze di fattori avulsi al drag, ci si riferirà a dati di simulazioni dirette accurate LBM presenti in letteratura. Appare necessario, dunque

Tab. 4-i: Dati di letteratura selezionati per l'ottenimento del modello monodisperso.

<i>Origine dei dati</i>	<i>Tipo di dati</i>	<i>Intervallo ε</i>	<i>Intervallo Re</i>	<i>N° dati</i>	<i>Regione</i>
Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005), Beetstra et al. (2007b)	Simulazioni LBM	0.40–0.90	0–1050	45	(1)
Hill et al. (2001a e 2001b)	Simulazioni LBM	0.36–0.99	0–12	177	(2)
Turton e Levenspiel (1986)	Estratti analiticamente da modello	1	0–1050	55	(3)

I 55 dati per grado di vuoto unitario sono stati ottenuti estraendoli per via analitica dal modello di TL.

operare una scelta di tali dati in funzione della regione del dominio $\varepsilon-Re$ in cui essi siano stati ricavati.

La tabella 4-i racchiude l'insieme dei dati LBM selezionati, cui si sono aggiunti 55 dati ricavati dalla correlazione TL al fine di ben rappresentare la forza di drag per moto intorno ad una singola particella solida. Con riferimento alla figura 4-I, si osservano i limiti del dominio $\varepsilon-Re$, mentre sono state numerate le regioni di indagine.

Se si immagina di focalizzare l'attenzione sul piano di monodispersione, ovvero quello indicato in grigio nella figura 4-I, perpendicolare all'asse y_j nel punto $y_j = 1$ (ed $y_m = 1$), si ottiene il dominio indicato in figura 4-II, in cui si sono evidenziate le regioni che raccolgono i dati utili, individuati dalla tabella 4-i.

Come descritto nel capitolo precedente, nei lavori di van der Hoef et al. (2005), Beetstra (2005) e Beetstra et al. (2007b) gli autori hanno effettuato simulazioni in un ampio dominio che coinvolge valori bassi e moderati del numero di Reynolds; tuttavia, nella zona di variazione quadratica del drag, sono presenti prove LBM solo agli estremi del range ($0 < Re < 20$).

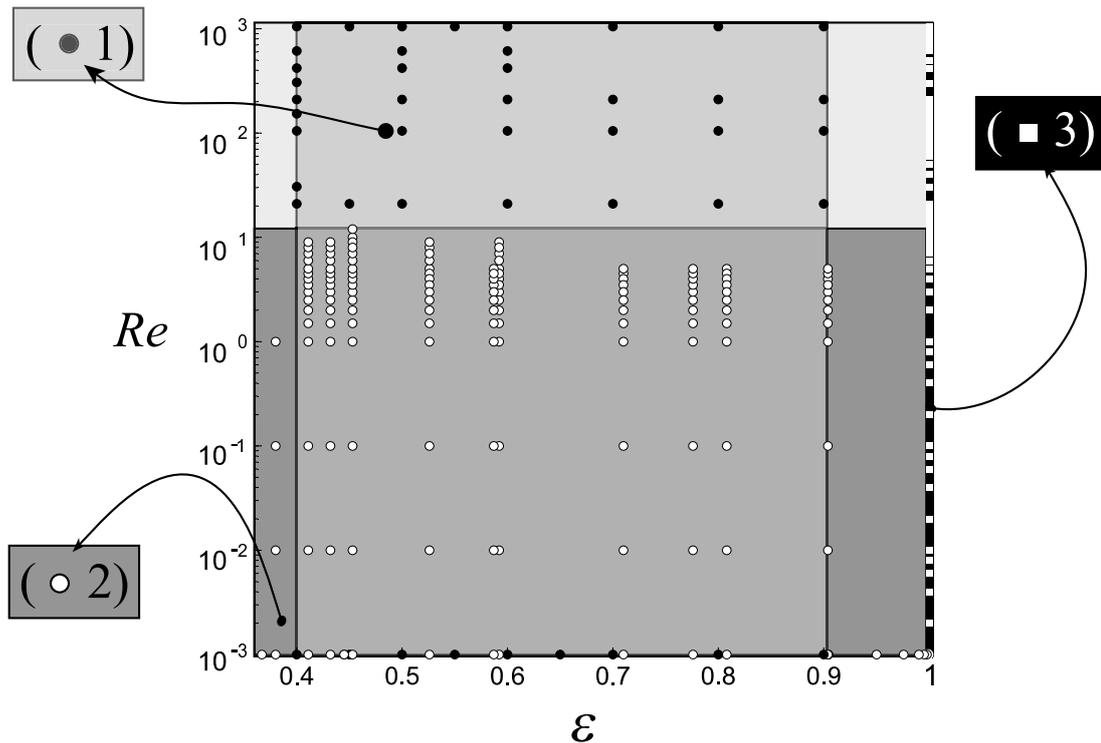


Fig. 4-II: Dati di letteratura per il modello monodisperso. Regioni del dominio di interesse in cui si sono evidenziati i dati cui si è fatto riferimento per l'ottenimento del nuovo modello: nelle diverse aree del dominio si individuano i dati di simulazioni LBM di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) [● 1]; Hill et al. (2001a e 2001b) [○ 2]; calcolati dal modello di Turton e Levenspiel (1986) [□ 3].

Questa mancanza di dati viene superata analizzando i lavori di Hill et al. (2001a e 2001b), in cui sono presenti nella zona di transizione dati LBM per un ampio intervallo di ε . Come già discusso nel precedente capitolo, gli autori hanno effettuato per ogni valore di ε una serie di simulazioni in DNS, traendo, appunto, per ogni valore del grado di vuoto due leggi che possano correlare i dati, una quadratica in Re e l'altra lineare. Come indicato da Benyahia et al. (2006) si individua la transizione tra le due dipendenze quando queste intersecano. In tal senso si è scelto di recepire i dati in LBM sufficientemente prima di tale valore di Re di transizione che varia a secondo del grado di vuoto. La figura 4-II illustra come, per ogni valore di ε , il numero punti considerati

nella regione (2) giungano fino a valori differenti di Re , a ribadire quanto appena discusso sulla modalità con cui si è individuata la regione di transizione.

Per sistemi molto diluiti, in cui $\varepsilon \rightarrow 1$, si è scelto di derivare i dati dall'applicazione diretta del modello di Turton e Levenspiel (1986) in 55 punti totali al variare del numero di Reynolds.

4.4 Un nuovo modello per il drag in sistemi monodispersi

Dalle osservazioni rilevate sinora il nuovo modello per il calcolo della forza di drag deve avere i seguenti requisiti:

- rispettare la correlazione di Turton e Levenspiel (1986) per $\varepsilon = 1$ e $0 < Re < 1050$, ovvero ricadere nel caso di moto intorno ad una singola sfera: la zona del dominio interessata è rappresentata in figura 4-II attraverso la linea continua (3), mentre i dati estratti dal modello TL sono indicati con quadratini bianchi;
- deve trovarsi in accordo con i valori delle simulazioni di Hill et al. (2001a e 2001b) per valori di Re che ricadono nella zona a dipendenza quadratica della forza di drag la cui estensione come detto varia per $0.36 \leq \varepsilon \leq 0.99$; Questo conferisce al modello la possibilità di rappresentare al meglio anche la zona immediatamente precedente la transizione di cui si sono sottolineate in precedenza le caratteristiche: in figura 4-II l'area di interesse è stata indicativamente assimilata alla regione (2) in grigio scuro, in cui sono stati presi in considerazione in dati indicati da dischi bianchi;
- per $0.40 \leq \varepsilon \leq 0.90$ e per $0 < Re < 1050$ deve riprodurre i valori delle simulazioni di van der Hoef et al. (2005), Beetstra (2005) e Beetstra et al. (2007b). In figura 4-II si tratta della regione (1) in grigio chiaro, in cui i punti corrispondenti ai dati LBM cui si è fatto riferimento sono stati indicati da dischi neri.

- deve avere una forma funzionale semplice per ridurre i tempi di calcolo rispetto a formulazioni complesse come le (3.31) e la (3.32). Si ricorda infatti come nel codice DEM-CFD sia necessario ottenere la forza di drag per ognuna delle particelle presenti. Quindi l'espressione analitica attraverso cui avviene il calcolo deve essere la più semplice possibile, possibilmente una forma basata essenzialmente su polinomi. Come già osservato, le (3.31) e la (3.32) invece, presentano radicali, potenze non intere e variabili esponenziali, ciò che allunga in maniera sensibile i tempi di calcolo e che rappresenta, quindi, un problema non trascurabile per l'obiettivo finale che ci si è posti.

Dalle imposizioni elencate si è optato per il nuovo modello proposto alla seguente forma funzionale:

$$f(\varepsilon, Re, 1, 1) = f_{mono}(\varepsilon, Re) = K_1 + K_2 \cdot \varepsilon^4 + K_3 \cdot (1 - \varepsilon^4), \quad (4.1)$$

dove

$$\left\{ \begin{array}{l} K_0 = \frac{1 - \varepsilon}{1 + 3\varepsilon}, \\ K_1 = \frac{1 + 128 K_0 + 715 K_0^2}{\varepsilon^2 (1 + 49.5 K_0)}, \\ K_2 = \frac{1 + 0.13 Re + 6.66 \cdot 10^{-4} Re^2}{1 + 3.42 \cdot 10^{-2} Re + 6.92 \cdot 10^{-6} Re^2} - 1, \\ K_3 = \left(\frac{2 Re^2}{1 + Re} \right) \cdot \left(\frac{-410\varepsilon + 9.2 \cdot 10^7 Re \cdot K_0^{20} + 1900\varepsilon^2 - 0.066 Re}{6600\varepsilon + 4.92 \cdot 10^{-4} Re - 43000\varepsilon^2 - 1.31 \cdot 10^{-4} Re^2 + 0.0738\varepsilon^3} \right). \end{array} \right. \quad (4.2)$$

Si nota come K_1 sia solo funzione del grado di vuoto in quanto rappresenta la forza adimensionale di puro drag quando $Re \rightarrow 0$: in pratica $f_{mono}(\varepsilon, 0) = K_1(\varepsilon)$; inoltre $K_1(1) = 1$. Vale poi che $K_2 + 1$ rappresenta l'espressione TL per moto intorno una

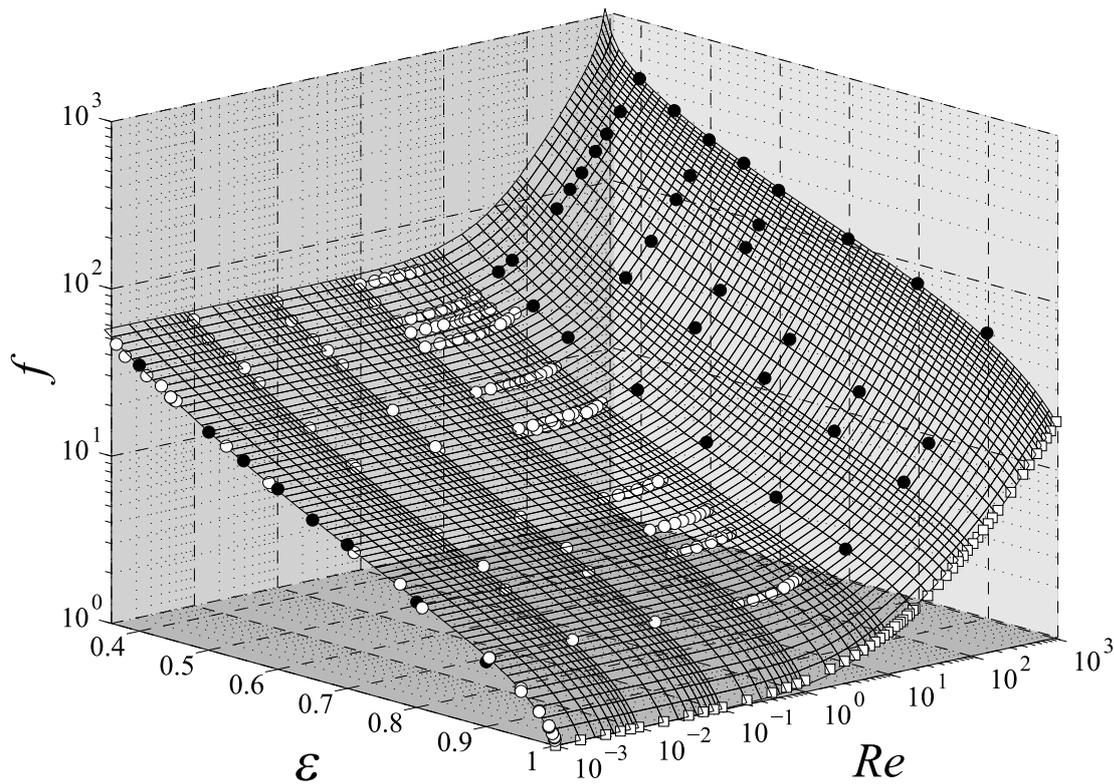


Fig. 4-III: Andamento del modello monodisperso. Forza di drag adimensionale in sistemi monodispersi in funzione del numero di Reynolds e del grado di vuoto. Dati provenienti da Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) [●]; Hill et al. (2001a e 2001b) [○]; derivati dal modello di Turton e Levenspiel (1986) [□].

singola sfera, per cui $f_{mono}(1, Re) = K_1(1) + K_2(Re)$. K_3 completa il calcolo in tutti gli altri casi e dipende sia da Re che da ε .

Nonostante la (4.1) sembri avere una forma parametrica complessa essa si può ritenere una polinomiale fratta ad esponenti interi: in 10^8 valutazioni consecutive nel dominio di interesse la nuova forma funzionale ha prodotto un risparmio sui tempi di calcolo pari all'80% rispetto al modello VBK dell'equazione (3.32).

La figura 4-III mostra l'andamento della (4.1) nel dominio di interesse ed evidenzia l'accordo con i dati di letteratura presi in esame.

A discapito di un numero leggermente superiore di parametri rispetto al modello VBK, la (4.1) presenta un ottimo accordo coi punti del dominio preso in esame: per tutti i dati considerati, si registra un errore medio dello 0.2% e massimo dell'8.3%. Questi valori ben si rapportano agli errori espressi dal modello VBK, ovvero del 2% in media, e del 63% massimo. Il coefficiente di determinazione globale R^2 risulta superiore al valore di 0.999.

Per bassi valori del numero di Reynolds e per un grado di vuoto intorno a 0.40 i miglioramenti rispetto il modello VBK sono generalmente piccoli, mentre per alti valori di ε e per Re moderato ed alto, il modello proposto è nettamente migliore e segue correttamente le relazioni di letteratura suffragate da accordo con i dati sperimentali (TL).

4.5 Considerazioni sull'accuratezza del modello monodisperso

Il confronto in forma tabellare tra i dati LBM e di letteratura selezionati, il nuovo modello (da qui in poi indicato come NM) ed i modelli VBK e HKL, viene operato in appendice A, nelle tabelle A-i, A-ii e A-iii.

Risulta interessante osservare l'andamento del nuovo modello in alcuni particolari valori di grado di vuoto al variare del numero di Reynolds. In particolare, ricordando la figura 3-V, si verifica mediante la 4-IV-(a) che il modello proposto rispetta il limite estremo di moto intorno ad una sfera isolata, sovrapponendosi per grado di vuoto unitario alla correlazione TL. Ricordando la 3-VI, la figura 4-IV-(b) illustra che per condizioni fluidodinamiche in cui sia trascurabile l'inerzia, il NM, oltre ad avere un buon accordo con tutti i punti del dominio, a bassi valori di ε segue più da vicino quello di Fand et al. (1987), che risulta essere il più accurato per alta frazione solida e numeri di Reynolds moderati.

Per quanto concerne il confronto grafico con i dati di van der Hoef et al. (2005), Beetstra (2005) e Beetstra et al. (2007b), si sono selezionate alcune curve di livello di grado di vuoto, ottenendo nelle figure 4-V, 4-VI e 4-VII al variare di Re un confronto con i valori previsti anche dai modelli VBK e HKL. Le barre di errore non sono state riportate perché non visibili nel range di variazione delle ordinate o perché in alcuni casi assenti nei dati LBM di riferimento.

Altro confronto grafico può essere effettuato tra i valori predetti dal nuovo modello e quelli LBM di partenza di Hill et al. (2001a e 2001b). Come già discusso i dati selezionati appartengono ad una regione, la (2) in tabella 4-i, che si è supposta a variazione quadratica della forza adimensionale di puro drag col numero di Reynolds: tali valori sono forniti dagli autori sotto forma di dato tabellare solo per $Re \rightarrow 0$; per valori superiori di questa variabile sono fornite invece delle correlazioni quadratiche del tipo $f = f_0 + \frac{1}{4} f_2 Re^2$, in cui i valori dei due coefficienti, come discusso nel precedente capitolo, variano a seconda del grado di vuoto a cui è riferita la prova numerica. Come già detto, ad ogni valore di ε simulato, si individua come numero di Reynolds di transizione quello in cui le due correlazioni fornite dagli autori, quadratica e lineare, si intersecano (Benyahia et al. 2006). Nell'estrarre i punti LBM, ad ogni ε considerato, ci si è sempre fermati sufficientemente prima di questo valore.

La figura 4-VIII mostra un confronto tra i dati LBM ricavati col metodo esposto in precedenza per $\varepsilon = 0.359$, con i valori previsti dal nuovo modello (NM) e dai modelli VBK e Fand et al. (1987), punto di riferimento molto valido a tali valori di concentrazione solida elevata. Sia i dati LBM, che il NM e quello VBK sono vicini ai valori previsti da Fand per $Re \rightarrow 0$ (tratto a dipendenza lineare), ma si nota la tendenza del NM ad avvicinarsi a quello di Fand in tutto il range di dipendenza dal Re (anche nel tratto a dipendenza quadratica), cosa che più avanti sarà dimostrata essere valida anche in regioni in cui il modello proposto viene applicato per estrapolazione.

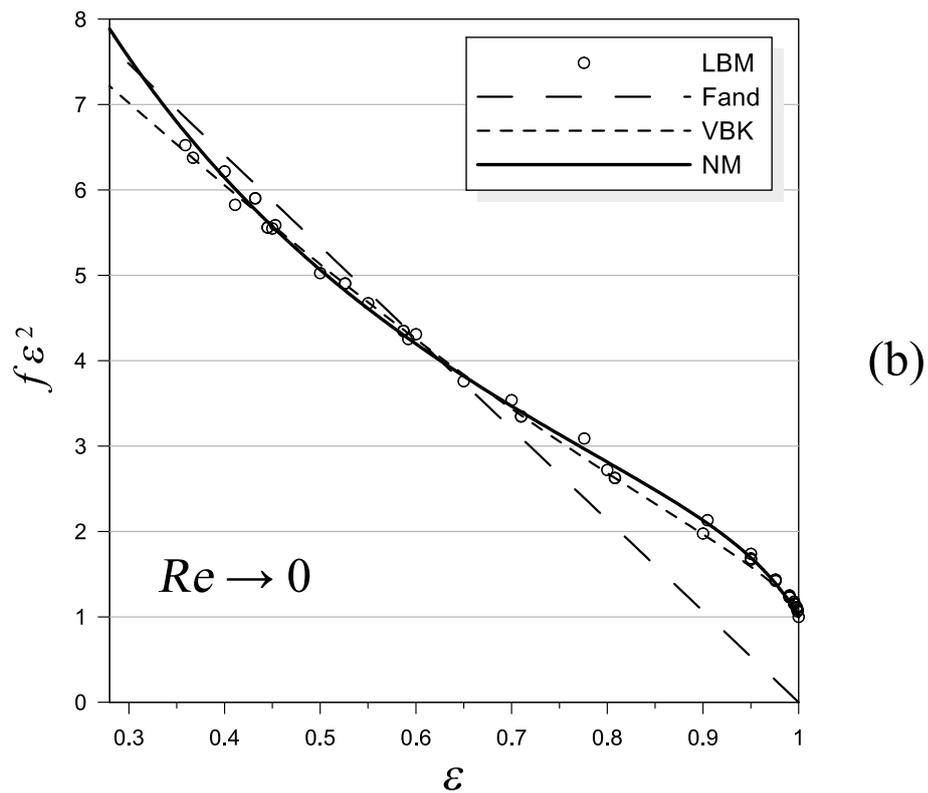
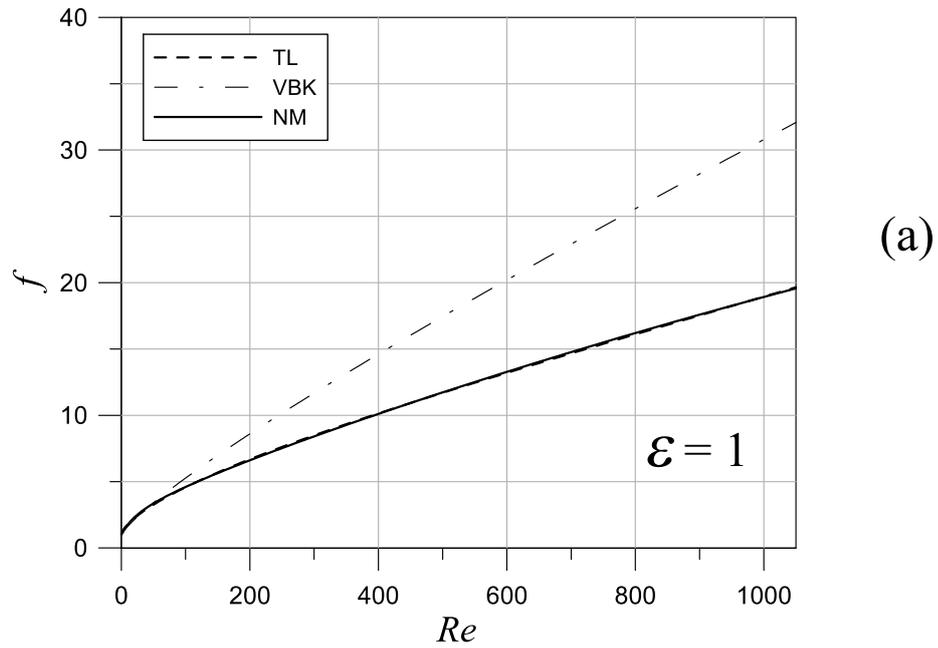


Fig. 4-IV: Sistemi estremamente diluiti ed in regime viscoso. La figura (a) mostra un confronto tra i modelli VBK e NM con TL: si osserva che il nuovo modello risulta indistinguibile da TL. La figura (b) dimostra come, per $\varepsilon < 0.36$, il nuovo modello tenda a quello di Fand et al. (1987), pur presentando un accordo ottimale con i dati LBM tratti da Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005), Beetstra et al. (2007b), Hill et al. (2001a e 2001b).

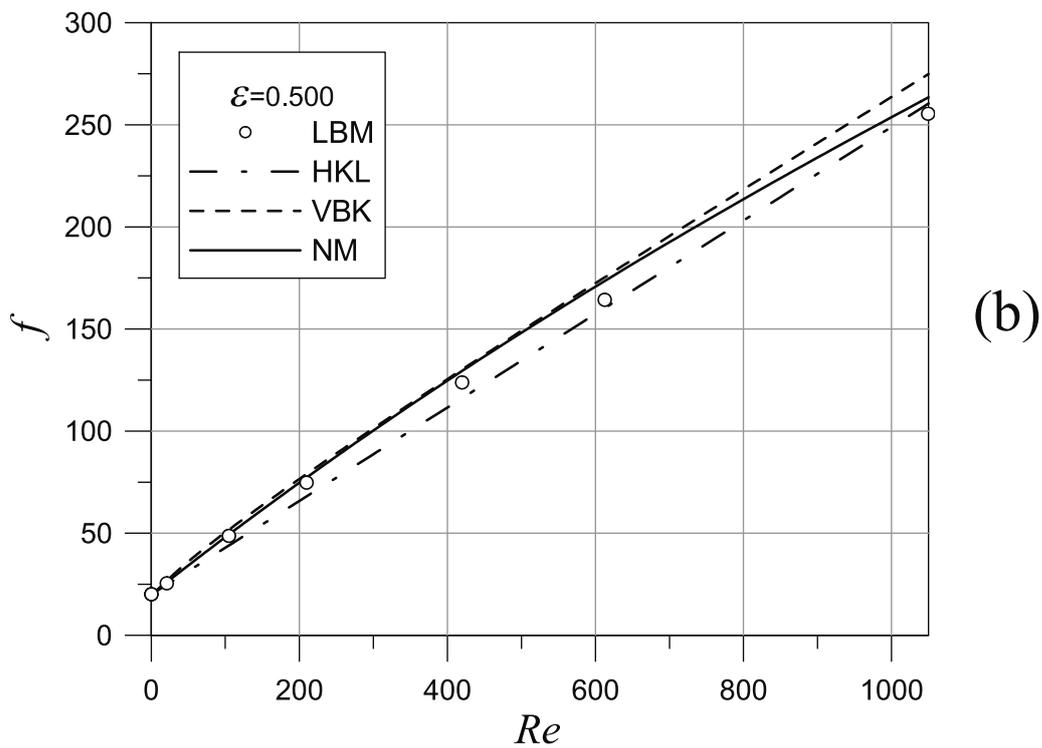
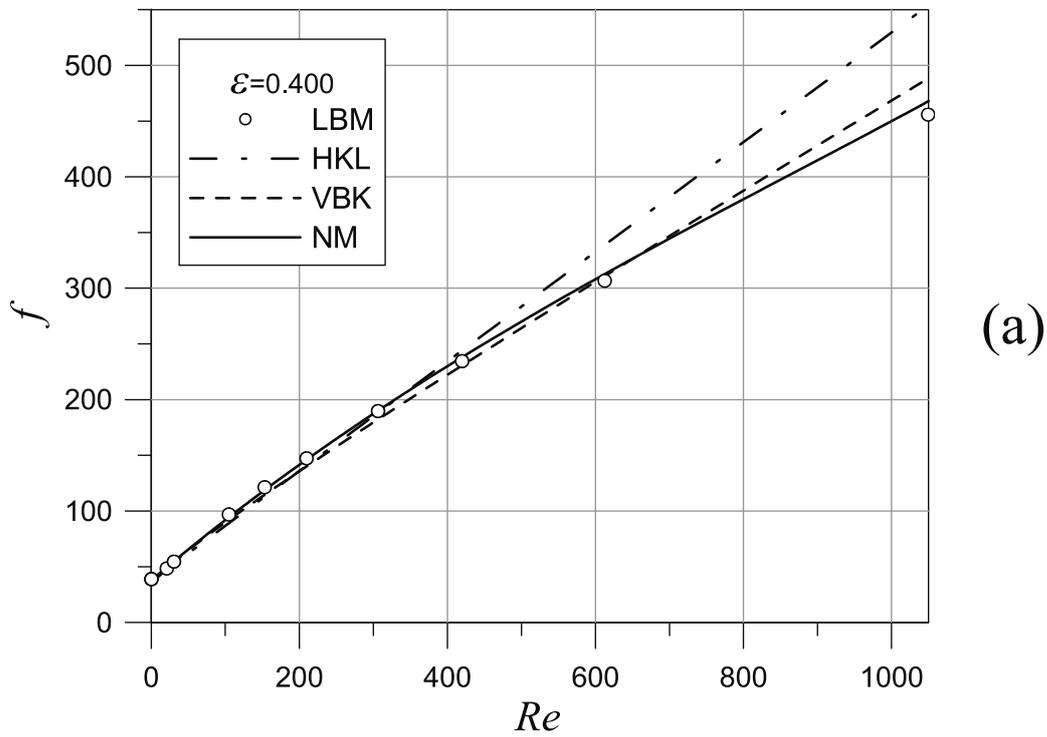


Fig. 4-V: Dettagli per $\varepsilon = 0.400$ (a) ed $\varepsilon = 0.500$ (b). Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (HKL e VBK) e con i dati LBM provenienti, ai gradi di vuoto selezionati, dalla regione (1) in tabella 4-i.

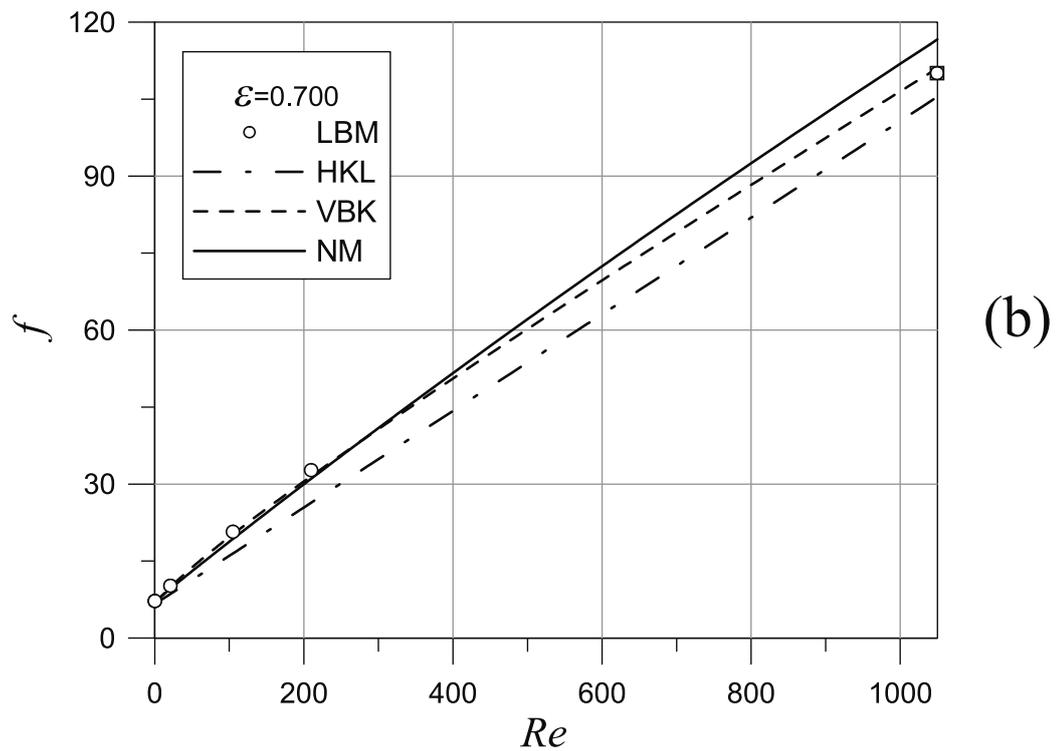
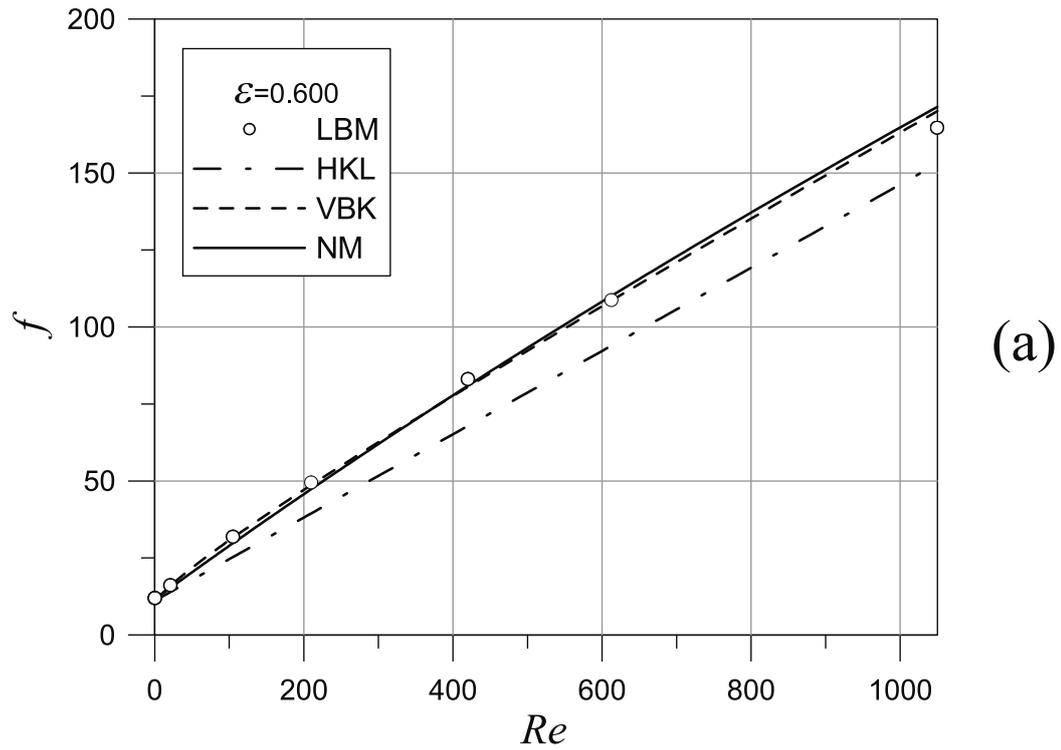


Fig. 4-VI: Dettagli per $\varepsilon = 0.600$ (a) ed $\varepsilon = 0.700$ (b). Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (HKL e VBK) e con i dati LBM provenienti, ai gradi di vuoto selezionati, dalla regione (1) in tabella 4-i.

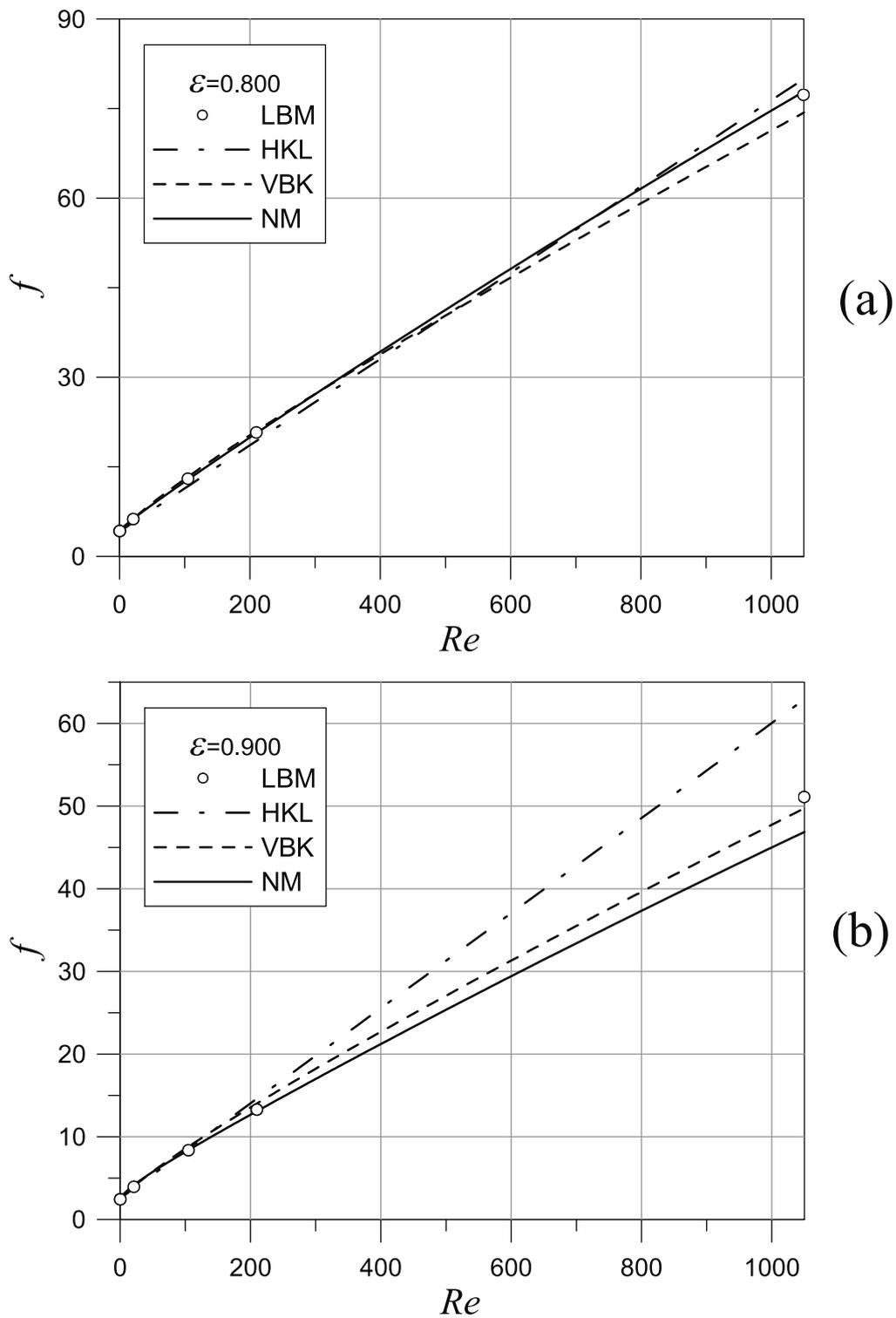


Fig. 4-VII: Dettagli per $\varepsilon = 0.800$ (a) ed $\varepsilon = 0.900$ (b). Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (HKL e VBK) e con i dati LBM provenienti, ai gradi di vuoto selezionati, dalla regione (1) in tabella 4-i.

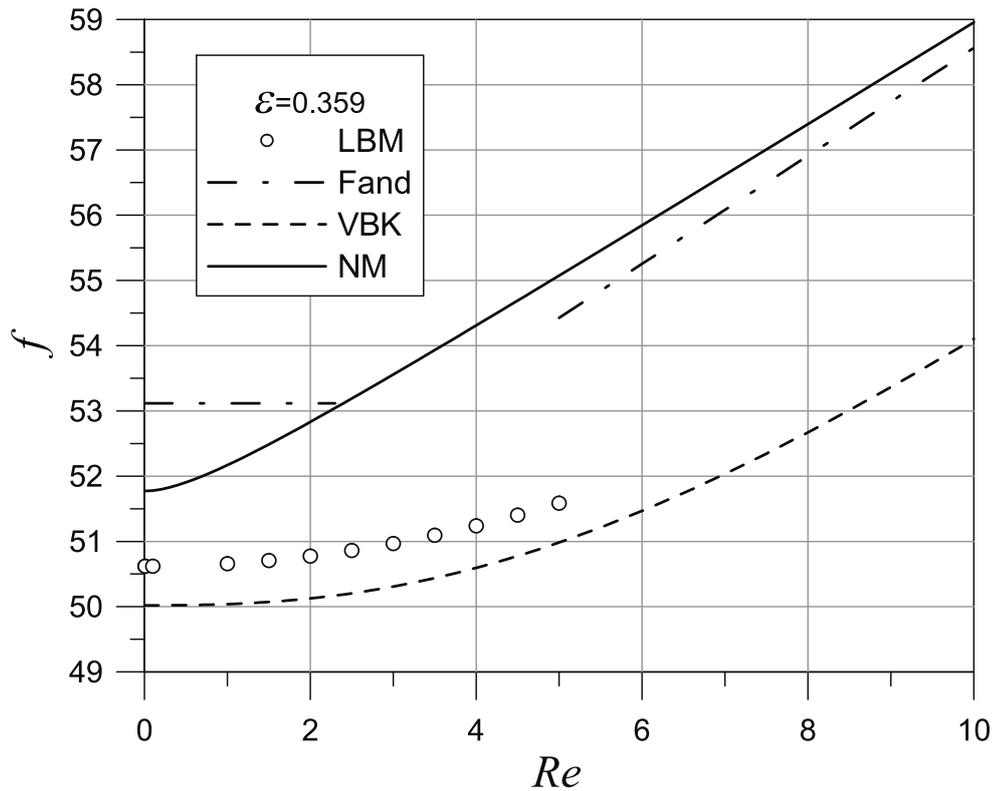


Fig. 4-VIII: Dettagli per $\varepsilon = 0.359$. Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (Fand et al. 1987 e VBK) e con i dati LBM provenienti, al grado di vuoto selezionato, dalla regione (2) in tabella 4-i.

Nella zona supposta a dipendenza quadratica, i valori della forza adimensionale di puro drag sono stati analizzati per $\varepsilon = 0.432$ nella figura 4-IX-(a), $\varepsilon = 0.592$ nella figura 4-IX-(b), $\varepsilon = 0.776$ nella figura 4-X-(a) e $\varepsilon = 0.904$ nella figura 4-X-(b).

4.6 Considerazioni sulla predittività del nuovo modello

Visto l'ottimo accordo con i punti del dominio presi in considerazione non rimane che fare qualche considerazione nelle zone in cui siano assenti valori LBM con cui confrontarsi.

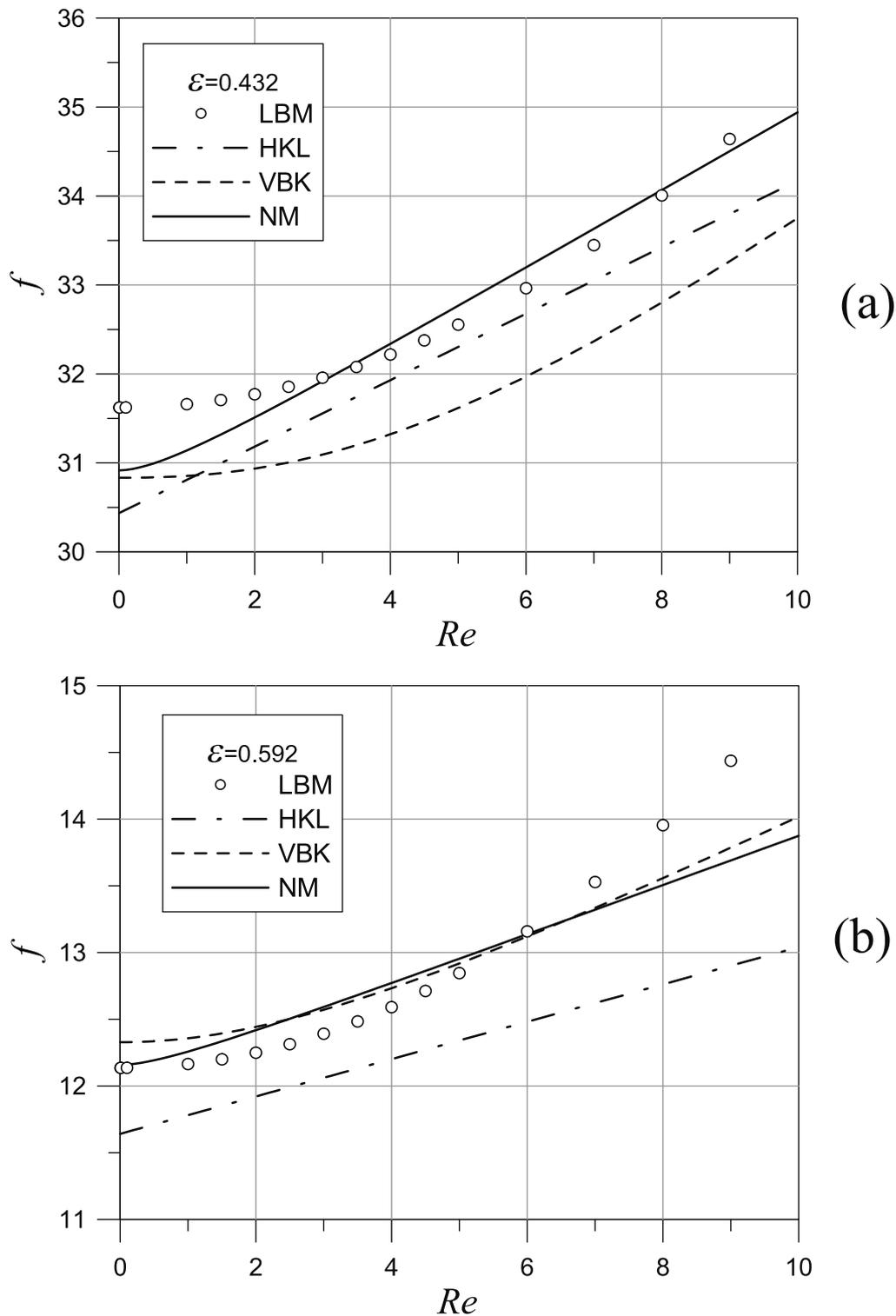


Fig. 4-IX: Dettagli per $\epsilon = 0.432$ (a) ed $\epsilon = 0.592$ (b). Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (HKL e VBK) e con i dati LBM provenienti, ai gradi di vuoto selezionati, dalla regione (2) in tabella 4-i.

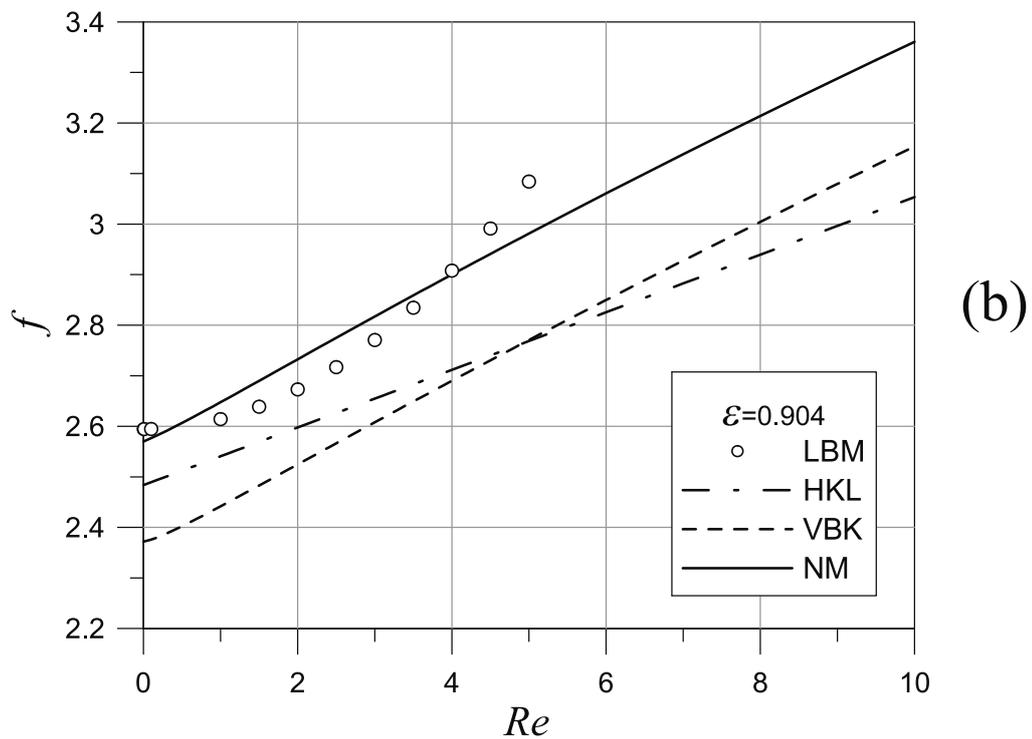
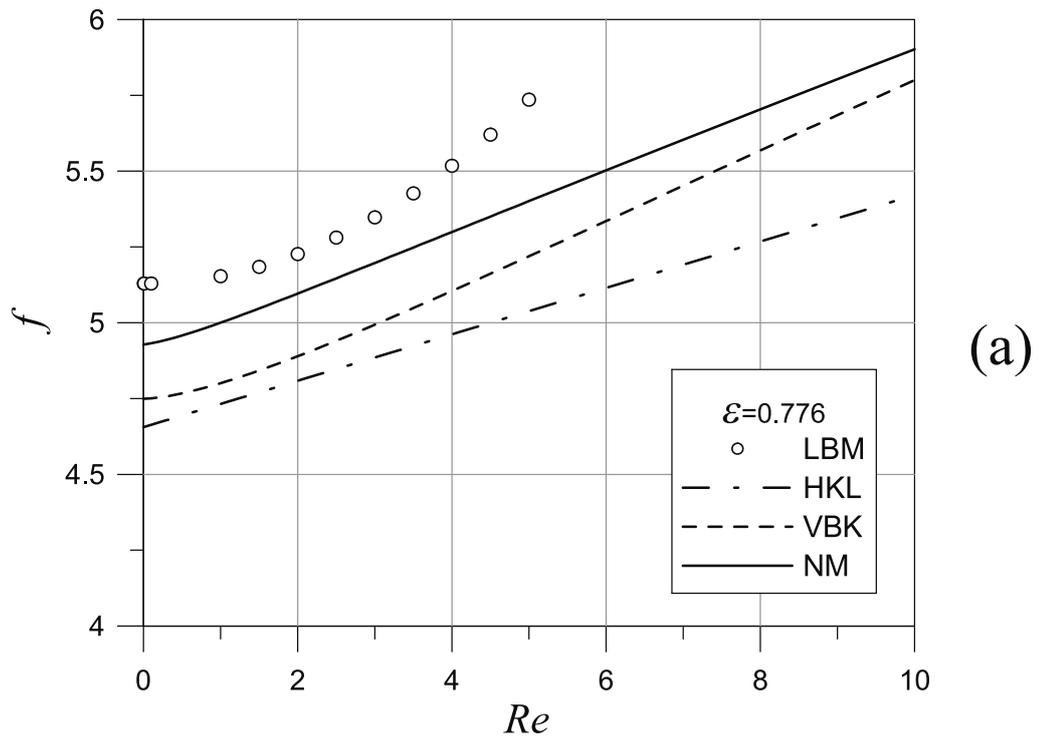


Fig. 4-X: Dettagli per $\varepsilon=0.776$ (a) ed $\varepsilon=0.904$ (b). Confronto del nuovo modello (NM) con altri modelli di letteratura (HKL e VBK) e con i dati LBM provenienti, ai gradi di vuoto selezionati, dalla regione (2) in tabella 4-i.

Per valori del grado di vuoto compresi tra 0.9 ed 1.0, ci si aspetta che il nuovo modello passi dai valori previsti dalle simulazioni VBK a quelli previsti dal modello TL. I modelli che in letteratura possono essere utilizzati per un confronto in sistemi diluiti e che prevedono accordo col moto intorno ad una singola sfera sono quelli di Wen e Yu (1966) e di Di Felice (1994), cui ci si riferirà nel seguito rispettivamente con gli acronimi di WY e DF. La figura 4-XI-(b) mostra come, per $\varepsilon = 0.970$ il NM si avvicini notevolmente ai valori predetti da quello DF, al contrario di quanto accade per il modello VBK, che inizia quella divergenza che diventerà molto marcata a valori di grado di vuoto unitari. È stato riportato anche l'andamento del modello WY a titolo di confronto e perché spesso usato in letteratura in sistemi diluiti.

Il modello per sistemi polidispersi proposto in questo lavoro di tesi richiede l'uso, come si vedrà più avanti, di quello monodisperso da applicare su un sistema a grandezze mediate. Siccome con la polidispersione si raggiungono bassissimi gradi di vuoto (prossimi a 0.30), si può immaginare come il modello monodisperso proposto debba fornire valori quanto più accurati della forza di drag adimensionale proprio nella zona ad alta concentrazione solida. I dati LBM presi in considerazione partono da $\varepsilon = 0.359$: nei sistemi a più componenti si registrano valori anche molto più bassi di questo, ed è dunque necessario verificare come si comporta il NM in questa regione. La figura 4-XI-(a) mostra, in tal senso, come già previsto ed anticipato, che il NM segue da vicino quello di Fand, discostandosi sensibilmente da quello VBK.

Al fine di validare il modello VBK, Beetstra (2005) ha condotto degli esperimenti a letto fluidizzato con particelle da 1, 2 e 4 mm, in modo da ottenere un grado di vuoto intorno a 0.37 e con liquidi di caratteristiche tali da garantire Re bassi, medi ed alti a seconda delle necessità. Per questi esperimenti il confronto tra il nuovo modello e quello VBK non sortisce considerazioni interessanti a bassi valori di Re , visto che per entrambi le correlazioni gli errori si mantengono al di sotto di un 12% che viene

apprezzato dagli autori come errore sperimentale ammissibile. La figura 4-XII-(a) mostra che per valori intermedi di Re il nuovo modello coglie i punti sperimentali con un margine di errore che rientra in quello sperimentale, mentre quello VBK raggiunge errori del 20%, addirittura più elevati per valori di Re più alti, come in figura 4-XII-(b); il nuovo modello mantiene, invece, l'errore sempre ben sotto il 12% sperimentale.

4.7 Scelta dell'approccio da usare per il nuovo modello polidisperso

Come fatto per il modello monodisperso, anche per quello polidisperso è necessario decidere la strategia da seguire. La strada che si è scelto di percorrere fa riferimento a quanto discusso nell'ottenimento della (3.9). Quest'ultima equazione manca solo di scelte verso la determinazione di un modello per la forza agente su una singola specie e verso la definizione di grandezze statistiche rappresentative in ambito fluidodinamico e particellare. In questo paragrafo si valutano gli effetti che queste scelte strategiche possono determinare sul risultato finale.

4.7.1 Effetti della definizione di un diametro medio

Si è già sottolineato come la (3.12) e la (3.13), permettano la definizione della forza adimensionale media di puro drag a partire da una scelta sul diametro medio da utilizzare: sull'uso, in tal senso, del diametro di Sauter come rappresentativo della fase particellare, si sono addotte motivazioni relative solo all'ottimo accordo con i dati sperimentali. Fermo restando questo che rimane un dato di fatto, si vogliono addurre a questa scelta motivazioni che siano anche analitiche.

Si immagini un sistema polidisperso in cui il contributo delle forze inerziali sia trascurabile ed in cui il grado di vuoto sia piccolo abbastanza da ritenere valida la legge di Darcy. Riguardo a quest'ultima, Carman (1937) fornisce una correlazione per il calcolo della permeabilità in funzione del raggio idraulico R_h , da cui:

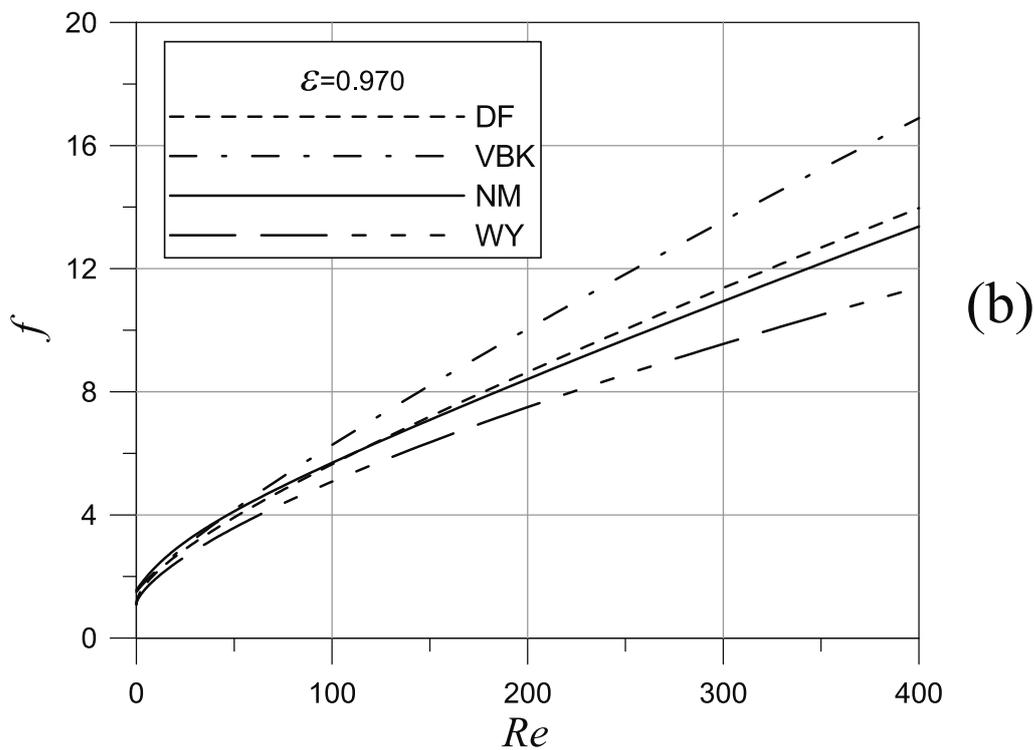
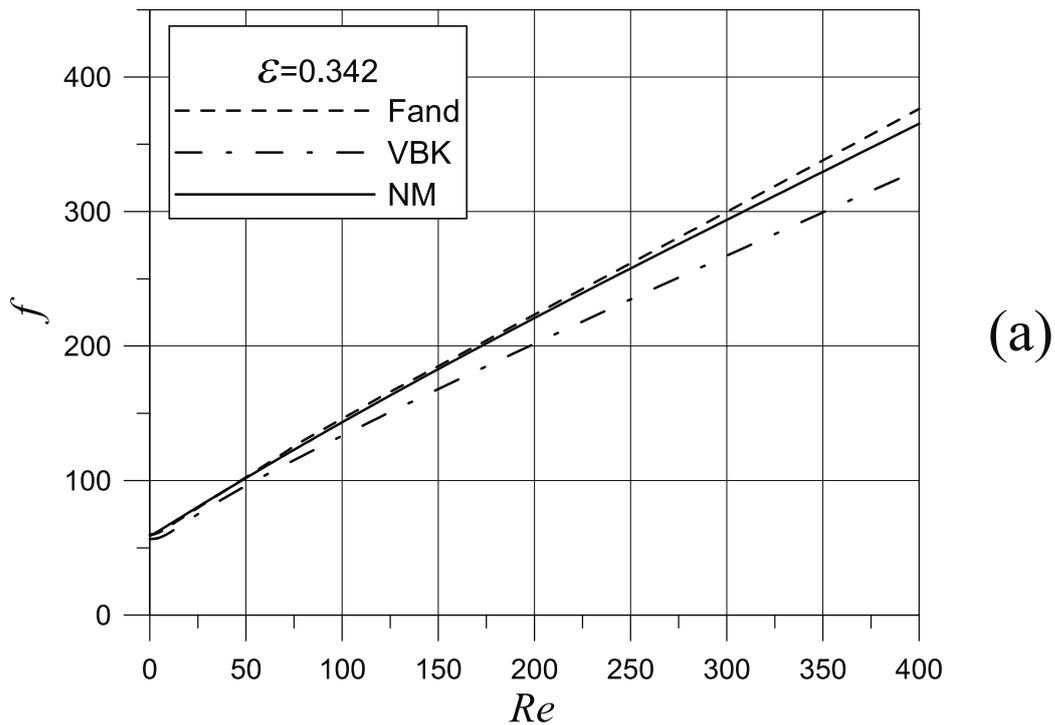


Fig. 4-XI: Dettagli per $\varepsilon=0.342$ (a) ed $\varepsilon=0.970$ (b). Predizioni del nuovo modello (NM) in confronto ai modelli di Fand et al. 1987 e VBK per sistemi densi (a) ed in confronto a quelli di WY, DF e VBK per sistemi diluiti (b).

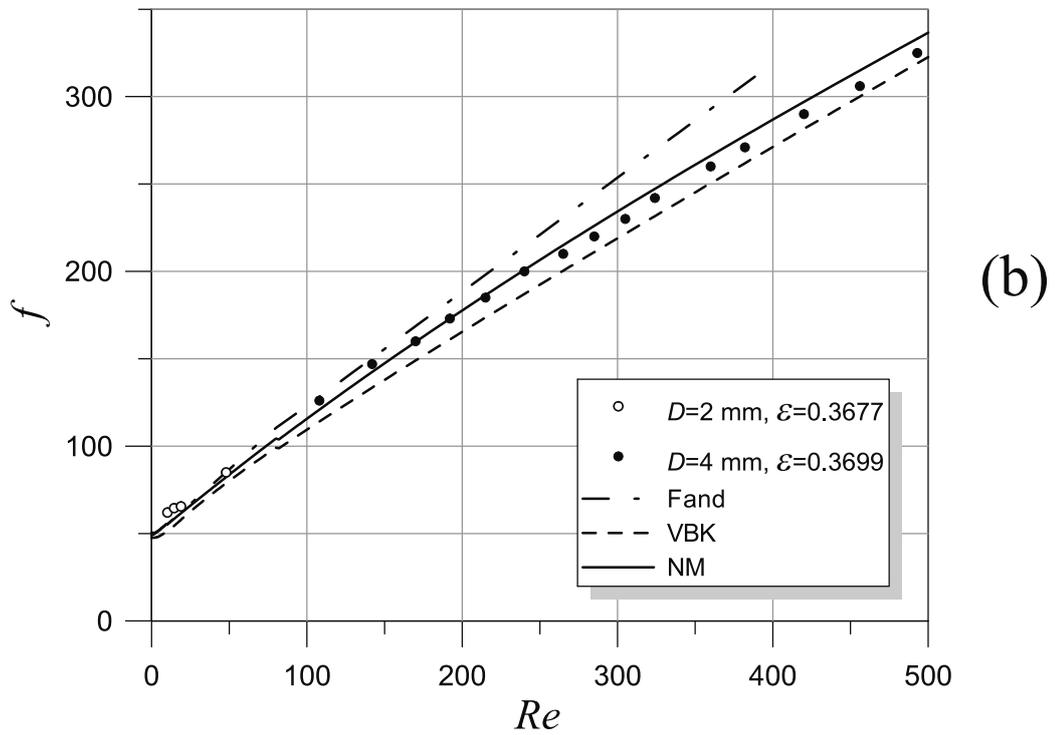
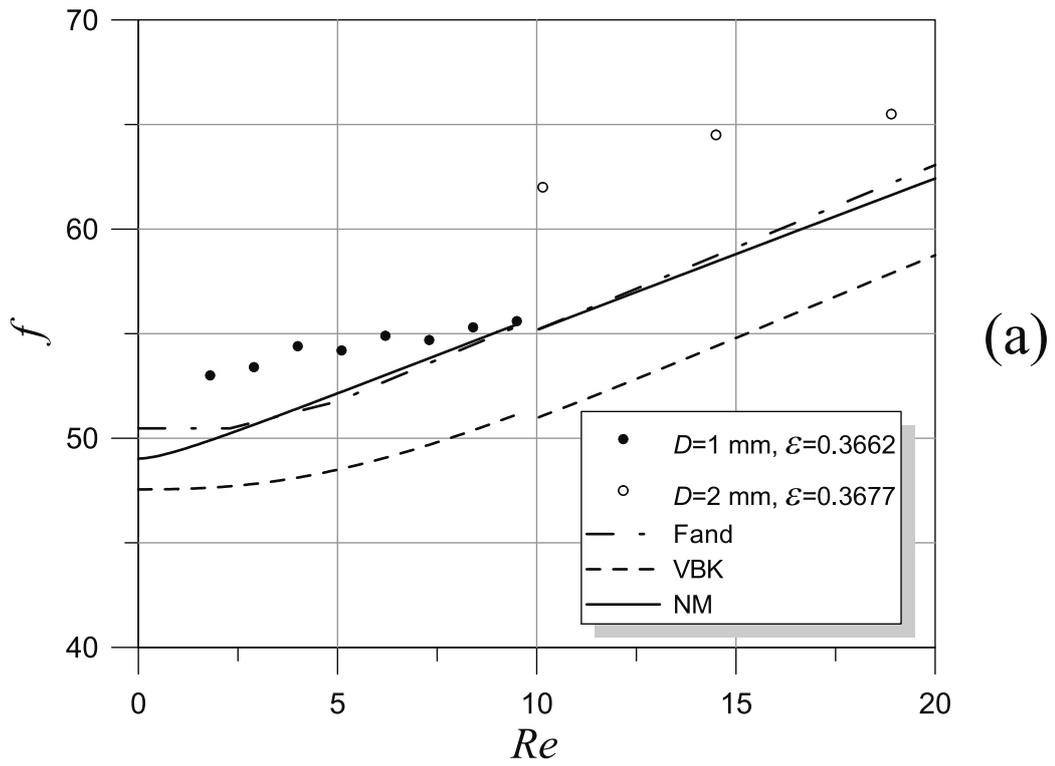


Fig. 4-XII: Confronto con dati sperimentali in sistemi densi. Confronto del nuovo modello ed altri modelli di letteratura (Fand et al. 1987 e VBK) con dati sperimentali di Beetstra (2005) a bassi (a) e medi (b) Re .

$$-\nabla p = \frac{\kappa}{\varepsilon} \mu u \frac{1}{R_h^2}, \quad (4.3)$$

κ essendo una costante pari a 5, mentre il raggio idraulico viene definito come il rapporto tra il volume totale dei pori (il volume di vuoto nel sistema) e la superficie lambita dal flusso fluido. ∇p ed u sono le componenti nella direzione del moto dei loro vettori. Dalla (3.11), nel caso polidisperso nel volume di riferimento ψ si ricava:

$$R_h = \frac{\varepsilon \psi}{\sum_{j=1}^{M_s} M p_j \pi D_{s,j}^2} = \frac{\varepsilon \psi}{\sum_{j=1}^{M_s} M p_j D_{s,j}^2} \cdot \frac{\sum_{j=1}^{M_s} M p_j D_{s,j}^3}{6 \cdot \sum_{j=1}^{M_s} M p_j \pi \frac{D_{s,j}^3}{6}} = \frac{\varepsilon \psi \bar{D}}{6 \cdot (1-\varepsilon) \psi} = \frac{\bar{D}}{6} \frac{\varepsilon}{(1-\varepsilon)}, \quad (4.4)$$

mentre per il caso monodisperso il diametro superficie-volume coincide con quello dell'unica specie solida presente. Sostituendo la (4.4) nella (4.3) si ottiene l'espressione per il calcolo delle perdite di carico globali nel letto fluido:

$$-\nabla p = 36 \kappa \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu u}{\bar{D}^2}, \quad (4.5)$$

o, analogamente, usando la definizione di forza adimensionale di puro drag e ricordando la (3.23)

$$-\nabla p = 18 \mu u \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot 2 \kappa \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} \frac{1}{\bar{D}^2} = 18 \mu u \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \frac{f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re} \rightarrow 0)}{\bar{D}^2}. \quad (4.6)$$

Si è voluta evidenziare con f_{mono} la forza adimensionale che secondo la (3.23) agisce in condizioni di moto laminare nel sistema. Se si guarda alla sua espressione algebrica, essendo indipendente dal diametro, essa può essere considerata anche come la forza adimensionale di puro drag che agirebbe in un sistema di pari grado di vuoto con diametro particellare pari a quello medio di Sauter. In altre parole, nelle condizioni fluidodinamiche esposte:

$$f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re} \rightarrow 0) = \overline{f}(\varepsilon, \overline{Re} \rightarrow 0, 1, 1). \quad (4.7)$$

Beetstra et al. (2007b) hanno esteso questo risultato a tutti i regimi di moto fluido, trovando riscontro nelle simulazioni LBM effettuate: per cui, quando necessiti calcolare la forza adimensionale media di puro drag (ma vale anche per quella netta lo stesso principio), si può ottenerne con ottima approssimazione il valore da un modello per casi monodispersi a parità di grado di vuoto e diametro medio (ovvero numero di Reynolds medio).

Ma la cosa più interessante, che rappresenta poi l'obiettivo che ci si era posti ad inizio paragrafo, è che le (4.6)–(4.7) testimoniano che, almeno nel caso laminare, la scelta effettuata con la (3.10) di mediare il diametro alla Sauter risulta corretta: questo risulta evidente dal confronto delle equazioni appena citate. Non si può essere sicuri che ciò valga anche nei casi in cui siano da considerare le forze inerziali, ma in quei casi si ha l'avallo del dato sperimentale. Infine, ragionando a ritroso, se si fosse utilizzata un'altra forma mediata del diametro, sicuramente questo avrebbe indotto ad una definizione di \overline{f} , diversa dalla (3.13) e non calcolabile come forza adimensionale di puro drag che agirebbe qualora il sistema fosse caratterizzato da un diametro monodisperso e pari a quello medio (f_{mono}).

4.7.2 Effetti della definizione di una forza per la singola specie

In questo paragrafo si intende cambiare punto di vista sul problema. Se si ritiene valido il modello CK (quindi in regime fluidodinamico viscoso), la (4.5) è l'espressione che necessita utilizzare per valutare le perdite di carico. Questa può essere ricondotta a variabili indipendenti dalla definizione di un diametro medio, ovvero:

$$-\nabla p = 36\kappa \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \mu u \left(\sum_{k=1}^{M_s} \frac{x_k}{D_{s,k}} \right)^2. \quad (4.8)$$

Facendo qualche passo indietro e tornando alla (3.9), ricavata sotto ipotesi che concordano con quelle che rendono valida la (4.8), si può ragionare per induzione, valutando l'effetto che la scelta di un modello per la forza agente sulla j -esima specie induce. Se, sostituendo nella (3.9) il modello prescelto per f_j si ottenesse una formulazione diversa dalla (4.8), allora questo, in regime viscoso, corrisponderebbe ad un errore nella valutazione della perdita di carico complessiva, che è interessante valutare. Se ad esempio si ritenesse valido l'approccio seguito dalle (3.37), in regime di moto laminare si dovrebbe scrivere

$$f_j(\varepsilon, Re \rightarrow 0, y_j, y_m) = x_j \left[2\kappa \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} \right], \quad (4.9)$$

da cui, applicando la (3.9) varrebbe

$$-\nabla p = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j=1}^{M_s} \frac{Mp_j F_{d,j}}{\psi} = 36\kappa \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \mu u \cdot \frac{\sum_{k=1}^{M_s} (Mp_k D_{s,k}^2)^2}{\left(\sum_{k=1}^{M_s} Mp_k D_{s,k}^3 \right)^2}. \quad (4.10)$$

L'ultimo membro a prodotto nella (4.10) è ben distante da quello della (4.8) che correttamente dovrebbe trovarsi al suo posto nelle ipotesi considerate: esso rappresenta una misura dell'errore che l'assunzione fatta nella (4.9) induce.

Stesso problema si verifica se si usa come definizione di drag adimensionale

$$f_j(\varepsilon, Re \rightarrow 0, y_j, y_m) = 2\kappa \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2}. \quad (4.11)$$

In questo caso, infatti si ottiene

$$-\nabla p = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j=1}^{M_s} \frac{Mp_j F_{d,j}}{\psi} = 36\kappa \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \mu u \cdot \frac{\sum_{k=1}^{M_s} Mp_k D_{s,k}}{\sum_{k=1}^{M_s} Mp_k D_{s,k}^3}, \quad (4.12)$$

in cui l'ultimo membro a prodotto differisce ancora una volta da quello della (4.8).

L'ultimo caso considerato è un po' la sintesi dell'errore che si commetterebbe in un codice DEM-CFD se si calcolasse la forza di drag con un metodo valido per sistemi monodispersi.

Se, invece, in accordo con la derivazione di van der Hoef et al. (2005) e con le (3.53) si definisce

$$f_j(\varepsilon, Re \rightarrow 0, y_j, y_m) = y_j \left[2\kappa \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} \right], \quad (4.13)$$

allora si riottiene precisamente la (4.8). Più in generale questo risultato si ottiene ogni qual volta si scelga un coefficiente premoltiplicativo Ω_j , tale che verifichi la condizione illustrata nella seconda delle (3.45).

4.7.3 Effetti della definizione di indici di polidispersione

Già nel precedente capitolo, attraverso la (3.20), si è osservato che il solo indice di polidispersione specifico per la specie j non basta a descrivere la monodispersione nel sistema, se non nel caso particolare in cui $M_s = 2$. Si vuole ora porre l'accento sull'errore in cui si può incorrere se in un sistema polidisperso con $M_s > 2$ si voglia valutare la forza di drag col solo ausilio delle variabili ε , \overline{Re} ed y_j , dimostrando che esse non sono sufficienti a descrivere la condizione del sistema in cui si trova immersa la i -esima particella appartenente alla specie j .

Si supponga, ad esempio, che il sistema da studiare sia quello illustrato nella figura 3-VIII, dove $M_s = 3$. Se il diametro della specie j (in grigio scuro), cui appartiene la particella i , ha un diametro pari a quello medio, si verifica che $y_j = 1$, pur non essendo il sistema monodisperso. Volendo dare una forma analitica a questa eventualità, nel caso più generale di sistema polidisperso con $M_s > 2$, si dimostra che $y_j = 1$ ogni qual volta si verifichi che:

$$D_{s,j} = \frac{1-x_j}{\sum_{k=1, k \neq j}^{Ms} (x_k / D_{s,k})}. \quad (4.14)$$

La (4.14) testimonia che l'uso del solo indice di polidispersione specifico non basta a descrivere la dispersione globale dei diametri nel sistema. Se si applicasse il modello VBK alla i -esima particella appartenente alla specie j , si otterrebbe la medesima forza adimensionale di puro drag sia nelle condizioni indicate dalla (4.14), sia in condizioni effettivamente monodisperse. In pratica, il modello VBK non riesce a concentrare intorno alla particella oggetto di indagine informazioni inerenti la distribuzione dei diametri nel sistema, considerato nel suo complesso, se non per sistemi bidispersi come dimostrato con la (3.20). Si evince che, volendo costruire un modello per sistemi polidispersi, valido in generale indipendentemente dal numero di specie presenti, bisogna far riferimento ad altri parametri che superino questo limite. Si potrebbe pensare di tenere conto di tutti gli Ms diametri, ma è assolutamente equivalente, come visto con la (3.20), considerare il solo indice di polidispersione media y_m .

Un'ultima osservazione va fatta su cosa implichi verificare che nel sistema $y_m = 1$: dalle (1.44) e (3.36) si ottiene che

$$y_m = \sum_{k=1}^{Ms} \left(x_k \cdot \frac{D_{s,k}}{D} \right) = \frac{D_{avg}}{D} = 1 \Rightarrow \bar{D} = D_{avg}. \quad (4.15)$$

Ciò significa che, quando il sistema è mediamente monodisperso, qualsiasi definizione di diametro medio esprime il medesimo valore.

4.7.4 Strategia scelta per la ricerca del nuovo modello

Per i motivi sinora adottati, si è scelto di definire il nuovo modello usando un approccio simile a quello di Hoef et al. (2005), ampliando le conclusioni a cui si è giunti anche al caso inerziale e facendo uso di un parametro aggiuntivo y_m .

4.8 Modello per il drag in matrici di particelle polidisperse

Come già accennato in apertura di capitolo, si è scelto di ricercare un nuovo modello per il calcolo della forza di interazione anche per sistemi polidispersi, prendendo spunto da considerazioni scaturite dall'analisi di sistemi particellari soggetti a campo di moto fluido di regime laminare. Si è già discusso di come la (4.6) in tali condizioni fluidodinamiche richiami la (3.10) e suggerisca l'uso del diametro di Sauter, definito nella (3.12), come rappresentativo della tipica particella soggetta ad interazione col fluido. Sempre la (4.6), ottenuta in condizioni fluidodinamiche in cui siano trascurabili le forze inerziali rispetto a quelle viscosi, suggerisce come definizione di forza adimensionale media di puro drag quella ottenibile da un modello monodisperso nelle stesse condizioni di grado di vuoto e numero di Reynolds, ma con particelle di diametro pari a quello medio di Sauter. Tali risultati sono stati ampliati anche ai regimi di moto in cui prevalgano le forze inerziali attraverso i lavori di van der Hoef et al. (2005), Beetstra (2005) e Beetstra et al. (2007b), giungendo alla (3.10), in cui l'uso del diametro di Sauter come medio particellare lascia definite le forze adimensionali medie attraverso le (3.13) e (3.16). Seguendo questa tipologia di approccio le perdite di carico totali del sistema sono calcolate in maniera accurata: affinché ciò accada, in accordo con la derivazione effettuata mediante le (3.38)-(3.41), la forza adimensionale media netta per una particella appartenente alla j -esima specie deve essere definita come

$$n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \alpha_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot \bar{n}(\varepsilon, \overline{Re}) = \alpha_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot n_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}), \quad (4.16)$$

mentre per la forza adimensionale di puro drag è analogo scrivere

$$f_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \Omega_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot \bar{f}(\varepsilon, \overline{Re}) = \Omega_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}). \quad (4.17)$$

Il problema si sposta sulla definizione dei coefficienti di specificazione sulla singola specie della forza adimensionale: essi necessariamente devono obbedire alle (3.45)

Tab. 4-ii: Dati di letteratura selezionati per l'ottenimento del modello polidisperso.

<i>Origine dei dati</i>	<i>Intervallo ε</i>	<i>Intervallo \overline{Re}</i>	<i>Intervallo y_j</i>	<i>N° dati</i>	<i>Gruppo dati</i>
Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005), Beetstra et al. (2007b)	0.35–0.90	0–500	0.44–2.52	330	(1)
Yin e Sundaresan (2009b).	0.60–0.90	0	0.36–3.25	70	(2)

Per $\overline{Re} = 0$ si intende un regime di moto viscoso.

perché il bilancio di forze globale sia rispettato e la perdita di carico totale sia calcolata con accuratezza. Van der Hoef et al. (2005) hanno ottenuto, per estrapolazione, nel caso limite che $D_{s,j} / D_{s,k} \rightarrow 0$, una funzionalità per α_j attraverso la prima delle (3.53). α_j risulta indipendente da y_m perché riferito a sistemi a due soli componenti solidi.

Gli autori hanno corredato le loro teorie con 330 prove di simulazione in LBM di sistemi bidispersi in cui $0.44 \leq y_j \leq 2.52$, $0.35 \leq \varepsilon \leq 0.90$ e $Re = 0, 10, 100, 500$ (tabella 4-ii). La figura 4-XIII, mostra i valori del coefficiente di specificazione, provenienti dalle simulazioni (α^{sim}), a confronto con quelli predetti dal modello teorico (α^{pred} , dischi neri). Appare evidente una divergenza dei valori che ha spinto gli autori a correggere il modello teorico attraverso la (3.54): nella figura 4-XIII si trova riscontro del miglioramento ottenuto (α^{pred} , dischi chiari). La (3.54), oltre alla deviazione dal caso ideale, derivato analiticamente per moto confinato in regime viscoso, porta con sé una serie di contraddizioni di cui si è discusso nel precedente capitolo: prime fra tutte quelle riguardanti un permanente errore commesso sulla perdita di carico totale del sistema, e nei casi limite di sistema estremamente diluito o monodisperso. L'obiettivo che ci si pone è quello di ideare un modello per i coefficienti di specificazione del drag che rispetti le (3.45) e non contraddica la derivazione teorica per $D_{s,j} / D_{s,k} \rightarrow 0$: il modello sarà ottenuto a partire da dati LBM in sistemi bidispersi (elencati in tabella 4-ii), ma sarà analiticamente derivato ed in seguito testato per il più generale caso polidisperso.

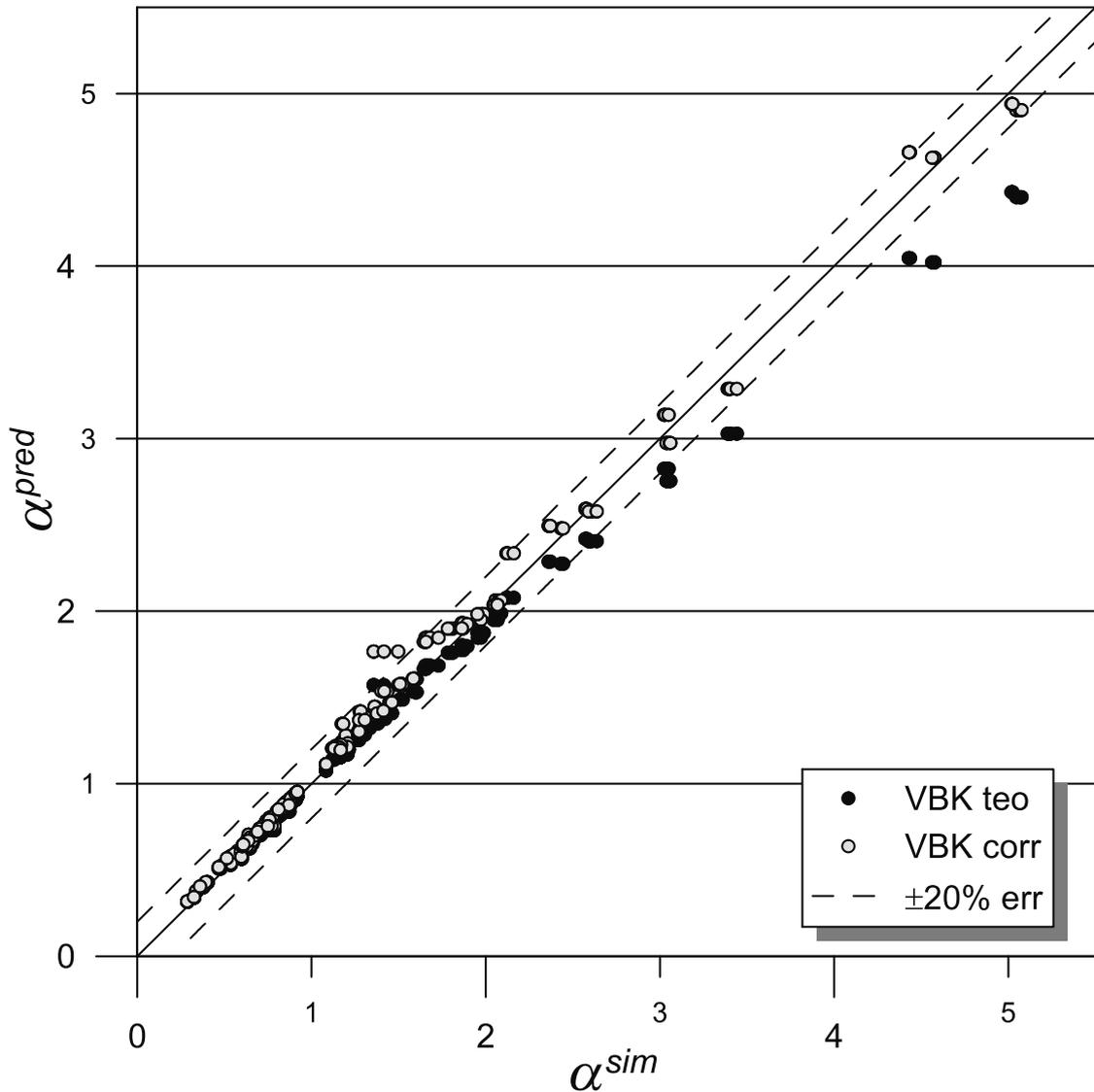


Fig. 4-XIII: Modello bidisperso VBK teorico e corretto. Confronto dei i valori del coefficiente di specificazione (α^{pred}) previsti dal modello VBK teorico e corretto con quelli derivanti (α^{sim}) dall'analisi dei dati LBM del gruppo (1) in tabella 4-ii.

4.8.1 Correzione e revisione del modello VBK

Per la proposizione di un nuovo modello si vogliono mantenere le caratteristiche positive del modello VBK cercando di limare le problematiche precedentemente descritte. A tal fine si inserisce un fattore correttivo C_j , dipendente non solo dal grado di

vuoto ma anche dalla composizione generale del sistema e dal grado complessivo di polidispersione dello stesso, attraverso i parametri y_m e y_j :

$$\alpha_j(\varepsilon, y_j, y_m) = \varepsilon \cdot y_j + (1 - \varepsilon) \cdot y_j^2 + C_j(\varepsilon, y_j, y_m). \quad (4.18)$$

Le equazioni (4.16)–(4.17) diventano

$$n_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = [\varepsilon \cdot y_j + (1 - \varepsilon) \cdot y_j^2 + C_j(\varepsilon, y_j, y_m)] \cdot n_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}), \quad (4.19)$$

$$f_j(\varepsilon, \overline{Re}, y_j, y_m) = \left[y_j + \frac{1}{\varepsilon} C_j(\varepsilon, y_j, y_m) \right] \cdot f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}). \quad (4.20)$$

Il coefficiente correttivo C_j deve rispettare le seguenti condizioni:

- 1 $C_j \rightarrow 0$ se il sistema tende ad essere monodisperso, ovvero se per ogni specie $k = 1..Ms$ accade che $y_k \rightarrow 1$; ovviamente ne deriva che, come visto, $y_m \rightarrow 1$. In tal caso per una qualsiasi i -esima particella delle Mp presenti nel volume di controllo $D_{s,j} = \overline{D}$, e conseguentemente per ogni specie $k = 1..Ms$ $\alpha_k \rightarrow 1$, $\Omega_k \rightarrow 1$, $f_k = \overline{f}$ e $n_k = \overline{n}$;
- 2 se oltre ad essere monodisperso il sistema fosse anche estremamente diluito ($\varepsilon \rightarrow 1$), ovvero le particelle fossero talmente distanti fra loro da considerarle isolate, allora, visto che si verificherebbe la condizione 1, le (4.18)–(4.20) restituirebbero direttamente i valori di TL. Ciò è ragionevole; ma quando il sistema è, invece, polidisperso ed estremamente diluito, nulla si può evincere a priori sul valore che assume la forza di drag: si decide allora che continui a valere il modello VBK privo di correzioni, ovvero, per $\varepsilon \rightarrow 1$ e $k = 1..Ms$, si impone $C_k \rightarrow 0$;
- 3 $\sum_k \frac{x_k}{y_k} C_k = 0$, con $k = 1..Ms$: questo accade per ciò che impone la (3.45), nel rispetto del bilancio globale delle forze;

- 4** $C_j \rightarrow 0$ se $\frac{D_{s,j}}{D_{s,k}} \rightarrow 0$, $\forall k \neq j$: si tratta del caso di specie j confinata nel moto attraverso le altre, in cui si è in precedenza dimostrato, almeno nel caso di moto viscoso, valgono analiticamente le (3.53), ovvero la forza di drag è calcolabile attraverso il modello VBK teorico, per cui il coefficiente correttivo deve annullarsi.

Considerando i vincoli esposti si propone la seguente forma funzionale:

$$C_j(\varepsilon, y_j, y_m) = \underbrace{(1-\varepsilon)}_I \cdot \underbrace{\left(\frac{1-\varepsilon-\gamma}{1-\gamma}\right)}_{II} \cdot \underbrace{\frac{1}{y_m}}_{III} \cdot \underbrace{(y_j^2 - y_j)}_{IV}, \quad (4.21)$$

in cui γ è l'unico parametro del modello.

Il termine IV è quello che fattivamente effettua la correzione dei valori che prevedrebbe il modello VBK usato tal quale: presenta inoltre il vantaggio di far rispettare, per come è espresso, la condizione **1** e la **3**, anche perché gli altri termini sono indipendenti dalla j -esima specie e misurano grandezze globali. Come sarà discusso in seguito, l'andamento dei dati LBM per sistemi bidispersi (tabella A-iv in appendice) mostra che il termine correttivo IV necessita di una modulazione dipendente dal grado di vuoto ε , ruolo che svolgono nel loro insieme i termini I e II . Del II diremo nel prossimo paragrafo, mentre il termine I permette a C_j di tendere a zero quando $\varepsilon \rightarrow 1$, in accordo con quanto discusso al punto **2**. Il termine III è quello di più difficile definizione, in quanto, in combinazione col termine IV , deve entrare in gioco quando $D_{s,j}/D_{s,k} \rightarrow 0$, per garantire la proprietà **4**: infatti accade che

$$\lim_{\substack{D_{s,j}/D_{s,k} \rightarrow 0 \\ \forall k \neq j}} \frac{y_j(y_j - 1)}{\sum_{l=1}^{M_s} x_l y_l} = \lim_{\substack{D_{s,j}/D_{s,k} \rightarrow 0 \\ \forall k \neq j}} \frac{(y_j - 1)}{\underbrace{\sum_{k=1, k \neq j}^{M_s} \left(x_k \frac{D_{s,k}}{D_{s,j}} \right)}_{+\infty}} + x_j = 0 \Rightarrow \lim_{D_{s,j}/D_{s,k} \rightarrow 0} C_j = 0, \quad (4.22)$$

condizione che coinvolge la sola specie j , che vede annullarsi il proprio coefficiente di correzione, mentre i coefficienti delle altre specie C_k rimangono inalterati. Questo è in linea con quanto ottenuto nel precedente capitolo, in cui la sola specie j fluisce confinata dalle altre e solo per essa valgono le equazioni (3.51), (3.52) e (3.53). Questo fatto coincide anche con quanto suggerisce l'esperienza: un solo granello, o una piccolissima frazione di un solido, di diametro infinitesimo, non influenza le altre.

4.8.2 Regressione del modello

Per essere completamente definito, al modello manca il valore del parametro di fitting γ presente nel termine II della (4.21). γ è stato ottenuto tramite regressione dall'insieme dei dati disponibili (tabella 4-ii) per sistemi bidispersi di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005), Beetstra et al. (2007b) e Yin e Sundaresan (2009b). Il valore cui si è giunti è $\gamma = 0.27$, ottenuto minimizzando $\Pi(\gamma)$, ovvero la somma degli errori frazionari quadratici, rispetto ad α_l , estesa a tutti gli $Md = 400$ dati LBM per sistemi bidispersi:

$$\Pi(\gamma) = \sum_{l=1}^{Md} \frac{\alpha_l^{sim} - \alpha_l^{pred}(\gamma)}{\alpha_l^{sim}}. \quad (4.23)$$

Si è scelta questa strada perché una semplice regressione lineare avrebbe penalizzato i punti in cui i valori del coefficiente di specificazione sono molto piccoli. Nel calcolo degli α_l della simulazione o predetti dal modello, si è utilizzato, per ogni dato l -esimo LBM, il valore \bar{n}_l^{sim} fornito dagli autori, ovvero

$$\alpha_l^{sim} = n_l^{sim} / \bar{n}_l^{sim}; \quad \alpha_l^{pred} = n_l^{pred} / \bar{n}_l^{sim}. \quad (4.24)$$

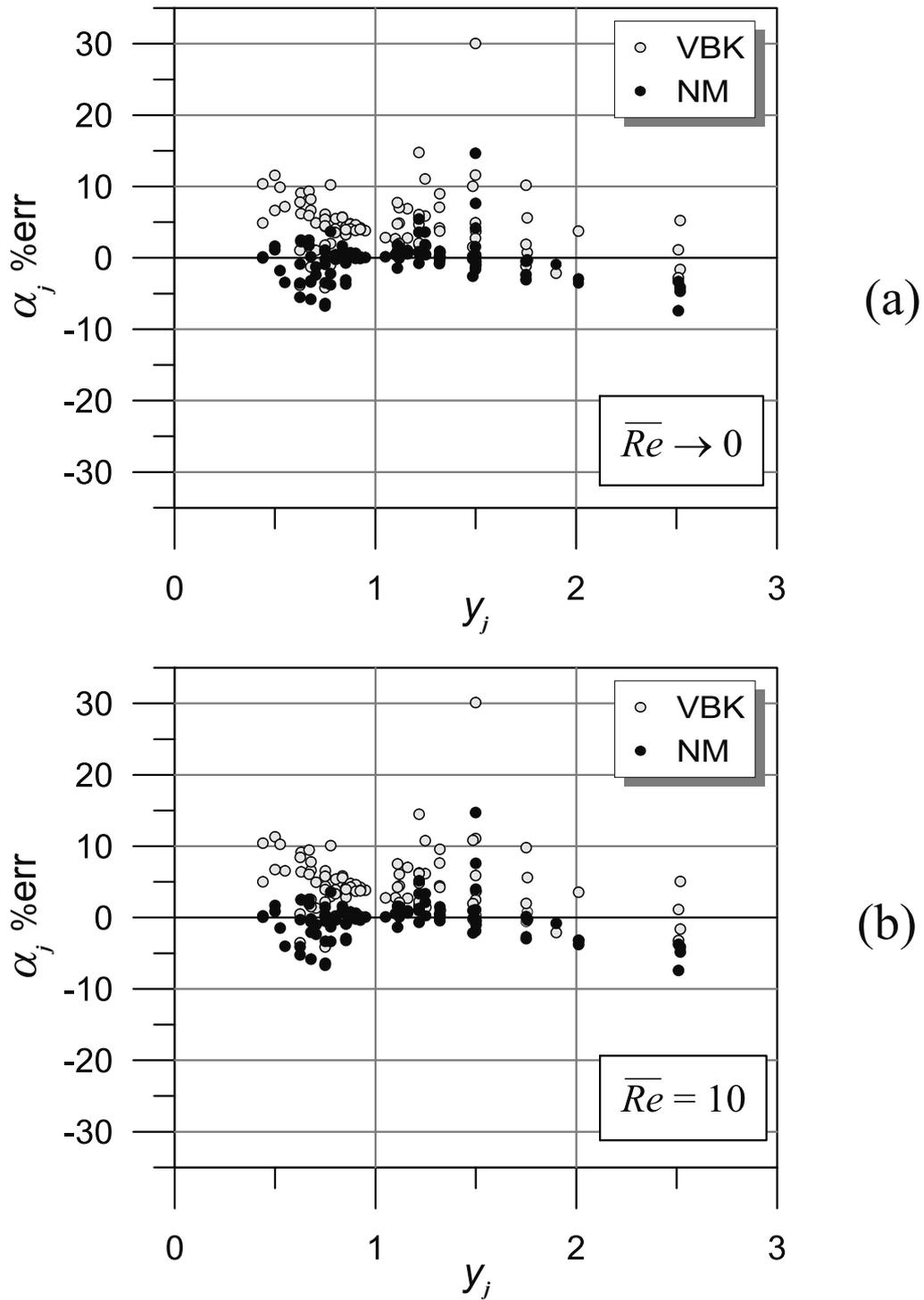


Fig. 4-XIV: Previsione dei valori di α_j . Sono Confrontati, in termini di errore percentuale $[100 \cdot (\alpha_j^{sim} - \alpha_j^{pred}) / \alpha_j^{sim}]$, per $\varepsilon = 0.35-0.90$, i valori del coefficiente di specificazione previsti dal NM e dal modello VBK corretto con quelli ottenuti dai dati LBM del gr. (1) in tab. 4-ii. La figura (a) analizza gli errori percentuali per $\overline{Re} \rightarrow 0$, la (b) quelli per $\overline{Re} = 10$. Non sono presenti dati da cui poter trarre le barre di errore.

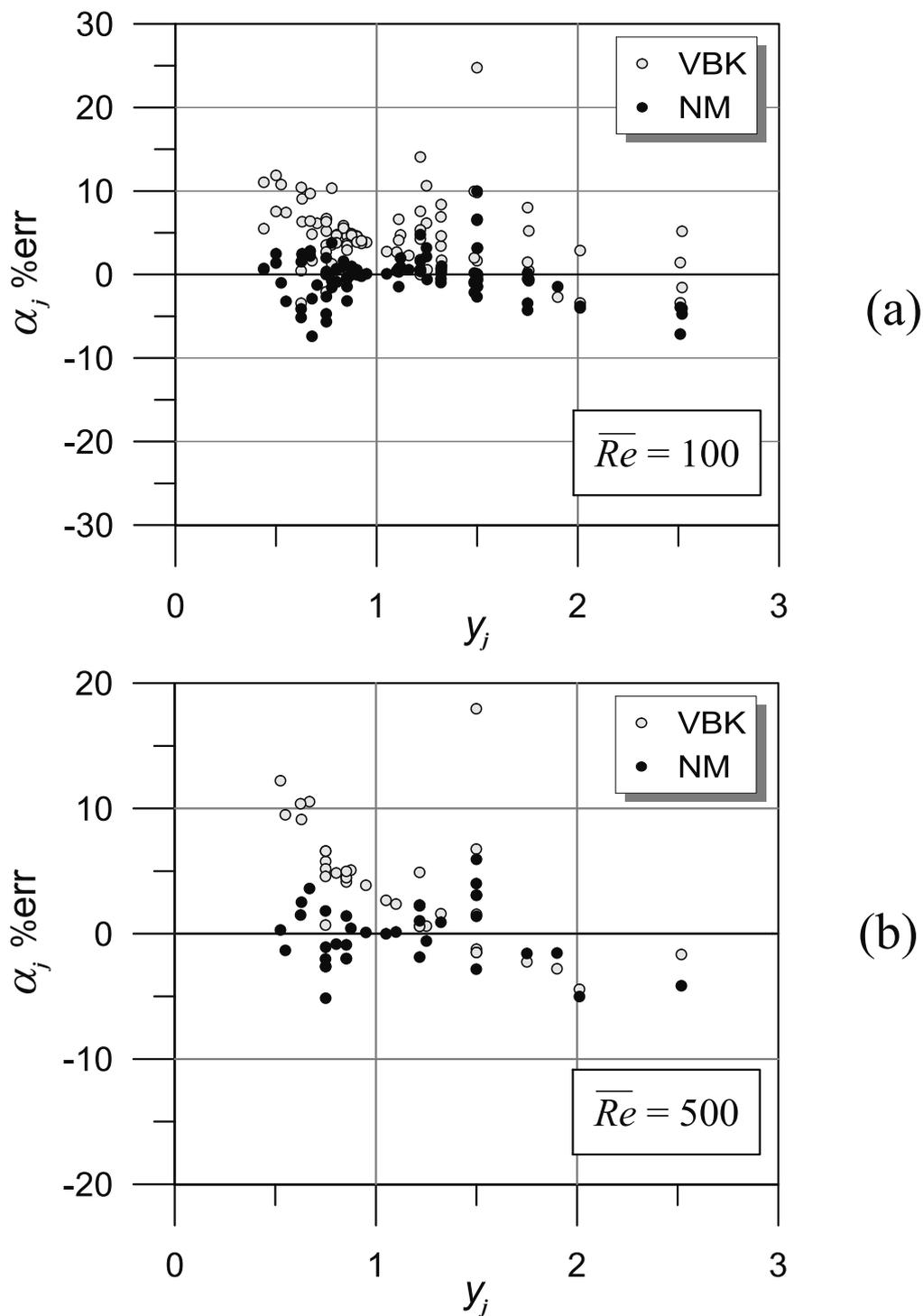


Fig. 4-XV: Previsione dei valori di α_j . Sono confrontati, in termini di errore percentuale $[100 \cdot (\alpha_j^{sim} - \alpha_j^{pred}) / \alpha_j^{sim}]$, per $\varepsilon = 0.35-0.90$, i valori del coefficiente di specificazione previsti dal NM e dal modello VBK corretto con quelli ottenuti dai dati LBM del gr. (1) in tab. 4-ii. La figura (a) analizza gli errori percentuali per $\overline{Re} = 100$, la (b) quelli per $\overline{Re} = 500$. Non sono presenti dati da cui poter trarre le barre di errore.

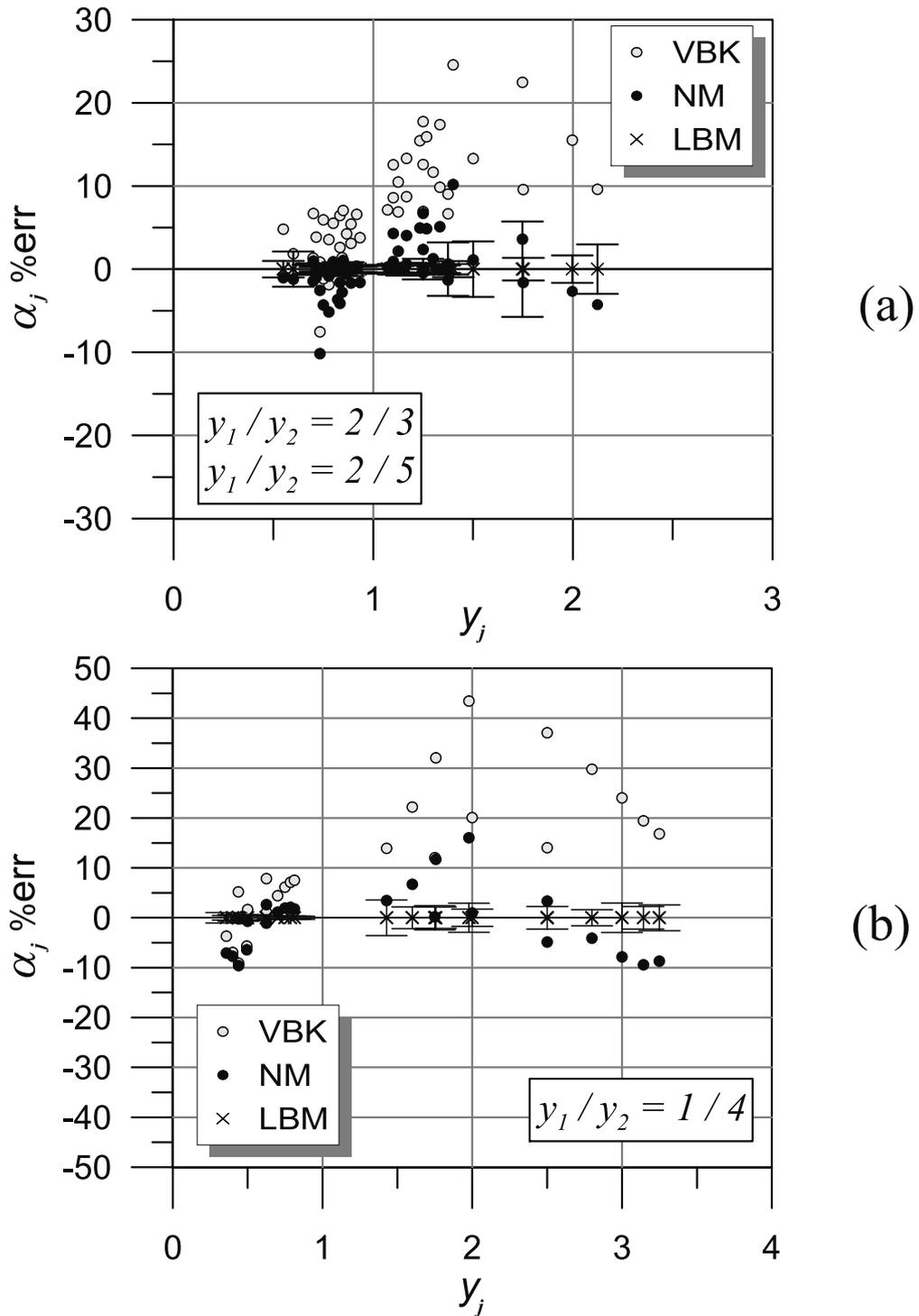


Fig. 4-XVI: Previsione dei valori di α_j . Sono confrontati, in termini di errore percentuale $[100 \cdot (\alpha_j^{sim} - \alpha_j^{pred}) / \alpha_j^{sim}]$, per $\varepsilon = 0.60-0.90$, i valori del coefficiente di specificazione previsti dal NM e dal modello VBK corretto con quelli ottenuti dai dati LBM del gr. (2) in tab. 4-ii. La figura (a) mostra gli errori percentuali sui dati per $D_{s,1}/D_{s,2} = 2/3$ e $D_{s,1}/D_{s,2} = 2/5$, la (b) quelli per $D_{s,1}/D_{s,2} = 1/4$. Le barre di errore indicano un intervallo di confidenza del 90%.

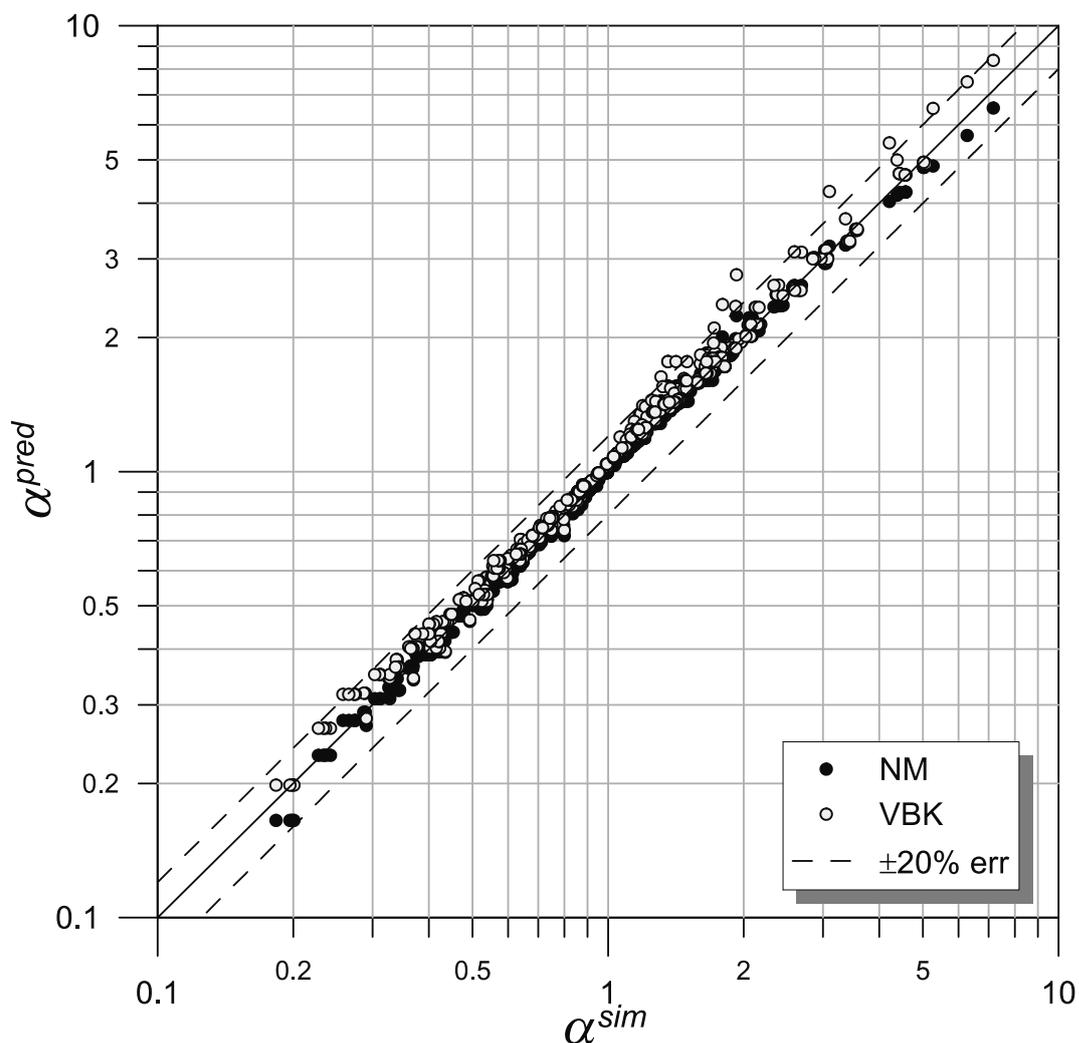


Fig. 4-XVII: Previsione dei valori di α_j . Sono confrontati i valori del coefficiente di specificazione previsti dai modelli NM e VBK corretto con quelli derivati dai dati LBM dei gr. (1)-(2) in tab. 4-ii.

In termini prettamente quantitativi, per ogni prova $\alpha_j^{sim} = n_j^{sim} / \bar{n}^{sim}$, mentre α_j^{pred} viene calcolato mediante le (4.18) e (4.21): essi differiscono in media per il 2% (16% errore massimo). Qualora α_j^{pred} fosse calcolato col modello VBK corretto, ovvero con l'equazione (3.53), l'errore medio su α_j^{sim} salirebbe al 6% circa (43% errore massimo). In particolare le figure 4-XIV e 4-XV mostrano nel dettaglio gli errori percentuali

commessi dal NM e VBK corretto nella previsione di α_j nei casi più rappresentativi dei sistemi bidispersi di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b), ovvero del gruppo (1) tra quelli elencati nella tabella 4-ii; la figura 4-XVI illustra, invece, i dati più rappresentativi di Yin e Sundaresan (2009b), ovvero quelli appartenenti al gruppo (2). La figura 4-XVII compara tutti i dati di α_j netta disponibili con le previsioni dei modelli.

Una verifica totale sul calcolo della forza dimensionale netta agente su una particella appartenente alla specie j -esima richiede un'applicazione totale del modello proposto. In effetti nel calcolo di α_j attraverso le (4.24) rientra la forza media adimensionale netta fornita nelle stesse simulazioni. Se invece si volesse utilizzare come forza adimensionale media quella ottenuta attraverso il modello monodisperso a parità di grado di vuoto e con un numero di Reynolds medio, si dovrebbero applicare le (4.18), (4.19) e (4.21) per il calcolo di n_j . Questo da un lato rappresenta una doppia verifica di entrambi i modelli, monodisperso e polidisperso, mentre dall'altro proietta al loro uso nel codice DEM-CFD: in quell'ambito attorno ad ogni particella saranno raccolte le informazioni di diametro medio e grado di vuoto locale; sarà possibile calcolare la forza media tramite il modello monodisperso e successivamente specificare la forza sulla specie della particella tramite il modello bidisperso. Il confronto fra le previsioni del modello ed i dati LBM originali forniscono una deviazione media (in termini di n_j) del 6% (24% massimo).

Nel dettaglio le figure 4-XVIII e 4-XIX mostrano rispettivamente i casi più rappresentativi dei dati di forza di drag netta adimensionale per sistemi bidispersi di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b), ovvero del gruppo (1) tra quelli elencati nella tabella 4-ii, e quelli più rappresentativi di Yin e Sundaresan (2009b), appartenenti al gruppo (2). Si noti che i valori previsti dal modello non sono rappresentati da un tratto continuo ma da singoli punti: questo poiché, pur raggruppati a

parità di grado di vuoto, si riferiscono a sistemi a diversa distribuzione globale dei diametri. La figura 4-XX compara tutti i dati di forza adimensionale netta disponibili. In appendice A, nelle tabelle A-iv e A-v, vengono elencati tutti i dati dei grafici sinora discussi.

Si può concludere che il nuovo modello raggiunge un accordo molto buono con i dati delle simulazioni LBM per un sistema bidisperso e come si vedrà nel prossimo capitolo mantiene validità nel caso polidisperso.

Si noti che l'accordo sui dati si unisce ad una fondatezza teorica più robusta rispetto agli altri modelli di letteratura per sistemi polidispersi. Più avanti in questo capitolo si valuterà il comportamento del NM anche in forti casi di non omogeneità nel sistema.

4.8.3 Distribuzione continua

Per come è stato derivato il modello proposto per un sistema bidisperso conserva validità teorica anche per un modello polidisperso; tutte le formule ricavate rimangono valide, anche se, al punto in cui si è giunti, non si è ancora provveduto ad una sua convalida in sistemi che comportino una polidispersione dei diametri particellari, ciò che sarà oggetto di analisi nel prossimo capitolo. Al momento diventa interessante comprendere ciò che accade quando la distribuzione dei diametri oltre ad essere polidispersa, presenti anche caratteristiche di continuità: è il caso, ad esempio della classica distribuzione “a campana”, ovvero che può essere rappresentata da una curva di tipo gaussiano. In questi casi non è più possibile individuare un numero finito di classi j -esime di solido particellare. La prima cosa che necessita fare è quella di ridefinire il diametro superficie-volume per un numero infinito di classi specie solide, ognuna delle quali racchiusa in un intervallo dD infinitesimo:

$$\bar{D} = \left[\int_0^{\infty} \frac{X(D)}{D} dD \right]^{-1}. \quad (4.25)$$

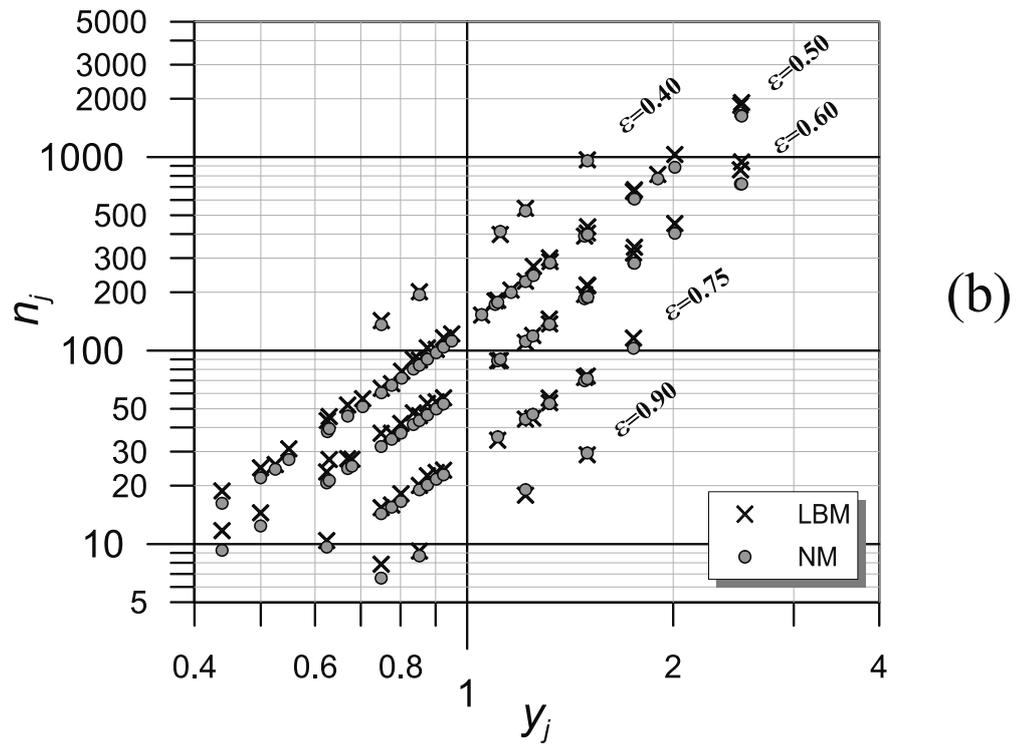
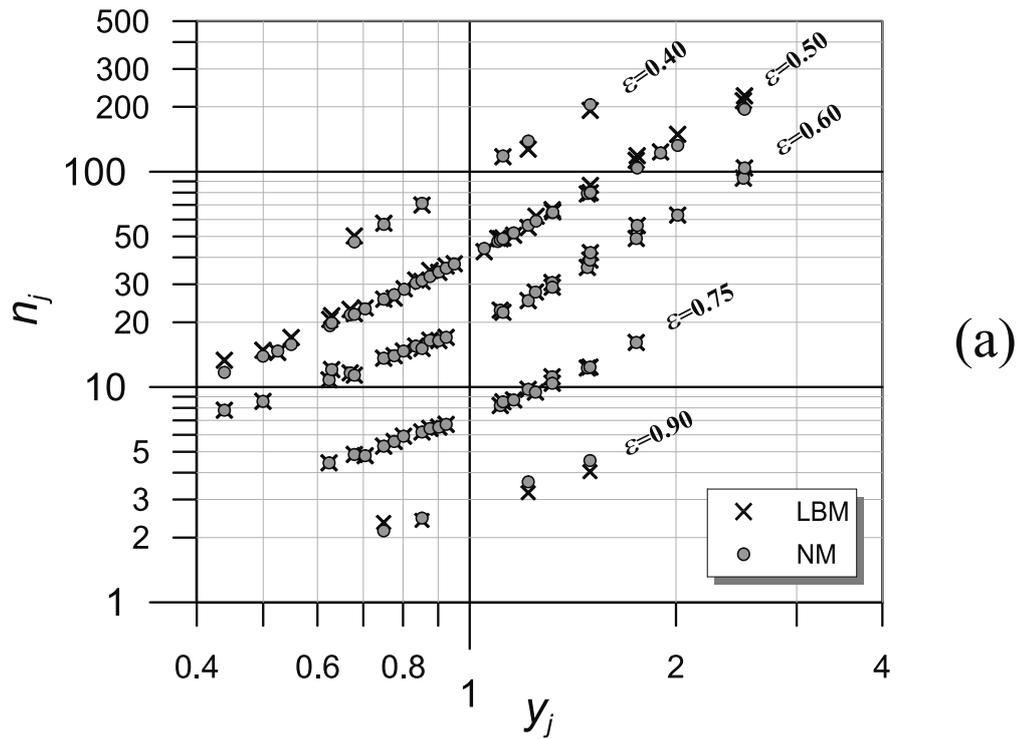


Fig. 4-XVIII: Previsione dei valori di n_j . Confronto fra i dati LBM, provenienti dal gruppo (1) della tabella 4-ii, con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. La figura (a) analizza i dati per $\overline{Re} = 0$, la (b) quelli per $\overline{Re} = 100$. Non sono presenti dati da cui poter trarre le barre di errore.

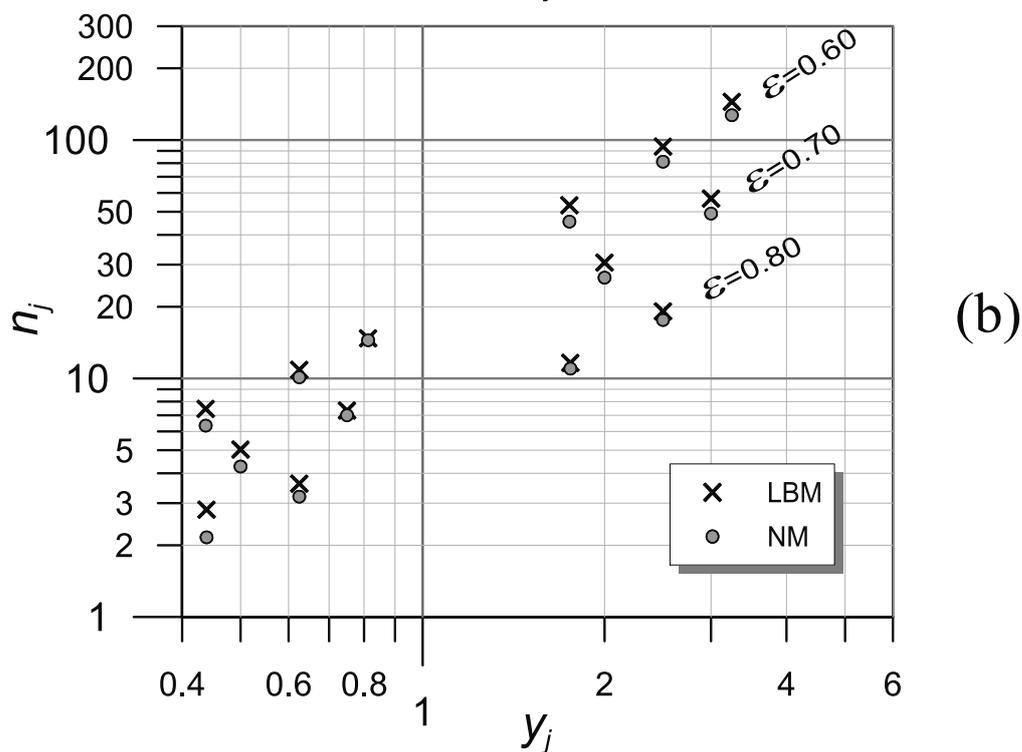
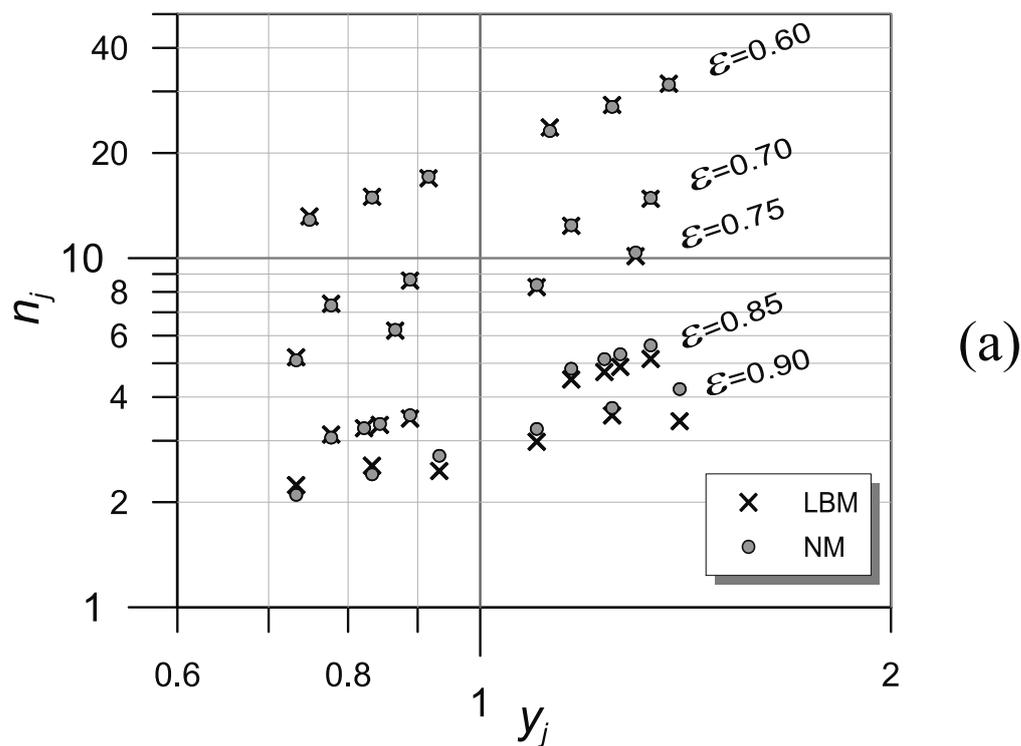


Fig. 4-XIX: Previsione dei valori di n_j . Confronto fra i dati LBM, provenienti dal gruppo (2) della tabella 4-ii, con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. La figura (a) analizza i dati per $D_{s,1}/D_{s,2} = 2/3$, la (b) quelli per $D_{s,1}/D_{s,2} = 1/4$. Le barre di errore con intervallo di confidenza del 90% risultano impercettibili e non si sono indicate.

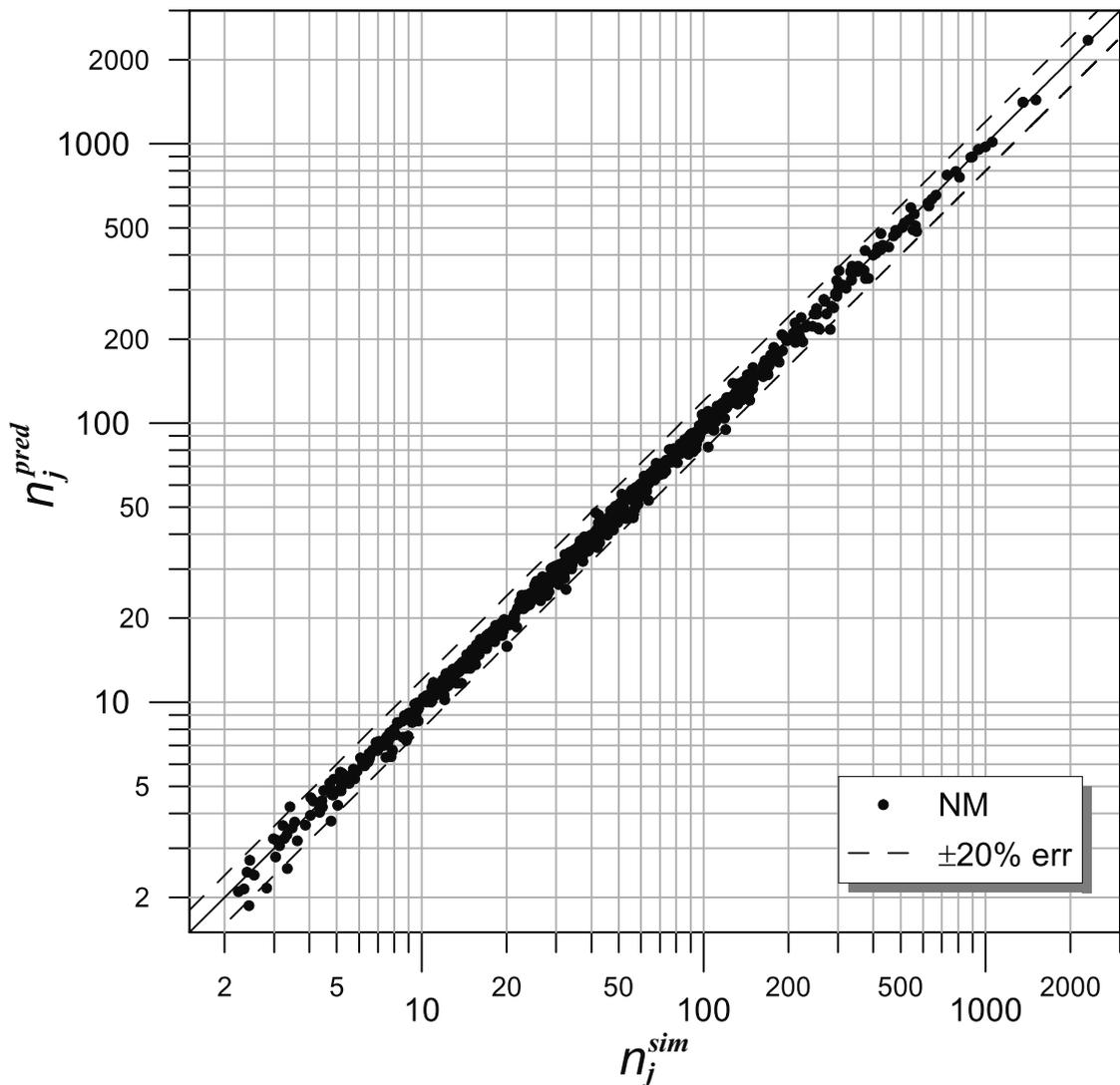


Fig. 4-XX: *Previsione dei valori di n_j . Confronto delle previsioni del NM di forza adimensionale netta con i valori provenienti dai dati LBM dei gr. (1)-(2) in tab. 4-ii.*

$X(D)$ è la funzione di densità di probabilità (PDF) della distribuzione particellare considerata: in particolare il prodotto $X(D) \cdot dD$ rappresenta la frazione volumetrica di particelle il cui diametro è compreso tra D e $D+dD$. Di conseguenza l'indice di polidispersione y_i riferito ad una particella di diametro D_i sarà definito come

$$y_i = D_i \int_0^{\infty} \left[\frac{X(D)}{D} \right] dD. \quad (4.26)$$

Rimane da definire il coefficiente di correzione che, sempre in riferimento ad una particella i -esima risulta calcolabile da

$$C_i = (1 - \varepsilon) \cdot \frac{1 - \varepsilon - \gamma}{1 - \gamma} \cdot \frac{D_i^2 \int_0^{\infty} [X(D)/D] dD - D_i}{\int_0^{\infty} [X(D) \cdot D] dD}. \quad (4.27)$$

Dalle definizioni date sarà possibile il calcolo delle (4.18), (4.19) e (4.21) per l'ottenimento di n_i , forza adimensionale netta agente sulla particella i -esima.

4.9 Modalità di applicazione e limiti del modello proposto

Come detto nella derivazione teorica del nuovo modello, esso muove dall'ipotesi di una distribuzione uniforme di proprietà caratteristiche come la velocità superficiale di scorrimento, la concentrazione e la composizione solida, nonché il grado di vuoto. Tutto infatti nasce dall'analogia, come visto in apertura di capitolo, col modello proposto da Carman (1937) che, oltre ad ipotizzare le omogeneità delle grandezze citate, considera il moto del fluido come indirizzato in canaletti lasciati liberi al passaggio dalla fase solida: le particelle sono, appunto, le pareti di tali canaletti. Tale assunzione è valida solo per sistemi molto concentrati ed in cui i canali possano essere omogeneamente distribuiti nel letto solido.

Appare, quindi, chiaro che la presenza di disomogeneità spaziali o temporali non sono compendiate, almeno nella derivazione teorica dal modello mono- e polidisperso. Rimane, però, da considerare che alcune di queste deviazioni dall'idealità possono essere affrontate mediante simulazioni dettagliate. Nelle simulazioni CFD, tipicamente

le proprietà sono assunte uniformi ed omogenee in una (piccola) scala dimensionale σ , per poi tener conto di variazioni con una modellazione macroscopica ed in maniera separata, eventualmente con metodi che agiscano, appunto, su scale dimensionali superiori.

Il cuore del problema risiede, dunque, nell'individuare questa dimensione caratteristica σ che rappresenta allo stesso tempo la scala di omogeneità, ma anche la frontiera oltre la quale si passa, nell'ottica di un approccio multiscala, ad una dimensione superiore. Sulla definizione di una scala appropriata di indagine si tornerà più avanti, analizzando il caso limite di sistemi estremamente diluiti. Tuttavia, avendo questo lavoro di tesi come finalità principale l'uso del nuovo modello in un algoritmo DEM-CFD, ed essendo quest'ultimo fondato su un volume tipico, supposto omogeneo, facente capo ad una cella computazionale, si individuerà σ proprio nella distanza caratteristica della cella, ovvero poco più che particellare.

A partire da questa assunzione si propone di seguito una procedura per il calcolo della forza di drag agente su una particella immersa in una sospensione localmente (in un intorno σ) omogenea.

Per valutare la forza di puro drag $F_{d,j}$, agente su una i -esima particella, appartenente alla specie j , bisogna osservare la seguente sequenza di operazioni:

- 1** Individuare una grandezza caratteristica σ che coincide, per i nostri scopi, in un intorno che disegna un volume ψ intorno alla particella in cui tutte le grandezze vengono considerate omogenee. Si tratta del procedimento descritto nel secondo capitolo: è necessario raccogliere attorno alla particella, al centro di questo volume, tutte le informazioni medie, mediando quelle provenienti dalla periferia, come, ad esempio la velocità superficiale di scorrimento relativo. La figura 2-VII e le

equazioni (2.4)–(2.8) descrivono analiticamente l'ottenimento di \bar{D} , ε , le frazioni x_j e \bar{Re} . Ne consegue la conoscenza delle y_j e di y_m .

- 2 Attraverso la (4.1) si ottiene $f_{mono}(\varepsilon, \bar{Re})$. In pratica è la forza che agirebbe sulla particella qualora si trovasse immersa in un sistema monodisperso con grado di vuoto, velocità superficiale e diametro pari a quelli ottenuti dalla raccolta di informazioni medie da un intorno di estensione volumetrica ψ al centro del quale giace la i -esima particella di cui si vuole conoscere la forza di puro drag.
- 3 Si valuta il coefficiente di specificazione Ω_j , riferito alla particella i -esima, appartenente alla specie j :

$$\Omega_j(\varepsilon, y_j, y_m) = y_j + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \left(\frac{1-\varepsilon-0.27}{1-0.27} \right) \cdot \frac{(y_j^2 - y_j)}{y_m}. \quad (4.28)$$

- 4 Mediante la forza di drag in regime di Stokes si ottiene la forza di puro drag agente sulla particella appartenente alla specie j :

$$F_{d,i} = \Omega_j(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot f_{mono}(\varepsilon, \bar{Re}) \cdot 3\pi\mu D_{s,j} u. \quad (4.29)$$

Ovviamente il modello, salvo prove successive che ne allarghino il campo delle applicazioni, vale nei limiti di grado di vuoto, numero di Reynolds ed indice di polidispersione dei dati originali LBM da cui è stato ricavato.

4.9.1 Considerazioni sui casi limite di disomogeneità

Tra le condizioni imposte alla derivazione del modello per sistemi polidispersi, ove si è discusso la forma della (4.21), la **2** proponeva il caso estremo di sistemi diluiti. Il fatto che $\varepsilon \rightarrow 1$ non implica direttamente che ci si trovi di fronte al caso di moto intorno ad una singola particella solida: infatti il sistema può comunque essere multiparticellare.

Yin e Sundaresan (2009b) attraverso la (3.55) sostengono che basti avere un sistema diluito perché (almeno in regime viscoso) ogni particella venga vista come singola ed isolata ed il drag su di essa esercitato possa scaturire da modelli per moto intorno a singola sfera. Secondo quanto derivato nel nuovo modello, in accordo col modello VBK teorico, solo se il sistema è monodisperso oltre che estremamente diluito ogni particella risente di una forza calcolabile tramite TL funzione del Re particellare. Infatti, se il sistema presenta polidispersione, allora le altre particelle influenzano in un modo non teorizzabile o direttamente quantificabile quella sotto osservazione. Il nuovo modello e quello VBK teorico applicano alla particella su cui si posa il focus un valore di drag adimensionale puro frutto del prodotto tra l'indice di polidispersione specifico per la specie considerata ed il valore fornito da TL funzione del Re medio.

Questo è un tipico caso di estremizzazione e disomogeneità di cui si è prima discusso: infatti se si scegliesse un volume di controllo che abbracci esclusivamente la particella supposta isolata, allora anche il nuovo modello, in condizioni di generale polidispersione, localmente risponderebbe con i valori di TL funzione del Re particellare nel calcolo del puro drag adimensionale.

Sempre su questo discorso di forte non uniformità del dominio di analisi rientra il caso di una specie con diametro particellare infinitamente piccolo rispetto a quello delle altre, per il quale il NM, ma non quello di Yin e Sundaresan (2009b), fornisce la funzionalità teorica del coefficiente di specificazione, ovvero VBK non corretto. Se a questo fatto si aggiunge che la frazione volumetrica della specie in questione sia anche infinitesima, allora si può visualizzare il problema come quello di un granellino di solido in mezzo a tante altre particelle di dimensioni infinitamente superiori. In queste condizioni, come già discusso in precedenza, Yin e Sundaresan (2009b) sostengono si possa vedere la particella come isolata e che in regime viscoso la forza di puro drag adimensionale sia pari al reciproco del grado di vuoto. Il nuovo modello fornisce forza nulla in quanto $y_j \rightarrow 0$. Questo che sembrerebbe un errore fornisce, però, un risultato

ragionevole qualora il volume di controllo abbracci esclusivamente il granellino solido in questione: in questo caso il NM lo percepisce come isolato e fornisce gli stessi valori di TL calcolato col Re particellare. Risultato ragionevole anche se diverso da quello teorizzato da Yin e Sundaresan (2009b).

I due casi spiegati nel confronto fra i vari modelli, permettono di meglio comprendere quanto discusso precedentemente circa la distanza σ caratteristica della scala di indagine.

Capitolo 5

Validazione del nuovo modello

In questo capitolo ci si occuperà di operare una validazione per il nuovo modello. Il confronto con dati di letteratura avverrà in una prima parte con dati LBM di sistemi polidispersi (Sarkar et al. 2009): il modello è stato ottenuto, infatti, in forma del tutto generale, e si dimostrerà essere valido anche in presenza di più specie solide, anche se la regressione è stata originariamente effettuata attraverso dati LBM per sistemi a due sole specie presenti.

La seconda parte della validazione procederà su base macroscopica, utilizzando dati di letteratura inerenti il problema dell'inversione: si tratta di un fenomeno in cui, disomogeneità nella dimensione e nella densità delle particelle indicano il prevalere, a seconda della fluidodinamica indotta, della forza peso o del drag; questo determina, all'aumentare della velocità del fluido una sostituzione nella parte alta della colonna della specie che sormonta una zona invece miscelata: a bassa velocità si segregano in alto le particelle grossolane e meno dense, ad alta velocità, invece, quelle piccole e più dense. Si intuisce come il fenomeno sia dominato dalle forze di interazione fluido-particella e sia fertile terreno su cui confrontarsi sui dati sperimentali.

La terza parte della validazione inerisce ad un confronto su dati di inversione effettuato non attraverso il modello inteso come legge macroscopica, ma quanto esso sia applicato all'interno di un codice DEM-CFD, ciò che rappresentava in effetti l'obiettivo finale di questo lavoro di tesi.

5.1 Validazione del modello attraverso simulazioni LBM di sistemi a diametri polidistribuiti

In un recente articolo (Sarkar et al. 2009) il medesimo gruppo di ricerca che ha sviluppato il modello VBK ha comparato le previsioni di quest'ultimo con i risultati di simulazioni LBM per sistemi a più specie particellari. In particolare le simulazioni prevedono un flusso fluido attraverso un sistema in cui le particelle sono disposte in maniera casuale e classificabili, mediante il loro diametro, in dieci specie solide.

Si sono condotte prove che prevedono due tipologie di distribuzione delle dimensioni particellari: una di tipo gaussiano e l'altra di tipo lognormale. Per ognuna delle tipologie sono stati considerati due sistemi, il primo dei quali è stato analizzato per due valori del grado di vuoto, mentre il secondo solo ad un valore.

In totale sono state analizzate, dunque, 6 combinazioni, e per ognuna di esse si sono condotte prove a quattro valori del numero di Reynolds. Le diverse combinazioni delle prove sono state riassunte in tabella 5-i. Gli errori medi che scaturiscono dal calcolo, mediante il nuovo modello, della forza adimensionale netta agente su una singola specie sono elencati nella tabella 5-i, per ogni caso preso in esame.

Nei dati originali non viene fornito il valore della forza media adimensionale netta \bar{n} ed in sua sostituzione si è ritenuto di poter utilizzare i valori forniti dalla (3.16): in questo modo per ogni specie è possibile estrarre i valori di $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21). Questo consente in maniera del tutto simile al precedente capitolo di confrontare i risultati totali in termini di errore percentuale commesso sulla stima di α_j (figure 5-I e 5-II). Il confronto mostra che il modello proposto esibisce un buon accordo con i dati LBM, migliorando, seppur di poco quello del modello VBK corretto. Va sottolineato come Sarkar et al. (2009) dimostrino che il modello VBK corretto mostri già significativi miglioramenti rispetto ai precedenti. Nelle pagine seguenti, nelle figure 5-III e 5-IV sono illustrati i risultati del confronto tra

Tab. 5-i: Dati LBM di letteratura da Sarkar et. al (2009) per sistemi polidisersi.

<i>Distribuzione</i>	<i>Sistema</i>	ε	\overline{Re}	<i>Errore medio</i>	R^2
Gaussiana	I	0.5, 0.7	1, 10, 100, 500	3.7%	0.996
	II	0.5		5.1%	
Lognormale	III	0.5, 0.7		2.7%	0.998
	IV	0.5		3.4%	

Per R^2 si intende il coefficiente di determinazione, mentre l'errore medio è quello che scaturisce dal confronto tra i dati delle simulazioni ed i valori previsti mediante il NM.

i valori previsti dal nuovo modello e quelli LBM più rappresentativi di forza adimensionale netta per ogni specie j , scelti fra quelli dei sistemi I, II, III e IV elencati in tabella 5-i. Le tabelle B-i e B-ii in appendice B contengono i dati di Sarkar et al. (2009) di cui si è ora discusso, rispettivamente per il caso di distribuzione gaussiana e lognormale.

Altri dati di letteratura LBM su sistemi polidisersi sono quelli di Beetstra (2005), inerenti una distribuzione a 4 specie: i dati analizzano un'unica distribuzione ($x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 0.25$), ad un unico grado di vuoto ($\varepsilon = 0.502$), ma al variare del numero di Reynolds (0.2, 10, 100, 500). Anche su questi dati, elencati in tabella B-iii si registra un ottimo accordo, lievemente migliore di quello del modello VBK corretto. Nella figura 5-V sono stati riportati i dati di tutte le simulazioni LBM per i sistemi polidisersi analizzati. Sono stati confrontati i valori predetti del coefficiente di specificazione e della forza adimensionale netta con quelli provenienti dalle simulazioni. In merito ad entrambi i dati su α_j ed n_j , che coprono un intervallo di valori della forza netta di circa tre ordini di grandezza, è possibile osservare un buon accordo: le deviazioni su α_j sono inferiori all'8%, fatta eccezione per bassi valori di y_j del sistema gaussiano II riportati in figura 5-I-(b), per i quali i discostamenti sono comunque limitati entro il 17%.

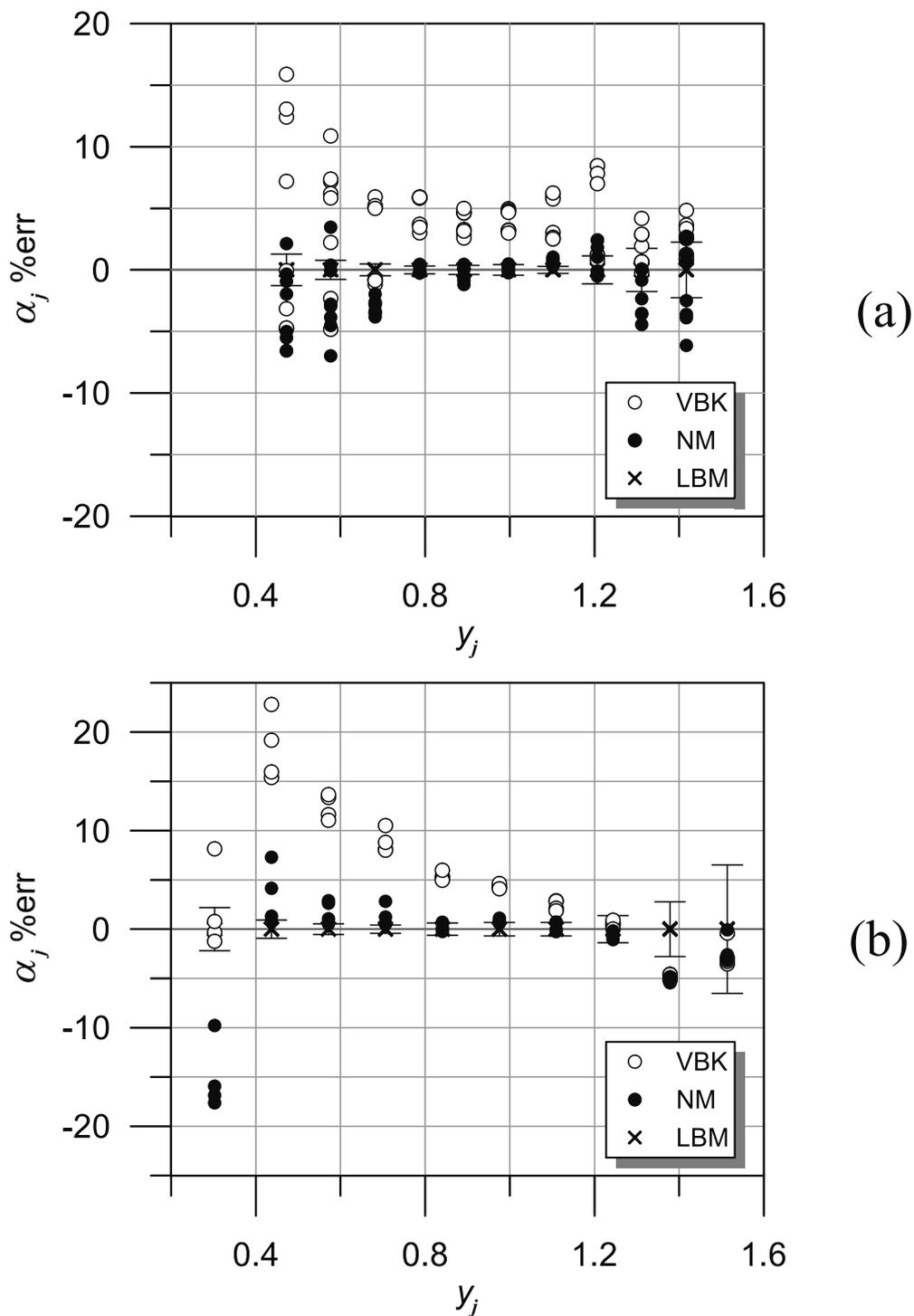


Fig. 5-I: Previsioni di α_j per distribuzioni gaussiane. Errori percentuali sul coefficiente di specificazione α_j nel confronto tra il NM e VBK corretto con i dati LBM della distribuzione di tipo gaussiano in tabella 5-i. La figura (a) analizza i dati per $\overline{Re} = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5-0.7$ del sistema I, la (b) quelli per $\overline{Re} = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5$ del sistema II. Sui dati LBM sono fornite barre di errore riferite allo scarto quadratico medio (RMS error).

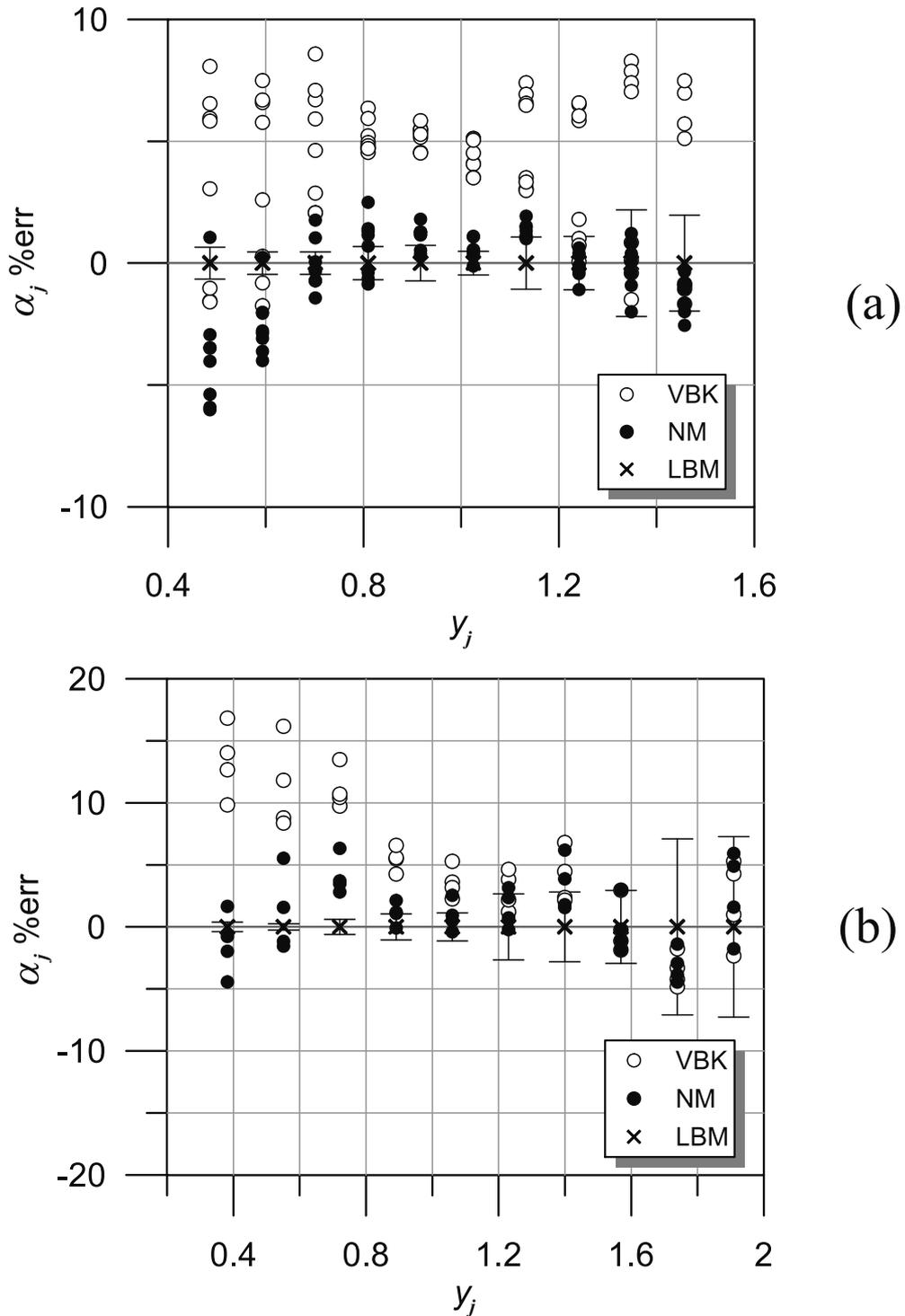


Fig. 5-II: Previsioni di α_j per distribuzioni lognormali. Errori percentuali sul coefficiente di specificazione α_j nel confronto tra il NM e VBK corretto con i dati LBM della distribuzione di tipo lognormale in tabella 5-i. La figura (a) analizza i dati per $Re = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5-0.7$ del sistema III, la (b) quelli per $Re = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5$ del sistema IV. Sui dati LBM sono fornite barre di errore riferite allo scarto quadratico medio (RMS error).

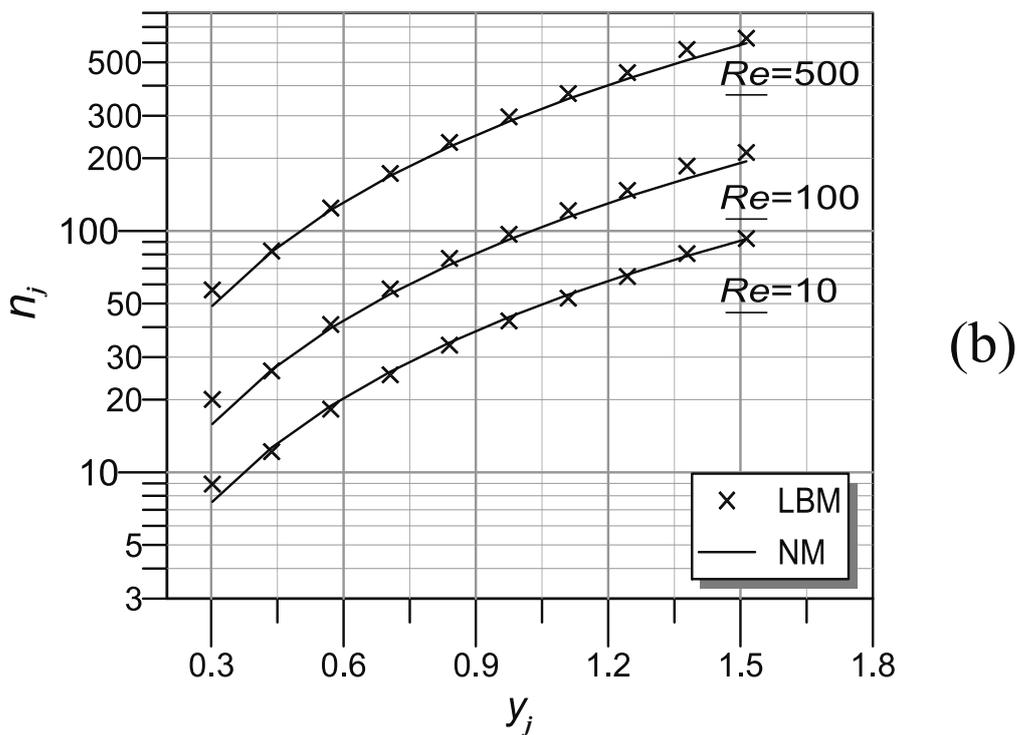
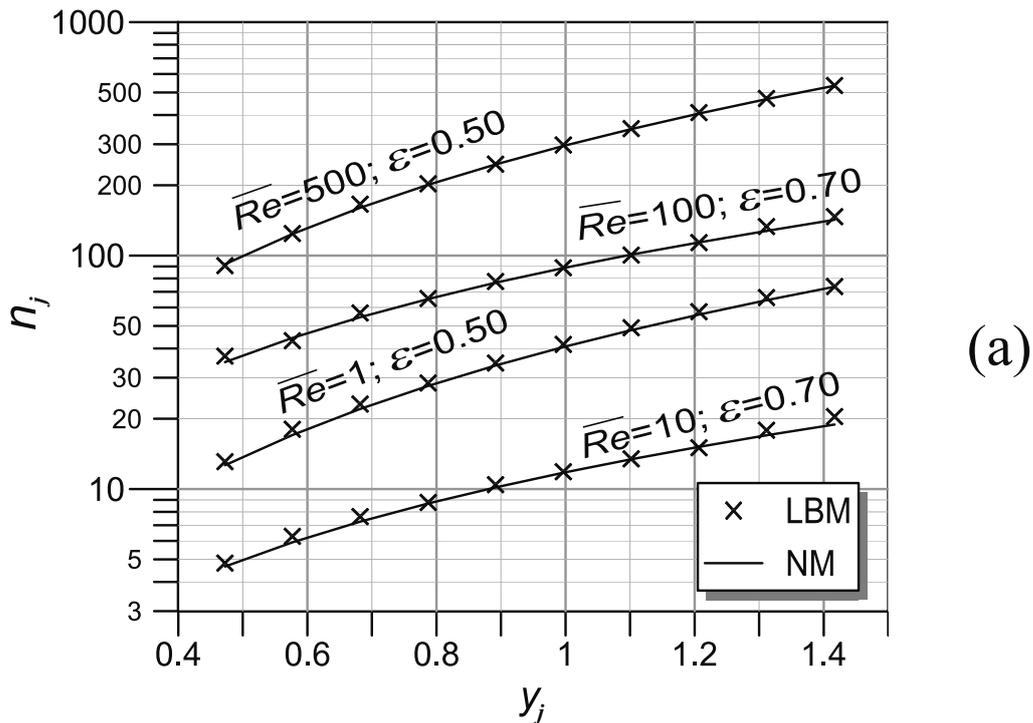


Fig. 5-III: Previsioni di n_j per distribuzioni gaussiane. Confronto fra i valori di forza adimensionale netta di drag n_j dei dati LBM più rappresentativi delle distribuzioni gaussiane in tabella 5-i, e quelli previsti dal NM e VBK corretto. La figura (a) analizza i dati per $Re = 1-500$ ed $\epsilon = 0.5-0.7$ del sistema I, la (b) quelli per $Re = 1-500$ ed $\epsilon = 0.5$ del sistema II. Sono omesse le barre di errore su dati LBM perché impercettibili.

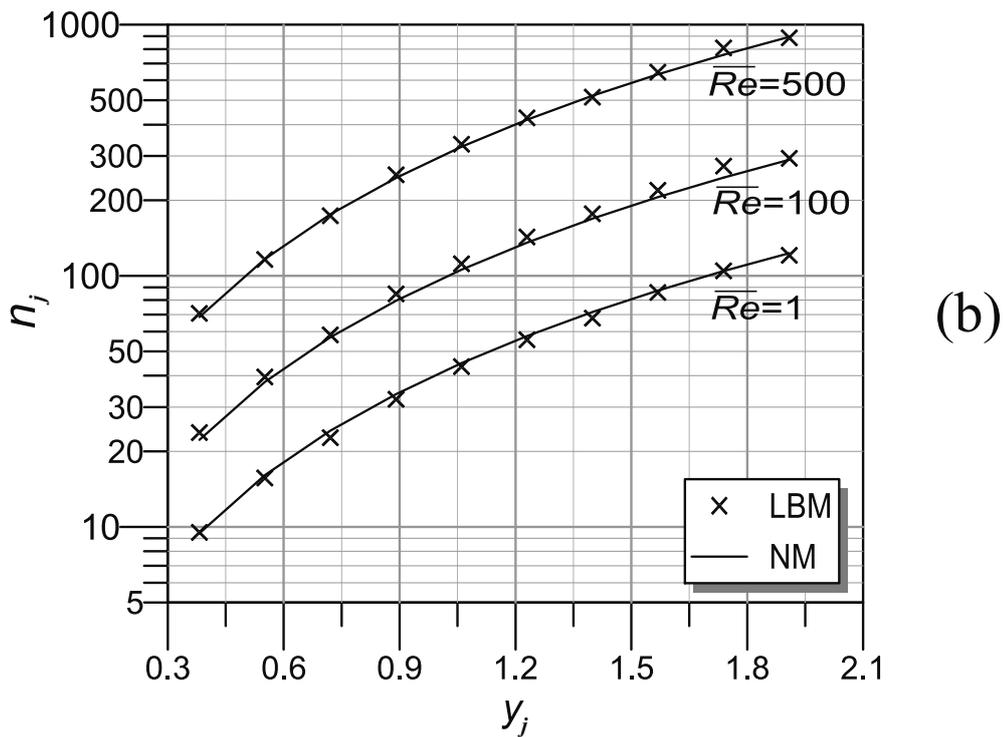
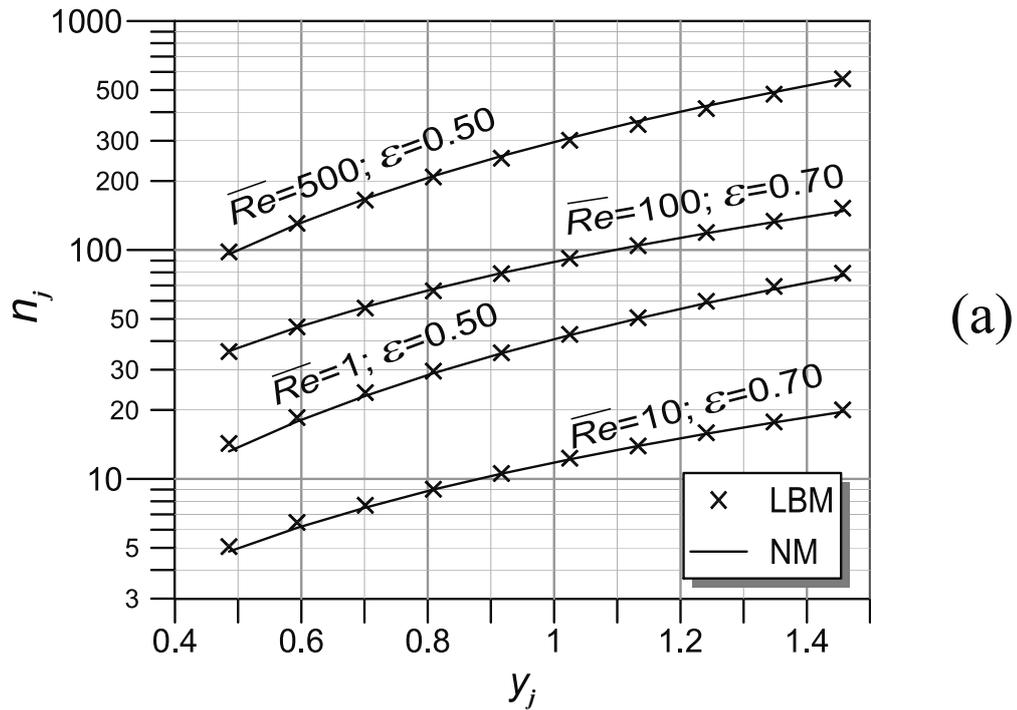
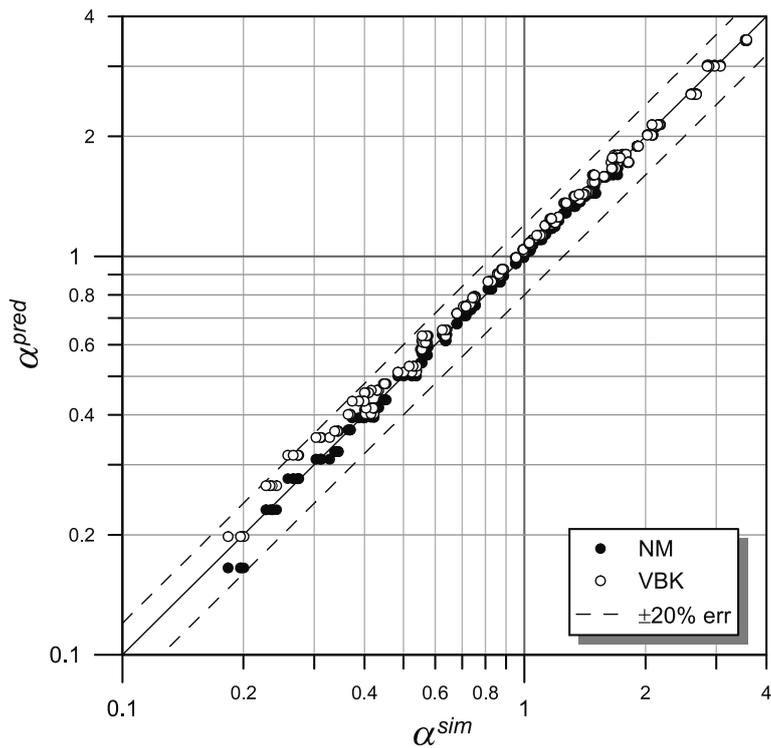
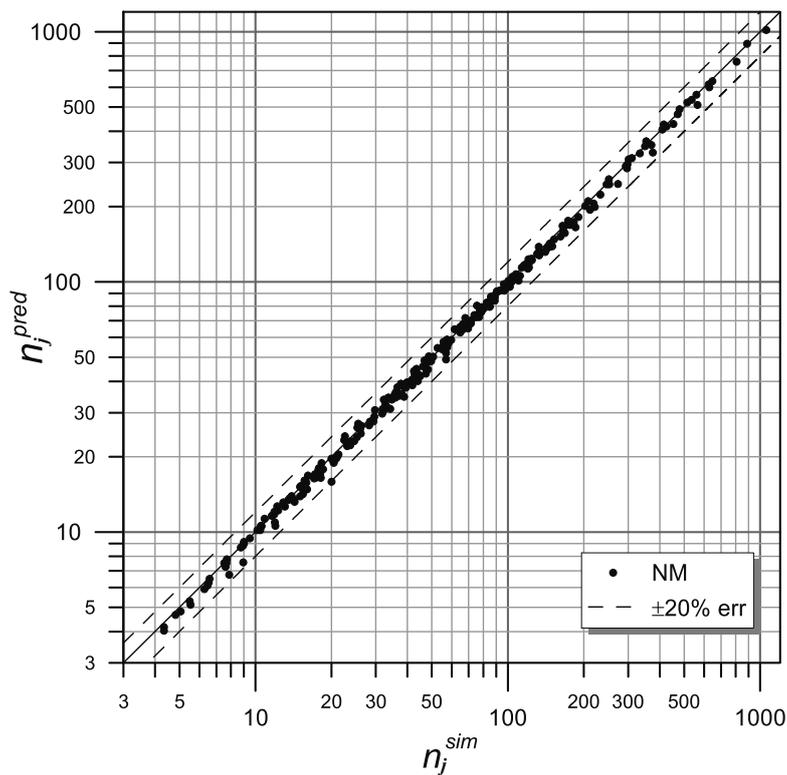


Fig. 5-IV: Previsioni di n_j per distribuzioni lognormali. Confronto fra i valori di forza adimensionale netta di drag n_j dei dati LBM più rappresentativi delle distribuzioni lognormali in tabella 5-i, e quelli previsti dal NM e VBK corretto. La figura (a) analizza i dati per $\overline{Re} = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5-0.7$ del sistema III, la (b) quelli per $\overline{Re} = 1-500$ ed $\varepsilon = 0.5$ del sistema IV. Sono omesse le barre di errore su dati LBM perché impercettibili.



(a)



(b)

Fig. 5-V: Confronto complessivo. Sono messi a confronto le previsioni del NM e VBK corretto rispetto ai valori di α_j (a) e del NM rispetto ad i valori di η_j (b). I dati LBM sono tratti da Sarkar et al. (2009) e da Beetstra (2005).

Concludendo, si acclara come il nuovo modello raggiunge un generale ottimo accordo con i dati LBM per sistemi polidispersi.

5.2 Inversione di un sistema binario fluidizzato da un liquido

Per validare il modello introdotto in questo lavoro è necessario operare dei confronti anche su scala macroscopica. A tal fine necessita trovare un sistema oggetto di indagine in cui i fenomeni siano fortemente controllati dalla forza di drag e che sia quanto più omogeneo, che contenga almeno due specie con differenze significative nel diametro medio e che copra un range quanto più ampio di grado di vuoto e numero di Reynolds.

Una delle possibilità che in tal senso possono essere prese in considerazione è quella che fa capo al ben noto fenomeno dell'inversione di letti fluidizzati mediante un liquido (descritto da Moritomi et al., 1982 e 1986). In effetti questo fenomeno investe particelle, diverse per diametro e densità, ed il letto da esse composto propone comportamenti macroscopici differenti quando sottoposto alla variazione di velocità di invio del liquido che lo fluidizza; rappresenta, dunque, un banco di prova molto importante per un modello di drag per sistemi bidispersi, in quanto proprio il drag è la forza che controlla i diversi comportamenti del solido e poiché la fluidizzazione con liquido rende, in genere, omogeneo il grado di vuoto nel sistema.

5.2.1 Fenomenologia dell'inversione

Osservando più da vicino il fenomeno (Moritomi et al., 1982 e 1986) ci si rende conto che esso rappresenta un peculiare comportamento cui danno vita due componenti solidi, uno dei quali più grossolano, ma meno denso, mentre l'altro è fine, ma più denso. Quando un letto così composto viene fluidizzato mediante un liquido si osserva la formazione di due strati caratteristici. Uno viene indicato come strato di bulk ed occupa la zona inferiore della colonna fluidizzata; in questo strato i due componenti appaiono

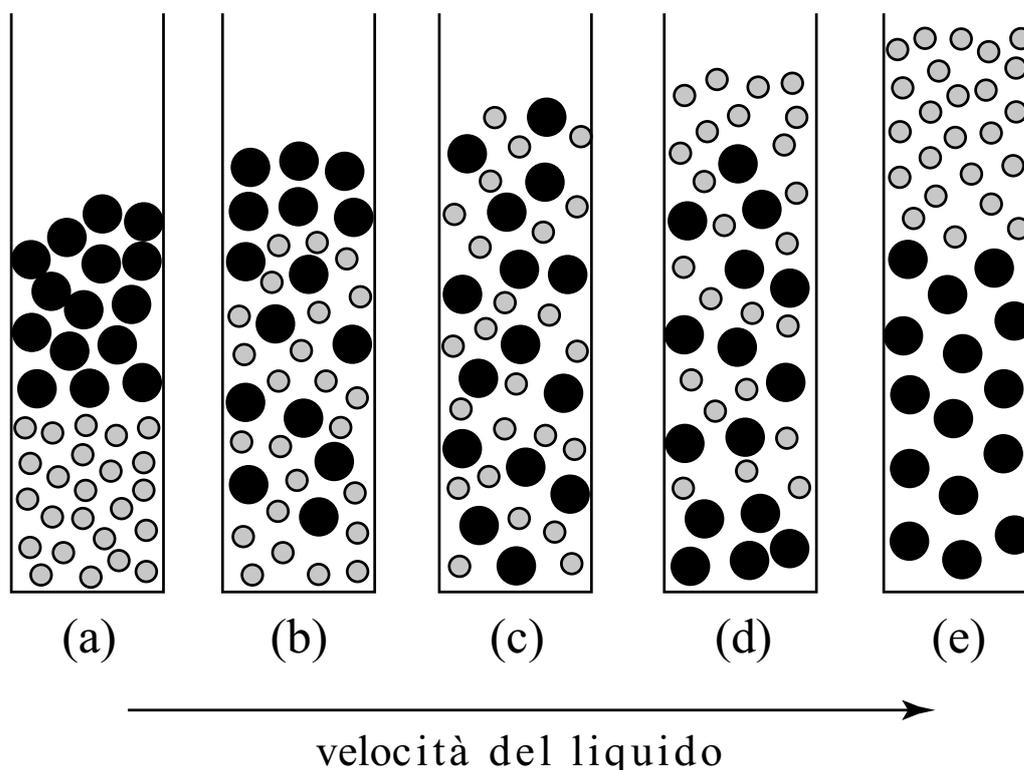


Fig. 5-VI: Stadi successivi del fenomeno dell'inversione.

miscelati. Si forma inoltre uno strato ricco in uno dei due componenti che va ad occupare la zona superiore della colonna. Al variare della velocità del fluido questo strato più in alto vede modificarsi il suo spessore e cambia anche la specie di cui è più ricco e che in esso segrega (figura 5-VI).

La successione degli eventi si verifica al variare della velocità in quanto la tendenza imposta dalla differenza di densità delle due specie compete con quella imposta dalla differenza di dimensioni: ad ogni velocità imposta al fluido forza peso, galleggiamento e drag devono, attraverso la disposizione particellare, trovare un equilibrio.

In figura 5-VI-(a) è illustrato ciò che accade, dunque, a bassissima velocità superficiale: la parte alta del letto vede segregate le particelle meno dense, ma dotate di dimensioni superiori; questo perché a basse velocità è la gravità a dominare il

comportamento del sistema. Man mano che la velocità superficiale del liquido viene aumentata, la forza di drag comincia a diventare controllante e si osserva la formazione dei due strati di cui prima si è discusso. Come si evidenzia in figura 5-VI-(b), al di sopra di un bulk ben miscelato (trascorrendo l'inevitabile fenomeno della coda di distribuzione della specie fine) si dispone uno strato arricchito delle particelle più grossolane e meno dense.

Incrementando ulteriormente la velocità del fluido, il bulk miscelato si estende fino a coprire tutta l'altezza del letto; la velocità corrispondente a questa situazione, in cui mediamente il drag pareggia la forza peso apparente in tutto il letto particellare, viene definita "velocità d'inversione". In pratica, ci si trova nelle condizioni illustrate in figura 5-VI-(c), ovvero al punto d'inversione, quando nel bulk miscelato si registrano le medesime concentrazioni delle due specie che all'inizio si erano determinate versando il solido in colonna. Si osserva che, ovviamente, a bassa velocità prima del punto di inversione, nel bulk la concentrazione della specie grossolana è inferiore al valore iniziale.

Continuando ad aumentare la velocità del liquido sono le particelle più fini e più dense a disporsi prevalentemente nella zona alta dal letto, sovrastando una zona miscelata in maniera ottimale fatto salvo l'inevitabile verificarsi di una coda di concentrazione della specie grossolana: il fenomeno è descritto in figura 5-VI-(d) e si sottolinea come nel bulk la frazione volumetrica della specie grossolana ora è superiore a quella iniziale. Spingendosi verso la velocità di trascinamento il bulk si assottiglia sempre più, fino a lasciare posto nella zona bassa del letto alla sola specie solida più grossolana e meno densa, come evidenziato in figura 5-VI-(e).

La figura 5-VII riassume i fenomeni discussi sinora osservando le quote caratteristiche che vengono raggiunte dai due strati (segregato e miscelato) al variare della velocità. Il grafico rappresenta la schematizzazione di alcuni risultati di Moritomi e al. (1982), nel qual caso si osserva che, prima dell'inversione, l'altezza della fase

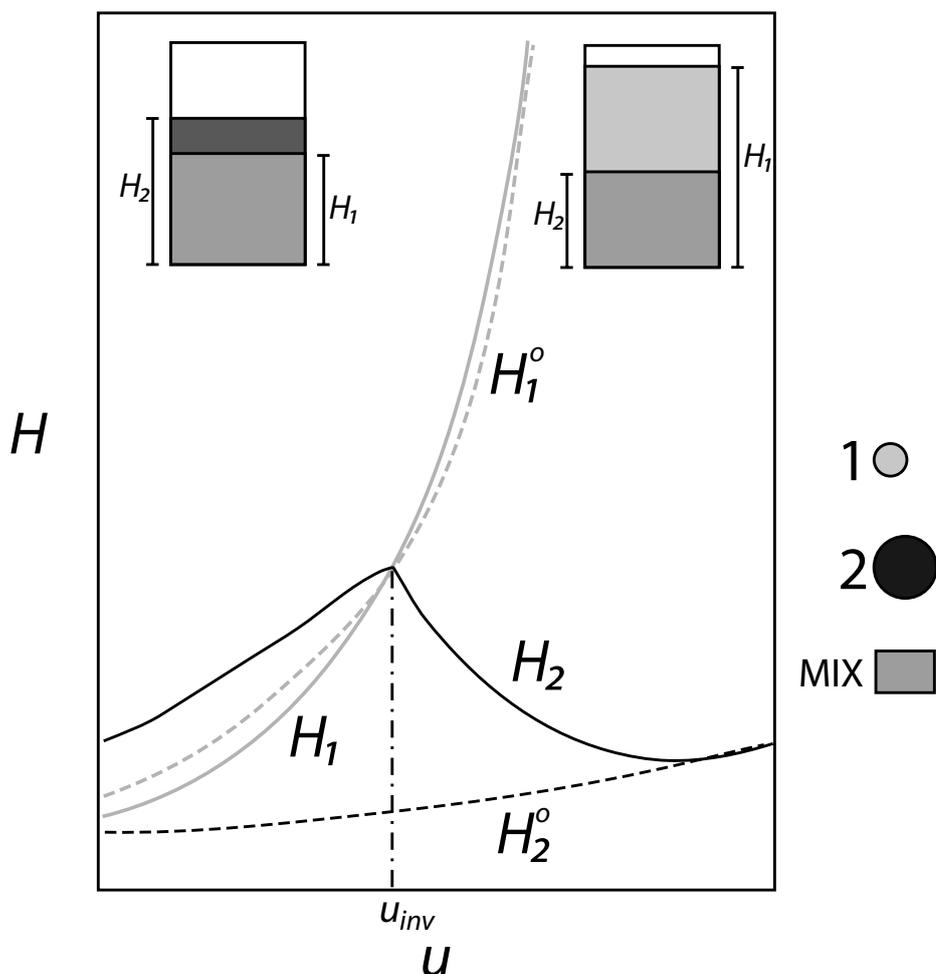


Fig. 5-VII: Quote caratteristiche del fenomeno dell'inversione. La figura mostra le quote degli strati caratteristici che si formano nel fenomeno dell'inversione. La linea continua in nero (H_1) rappresenta l'altezza massima in cui è compresa la specie 1 più fine e più densa, quella continua in grigio (H_2) rappresenta la specie 2 più grossolana e meno densa: il punto che intercetta entrambe le linee rappresenta quello di inversione. Le linee tratteggiate (H_1^0 ed H_2^0) indicano l'altezza dei solidi considerati puri.

miscelata contenente la quasi totalità del solido fine è molto simile a quella raggiunta dal solido fine puro alla stessa velocità superficiale del fluido. In altri casi questo non si verifica sperimentalmente.

Appare evidente che il fenomeno dell'inversione, una volta scelte le due specie con i rispettivi diametri e densità, dipende in maniera esclusiva dalla velocità superficiale del

liquido e dalla composizione particellare. Infatti, analogamente a quanto osservato al variare della velocità, gli stessi fenomeni si osserverebbero se si aggiungessero quantitativi crescenti di solido fine al grossolano già presente nel letto (Moritomi e al. 1982), il quale rimanesse esposto continuamente alla stessa velocità: dopo le prime aggiunte si formerebbe il bulk fino a raggiungere la composizione corrispondente all'inversione, allorché il letto apparirebbe miscelato. Un'ulteriore aggiunta di solido fine segregherebbe in alto.

Altra osservazione che si può fare è che, se ad una determinata velocità superficiale u_0 di invio del fluido si registra una determinata frazione volumetrica assoluta x_0 nella zona del bulk della specie grossolana, allora si verifica sperimentalmente che se si predispose un sistema con gli stessi solidi, ma il cui letto abbia frazione volumetrica iniziale x_0 del grossolano, allora questo stesso letto invertirebbe alla velocità u_0 .

5.2.2 Modelli di letteratura per la previsione del punto di inversione

Nel punto di inversione in cui il sistema raggiunge la totale miscelazione si attua mediamente in tutto il letto un bilancio dinamico tra la forza gravitazionale e quella di interazione fluidodinamica: affinché ciò si verifichi, entrambe le specie solide presenti devono essere contemporaneamente in equilibrio. Ci si aspetta che le grandezze critiche di questo punto come velocità superficiale, grado di vuoto e frazione volumetrica siano strettamente dipendenti dalla forza di interazione fluido-particella ed ovviamente, dai modelli che si adottano per il calcolo della forza di drag sulle due specie solide. In letteratura dagli anni '80 e '90 è riportata una serie notevole di esperimenti sul fenomeno (Moritomi et al. 1982 e 1986, Matsuura e Akehata 1985, Jean e Fan 1986, Gibilaro et al. 1986, Di Felice et al. 1988 e Funamizu e Takakuwa 1995 su tutti) e si sono susseguite anche diverse tipologie di approccio nel modellarlo e prevederlo. Recentemente esperimenti e modelli sono stati rivisti e raccolti da Escudié et al. (2006).

In merito agli esperimenti, purtroppo molte sono le incertezze ed omissioni che spesso compromettono l'ottenimento di dati affidabili per un confronto: ad esempio distribuzione dei diametri particellari e temperatura del fluido sono quelli più affetti da imprecisioni e difficilmente sono riportati contemporaneamente. Proprio la temperatura gioca un ruolo importante agendo sulla viscosità del fluido e, quindi, sul drag mediante il numero di Reynolds.

Dal punto di vista dei modelli di letteratura, di seguito si elencheranno i più rappresentativi, ma prima è necessario analizzare le equazioni di bilancio che è possibile scrivere per rappresentare analiticamente il fenomeno.

Innanzitutto vale che, in condizioni di fluidizzazione, il peso apparente totale del solido, somma di quello delle due specie, sia sostenuto dalla perdita di carico del sistema, ovvero:

$$\frac{\Delta p}{L} = \phi_1(\rho_1 - \rho_f)g + \phi_2(\rho_2 - \rho_f)g = [x_1(\rho_1 - \rho_f) + x_2(\rho_2 - \rho_f)] \cdot (1 - \varepsilon)g, \quad (5.1)$$

in cui Δp è la differenza di pressione tra ingresso ed uscita del fluido. Altra equazione di equilibrio che è possibile scrivere è quella che esprime il bilancio di forze per il punto di inversione, che deve essere valido per entrambe le specie solide: se si immagina che nelle condizioni di sistema perfettamente miscelato il grado di vuoto e le concentrazioni delle due specie siano uniformemente distribuiti varrà:

$$\begin{cases} W_1 = \rho_1 g V_{s,1} \\ W_2 = \rho_2 g V_{s,2} \end{cases}, \quad (5.2)$$

ovvero, come già detto, la forza peso deve bilanciare la forza complessiva agente sulla particella. Si osservi come nelle (5.1)–(5.2) siano state inserite grandezze scalari, per cui si intende che Δp , W_1 , W_2 , e g siano i valori assoluti delle proiezioni lungo l'asse z verticale dei rispettivi vettori. In termini vettoriali:

$$\begin{cases} \mathbf{W}_j = W_j \cdot \mathbf{i}_y \\ \Delta p = \Delta p \cdot \mathbf{i}_y = -\int_0^H \frac{\partial p}{\partial y} \cdot \mathbf{i}_y \\ \mathbf{g} = -g \cdot \mathbf{i}_y . \end{cases} \quad (5.3)$$

Se si volesse esprimere il bilancio in termini di forza netta, sarebbe necessario esplicitare il galleggiamento come indicato dalla (1.24), da cui si otterrebbe

$$\begin{cases} N_1 + \rho_f g V_{s,1} = \rho_1 g V_{s,1} \\ N_2 + \rho_f g V_{s,2} = \rho_2 g V_{s,2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} N_1 = (\rho_1 - \rho_f) g V_{s,1} \\ N_2 = (\rho_2 - \rho_f) g V_{s,2} . \end{cases} \quad (5.4)$$

Se invece si volesse esprimere tutto in funzione della forza di puro drag, sempre secondo la (1.24) sarebbe necessario esprimere la perdita di carico espressa dalla (5.1), e si otterrebbe che

$$\begin{cases} F_{d,1} + V_{s,1} \frac{\Delta p}{L} = (\rho_1 - \rho_f) g V_{s,1} \\ F_{d,2} + V_{s,2} \frac{\Delta p}{L} = (\rho_2 - \rho_f) g V_{s,2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} F_{d,1} = [\rho_1 - (\phi_1 \rho_1 + \phi_2 \rho_2 + \varepsilon \rho_f)] g V_{s,1} \\ F_{d,2} = [\rho_2 - (\phi_1 \rho_1 + \phi_2 \rho_2 + \varepsilon \rho_f)] g V_{s,2} . \end{cases} \quad (5.5)$$

La (5.5) rappresenta, in pratica, la definizione di “densità di bulk” (Gibilaro et al. 1986),

$$\rho_b = (\phi_1 \rho_1 + \phi_2 \rho_2 + \varepsilon \rho_f), \quad (5.6)$$

e che indica la densità media della fase miscelata, in cui il vuoto è occupato dal fluido che impone la sua densità attraverso il grado di vuoto, mentre la restante frazione solida impone le densità delle due specie, pesandole con la loro frazione volumetrica assoluta. Per cui concludendo:

$$\begin{cases} F_{d,1} = (\rho_1 - \rho_b) g V_{s,1} \\ F_{d,2} = (\rho_2 - \rho_b) g V_{s,2} . \end{cases} \quad (5.7)$$

Le incognite del problema sono il grado di vuoto e la velocità superficiale relativa critici, noti che siano i diametri delle specie e la loro composizione. È importante, inoltre, ricordare che le formulazioni (5.2), (5.4) e (5.7) sono del tutto equivalenti. In letteratura sono presenti approcci diversi alla previsione delle grandezze critiche, ma come si vedrà nei modelli elencati di seguito, il problema si riduce il più delle volte nell'esprimere la forza di drag agente su ogni specie particellare con un modello adeguato.

- **Metodi basati sulla densità di bulk dei puri**

Questa categoria di modelli per la previsione dell'inversione si basano sull'ipotesi che il grado di segregazione nel sistema sia dettato dalla differenza di densità di bulk per le due specie solide, quando fluidizzate separatamente dallo stesso liquido e nelle stesse condizioni fluidodinamiche. Se si indica con ε_j il grado di vuoto raggiunto dalla specie j quando fluidizzata separatamente e pura, e si suppone che al punto di equilibrio le densità di bulk ottenute in maniera distinta per le due specie pure debbano coincidere, deve valere che

$$(1 - \varepsilon_1)\rho_1 + \varepsilon_1\rho_f = (1 - \varepsilon_2)\rho_2 + \varepsilon_2\rho_f. \quad (5.8)$$

Il problema si sposta poi nella valutazione di ε_j : su questo esistono diversi approcci tra cui si citano quelli di Epstein e LeClair (1985), di Hu (2002) e di Epstein (2005).

- **Metodi basati sull'espansione**

Questi metodi fanno capo a quelli di Patwardhan e Tien (1985) e di Bhattacharya e Dutta (2002), già citati attraverso le (3.34)–(3.36), per l'ottenimento di ε_j . Se q_j è l'esponente di Richardson-Zaki (1954) dell'equazione (3.26) per la specie j , vale

$$U_{t,1}\varepsilon_1^{q_1-1} \frac{(\rho_1 - \rho_b)}{(\rho_1 - \rho_f)} = U_{t,2}\varepsilon_2^{q_2-1} \frac{(\rho_2 - \rho_b)}{(\rho_2 - \rho_f)}, \quad (5.9)$$

ovvero l'equazione di Masliyah (1979) modificata, da cui si può ottenere il grado di vuoto all'inversione, di cui sono funzione gli ε_j secondo le (3.34)–(3.35).

- **Metodi basati sulla massimizzazione della densità del bulk**

Questi metodi sono stati proposti ed utilizzati soprattutto da Gibilaro et al. (1986) e Di Felice (1994). Si parte dall'equazione (5.1) cui viene sostituita, per la perdita di carico, un modello per il calcolo della forza di interazione in sistemi monodispersi, facendo uso, però, del diametro alla Sauter. Manipolando l'equazione di ottiene:

$$\left\{ \left[\left(\frac{17.3}{Re} \right)^\varphi + (0.336)^\varphi \right]^\frac{1}{\varphi} \frac{\rho_f u^2}{gD} = \frac{\phi_1(\rho_1 - \rho_b) + \phi_2(\rho_2 - \rho_b)}{(\phi_1 + \phi_2)(1 - \phi_1 - \phi_2)^{-4.8}} \right. \quad (5.10)$$

$$\left. \left[\varphi = 2.55 - 2.1 \left[\tanh(20\varepsilon - 8) \right]^{0.33} \right]^3 \right.$$

Le coppie di punti ϕ_1 – ϕ_2 soluzioni della (5.10) rappresentano “condizioni di lavoro”, alle quali vanno accoppiate delle condizioni di equilibrio; quest'ultime nascono dalla considerazione che la densità di bulk diviene massima quando il sistema è completamente miscelato. Quindi, tra le coppie di lavoro soluzioni della (5.10), quella di equilibrio è quella che massimizza il valore della densità di bulk espressa dalla (5.6).

- **Metodi basati sull'equilibrio contemporaneo delle specie**

Appartengono a questo insieme di metodi i modelli sviluppati, tra gli altri, da Moritomi et al. (1986) e Funamizu e Takakuwa (1995). Si illustra brevemente quest'ultimo, il quale fa capo all'equazione (5.7), in cui rimane da scegliere il modello per il calcolo della forza di puro drag. Gli autori propongono un modello che fa uso del coefficiente di drag riferito ai solidi puri $C_{d,j}^*$ e di una concentrazione media del bulk ϕ_j^* :

$$F_{d,j} = \rho_f \left(\frac{U_f}{1 - \phi_j^*} \right)^2 \frac{\pi}{8} D_{s,j}^2 C_{d,j}^* \quad (5.11)$$

in cui le due grandezze medie introdotte necessitano di ulteriori modelli che si evita di riportare perché esulano da questa trattazione. Basti dire che il metodo prescelto per la previsione del punto di inversione mediante il nuovo modello si basa proprio su questo gruppo di metodi.

5.2.3 Previsione dell'inversione mediante il nuovo modello

Data la sua semplicità concettuale sarà presa in considerazione la (5.7), con cui è possibile ottenere la velocità, prevista dal nuovo modello, alla quale il sistema inverte, mediante la sostituzione della (4.29)

$$\begin{cases} \Omega_1(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}) \cdot 3\pi\mu D_{s,1} u = (\rho_1 - \rho_b) g V_{s,1} \\ \Omega_2(\varepsilon, y_j, y_m) \cdot f_{mono}(\varepsilon, \overline{Re}) \cdot 3\pi\mu D_{s,2} u = (\rho_2 - \rho_b) g V_{s,2}, \end{cases} \quad (5.12)$$

ed applicando la (4.28) è possibile, data la composizione e la distribuzione dei diametri particellari, risolvere il sistema nelle due sole incognite rappresentate dal grado di vuoto e dalla velocità superficiale del fluido. Analogo risultato, ovviamente, si sarebbe potuto ottenere utilizzando le (5.4).

Può essere interessante, a tal punto, procedere ad una validazione del nuovo modello, inserendo nel sistema (5.12) dati di letteratura inerenti composizione, dimensione e densità delle specie solide, in modo da confrontare i valori di velocità e grado di vuoto al punto di inversione forniti dalle previsioni del modello con quelli empirici. I risultati di questo confronto sono esposti in tabella 5-ii ed in figura 5-VIII.

La tabella 5-ii contiene un confronto tra alcuni dei i dati di letteratura disponibili e le previsioni dei modelli. La temperatura è stata assunta sempre pari a 20°C. La tabella confronta le previsioni ottenute risolvendo, rispetto ad u ed ε , le equazioni (5.12), calcolando i coefficienti di specificazione tramite il nuovo modello e quello VBK non corretto delle equazioni (3.53). In tabella sono anche riportate le previsioni ottenute

Tab. 5-ii: Confronto con dati di inversione. Dati a 20°C per velocità e grado di vuoto al punto di inversione in cui si confrontano i valori previsti dal nuovo modello (NM), dal modello VBK senza correzione (NC) e dall'uso diretto del modello di Di Felice (1994) (DF) con quelli di letteratura (EXP) tratti da [1] Di Felice (1988), [2] Funamizu e Takakuwa (1995), [3] Gibilaro et al. (1986), [4] Matsuura e Akehata (1985), [5] Moritomi et al. (1982) e [6] Jean e Fan (1986). I solidi sono fluidizzati con acqua.

Dati	$D_{s,1} / D_{s,2}$ [mm]	x_2	ρ_1 / ρ_2 [kg/m ³]	$u_{EXP} / u_{NM} / u_{NC} / u_{DF}$ [mm/s]	$\epsilon_{EXP} / \epsilon_{NM} / \epsilon_{NC} / \epsilon_{DF}$
[1]	0.195 / 2.000	0.551	2500 / 1280	12.3 / 12.1 / 13.1 / 19.9	0.77 / 0.81 / 0.82 / 0.69
[2]	0.134 / 0.677	0.500	2476 / 1398	7.6 / 5.9 / 6.9 / 9.8	0.83 / 0.84 / 0.86 / 0.63
	0.164 / 0.677	0.500	2480 / 1398	13.1 / 13.5 / 15.5 / 14.2	0.91 / 0.93 / 0.94 / 0.67
[3]	0.135 / 0.700	0.293	8800 / 3800	13.8 / 13.4 / 14.1 / 41.9	0.72 / 0.74 / 0.75 / 0.61
	0.135 / 0.700	0.508	8800 / 3800	18.7 / 14.2 / 13.9 / 43.4	0.69 / 0.70 / 0.69 / 0.53
[4]	0.807 / 2.010	0.431	1170 / 1395	30.0 / 35.9 / 38.8 / 44.7	0.87 / 0.91 / 0.93 / 0.69
[5]	0.214 / 0.776	0.476	2450 / 1500	12.5 / 12.5 / 14.5 / 21.1	0.84 / 0.84 / 0.86 / 0.60
[6]	0.193 / 0.778	0.480	2510 / 1509	9.9 / 9.4 / 10.7 / 18.4	0.84 / 0.81 / 0.83 / 0.59

applicando il modello di Di Felice (1994) in maniera diretta su ogni singola specie particolare ovvero:

$$\begin{cases} \frac{Re_1}{24} C_d(Re_1) \epsilon^{-p(Re_1)} \cdot 3\pi\mu D_{s,1} u = (\rho_1 - \rho_b) g V_{s,1} \\ \frac{Re_2}{24} C_d(Re_2) \epsilon^{-p(Re_2)} \cdot 3\pi\mu D_{s,2} u = (\rho_2 - \rho_b) g V_{s,2} \\ Re_j = \frac{\rho_f u D_{s,j}}{\mu}; \quad p(Re_j) = 3.7 - 0.65 \exp\left[-\frac{(1.5 - \log_{10} Re_j)^2}{2}\right] \end{cases} \quad (5.13)$$

La prima osservazione da fare è che non vengono riportate previsioni effettuate tramite il modello VBK corretto: questo perché accade che il sistema (5.12) con l'uso delle (3.54) nella maggior parte dei casi non ammette una soluzione accettabile. L'uso della (5.13) rientra nei tentativi di letteratura, di cui si è discusso nel terzo capitolo, di usare un numero di Reynolds modificato per la singola specie: si osserva (tabella 5-ii)

come questa strada porti a previsioni molto distanti dal valore reale del grado di vuoto e della velocità all'inversione. Per il calcolo del coefficiente di drag da utilizzare nelle (5.13) si è fatto uso del modello di Dallavalle (1948). L'alternativa all'uso del Reynolds particellare è quella rappresentata dalle (3.37): qualora si seguisse questa strada adoperando come modello monodisperso quello DF, gli errori sarebbero ancora più marcati.

La tabella 5-ii dimostra che la correzione inserita attraverso il nuovo modello migliora le previsioni dei dati di velocità e/o di grado di vuoto nella quasi totalità dei casi, confermando in questo modo la sua validità.

Come dimostrato nel lavoro di Escudié et al. (2006), la temperatura del sistema, spesso non riportata ma necessaria per calcolare le proprietà del fluido, da utilizzare per calcolare il punto di inversione, riveste in alcuni casi un'importanza notevole: sono i casi in cui l'espansione di almeno una delle specie solide coinvolte dipenda fortemente dalla densità, ma soprattutto dalla viscosità del fluido. Basta osservare il bilancio di forze per un sistema fluidizzato espresso mediante le (5.4) e (5.7) per comprendere in quali contributi entra la viscosità del fluido immesso in colonna: nella definizione del numero di Reynolds e determina la forza adimensionale netta o pura; l'effetto sull'espansione di una variazione della viscosità a causa della temperatura non è sempre prevedibile qualitativamente, mentre una diminuzione della temperatura corrisponde sempre ad una diminuzione della velocità caratteristica alla quale il fenomeno avviene.

La tabella 5-ii raccoglie il confronto tra dati sperimentali e previsioni dei modelli considerando che questi siano sempre alla temperatura di 20°C: questo, ovviamente, per avere un riferimento nel confronto tra i valori previsti. Per ottenere, invece, una valutazione dell'effetto della temperatura si fa riferimento alla figura 5-VIII che mostra, al variare della frazione volumetrica del solido più grossolano, un confronto tra i valori di velocità di inversione estratti dai dati sperimentali di Jean e Fan (1986) e di Moritomi et al. (1982) con quelli previsti da nuovo modello mediante l'uso della (5.12).

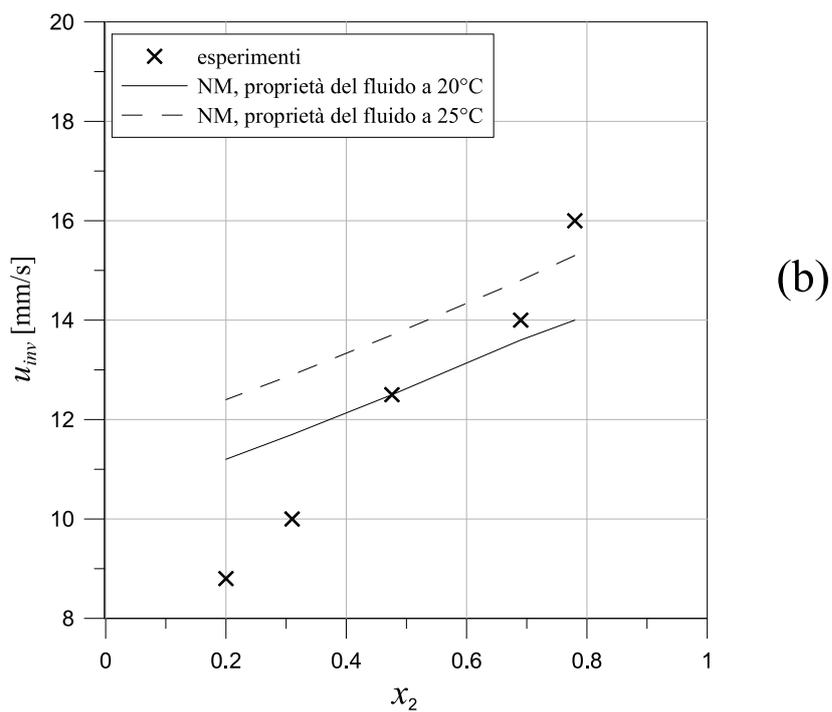
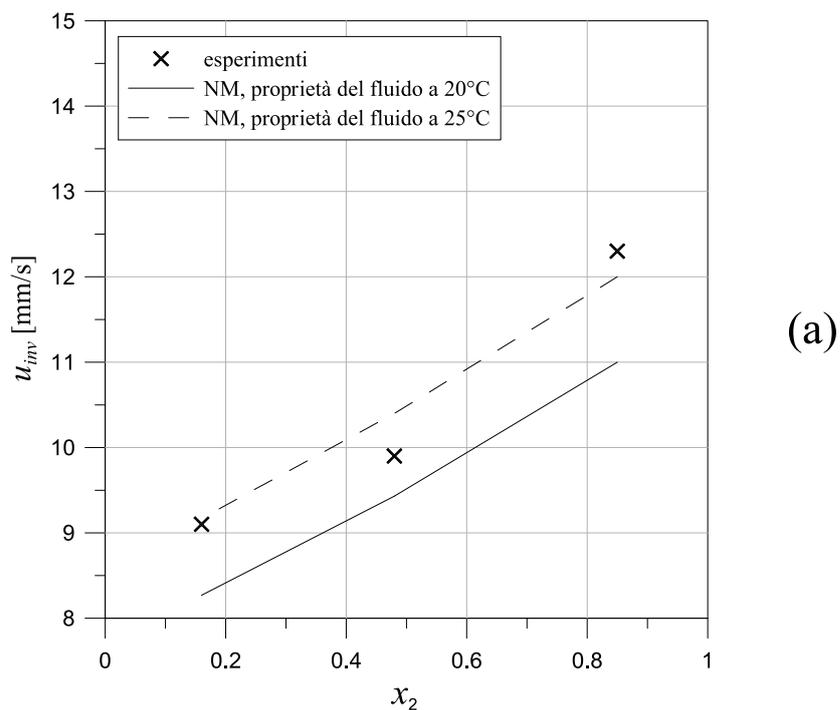


Fig. 5-VIII: Previsione della velocità di inversione. Confronto fra i valori di velocità di inversione, al variare della frazione volumetrica, provenienti dai dati sperimentali di Jean e Fan (1986) {figura (a), gruppo [6] in tabella 5-ii} e Moritomi et al. (1982) {figura (b), gruppo [5] in tabella 5-ii} e quelli previsti col metodo del bilancio delle forze mediante il nuovo modello (NM).

Si nota l'effetto della temperatura sui valori critici al punto di inversione di velocità e grado di vuoto e si osserva un buon accordo soprattutto nella tendenza dei punti al variare della frazione volumetrica relativa. Osservando la figura 5-VIII-(a), nel caso dei dati di Jean e Fan (1986), i valori previsti sono molto prossimi a quelli osservati sperimentalmente, soprattutto considerando la temperatura di 25 °C. Per ciò che riguarda i dati di Moritomi et al. (1982) in figura 5-VIII-(b), l'accordo è buono soprattutto a frazioni volumetriche intermedie, mentre l'andamento delle previsioni indica una sovrastima dei valori sperimentali.

5.3 Validazione del nuovo modello mediante simulazioni DEM-CFD di sistemi bidispersi studiati in letteratura

Nella convinzione, confermata anche dalla previsione macroscopica dell'equilibrio di forze in sistemi bidispersi, che il fenomeno dell'inversione sia dominato dal punto di vista meccanico dalla forza di drag, si è scelto di simulare in dettaglio alcuni sistemi, i cui dati fossero disponibili in letteratura, al fine di verificare l'effettiva validità del nuovo modello attraverso il confronto con i risultati ottenuti. La simulazione è stata effettuata col codice DEM-CFD descritto nel secondo capitolo.

5.3.1 Modalità di selezione dei dati di letteratura

La prima cosa che è necessario chiarire è il grado di fedeltà della simulazione che ci si può attendere. In effetti non è possibile, coi mezzi tuttora a disposizione, effettuare simulazioni che coinvolgano un numero di particelle prossimo a quello presente nei sistemi reali. Da questo punto di vista il lavoro è pionieristico, in quanto il fenomeno dell'inversione è stato simulato attraverso il TFM ad esempio da Syamlal e O'Brien (1988) e Howley and Glasser (2002), ma, a parte il tentativo di Malone et al. (2007), non si registrano, a nostra conoscenza, tentativi di simulazione mediante DEM. Quello

di Malone et al. (2007) va considerato come un lavoro preliminare, in quanto il sistema simulato è puramente teorico, non supportato da dati sperimentali e, pur facendo leva su una differenza di densità e di diametri fra le due specie molto rilevante non determina nelle simulazioni una loro netta segregazione.

Per diminuire l'onere computazionale del sistema solitamente si opera un'approssimazione legata all'ipotesi di pseudo-bidimensionalità con pareti periodiche ed una legata ad un fattore di scala. Per come è stato descritto nel secondo capitolo, si immagina il sistema a forma di parallelepipedo, in cui le dimensioni preponderanti siano la lunghezza e l'altezza (figura 2-II-b). Se si immaginano due piani, paralleli e simmetrici all'asse della colonna, supposta cilindrica, posti ad una distanza trascurabile rispetto al diametro della colonna stessa, allora essi intercettano un volume particellare a cavallo dell'asse di forma approssimativamente parallelepipedica (trascurando la curvatura della parete della colonna). Se si conferisce alle due superfici principali (quelle contenenti le dimensioni preponderanti di lunghezza ed altezza rispetto a quella della profondità) di questo parallelepipedo caratteristiche di periodicità, ovvero che il sistema sia toroidale ed una particella che abbandoni verso l'esterno una delle due facce rientri dall'altra, allora si può pensare di simulare solo questo spessore ottenendo comunque una fedele, seppur approssimata, rappresentazione della realtà (figura 5-IX). In tutte le simulazioni effettuate si sono supposte periodiche le pareti contenenti le dimensioni preponderanti (L ed H in figura 2-II-b), ma non quelle perpendicolari all'asse x .

L'aver fortemente ridotto il rapporto tra dimensione delle particelle e lunghezza del sistema potrebbe comportare una variazione del comportamento simulato rispetto a quello reale.

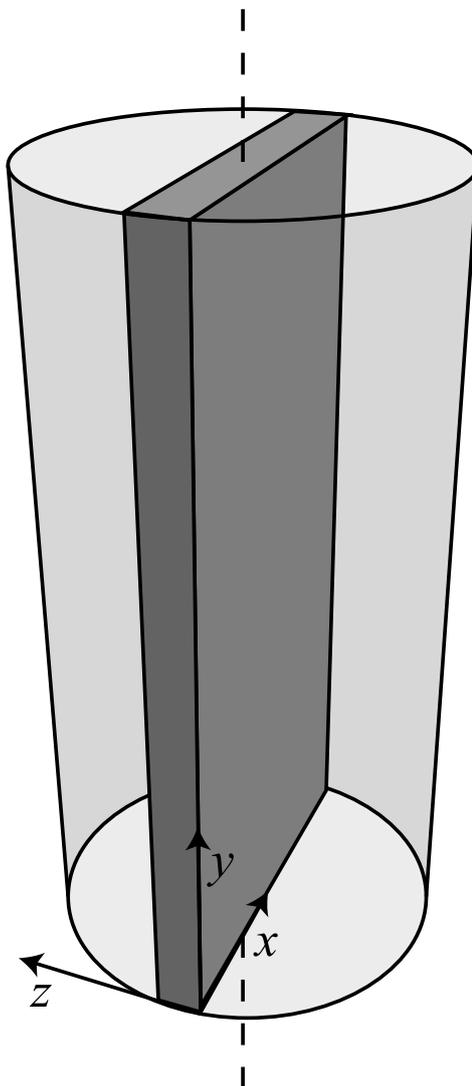


Fig. 5-IX: Approssimazione del sistema reale. La figura mostra la riduzione del dominio di indagine di un tipico sistema di letteratura i cui dati siano disponibili per una colonna cilindrica: è possibile simulare il parallelepipedo a spessore trascurabile lungo l'asse z , nelle ipotesi che le pareti parallele al piano contenente gli assi x ed y siano periodiche.

C'è da sottolineare che nelle direzioni x ed y , visto il funzionamento dell'algoritmo di ricerca degli urti (descritto nel secondo capitolo e che si fonda sul quarto di cella in cui si trova la particella oggetto di indagine), la dimensione minima ammissibile del passo di griglia deve essere una volta e mezzo la dimensione del diametro massimo particellare. Nella direzione z , essendo presente un'unica cella computazionale, la

dimensione minima di Δz deve essere pari a due diametri massimi particellari, onde evitare assurdi quali quelli di una particella urti con se stessa o con un'altra che affacci su di essa contemporaneamente da un lato e dall'altro della parete periodica

L'altra assunzione utilizzata per ridurre l'onere è quella di scalare le dimensioni preponderanti del sistema rispetto a quello sperimentale, mantenendo uno spessore in direzione z pari almeno alla dimensione di due diametri massimi particellari. Ci si ritrova, quindi, con una lunghezza L che è una frazione di quella originaria del diametro D_c della colonna. ciò induce un'approssimazione, poiché muta il rapporto tra la dimensione della colonna e quella delle particelle, che può influenzare il drag, essendo presente sulle pareti la condizione di aderenza (“no slip”).

Il problema del numero totale di particelle simulabili con un onere di calcolo accettabile diventa particolarmente preponderante quando si considerino sistemi bidispersi in cui la frazione volumetrica della specie fine è elevata e questa abbia un diametro molto piccolo. Questo significa che, per riprodurre le stesse proporzioni fra le due specie è richiesto un altissimo numero di particelle fini, pur nelle ipotesi di considerare solo una porzione del sistema (con l'ipotesi di pareti periodiche) e pur scalandone successivamente le dimensioni, riducendolo fin sotto al 20% di quello originale. Questi numeri sono improponibili dal punto di vista computazionale, motivo per cui ciò restringe enormemente l'insieme dei lavori di letteratura in cui poter attingere dati simulabili.

È importante sottolineare che in tutte le simulazioni effettuate si è ritenuto di poter trascurare tutti i contributi di forza agenti sulle particelle, fuorché quelle di contatto, la forza peso, quella di galleggiamento e la forza di drag: questo perché il comportamento del sistema soggetto al fenomeno dell'inversione è influenzato, come detto, in maniera preponderante dalla forza di drag. Il non aver inserito forze di natura fluidodinamica o legate ad un transitorio, potrebbe essere un fattore determinante l'accuratezza delle simulazioni effettuate.

Altra possibile causa di rappresentazione finale poco fedele da parte del DEM-CFD potrebbe ricercarsi nella qualità dei dati sperimentali di letteratura che è possibile reperire. In genere sono disponibili pochissimi lavori di letteratura da cui si possa evincere, oltre che la velocità di inversione, anche il grado di vuoto nella condizione di equilibrio, parametro cruciale e molto sensibile nell'ottica della valutazione della forza di drag. In alcuni casi viene fornita, però, l'altezza totale del sistema che consente, previa conoscenza delle dimensioni della colonna (anche queste non sempre fornite), di risalire al grado di vuoto. In altri casi, e sono davvero pochissimi, viene fornita anche l'altezza dell'interfaccia solida al variare della velocità di invio del fluido, ciò che consente una valutazione più efficace della distribuzione delle forze tra le due differenti specie.

Quanto discusso riduce ad un ristretto gruppo l'insieme delle prove sperimentali cui poter attingere, gruppo destinato ulteriormente a restringersi se si fanno anche delle considerazioni di fattibilità della simulazione, legate ai tempi di calcolo necessari. Come descritto nel secondo capitolo di questo lavoro di tesi, il passo temporale di integrazione scelto deve essere tale da poter osservare l'urto fra due particelle nel suo attuarsi in maniera completa: insomma il passo deve essere una frazione del tempo necessario ad un urto affinché si completi (Di Renzo e Di Maio 2005). Quest'ultimo parametro è inversamente proporzionale alla dimensione delle particelle protagoniste dell'urto stesso. Molti dei dati di letteratura che forniscono dati completi su grado di vuoto ed altezza dell'interfaccia sono stati scartati per via dell'assenza di questo prerequisito fondamentale legato alla praticabilità della simulazione, visto che oggetto di analisi di questi lavori erano particelle di dimensioni molto al di sotto dei 200 μm , ciò che rende troppo onerosi i tempi di calcolo necessari ad una loro simulazione.

Ultima incertezza, non sempre superabile, è quella legata alla temperatura del fluido; questa influenza notevolmente, come visto (Escudié et al. 2006), le previsioni dell'inversione e, di conseguenza, la fedeltà della simulazione DEM. Questo dato quasi

mai viene fornito, e qualora questo accada c'è da chiedersi se sia costante nel tempo necessario alla fluidizzazione del sistema.

Ciò detto, si evince che alla simulazione DEM, dopo attenta vagliatura dei casi sperimentali da analizzare, si richiede almeno di riprodurre il fenomeno ed il comportamento delle due specie, nonché quello macroscopico dell'intera massa solida: è necessario anche dotarsi di strumenti analitici che riescano ad elaborare i dati delle simulazioni per trarne delle indicazioni da confrontare coi dati sperimentali.

5.3.2 Sistemi scelti per la simulazione

Ogni sistema di letteratura ai cui dati si è deciso di attingere (tabella 5-iii), selezionato alla luce delle considerazioni in precedenza discusse, è stato simulato in una scala ridotta. È stata considerata una frazione delle particelle totali tale da continuare a garantire il medesimo rapporto d'aspetto (quando fornito), e le stesse frazioni volumetriche totali. Anche la lunghezza e l'altezza del sistema risultano, di conseguenza, in scala, mentre la profondità, come detto, deve garantire una dimensione almeno superiore a quella di due dei diametri massimi particellari. In queste condizioni è logico attendersi che il letto espanderà in scala: l'altezza totale e quella di interfaccia registrata in ogni prova saranno sempre raffrontabili in scala con quelle delle analoghe prove sperimentali. Questo fatto è di notevole importanza, in quanto permette una misura indiretta, attraverso l'altezza e l'area di base del sistema, del grado di vuoto raggiunto.

Come primo sistema da simulare si è scelto quello indicato come "binary 3" nel lavoro di Esptein e LeClair (1985). Dei dettagli e delle proprietà fisiche di questo sistema si riferisce in tabella 5-iii (sistema [A]) e si discuterà in seguito. Qui vale la pena osservare che gli autori hanno condotto prove sperimentali a quattro differenti velocità molto distanti fra loro. L'altezza dell'interfaccia in ogni prova è stata determinata attraverso l'individuazione di un cambio di pendenza della perdita di carico

Tab. 5-iii: Dati di letteratura selezionati per la simulazione. Le colonne della tabella contengono nell'ordine i diametri, la composizione e le densità del solido binario, la velocità ed il grado di vuoto al punto di inversione, il tipo di fluido utilizzato e la sua temperatura, il diametro della colonna predisposta. I dati da cui questi valori sono tratti sono quelli di [A] Esptein e LeClair (1985), [B] Matsuura e Akehata (1985), [C] Moritomi et al. (1982).

<i>Sistema</i>	$D_{s,1} / D_{s,2}$ [mm]	x_2	ρ_1 / ρ_2 [kg/m ³]	u_{EXP} [mm/s]	ϵ_{EXP}	<i>Fluido</i>	T [°C]	D_c [mm]
[A]	0.645 / 1.079	0.493	3950 / 2910	1.8	0.76 (0.77)	$\rho_f=1070 \text{ kg/m}^3$ $\mu=0.14 \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$	-	50.8
[B]	0.807 / 2.010	0.431	1170 / 1395	30.0	0.87	<i>Acqua</i>	12–15	80.0
[C]	0.214 / 0.776	0.476	2450 / 1500	12.5	0.84	<i>Acqua</i>	-	50.0

Il fluido utilizzato nei dati del gruppo [A] è glicole polietilenico.

lungo l'asse della colonna. Questo metodo lascia qualche dubbio nel caso in esame, in quanto le prove sono a velocità molto distanti fra loro e quelle effettuate alle velocità più prossime a quella critica presentano andamenti della perdita di carico tali per cui l'individuazione del cambio di pendenza risulta opinabile. D'altro canto, anche l'approccio con cui il grado di vuoto all'inversione è stata determinato risulta da due metodologie e fornisce due risultati abbastanza differenti fra loro (tabella 5-iii) e distanti anche dai valori forniti dai modelli di previsione degli stessi autori. Infine sono fornite la densità e la viscosità del fluido utilizzato (soluzione acquosa di glicole polietilenico), rendendo accessorio il dato di temperatura, ma non viene fornito alcun dato inerente il rapporto d'aspetto iniziale del letto.

Per tutte le osservazioni appena discusse si è deciso di utilizzare questo sistema, adatto ad essere simulato per la dimensione del solido usato, come primo approccio qualitativo al problema, verificandone il comportamento ed il verificarsi dell'inversione al variare della velocità del fluido, senza entrare in analisi quantitative che non avrebbero il necessario supporto dei dati sperimentali.

Grande dovizia di dettagli si ritrova, invece, nelle prove sperimentali effettuate da Matsuura e Akehata (1985), in cui sono fornite non solo le altezze totali a tutte le

velocità testate, ma anche quelle di interfaccia e soprattutto la temperatura a cui le prove sono state condotte. Questo sistema ([B] in tabella 5-iii) è stato, dunque, simulato con l'obiettivo di testare il nuovo modello, confrontando il dato dell'altezza dell'interfaccia per valutare la qualità della previsione della distribuzione delle specie. In effetti, qualora l'altezza dell'interfaccia venisse accuratamente predetta, questo sarebbe indice di una buona modellazione della forza agente sulla singola specie, cuore delle innovazioni apportate col NM. Come si vedrà, è stato operato anche un confronto con i risultati ottenuti utilizzando il modello DF puro su ogni particella per il calcolo della forza di drag. Gli autori forniscono le quantità dettagliate dei solidi caricati in colonna ed è possibile ricavare con precisione sia la frazione volumetrica complessiva delle due specie che il rapporto d'aspetto iniziale.

L'ultimo sistema di letteratura simulato è quello di Moritomi et al. (1982), classificato da Escudié et al. (2006) come "binary IV" ([C] in tabella 5-iii). Dei tre simulati questo rappresenta il sistema più oneroso dal punto di vista computazionale, vista la dimensione delle particelle e le proporzioni fra le specie. Di quelli studiati dagli autori questo sistema era l'unico che fornisse un numero di particelle simulabili in una riduzione in scala delle dimensioni accettabile. Sono forniti dati di altezza totale, ma non di interfaccia; non si conosce la temperatura di invio del fluido ed uno dei solidi utilizzati (hollow char) presenta porosità: questo fatto produce delle incertezze sulle proporzioni delle due specie, poiché la quantità di solido hollow char caricato in colonna viene fornito sotto forma di massa secca. Per determinare le quantità in gioco in letteratura (Escudié et al. 2006) si è fatto generalmente ricorso ad una densità assoluta dell'hollow char che lascia però alcuni dubbi nell'interpretazione dei grafici proposto da Moritomi et al. (1982); in questo lavoro si è preferito, come si vedrà, operare sulla base delle indicazioni fornite dell'altezza dei due solidi registrata nei grafici, utilizzati anche per ricavare il rapporto d'aspetto iniziale del letto particellare.

Il sistema IV di Moritomi et al. (1982) è stato simulato anche con l'obiettivo di verificare l'effetto della temperatura e dell'ampiezza della griglia CFD sui risultati. Dato l'onere computazionale già citato, al fine di ridurre i tempi di calcolo, è stata sviluppata una versione parallela del codice, discussa nella seconda parte di questa tesi.

5.3.3 Strumenti di analisi

L'analisi dei dati ottenuti dalla simulazione DEM di sistemi bidispersi sarà necessariamente incentrata sulla distribuzione delle specie solide: ciò corrisponde all'individuazione, ad ogni velocità di invio del fluido, di una zona miscelata ed una segregata.

La prova prevede un'evoluzione temporale, per cui necessita, ad ogni istante, di riuscire ad individuare con esattezza quale delle due specie manifesti la tendenza ad occupare lo strato superiore del sistema e quale quello inferiore. Una misura di queste tendenze può essere la determinazione del baricentro dei due gruppi lungo l'asse verticale y . Se con $H_{b,j}$ si indica la coordinata verticale del baricentro della j -esima delle due specie e $H_{b,t}$ quello totale varrà:

$$\begin{cases} H_{b,j} = \frac{\sum_{k=1}^{Ms_j} (V_j \rho_j s_{y,k})}{(Mp_j \cdot V_j \rho_j)} = \frac{\sum_{k=1}^{Ms_j} (s_{y,k})}{Mp_j} \\ H_{b,t} = \frac{\sum_{k=1}^{Mp} (V_k \rho_k s_{y,k})}{\sum_{l=1}^{Ms} (Mp_l \cdot V_{s,l} \rho_l)} = \frac{\sum_{j=1}^{Ms} (H_{b,j} \cdot m_{t,j})}{m_t}, \end{cases} \quad (5.14)$$

dove $s_{y,k}$ è la componente lungo l'asse y del vettore posizione della particella k , Mp_j ed $m_{t,j}$ sono rispettivamente il numero e la massa totale delle particelle di specie j , mentre m_t è la massa particellare totale.

Come si vedrà in seguito, la quota del baricentro delle due specie non solo sarà presa a misura della tendenza di una specie a segregare nella parte alta della colonna, ma la sua evoluzione temporale sarà indice del raggiungimento di uno stazionario per il comportamento per la disposizione dei due solidi.

Risulta interessante analizzare anche l'evoluzione temporale dell'altezza totale del letto, proprio al fine di individuare uno stazionario ed infine, a questo stadio, operare dei confronti con i dati sperimentali. L'altezza massima particellare non è omogenea in direzione x e z nel sistema: si è deciso di suddividere il sistema in un certo numero di sezioni lungo la direzione z e quella x . In ognuna di queste sezioni si ordinano le particelle in funzione della loro quota lungo l'asse y , derivando quota massima e minima nella sezione: la differenza determina l'altezza priva dello spessore del diffusore, che occupa una cella computazionale e mezza dal fondo della colonna. Si fa una media aritmetica delle altezze delle sezioni e si ottiene l'altezza al tempo corrente. Si ripete l'operazione per ogni Δt (passo temporale), e si ottiene l'evoluzione temporale dell'altezza del letto. Come detto, spesso si utilizza un fattore di scala nella rappresentazione del sistema rispetto a quello reale; per poter confrontare le altezze raggiunte sarà necessario, appunto, dividere l'altezza calcolata per il fattore stesso.

Altro strumento di cui ci si è dotati è quello dell'analisi dei profili di concentrazione (frazione volumetrica relativa) lungo l'asse y del sistema. Si seleziona una frazione del tempo totale di simulazione, ad esempio su 60 s di prova gli ultimi 15 s. Si suddivide la colonna attraverso piani orizzontali equidistanti e perpendicolari all'asse y che la tagliano in un determinato numero di sezioni (figura 5-X): ogni sezione deve contenere un volume di particelle (mediato nel tempo di osservazione) che sia significativo a livello statistico. Se si è scelto, come in figura 5-X ad esempio, di prendere in considerazione 50 sezioni, allora ognuna di essa dovrà contenere almeno 1/50 del volume totale di solido: si parte dal basso della colonna ed una volta intercettato il volume medio temporale di particelle richiesto si individua la prima sezione e si riparte da quel punto per individuarne un'altra rappresentativa, e così via fino alla fine del sistema. Ovviamente, così operando alla fine dell'analisi potrà capitare che il numero delle sezioni rappresentative sia inferiore a 50, come accade in figura 5-X.

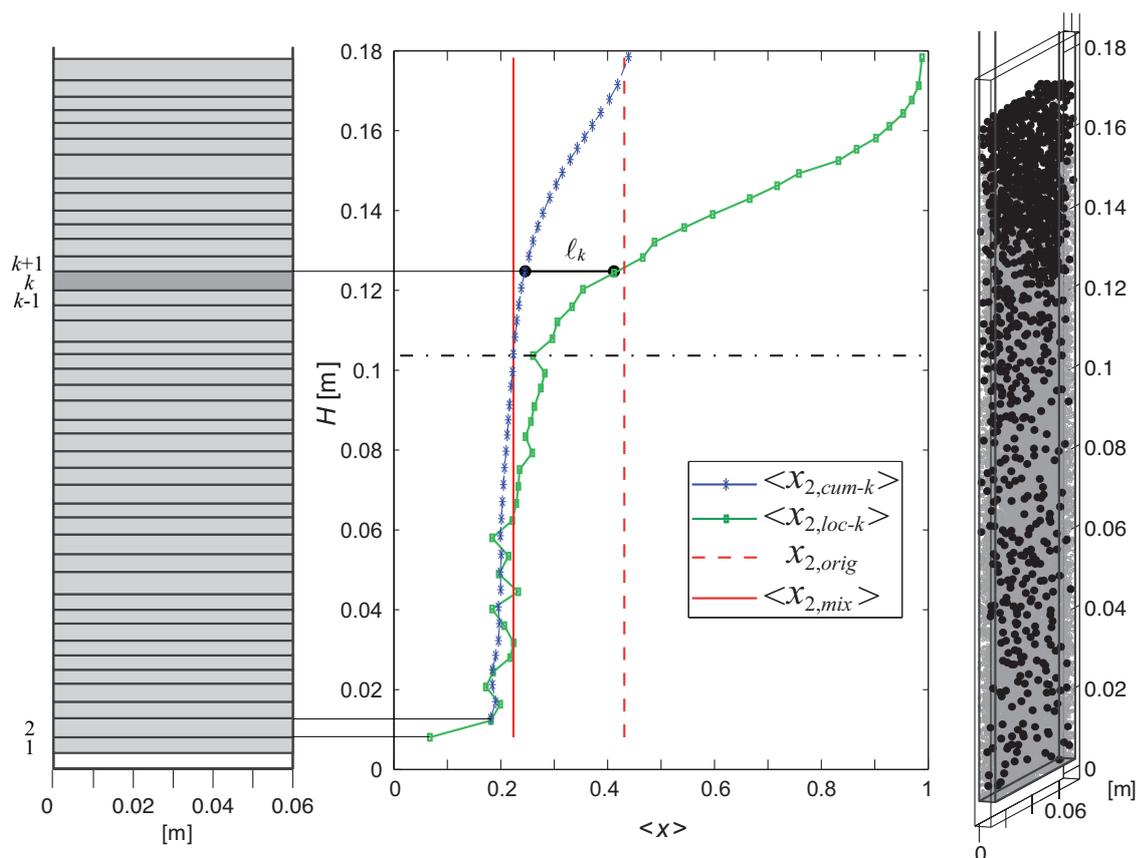


Fig. 5-X: Valutazione della quota di interfaccia. La figura illustra il metodo prescelto per la determinazione della quota di interfaccia: il sistema 3D (raffigurato sulla destra con un fotogramma in cui le particelle del gruppo 2 sono indicate in nero e quelle del gruppo 1 in grigio) viene suddiviso lungo l'asse y in sezioni contenenti un volume rappresentativo a livello statistico di particelle, in questo caso $1/50$ del volume totale. Per semplicità si è deciso di ragionare in riferimento alla specie solida 2. Partendo dal basso, si sono determinate 44 sezioni a volume significativo, in ognuna delle quali, mediando nel tempo, viene valutata la frazione volumetrica relativa locale $\langle x_{2,loc-k} \rangle$, attraverso la quale si può individuare la coda di distribuzione (prima sezione in figura). Escludendo quelle interessate dalla coda si determina per ognuna delle sezioni, sempre mediando nel tempo, la frazione volumetrica relativa cumulativa $\langle x_{2,cum-k} \rangle$: essa tiene conto del volume delle due specie a partire dal fondo della colonna fino alla sezione corrente k . La linea verticale tratteggiata indica la frazione volumetrica originariamente inserita nel sistema (in questo caso quella della specie 2, $x_{2,orig}$), mentre quella continua indica la frazione $\langle x_{2,mix} \rangle$ che, in media temporale, si indivia nella zona miscelata, pari al valore cumulativo nella sezione di interfaccia. La linea orizzontale tratteggiata rappresenta la quota di interfaccia individuata con il metodo del confronto tra la frazione locale e quella cumulativa, ottenuto valutando lo scarto ℓ_k indicato in figura. A questa quota va sottratto lo spessore del distributore, collocato in maniera tale da estendersi per una cella e mezza a partire da $y=0$.

Per ogni sezione k individuata, nel range temporale osservato sarà possibile valutare localmente il grado di vuoto $\langle \epsilon_{loc-k} \rangle$, le concentrazioni $\langle \phi_{j,loc-k} \rangle$ e le frazioni volumetriche relative $\langle x_{j,loc-k} \rangle$, frutto di una disposizione media nel tempo delle specie particellari. Oltre a queste grandezze locali, perché riferite alla singola k -esima sezione, si valuta anche la frazione volumetrica relativa complessiva $\langle x_{j,cum-k} \rangle$ fino alla sezione corrente k compresa, a partire dal fondo della colonna, ed escludendo eventuali code di distribuzione delle specie (figura 5-X). Fissato uno scarto ammissibile x^* (caratteristico del sistema in esame), si ritiene che una sezione ospita una coda di distribuzione se lo scarto in valore assoluto di $\langle x_{j,loc-k} \rangle$ rispetto alla sezione immediatamente superiore è maggiore di quello ammissibile; in pratica $|\langle x_{j,loc-k+1} \rangle - \langle x_{j,cum-k} \rangle| > x^*$: in figura 5-X questo accade solo per la prima sezione, per cui si valutano le frazioni cumulative a partire dalla seconda.

A questo punto entra in gioco il metodo prescelto per valutare la quota di interfaccia. Come detto, l'interfaccia separa una zona ben miscelata da una in cui la composizione si arricchisce bruscamente in uno dei due componenti. Si anticipa già da adesso che nelle simulazioni una separazione netta delle due specie, anche per i motivi di approssimazione discussi, si è raggiunta solo ai valori di velocità abbastanza inferiori o abbastanza superiori a quella di inversione: appena prima ed appena dopo il punto di equilibrio si è osservata, in genere, una fase ben miscelata disposta in fondo al sistema ed uno strato superiore più ricco in uno dei componenti, ma non puro come viene descritto nelle prove sperimentali. Questo può essere dovuto al numero esiguo, rispetto al reale, di particelle considerate, od al fatto che siano state omesse altre forze di natura fluidodinamica che potrebbero giocare un ruolo nella mobilità relativa delle specie, in modo particolare quando ci si avvicina al punto di equilibrio. Tuttavia, la conoscenza della composizione dello strato miscelato è importante, in quanto se si ripetesse la prova con una composizione pari a quella di miscelazione, alla medesima velocità, il sistema apparirebbe miscelato. Ciò che si fa, dunque, è di valutare ad una sezione k (figura 5-X)

lo scarto ℓ_k tra la composizione media locale e quella cumulativa: in pratica si calcola $\ell_k = |\langle x_{j,loc-k} \rangle - \langle x_{j,cum-k} \rangle|$. La sezione di interfaccia è l'ultima, partendo dal basso, per cui si rientri nello scarto tollerabile, ovvero per cui possa valere la relazione $\ell_k < x^*$. In corrispondenza di tale sezione (figura 5-X) è possibile ottenere la frazione volumetrica media della zona miscelata $\langle x_{j,mix} \rangle = \langle x_{j,cum-k} \rangle$. Per poter confrontare la quota raggiunta con i dati sperimentali, sarà necessario dividerla per il fattore di scala utilizzato.

La media temporale, effettuata negli ultimi secondi di simulazione, dopo aver raggiunto uno stazionario, si è resa necessaria, sia nella valutazione dell'altezza media che della quota di interfaccia, poiché i sistemi studiati presentano un'alta mobilità delle specie all'interno della colonna e, solo mediando le posizioni delle particelle nel tempo, si è potuta ottenere un'indicazione significativa della distribuzione delle specie.

Gli strumenti analitici sinora descritti sono stati implementati in script MATLAB[®].

5.4 Simulazione del sistema [A]

Volendo simulare il sistema sperimentale nella sua interezza, considerando il diametro della colonna e quello delle due specie, sarebbero occorse circa 400000 particelle. Ciò che si fa, come detto, è di immaginare un parallelepipedo di spessore trascurabile (figura 5-IX), contenente tutte le particelle posizionate nell'intercapedine fra due piani simmetrici e paralleli all'asse della colonna. Ebbene, sotto queste ipotesi, si dovrebbero considerare circa 21000 particelle, con un sensibile decremento dell'onere computazionale. Si riduce ancora tale onere considerando dimensioni pari circa al 75 % di quelle originali, scendendo fino a circa 12000 particelle. Date le dimensioni particellari (tabella 5-iii) ed il tempo di integrazione che ne consegue (tabella 5-iv), per simulare un secondo dell'evoluzione del sistema occorrono circa 4 ore su macchina DELL[™] PE1950 Quad-Core Xeon X5365 e sistema Red Hat Enterprise Linux.

Tab. 5-iv: Configurazione per la simulazione del sistema [A]. Per il sistema di Epstein e LeClair (1985), le colonne della tabella contengono nell'ordine la lunghezza e la profondità del sistema, il numero di celle considerato lungo le direzioni x , y e z , il numero di particelle per ognuna delle due specie, il rapporto d'aspetto a letto fisso; la percentuale di scala, il rapporto tra le dimensioni del passo di griglia lungo i tre assi ed il diametro massimo particellare, il passo temporale di integrazione.

L / B [mm]	$M_x / M_y / M_z$	M_{s_1} / M_{s_2}	T^* [°C]	$\frac{H_{\text{letto}}}{L}$	Scala %	$\frac{\Delta x}{D_2} / \frac{\Delta y}{D_2} / \frac{\Delta z}{D_2}$	Δt [s]
38.106 / 2.185	18 / 195 / 1	9938 / 2064	-	1.4	75	1.96 / 1.52 / 2.03	$5 \cdot 10^{-6}$

*Non viene fornito il valore di temperatura ma si ha $\rho_f = 1070 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 0.14 \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$

Date le finalità che ci si era preposti in merito alla simulazione di questo particolare sistema, di tipo puramente qualitativo, si è optato per questa scala meno onerosa; gli altri dati della configurazione sono stati inseriti in tabella 5-iv. Nella tabella si è evidenziato il rapporto tra le dimensioni della cella (nelle tre direzioni spaziali) ed il diametro massimo particellare. Nelle direzioni x ed y (dal metodo di ricerca degli urti descritto nel secondo capitolo), la dimensione del passo di griglia Δx deve essere almeno pari a $1.5 \cdot D_2$. Nella direzione z , Δz deve essere almeno pari a $2.0 \cdot D_2$.

Sono state effettuate tre simulazioni in corrispondenza dei valori di velocità riportati nel lavoro di Epstein e LeClair (1985) e saranno discusse individualmente. Va sottolineato che il sistema presenta tempi di evoluzione dinamica molto lenti. Anche a fronte di svariati minuti di simulazione (fino a 4) per alcune delle prove a più elevata velocità non si è raggiunto uno stazionario.

5.4.1 Prova a bassa velocità

La figura 5-XI mostra che a velocità superficiale relativamente bassa (0.3 mm/s) il sistema risulta segregato con la specie più grossolana e meno densa stratificata nella zona alta del letto particellare. La prova ha richiesto una simulazione di circa 92 s (circa 2 settimane), superati i quali il sistema è apparso raggiungere uno stazionario nelle altezze dei baricentri delle specie.

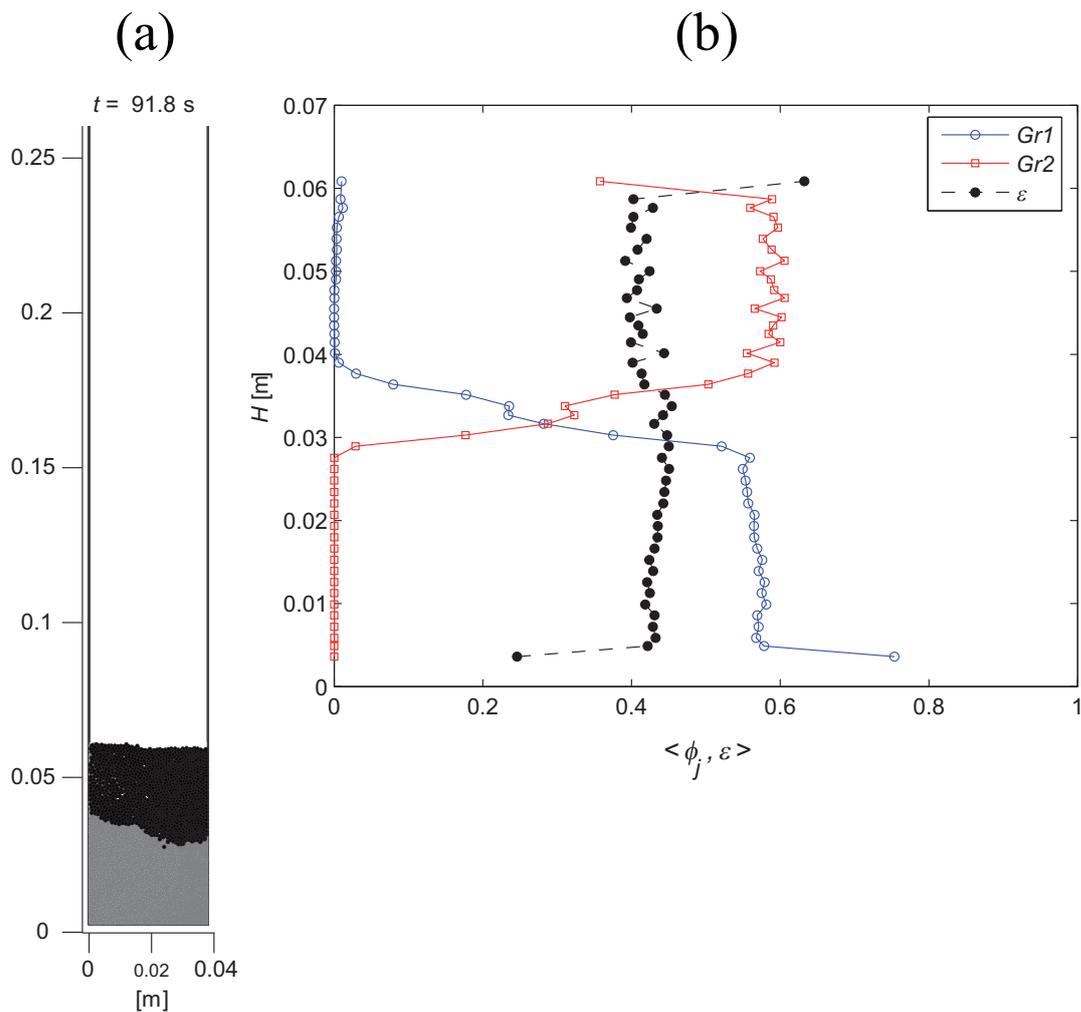


Fig. 5-XI: Prova a 0.3 mm/s. La figura (a) mostra la disposizione delle specie particellari in colonna dopo i circa 92 s di simulazione effettuata: si è indicata in nero la specie appartenente al gruppo 2. La figura (b) indica i profili di concentrazione (frazione volumetrica assoluta) delle due specie ed il conseguente grado di vuoto al variare dell'altezza in colonna.

5.4.2 Prova a media velocità

La figura 5-XII presenta il risultato di una prova effettuata ad 1.8 mm/s, al valore indicato da Esptein e LeClair (1985) quale velocità di inversione. Il sistema simulato appare già oltre il punto critico e, nonostante una generale miscelazione è possibile individuare una quota oltre la quale la fase solida si arricchisce nella specie fine.

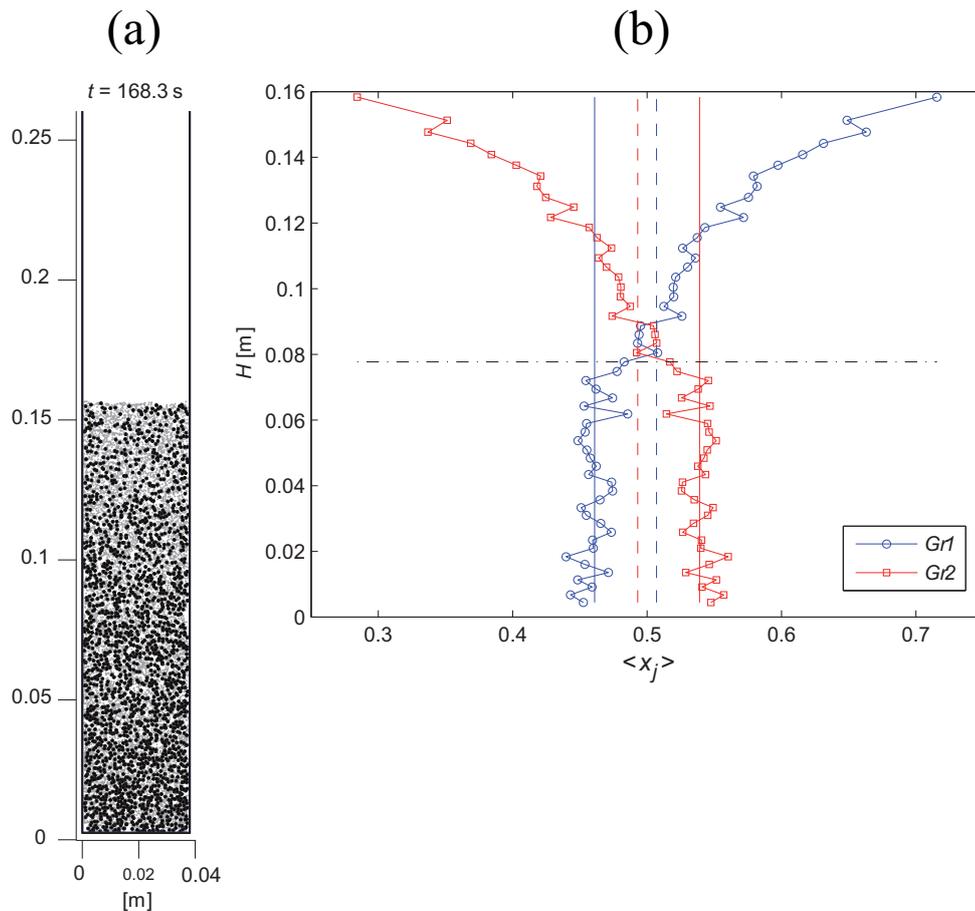


Fig. 5-XII: Prova a 1.8 mm/s. La figura (a) mostra la disposizione delle specie particellari in colonna dopo i circa 170 s di simulazione effettuata: si è indicata in nero la specie appartenente al gruppo 2. La figura (b) indica i profili frazione volumetrica relativa delle due specie al variare dell'altezza in colonna ed in media temporale, tenendo a riferimento le frazioni volumetriche di partenza indicate, per ognuna delle due specie, dalle linee verticali tratteggiate. La linea tratteggiata orizzontale indica la quota che determina l'altezza dello strato miscelato, oltre il quale la specie 1 diventa preponderante, mentre le linee continue verticali rappresentano la frazione volumetrica media delle due specie nella zona miscelata.

5.4.3 Prova a velocità elevata

La figura 5-XIII si riferisce alla prova effettuata a 3.7 mm/s. Il sistema simulato risulta invertito con la specie fine e maggiormente densa disposta nella parte alta della colonna; questo appare con chiarezza, anche se, visti gli scopi che ci si era preposti, non si è atteso fino al raggiungimento di uno stazionario nell'altezza H_t totale del letto.

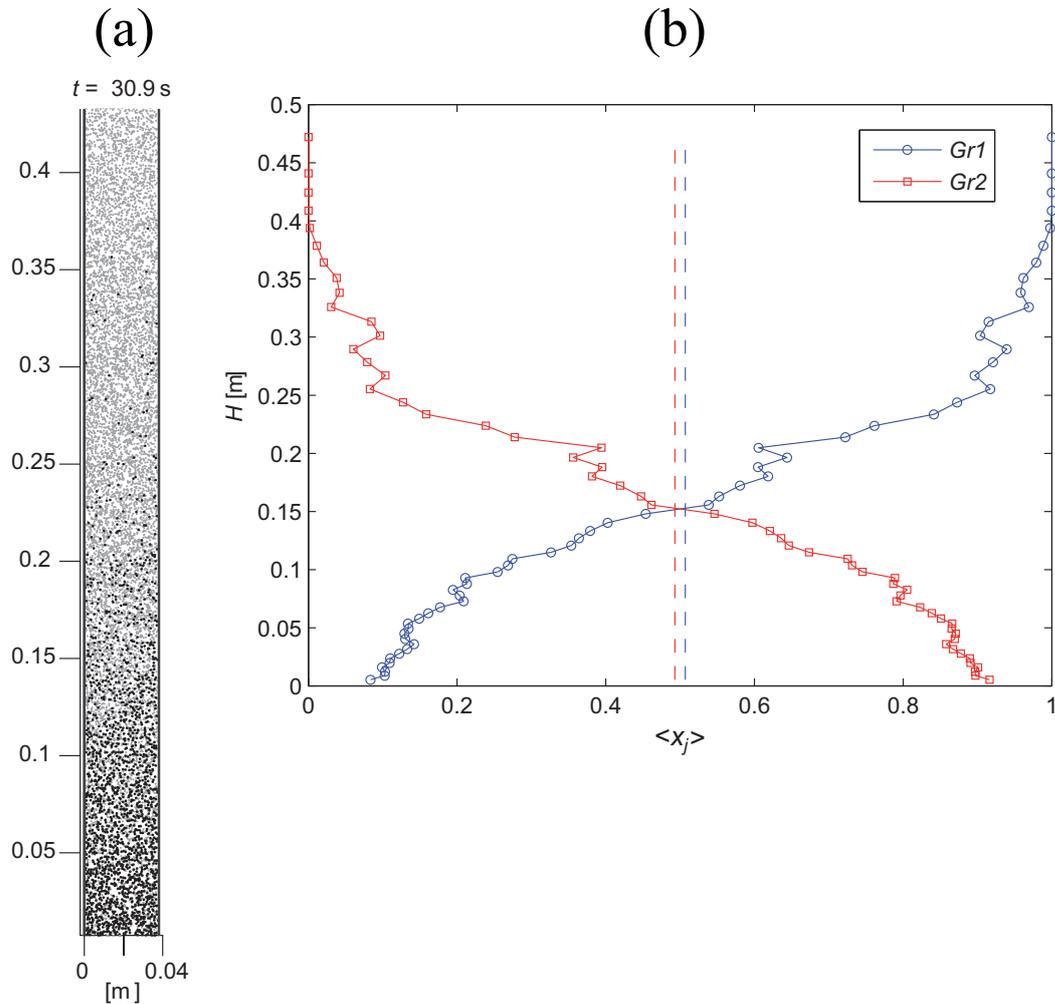


Fig. 5-XIII: Prova a 3.7 mm/s. La figura (a) mostra la disposizione delle specie particellari in colonna dopo i circa 31 s di simulazione effettuata: si è indicata in nero la specie appartenente al gruppo 2. La figura (b) indica la frazione volumetrica relativa in media temporale delle due specie al variare dell'altezza in colonna; le linee verticali tratteggiate indicano le frazioni volumetriche totali.

5.4.4 Analisi dei risultati

Si può concludere l'analisi del sistema simulato [A] (i cui dati sono riportati in tabella 5-iii), affermando che si è raggiunto l'obiettivo che ci si era preposti, ovvero riuscire a riproporre il fenomeno dell'inversione in termini qualitativi, avendo grosse

incertezze nei dati sperimentali (Esptein e LeClair 1985) sull'effettivo punto di inversione.

5.5 Simulazione del sistema [B]

I dati inerenti il sistema [B] sono riportati in tabella 5-iii, e si riferiscono alle prove sperimentali effettuate da Matsuura e Akehata (1985). I parametri della simulazione numerica effettuata, con campagna di prove alle velocità di 10, 20, 25, 30, 35 e 37 mm/s, sono inseriti nella tabella 5-v. Il sistema originale è stato scalato di un fattore 0.25 ottenendo così 21400 particelle. Un secondo di simulazione comporta un tempo di calcolo di circa quattro ore e mezza. Come detto i dati forniti dagli autori sono ricchi di particolari e permettono un'analisi dettagliata dei risultati, soprattutto nella distribuzione delle due specie solide in colonna: una corretta previsione del comportamento delle specie in gioco è indice di bontà del nuovo modello.

5.5.1 Analisi delle prove effettuate

Le figure dalla 5-XIV alla 5-XX permettono di analizzare i risultati ottenuti attraverso la simulazione del sistema [B] a velocità crescenti. Da un punto di vista generale le figure citate portano alla 5-XXI che confronta dati sperimentali e dati estratti dalle simulazioni mostrando un ottimo accordo. Entrando più nel dettaglio si può osservare che, a parte nelle prove effettuate a velocità molto basse o molto alte (5-XIV e 5-XX), difficilmente si ottiene uno strato di particelle segregato in cima alla colonna che abbia caratteristiche di purezza. Gli stessi Matsuura e Akehata (1985), come evidente nella figura 5-XXI, indicano una zona III che rappresenta un range di velocità in cui la segregazione del componente più leggero e grossolano (2) non appare netta. In questo senso si è operata un'analisi che parte dal basso della colonna e che possa individuare l'altezza dello strato miscelato (figure 5-XV, 5-XVI e 5-XIX) secondo le

Tab. 5-v: Configurazione per la simulazione del sistema [B]. Per il sistema di Matsuura e Akehata (1985), le colonne della tabella contengono nell'ordine la lunghezza e la profondità del sistema, il numero di celle considerato lungo le direzioni x, y e z, il numero di particelle per ognuna delle due specie, il rapporto d'aspetto a letto fisso, la percentuale di scala, il rapporto tra le dimensioni del passo di griglia lungo i tre assi ed il diametro massimo particellare, il passo temporale di integrazione.

L / B [mm]	$M_x / M_y / M_z$	M_{s_1} / M_{s_2}	T^* [°C]	$\frac{H_{\text{letto}}}{L}$	Scala %	$\frac{\Delta x}{D_2} / \frac{\Delta y}{D_2} / \frac{\Delta z}{D_2}$	Δt [s]
60.000 / 4.010	18 / 198 / 1	20399 / 1001	15	1.1	75	1.66 / 1.55 / 2.05	$5 \cdot 10^{-6}$

*Alla temperatura assunta si ha $\rho_f = 999.19 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 1.14 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$

modalità di media temporale indicate in precedenza (facendo uso della frazione volumetrica cumulativa raffrontata a quella locale, figura 5-X). Sotto queste ipotesi si è ottenuta un'ottima coerenza con i dati sperimentali in merito all'altezza di interfaccia. Quest'ultima per poter essere confrontata con il valore sperimentale è stata divisa per il fattore di scala.

Al fine di individuare il punto di inversione si è fatto anche uso di un'analisi dei baricentri (figura 5-XVII), utili, insieme all'evoluzione dell'altezza complessiva (figure 5-XVI e 5-XXII) anche a determinare il raggiungimento dello stazionario. Il risultato più importante, quello del punto critico, è coerente con la velocità di inversione indicata dagli autori di circa 30 mm/s. Inoltre, non solo il grado di vuoto medio (attraverso l'altezza totale, anch'essa proiettata mediante fattore di scala) risulta ben predetto (lo era anche attraverso l'applicazione del modello in termini macroscopici come risulta dalla tabella 5-ii), ma è anche uniformemente distribuito in colonna (figura 5-XVIII).

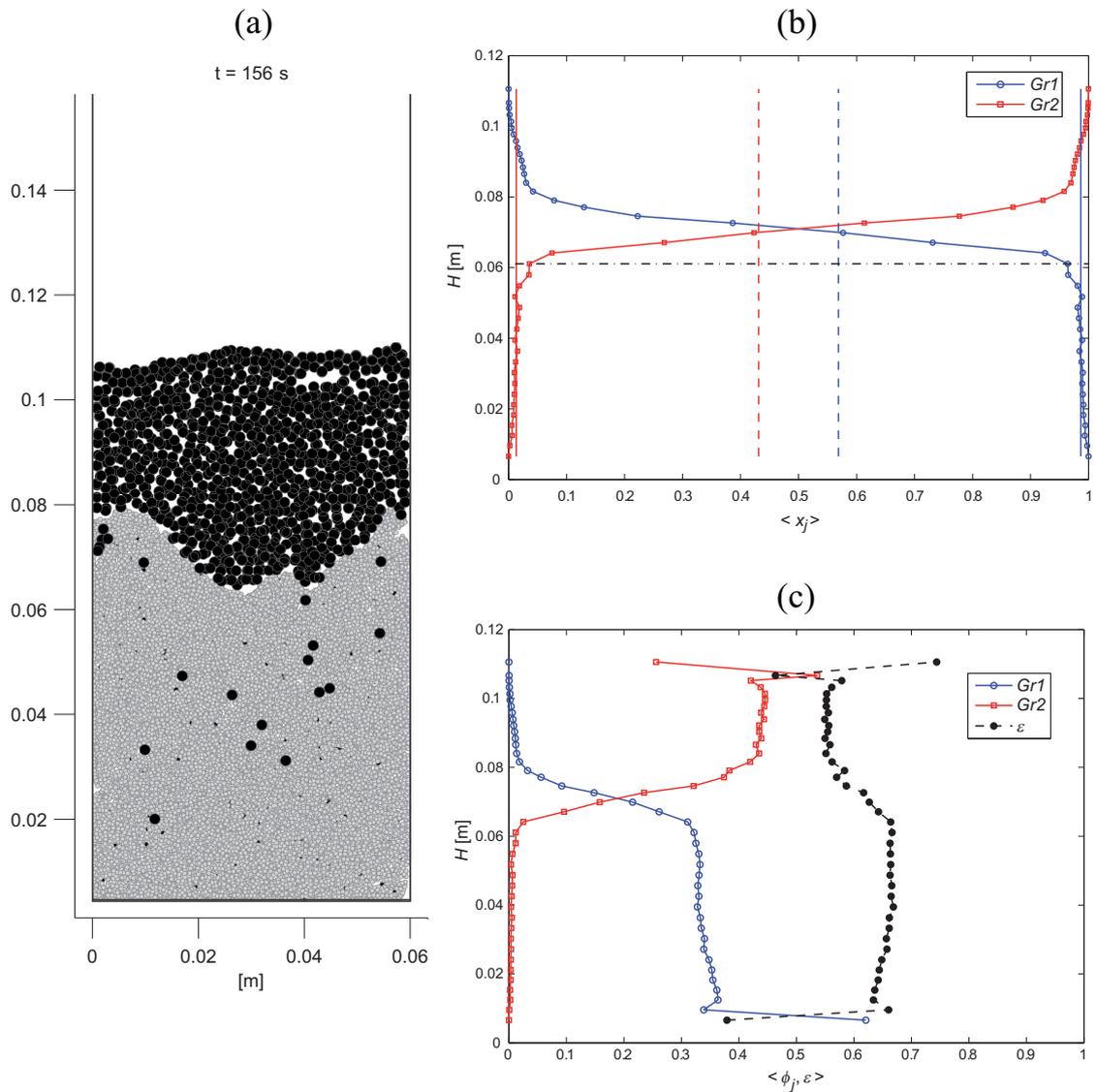


Fig. 5-XIV: Prova a 10 mm/s. La figura mostra la distribuzione delle specie particellari dopo i circa 170 s di simulazione necessari a raggiungere uno stazionario attraverso: (a) la posizione in colonna delle particelle solide, in cui si sono indicate in nero quelle appartenenti alla specie 2. (b) i profili di frazione volumetrica relativa lungo l'altezza della colonna, mediati negli ultimi 18 s di prova; le linee tratteggiate verticali indicano la frazione volumetrica complessiva, mentre quella orizzontale tratteggiata indica la quota in corrispondenza della quale, si passa dallo strato mediamente miscelato a quello in cui il sistema si arricchisce in una delle due specie (la 2 in questo caso). (c) i profili di concentrazione ed il grado di vuoto al variare dell'altezza in colonna.

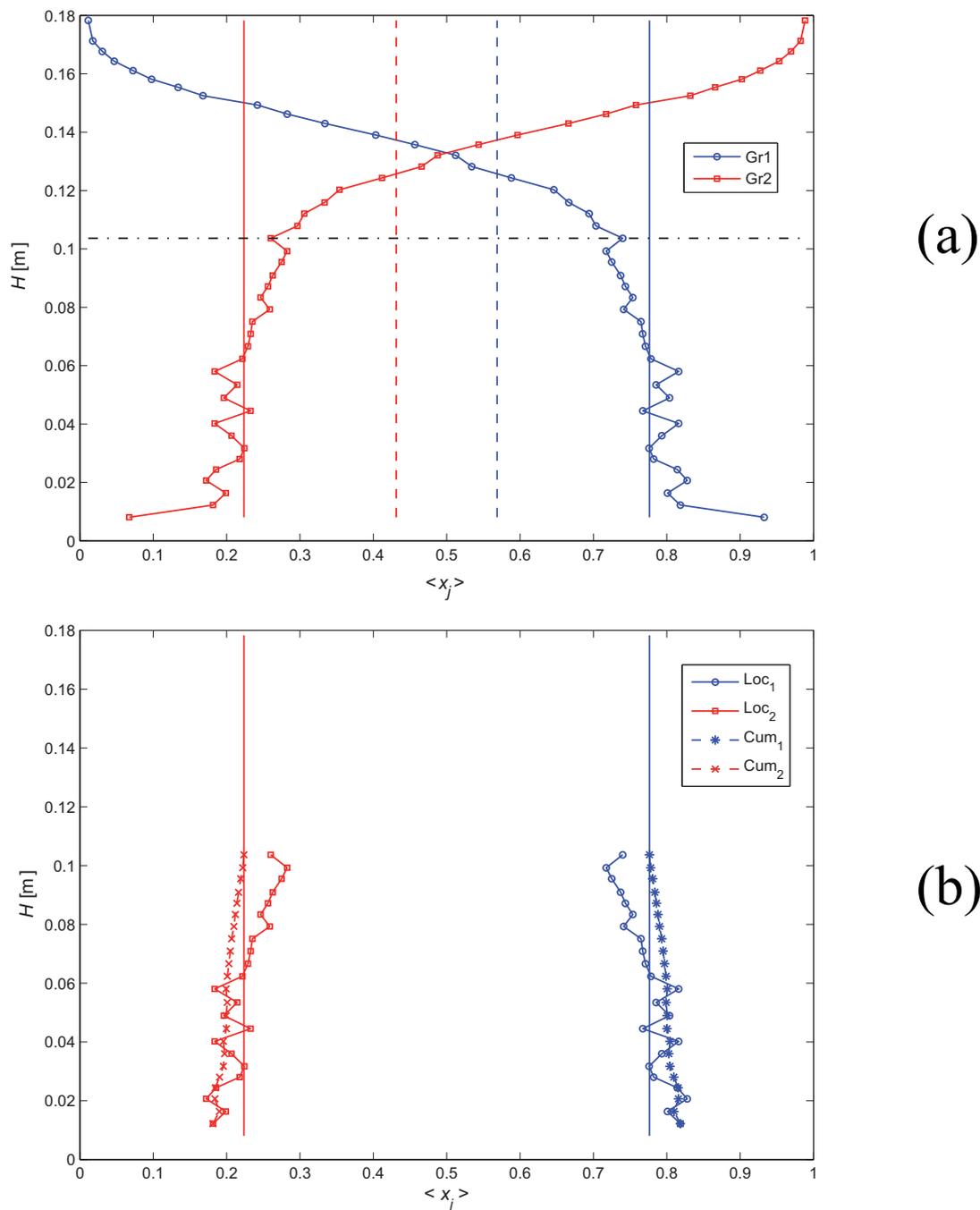


Fig. 5-XV: Quota di inversione a 20 mm/s. La figura (a) mostra, in media temporale sugli ultimi 18 s di prova, la variazione della frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna, le frazioni complessive (linee tratteggiate verticali) e quelle individuate nel bulk dello strato miscelato (linee continue verticali) il cui confine è indicato dalla linea tratteggiata orizzontale. La figura (b) illustra anche le frazioni volumetriche relative cumulative svincolate dalla coda di concentrazione (Cum_1 e Cum_2) a confronto con quelle locali (Loc_1 e Loc_2) già descritte nella (a); dal confronto appena descritto si evince con un margine percentuale di variazione massimo (5% in questo caso) la quota di interfaccia.

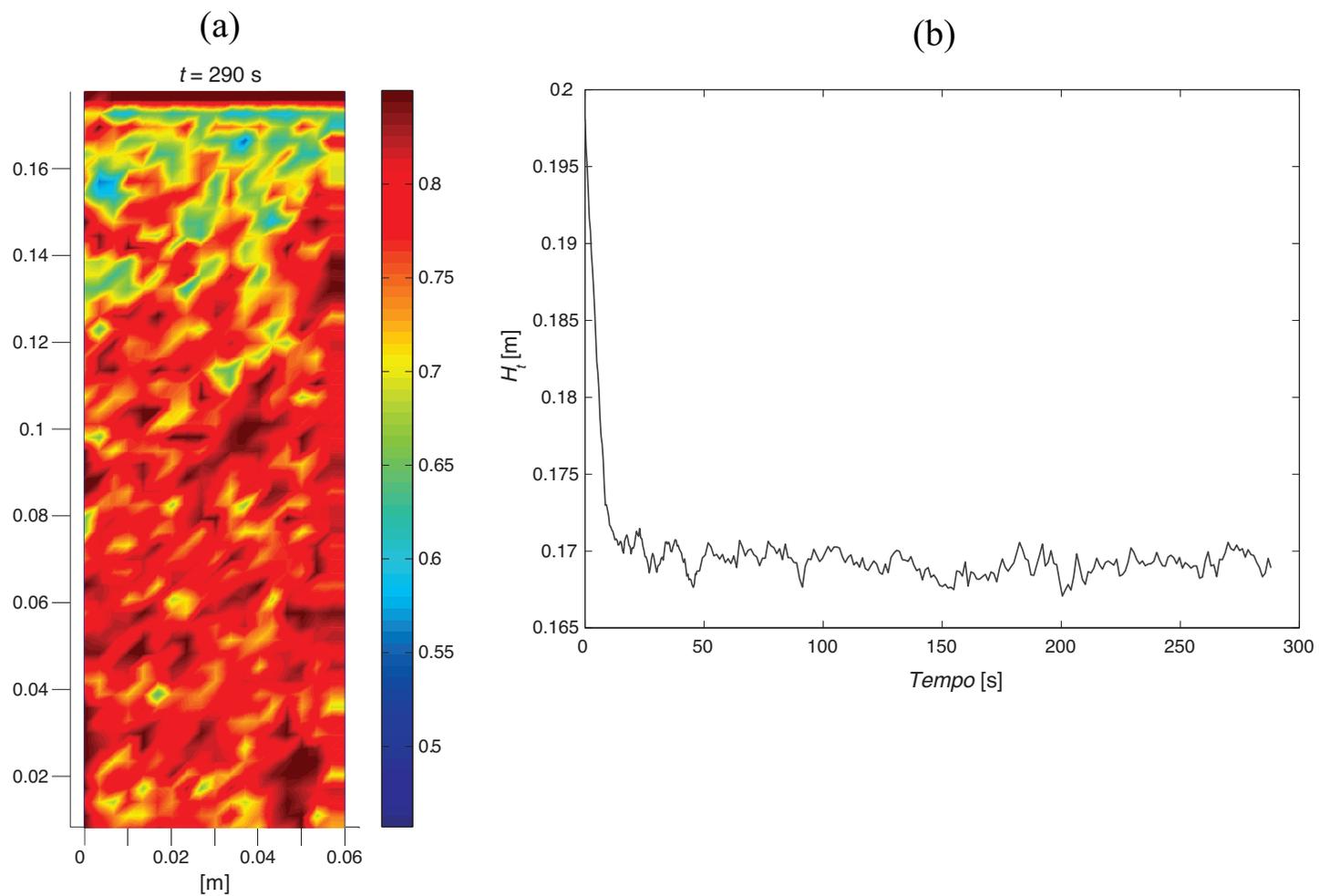


Fig. 5-XVI: *Analisi dei risultati a 20 mm/s. Distribuzione istantanea del grado di vuoto in colonna dopo 290 s (a) ed andamento dell'altezza totale del letto nel tempo (b).*

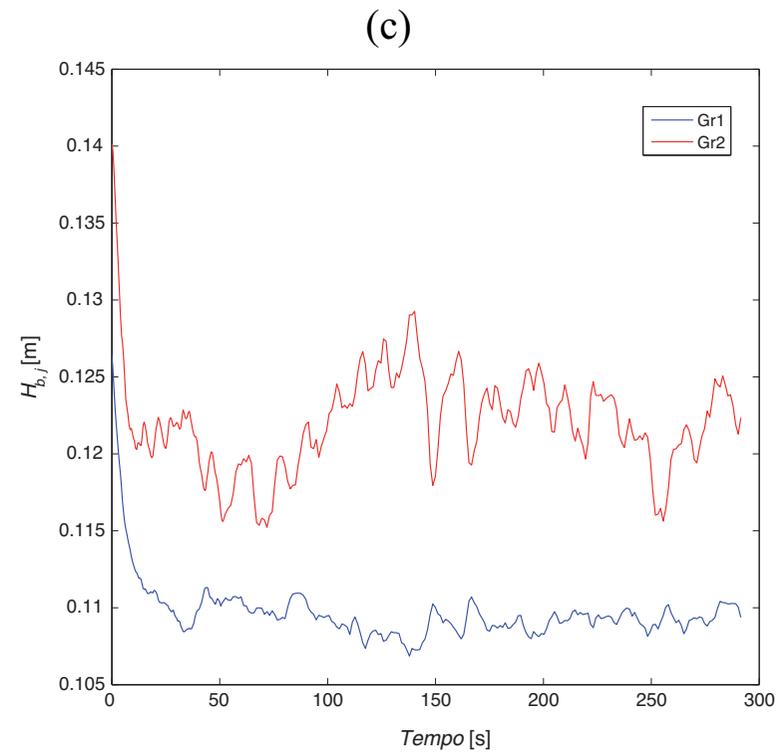
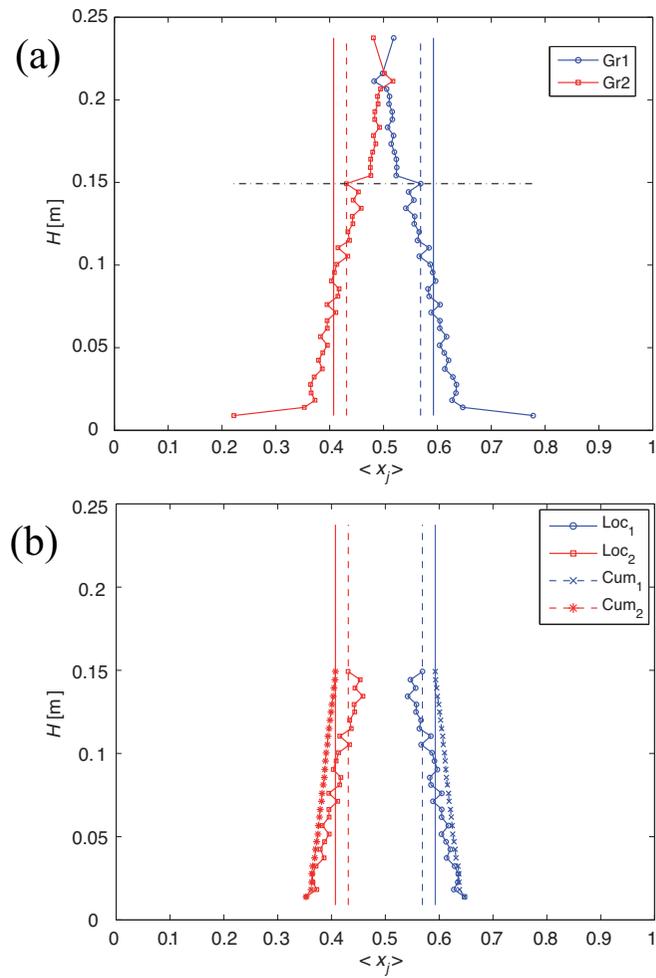


Fig. 5-XVII: *Analisi dei risultati a 25 mm/s. Andamento della frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna (a) e determinazione della quota di inversione e delle concentrazioni dello strato miscelato (a) e (b). Valori dei baricentri delle due specie al variare del tempo.*

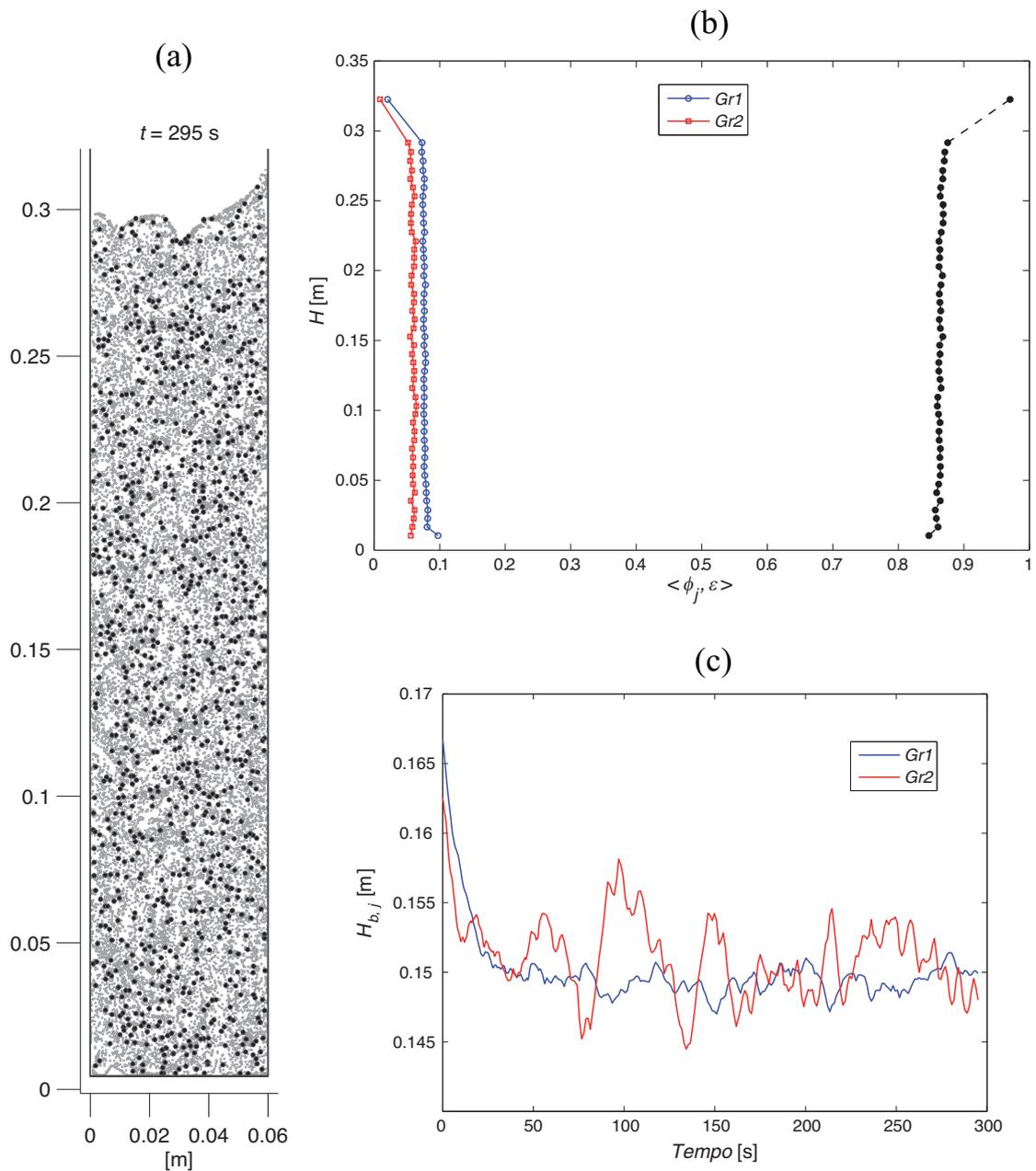


Fig. 5-XVIII: *Analisi della simulazione a 30 mm/s. Analisi delle posizioni particellari dopo circa 300 s di simulazione (a), delle concentrazioni e del grado di vuoto mediati negli ultimi 30 s (b) e delle posizioni dei baricentri delle specie al variare del tempo. Il sistema appare completamente miscelato e, dunque, al suo punto critico di inversione.*

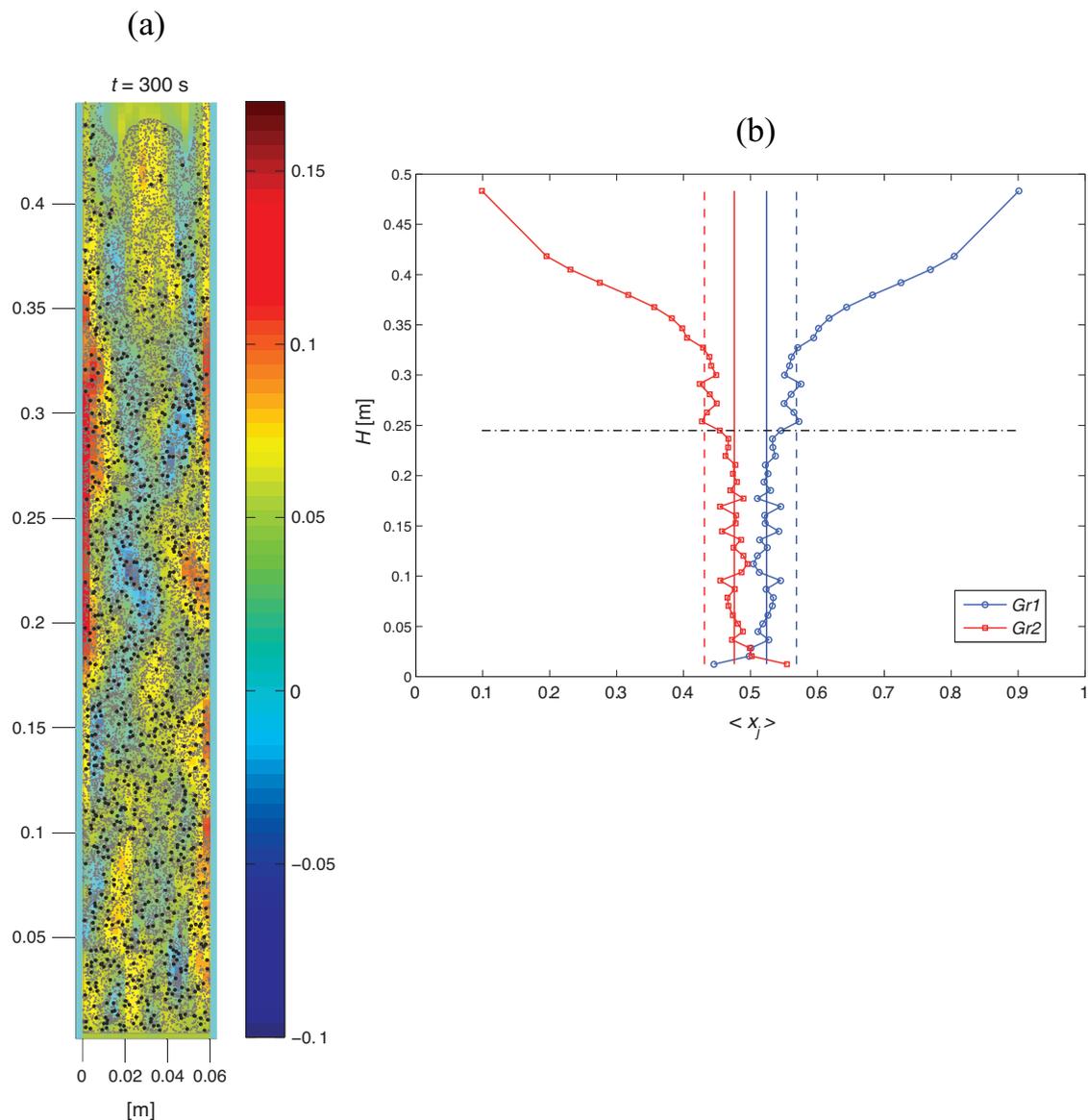


Fig. 5-XIX: Analisi della prova a 35 mm/s. La figura (a) mostra la distribuzione delle specie particellari dopo i circa 300 s di simulazione necessari a raggiungere uno stazionario: si sono indicate in nero le particelle appartenenti alla specie 2; si è inoltre indicata, attraverso scala colorimetrica, la velocità del fluido nella sua componente in direzione verticale y . La figura (b) illustra profili di frazione volumetrica relativa lungo l'altezza della colonna, mediati negli ultimi 30 s di prova; le linee tratteggiate verticali indicano la frazione volumetrica complessiva, mentre quella orizzontale tratteggiata indica la quota in corrispondenza della quale, si passa dallo strato mediamente miscelato a quello in cui il sistema si arricchisce in una delle due specie (la 1 in questo caso).

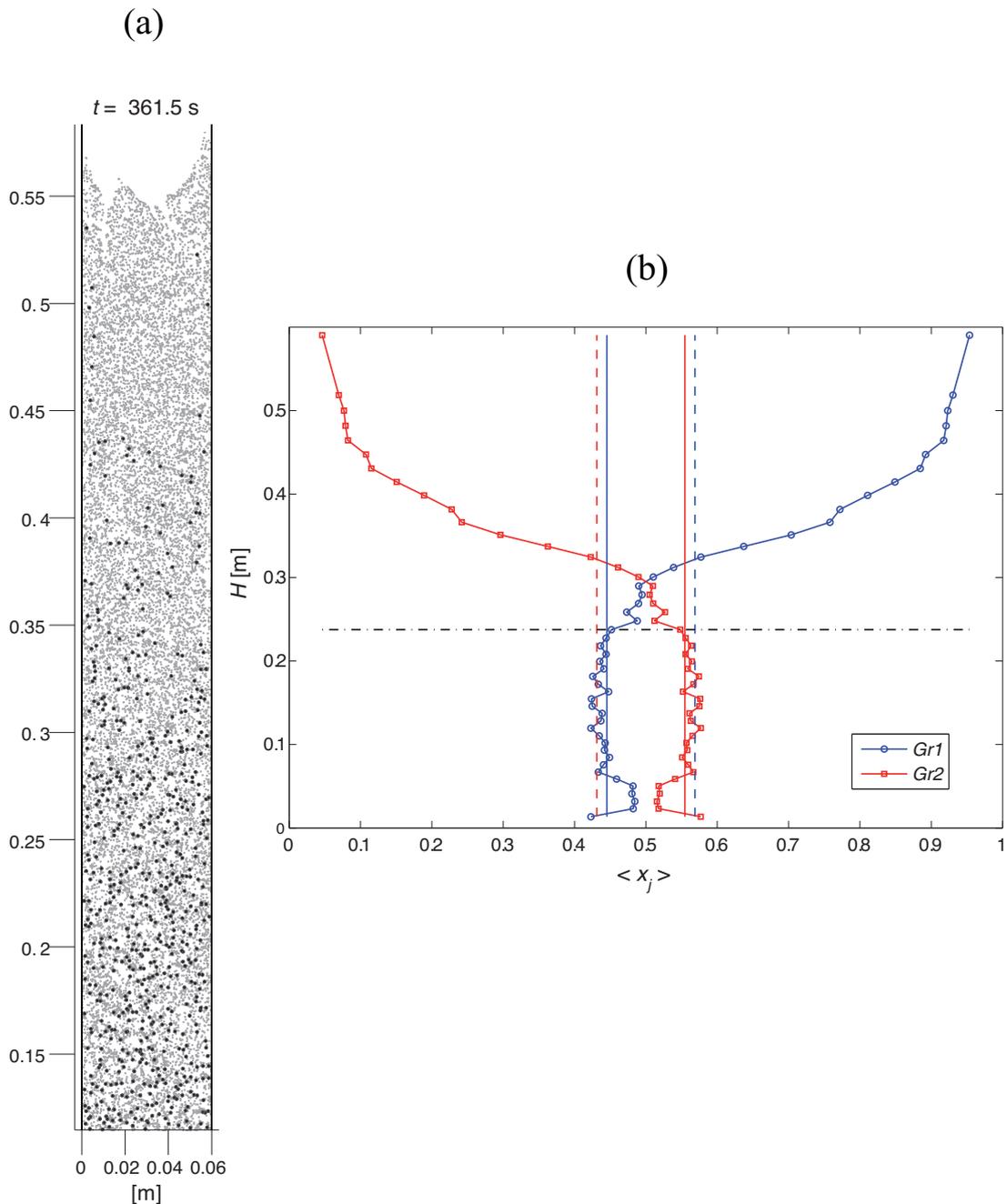


Fig. 5-XX: Analisi dei risultati a 37 mm/s. La figura (a) mostra la distribuzione delle specie particellari dopo i circa 350 s di simulazione necessari a raggiungere uno stazionario: si sono indicate in nero le particelle appartenenti alla specie 2. La figura (b) illustra, in media temporale sugli ultimi 24 s di prova, la variazione della frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna, le frazioni complessive (linee tratteggiate verticali) e quelle individuate nel bulk dello strato miscelato (linee continue verticali) il cui confine è indicato dalla linea tratteggiata orizzontale.

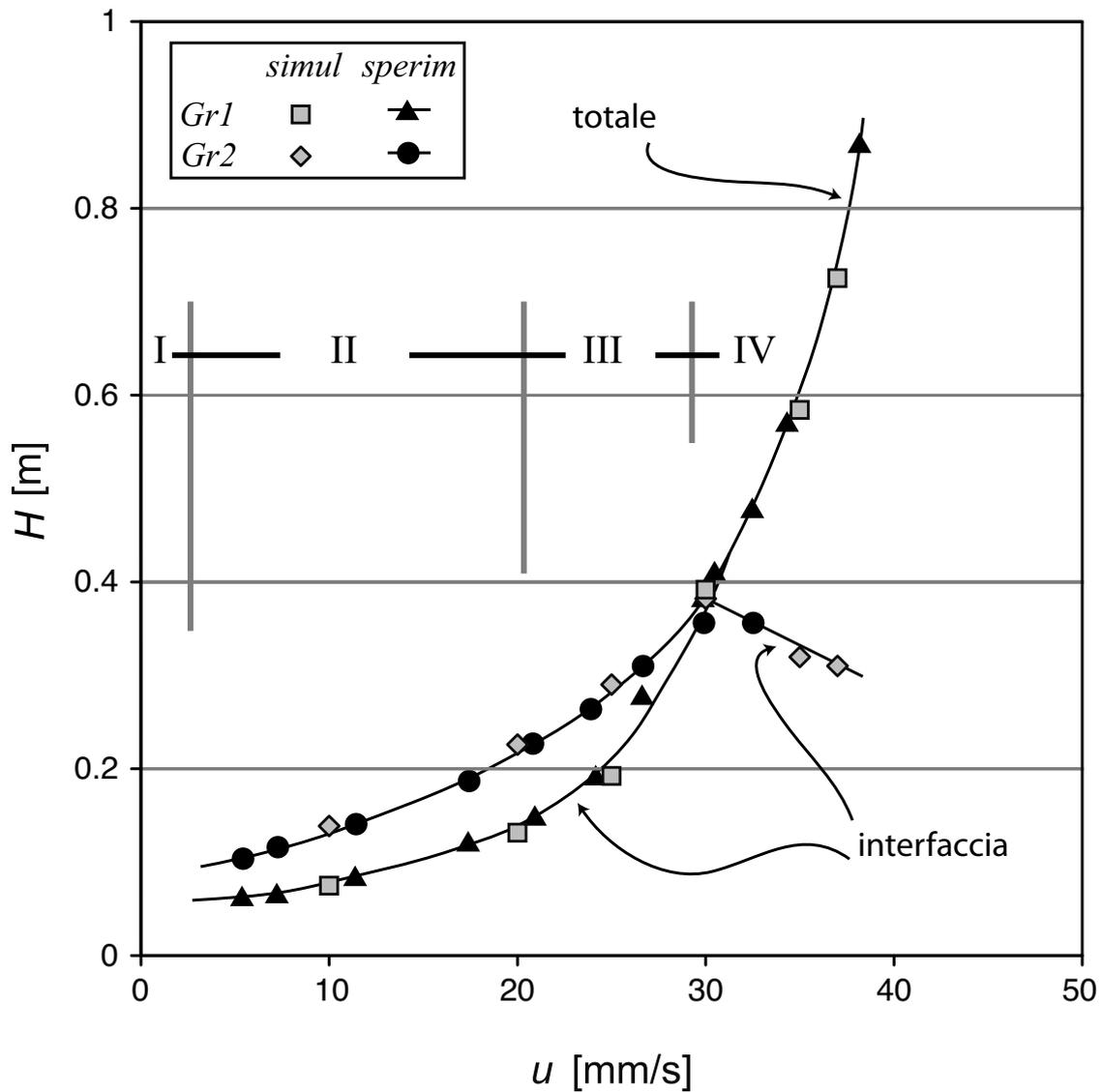
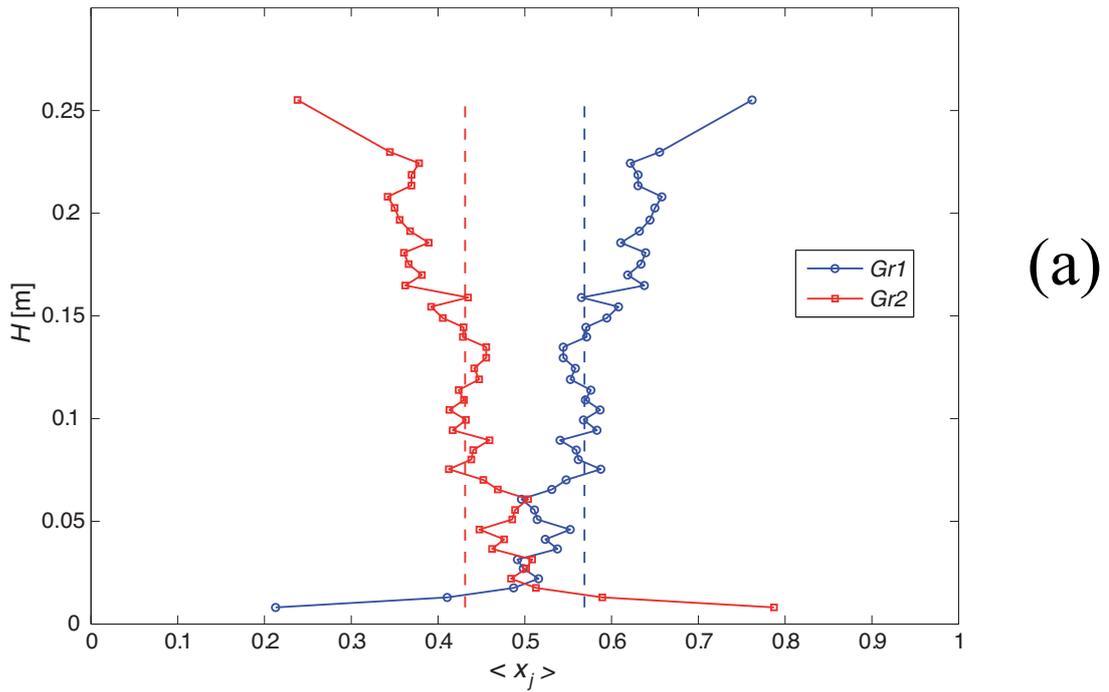
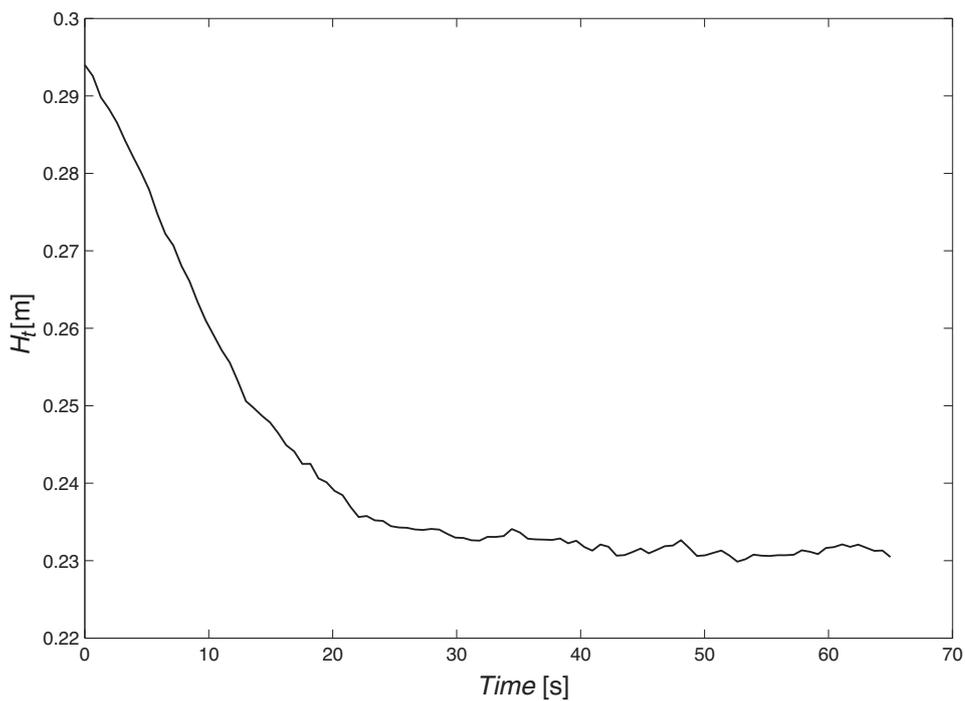


Fig. 5-XXI: Confronto con i dati sperimentali. In figura sono indicati i punti sperimentali del sistema [B] riferiti all'altezza totale del letto ed a quella di interfaccia, identificata dalla quota della specie 1 negli intervalli I (letto fisso), II e III (espansione e progressivo ispessimento dello strato miscelato), e dalla specie 2 nella zona IV (inversione avvenuta). Il confronto è stato operato proiettando la quota totale e di interfaccia sul sistema dei dati sperimentali mediante il fattore di scala utilizzato per simulare il sistema. Si nota un ottimo accordo tra i valori estratti dalle simulazioni e quelli sperimentali di Matsuura e Akehata (1985).



(a)



(b)

Fig. 5-XXII: Confronto col metodo DF a 30 mm/s. La figura (a) mostra, in media temporale sugli ultimi 10 s di prova, la variazione della frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna e le frazioni volumetriche complessive (linee tratteggiate verticali): il sistema simulato mediante l'uso del modello DF appare invertito. La figura (b) illustra l'andamento dell'altezza media totale del letto al variare del tempo.

5.5.2 Effetto del modello per il drag

Risulta interessante valutare l'effetto che l'uso di un particolare modello per il drag comporta. Se si immagina di applicare come modello quello DF puro, senza correzioni per un sistema bidisperso (cosa già tentata nelle previsioni macroscopiche in tabella 5-ii) si otterrebbero i risultati mostrati in figura 5-XXII, ovvero un errore superiore al 25 % nella previsione dell'altezza proiettata mediante fattore di scala (e conseguentemente del grado di vuoto previsto) ma anche un errore nell'individuare la velocità di inversione, che risulterebbe spostata a velocità più basse (a 30 mm/s il sistema è già invertito in figura 5-XXII).

5.6 Simulazione del sistema [C]

Il sistema in esame è quello in tabella 5-iii di Moritomi et al. (1982), classificato da Escudié et al. (2006) come "binary IV". Molte sono le incertezze riguardanti i dati di questo sistema che rappresenta anche quello più oneroso dal punto di vista computazionale tra quelli studiati (11 ore circa di simulazione per ottenere un secondo di prova). La prima difficoltà è stata quella di determinare le quantità dei solidi in gioco e la temperatura dell'acqua inviata in colonna. In effetti gli autori hanno fatto uso di solido poroso (hollow char) e ne misurano il quantitativo in colonna mediante peso a secco. Mediante i grafici forniti nel lavoro di Moritomi et al. (1982), inerenti le specie solide pure, supponendo per ognuna di esse un grado di vuoto iniziale simile, è stato possibile determinarne le frazioni volumetriche iniziali; dall'espansione dei puri prevista mediante il NM e quello VBK corretto, in confronto con le altezze indicate dai dati sperimentali, si è potuta supporre una temperatura per l'acqua tra i 25 ed i 27 °C (infatti l'espansione della specie solida 1, quella più fine, è influenzata fortemente dalla

Tab. 5-vi: Configurazione per la simulazione del sistema [C]. Per il sistema di Moritomi et al. (1982), le colonne della tabella contengono nell'ordine la lunghezza e la profondità del sistema, il numero di celle considerato lungo le direzioni x, y e z, il numero di particelle per ognuna delle due specie, il rapporto d'aspetto a letto fisso, la percentuale di scala, il rapporto tra le dimensioni del passo di griglia ed il diametro massimo particellare, il passo di integrazione.

L / B [mm]	$M_x / M_y / M_z$	M_{s_1} / M_{s_2}	T^* [°C]	$\frac{H_{letto}}{L}$	Scala %	$\frac{\Delta x}{D_2} / \frac{\Delta y}{D_2} / \frac{\Delta z}{D_2}$	Δt [s]
16.800 / 1.600	14 / 113 / 1	36584 / 696	27	1.32	33.6	1.55 / 1.55 / 2.06	$2 \cdot 10^{-6}$

*Alla temperatura assunta si ha $\rho_f = 996.59 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 0.85 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$

temperatura). Si è optato per una temperatura dell'acqua di 27 °C, salvo verificare gli effetti di una scelta differente.

I dati della simulazione sono raccolti in tabella 5-vi, mentre i risultati sono esposti dalla figura 5-XXIII alla 5-XXVIII. Con l'ausilio di un codice parallelo (della cui ideazione e validazione si discuterà nei capitoli 6 e 7 della seconda parte di questo lavoro di tesi) ed il relativo risparmio di tempi di calcolo, è stato possibile studiare piccole variazioni al sistema. La prima ha riguardato la valutazione dell'effetto della temperatura dell'acqua inviata in colonna, operando simulazioni non solo a 27 °C, ma anche a 25 °C (figure 5-XXVI e 5-XXVII); l'altra alternativa ai parametri di tabella 5-vi ha riguardato la dimensione del passo di griglia in direzione y, fatto variare da un rapporto rispetto al diametro massimo di 1.55 a 1.80 (figura 5-XXVIII) e 2.06.

5.6.1 Risultati della simulazione

La figura 5-XXIII illustra, in termini di profili lungo l'asse della colonna di frazione volumetrica relativa mediata nel tempo, i risultati della simulazione. Anche in questo caso lo strato superiore del letto è molto ricco in uno dei due componenti solo a velocità del fluido estreme (molto alte o molto basse), mentre si osserva una generale tendenza, in questo spessore a distanziarsi da condizione di purezza in senso stretto.

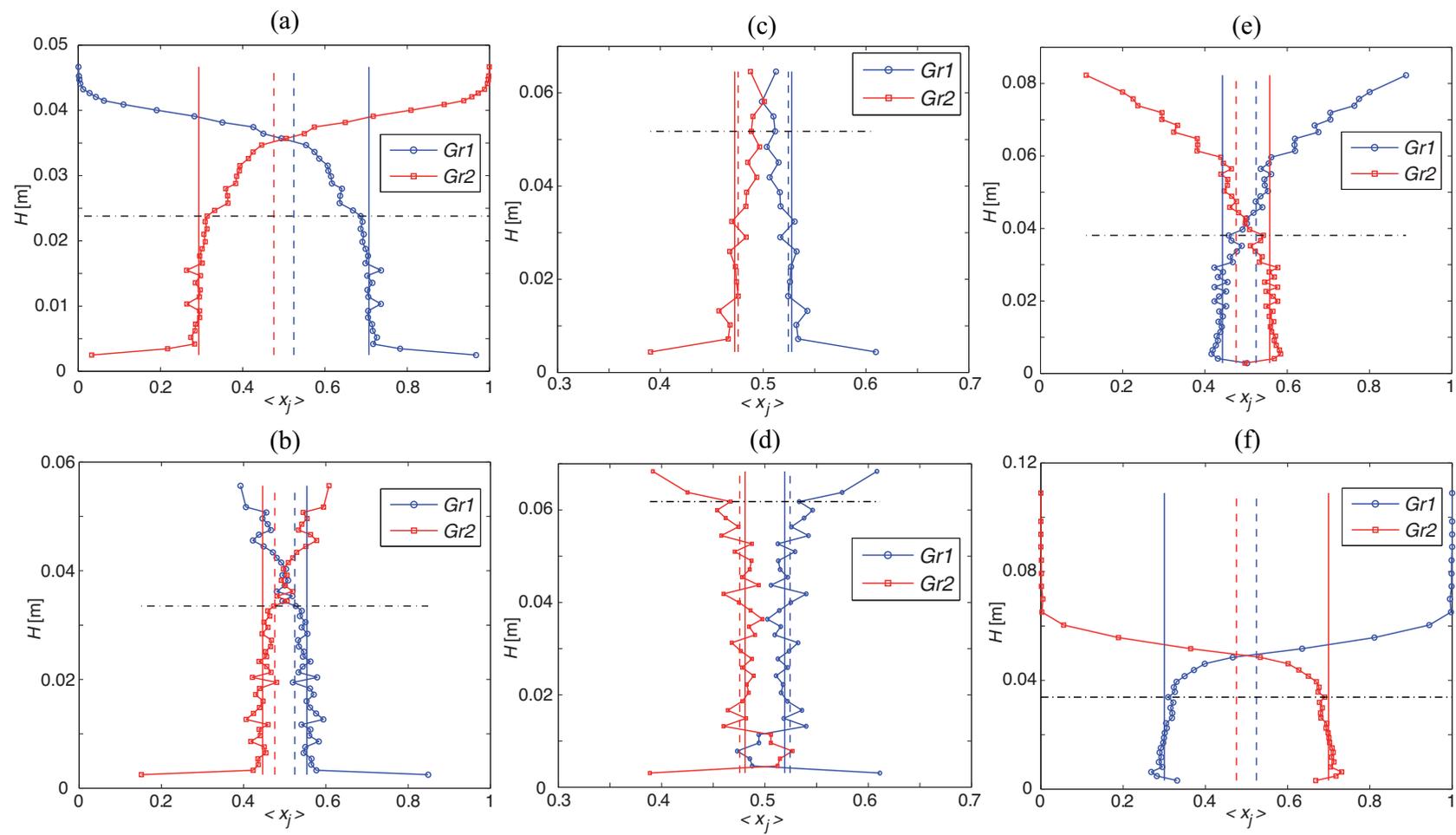


Fig. 5-XXIII: Simulazione a 27 °C. Le figure mostrano, la frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna, l'altezza e le frazioni volumetriche dello strato miscelato. Le figure sono inerenti alle prove effettuate a 8 mm/s (a), 10 mm/s (b), 12 mm/s (c), 13 mm/s (d), 15 mm/s (e) e 17 mm/s (f).

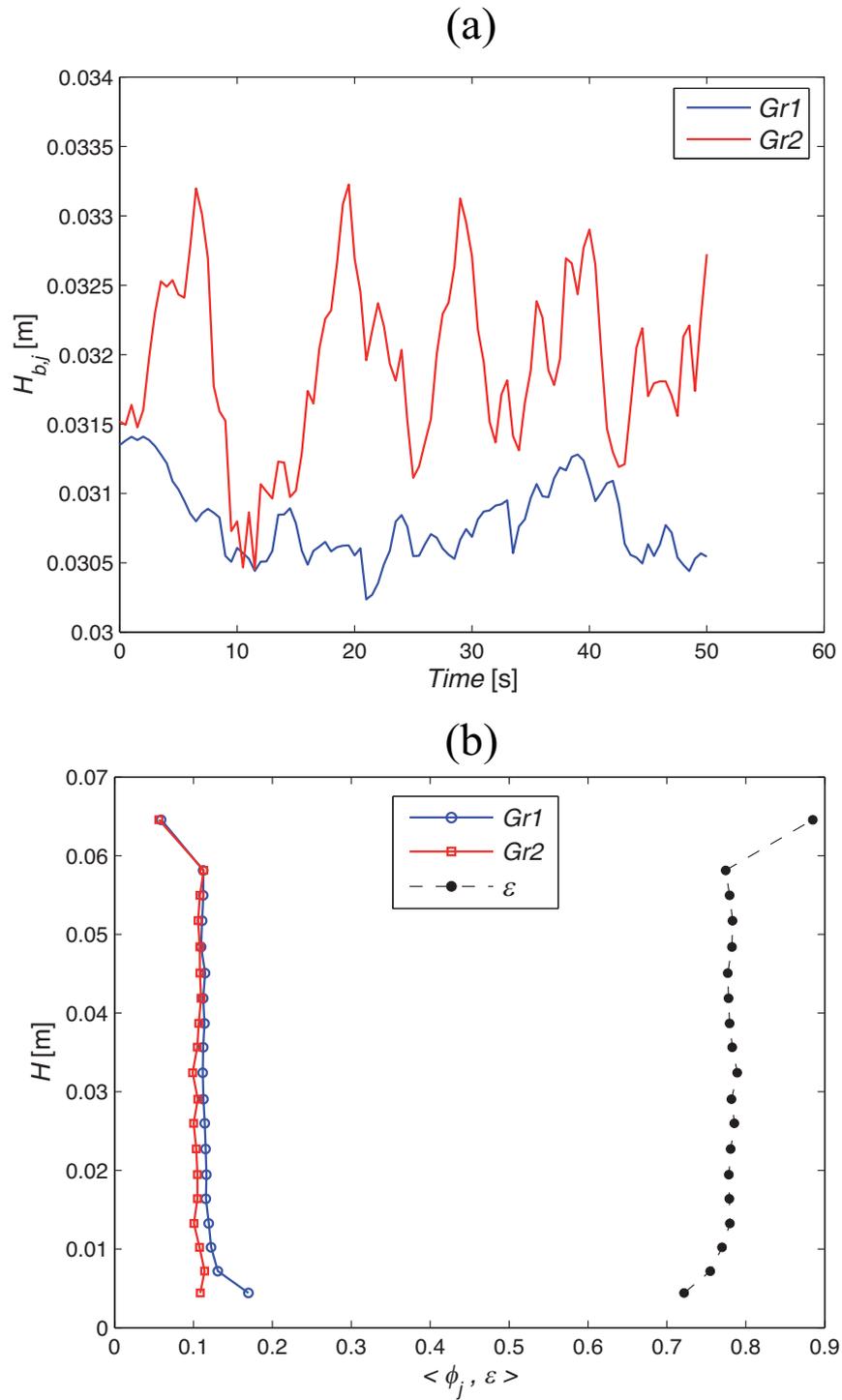


Fig. 5-XXIV: Analisi del punto di inversione. La figura (a) illustra la variazione dei baricentri delle due specie a 12 mm/s, indicando che ancora il sistema non è del tutto miscelato. La figura (b) indica il grado di vuoto e le concentrazioni lungo l'asse sempre a 12 mm/s, in media temporale sugli ultimi 8 s di prova sui 50 s totali necessari al raggiungimento di uno stazionario.

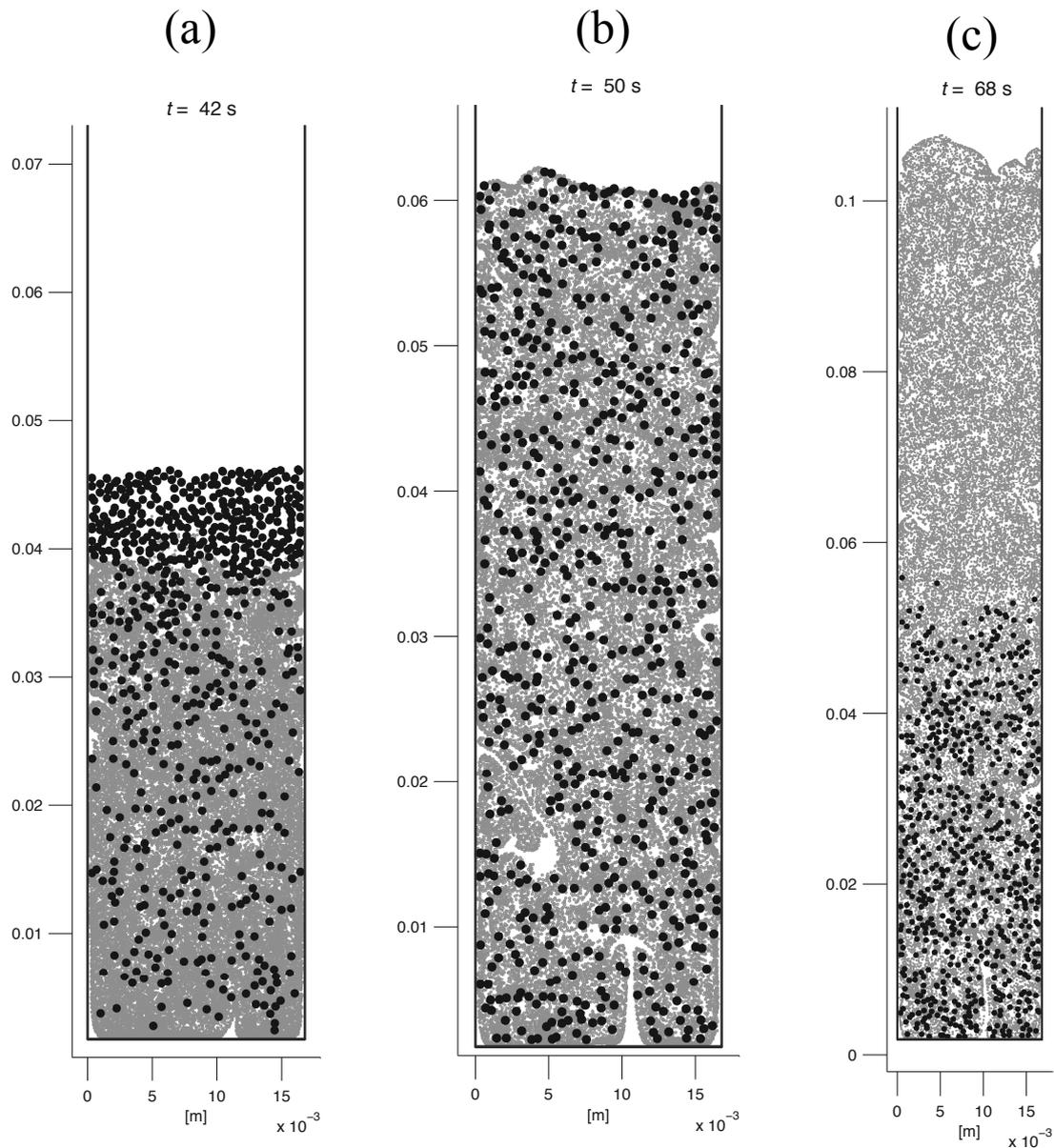


Fig. 5-XXV: Evoluzione del sistema. Le figure (a), (b) e (c) indicano le posizioni particellari al variare della velocità, rispettivamente a 8 mm/s, 12 mm/s e 17 mm/s. In nero si sono indicate le particelle appartenenti al gruppo 2, mentre in grigio quelle appartenenti alla specie 1.

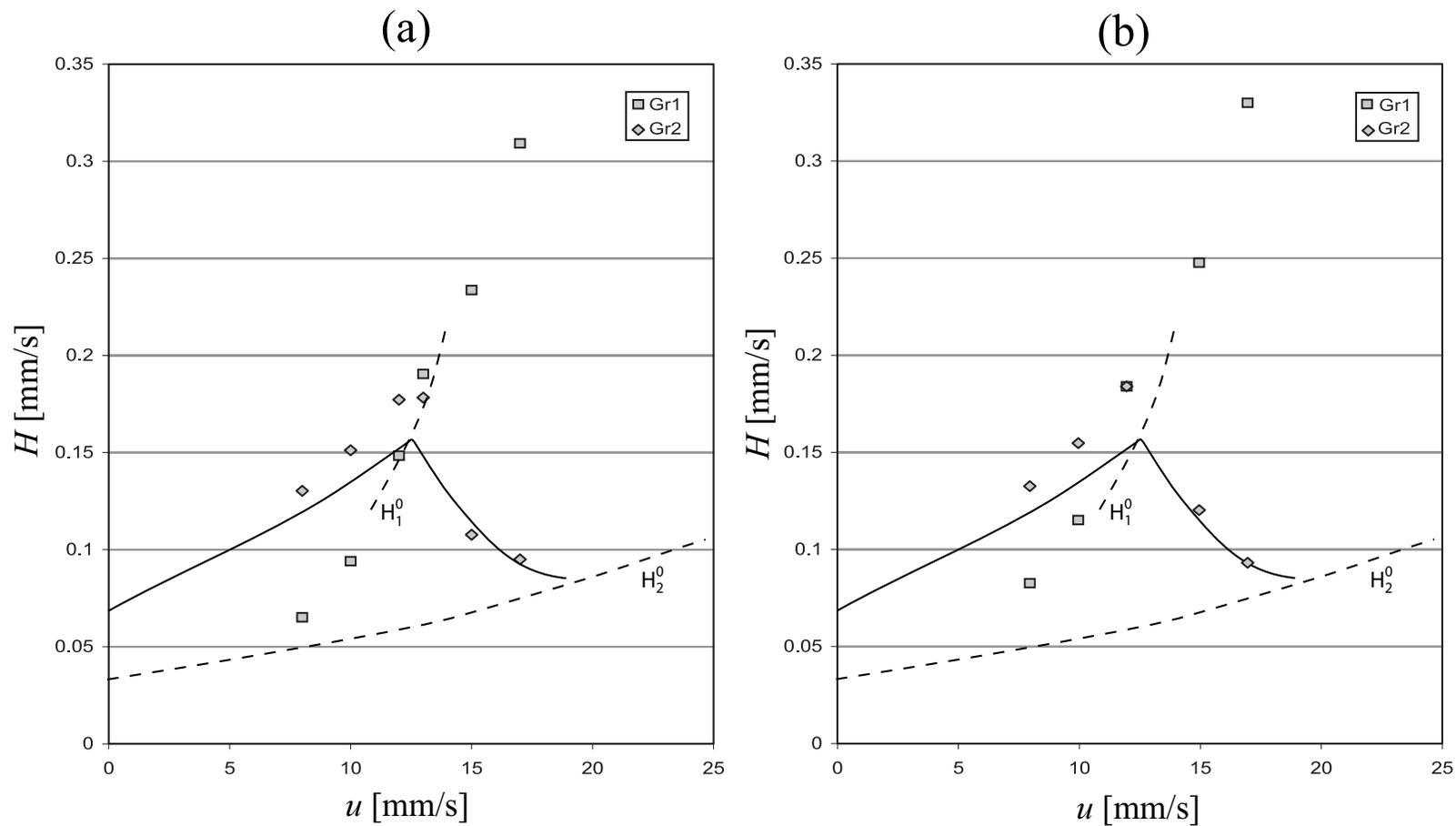


Fig. 5-XXVI: Effetti della temperatura sui risultati. Si raffrontano i dati sperimentali, la temperatura dei quali è ignota, con le previsioni delle simulazioni a 27 (a) e 25 °C (b). In entrambe le figure le linee tratteggiate indicano le altezze delle specie pure, quelle continue rappresentano l'altezza sperimentale della specie 2 nel letto fluidizzato. Dal confronto con i dati sperimentali (Moritomi et al. 1982) si può affermare che a 27 °C il punto critico di inversione sia ben predetto e che a 25 °C esso si sposti a velocità più bassa.

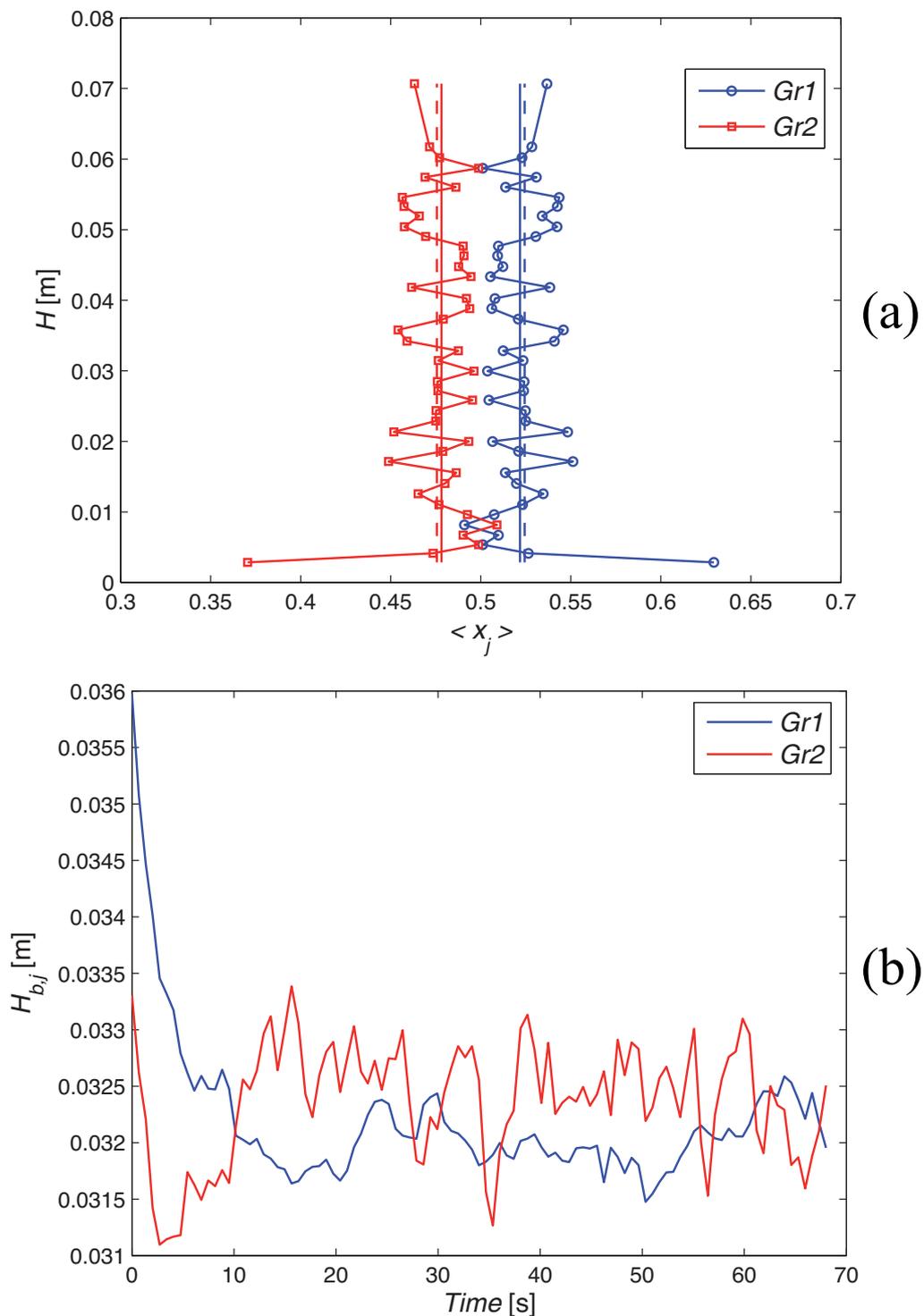


Fig. 5-XXVII: Inversione a 25 °C. La figura (a) mostra, in media temporale, la variazione della frazione volumetrica relativa lungo l'asse della colonna. La figura (b) illustra il variare della quota dei baricentri col tempo della simulazione. Entrambi i grafici indicano che a 25 °C il sistema è perfettamente miscelato già a 12 mm/s, cosa che non accade a 27 °C.

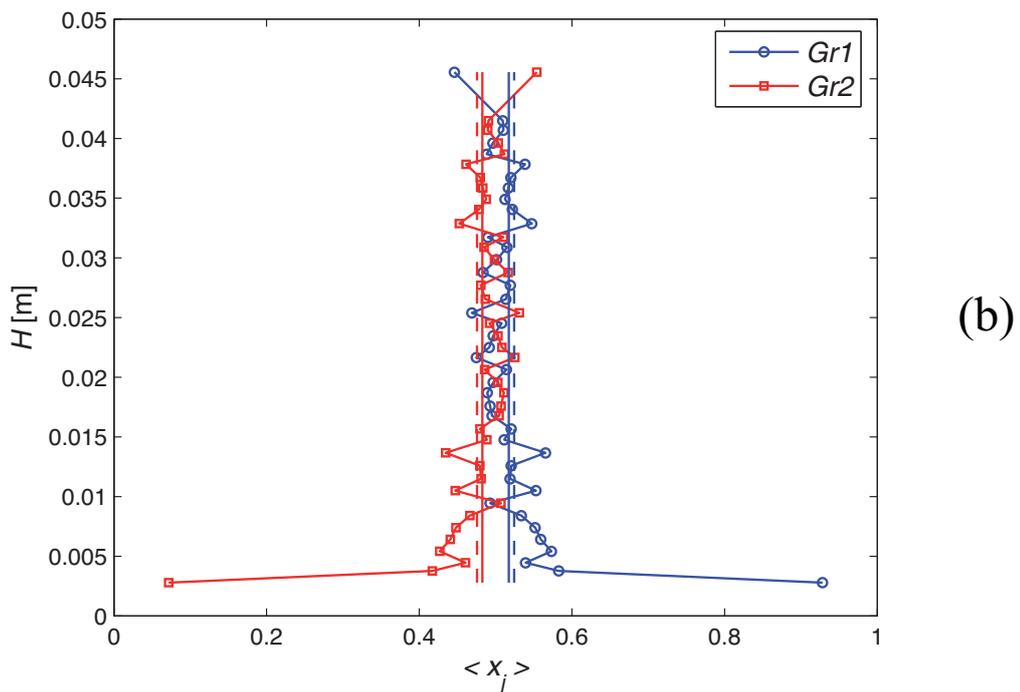
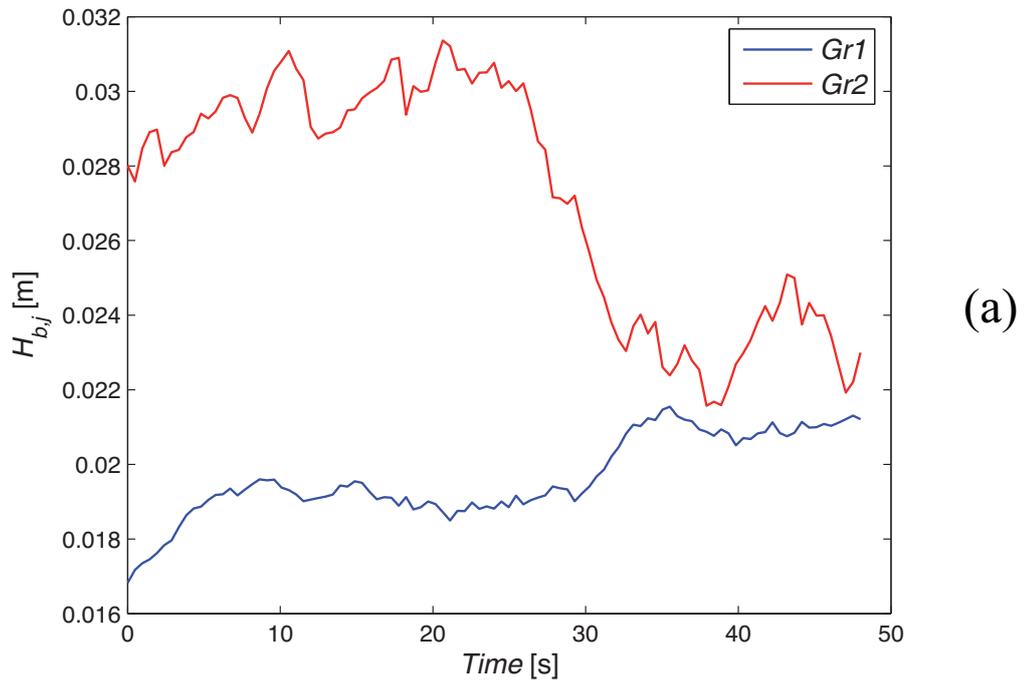


Fig. 5-XXVIII: Effetti di griglia. La figura (a) mostra che, partendo dalla prova a 27 °C e velocità pari a 8 mm/s, variando solo la griglia, portando $\Delta y/D_2$ da 1.55 ad 1.80, dopo un certo tempo i baricentri delle due specie tendono a sovrapporsi. La figura (b) illustra lo stesso fenomeno attraverso i profili medi di frazione volumetrica lungo l'asse. L'aumento del passo di griglia nel codice induce nella simulazione una miscelazione delle specie.

Mediante l'ausilio degli strumenti analitici di cui si è fatto in precedenza menzione è stato però possibile ricostruire il diagramma delle altezze totali e di interfaccia, come frutto della proiezione di scala delle quote di interfaccia (figura 5-XXVI). Pur non potendo fruire di dati sperimentali di altezza di interfaccia i risultati in figura 5-XXVI sembrano plausibili almeno a livello qualitativo, in quanto dagli altri sistemi analizzati nel lavoro di Moritomi et al. (1982) si evince che, prima del punto di inversione, la quota di interfaccia è molto simile all'altezza del solido fine considerato puro: questo accade in termini qualitativi sia nella figura 5-XXVI-(a) che nella 5-XXVI-(b), anche se quantitativamente i due risultati differiscono.

Dalla figura 5-XXIV è possibile, a 27 °C, individuare come velocità al punto critico di inversione, una intermedia tra i valori di 12 e 13 mm/s: in relazione a queste due ultime velocità, si osserva, infatti, che il sistema non è ben miscelato e che passa da una condizione in cui prevalentemente il solido di tipo 2 occupa la parte superiore del letto ad una inversa. Si può concludere che a 27 °C il fenomeno dell'inversione sia ben riprodotto nella simulazione del sistema [C], ottenendo conferma di ciò sia da un confronto visivo e qualitativo (figura 5-XXV), che da un'analisi dei dati estratti dalle simulazioni, in un ottimo accordo con quelli sperimentali, come illustrato in figura 5-XXVI-(a). In quest'ultima figura si osserva che, nonostante l'altezza proiettata mediante fattore di scala del gruppo 2, prima dell'inversione, sovrastimi quella dei dati sperimentali, si può comunque affermare che a 27 °C il punto critico di inversione sia ben predetto.

5.6.2 Effetti di temperatura e di griglia

Con l'ausilio del codice parallelizzato ed il corrispondente vantaggio in termini di tempi di simulazione, è stato possibile verificare l'effetto che una variazione della temperatura o della griglia comporta nei risultati.

A 25 °C si ottiene $\mu = 0.89 \cdot 10^{-3}$ kg/(m·s) e si osserva che il sistema tende ad invertire già a 12 mm/s di velocità superficiale di invio del fluido: questo si evince sia dalla figura 5-XXVI che dalla 5-XXVII. Si può concludere che a 25 °C il punto critico di inversione si sposta a velocità più basse e che anche a questa temperatura l'altezza proiettata mediante fattore di scala del gruppo 2, prima dell'inversione, sovrastima quella fornita nei dati sperimentali.

Si è tentato, inoltre di incrementare il rapporto tra passo di griglia in direzione verticale e diametro della specie particellare più grossolana dal valore di 1.55 al valore di 1.80 e 2.06. Utilizzando quest'ultimo valore, da subito è apparso che, a tutte le velocità il sistema appariva quasi totalmente miscelato, rendendo indistinguibile una quota di interfaccia. Utilizzando il valore di 1.80, solo attendendo un tempo sufficiente affinché la modifica produca effetti (circa 30 s) si è osservato lo stesso fenomeno. Si può concludere che almeno nel sistema [C] le dimensioni della griglia comportino una variazione nei risultati attesi.

Parte II

**PARALLELIZZAZIONE DEL CODICE
DEM-CFD**

Capitolo 6

Sviluppo di una versione parallela a memoria distribuita MPI del codice DEM

L'onere di calcolo indotto dal codice DEM-CFD è elevatissimo e legato al numero di particelle che vengono considerate presenti nel sistema. In questa seconda parte del lavoro di tesi sarà illustrato il tentativo di parallelizzazione della parte DEM. In particolare, in questo capitolo, ci si occuperà di illustrare le diverse architetture e modalità di calcolo parallelo; sarà indicato l'approccio prescelto per la parallelizzazione del codice palesando le strategie attraverso le quali l'onere possa essere distribuito in più processi.

6.1 Il calcolo parallelo

Una trattazione approfondita delle tecniche che investono il calcolo parallelo esula dagli obiettivi di questo lavoro di tesi, ma è opportuno operare una distinzione tra i diversi approcci e le differenti architetture a disposizione del programmatore.

Il calcolo parallelo rappresenta un'evoluzione del calcolo seriale e si pone come obiettivo quello di utilizzare simultaneamente più risorse per risolvere un unico problema computazionale. Il problema è suddiviso in un numero discreto di parti che possono essere risolte concorrentemente su più CPU (Tanenbaum 1972). Ogni singola parte è a sua volta suddivisa in una serie di istruzioni eseguite contemporaneamente su diverse unità di calcolo. Attualmente molti sistemi complessi sono studiati attraverso il calcolo parallelo: lo studio del genoma umano, la simulazione di attività sismiche, la modellazione del clima globale, ecc.

Le motivazioni che spingono all'uso di tali paradigmi di calcolo possono essere quelle di risolvere problemi più grandi in tempi equivalenti o affrontare il problema originale con enorme risparmio di tempo; altre spinte possono essere di natura economica, al fine di utilizzare un numero imprecisato di risorse hardware economiche al posto di un'unica costosa.

Rispetto alle macchine seriali quelle operanti in parallelo devono tener conto di un parametro fondamentale che è l'interconnessione fra esse e la velocità con la quale, ad esempio in una macchina cluster, le informazioni vengono scambiate fra i singoli nodi. Questo introduce agli svantaggi del calcolo parallelo, inerenti il costo e l'ingombro delle macchine cluster, nonché la loro difficile gestione. Gli svantaggi non sono solo legati ad aspetti hardware, ma necessita sottolineare anche che spesso i codici originali devono essere pesantemente modificati ed alcuni di essi rimarranno sempre intrinsecamente seriali. Un'ultima considerazione va fatta sulle prestazioni che sono fortemente legate al tipo di architettura hardware scelta.

6.2 Classificazione delle architetture parallele

Una classificazione (Flynn 1972) dei calcolatori può essere effettuata sulla base del flusso di dati (data stream) e/o sulla base del flusso delle istruzioni (instruction stream).

Nelle architetture a memoria condivisa, illustrate in figura 6-I(a), ogni processore vede la memoria come uno spazio globale condiviso di indirizzi: i processori operano indipendentemente, condividendo le medesime risorse di memoria. Qualora un processore modifichi un indirizzo di memoria, tale cambiamento sarà visibile a tutti gli altri. L'accesso alla memoria può essere uniforme (simmetrica) o non uniforme (asimmetrica): la differenza consta nei tempi di accesso alla memoria; nel primo caso tutti i processori sono identici con identici tempi di accesso, cosa non più vera nel secondo caso. La memoria può essere condivisa via hardware o software.

Nelle architetture a memoria distribuita ogni processore dispone di un'area di memoria che rimane locale: i processori, dunque, possono scambiare dati solo attraverso la loro rete di interconnessione. Questo approccio, illustrato in figura 6-I(b), prevede un'azione forte del programmatore, il quale deve necessariamente definire le modalità ed i tempi con cui i dati devono viaggiare, sincronizzando i task residenti su nodi diversi. Si definisce nodo l'insieme di uno o più processori con accesso diretto ad un quantitativo di memoria: in tal senso la memoria può essere distribuita con un processore per nodo o con più di uno.

Una programmazione a memoria condivisa presenta il vantaggio per il programmatore di una più agevole implementazione degli accessi alla memoria, a fronte della necessità di stabilire un accesso che sia sincronizzato. Altro svantaggio risiede nella limitata scalabilità degli algoritmi.

Le architetture a memoria distribuita, oltre ad avere costi contenuti, permettono al processore di accedere rapidamente alla propria memoria, la quale scala col numero di processore. I nodi cruciali di un tale approccio ricadono sulla responsabilità del

programmatore che deve curare i minimi dettagli della comunicazione fra i processi; a volte risulta particolarmente complesso ed arduo mappare codici esistenti su modelli a memoria distribuita. Un ruolo determinante è quello svolto dall'interconnessione fra i processi.

Esistono, poi, architetture ibride a memoria condivisa distribuita: condivisa su singolo nodo, distribuita tra i vari nodi interconnessi nel network di comunicazione.

6.3 Modelli di programmazione parallela

Saranno presentate di seguito i diversi approcci che un programmatore può scegliere nell'affrontare la parallelizzazione di un problema computazionale (Fox et al. 1988); va fatta la premessa che nessuno di essi è migliore degli altri, che ogni problema da affrontare richiede una scelta oculata fra gli approcci disponibili.

6.3.1 Modello a memoria condivisa (OpenMP e Pthreads)

In questo caso i processi (task) oltre a possedere una propria memoria privata, ne condividono un'altra che forma uno spazio di lettura-scrittura asincrona: l'accesso a tale spazio condiviso può essere controllato dal programmatore.

I principali vantaggi di questo modello (Dagum e Menon 1998) generalmente associato ad architetture a memoria condivisa, risiedono nella facilità con cui un programma seriale può essere trasformato in parallelo in maniera incrementale; inoltre questo approccio non richiede un'esplicita programmazione della comunicazione fra i vari processi. Questo modello risulta particolarmente inadatto per codici originariamente strettamente seriali o particolarmente interconnessi. Esso, inoltre, rende complessa la gestione dei dati nel locale del singolo processo, ciò che intacca le performance dell'applicazione.

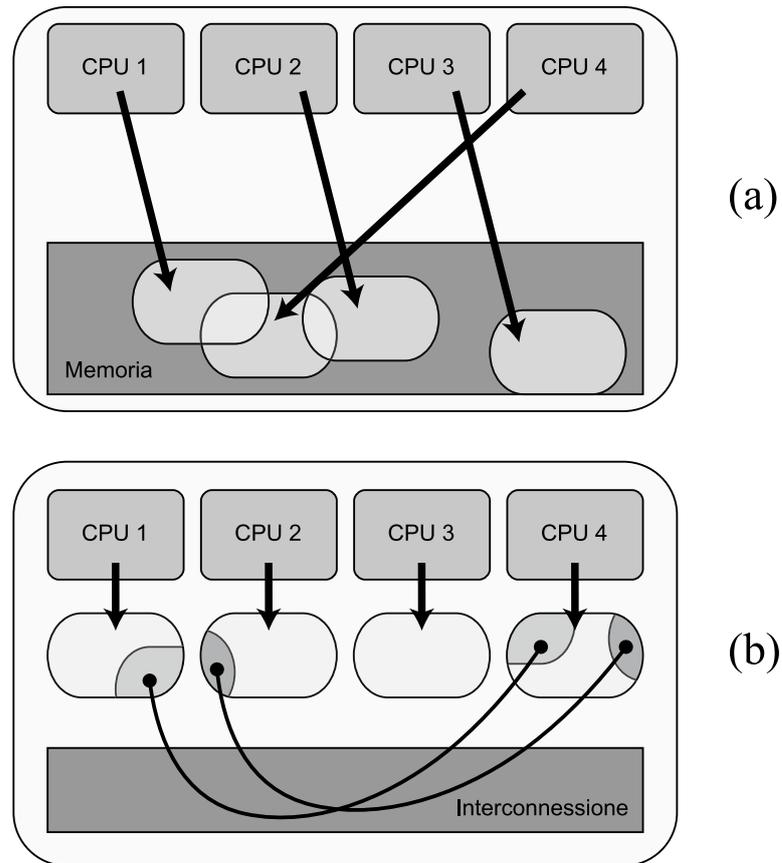


Fig. 6-I: Architetture di parallelizzazione disponibili. La figura mostra l'architettura a memoria condivisa (a) e quella a memoria distribuita (b). Nel primo caso le CPU leggono e scrivono su sottoinsiemi di un'area di memoria condivisa. Se i sottoinsiemi possiedono intersezioni il programmatore deve modulare gli accessi affinché non siano contemporanei tra più CPU sulla stessa regione. Nel caso di memoria distribuita i sottoinsiemi sono aree di memoria che appartengono al singolo processore: i dati che giacciono sulle intersezioni devono ora viaggiare attraverso il network per essere aggiornate.

Usualmente associato ad architetture a memoria condivisa è anche il modello multi threaded, in cui ogni processo singolo crea delle unità di esecuzione (thread) che tocca al sistema operativo schedulare in concorrenza. Sono necessarie operazioni di sincronizzazione per evitare che più di un thread possa accedere nello stesso istante di tempo ad una locazione di memoria condivisa con le altre unità di esecuzione: questo concetto è illustrato in figura 6-I-(a).

È possibile implementare il multi thread attraverso una libreria utilizzabile da codici C che prende il nome di POSIX (Pthreads), in cui la gestione del parallelismo è esplicitamente demandata al programmatore, oppure attraverso OpenMP il quale si basa su una parallelizzazione incrementale a partire dal codice seriale.

6.3.2 Modelli a memoria distribuita: Message Passing (MPI)

Un insieme di processi che può risiedere sulla stessa macchina o su più macchine interconnesse a formare un network di comunicazione, usa la propria memoria locale durante le operazioni computazionali, come illustrato in 6-I-(b). Lo scambio di dati avviene come operazione cooperativa fra i vari processi con uno scambio esplicito di messaggi (Gropp et al. 1999), ciò che richiede una libreria di funzioni da richiamare all'interno del proprio codice. La figura 6-I-(b) evidenzia che i messaggi da scambiare sono inerenti a dati appartenenti alle intersezioni dei sottoinsiemi in cui la struttura dati originale è stata suddivisa.

6.3.3 Modello Data Parallel

Un insieme di dati è soggetto ad operazioni da parte di un set di task, i quali lavorano ognuno su una porzione diversa della stessa struttura dati ed ognuno di essi esegue la stessa operazione sulla propria porzione (Hillis e Steele 1986). Se l'architettura è a memoria condivisa allora i task accedono a questa struttura dati attraverso la memoria che condividono; qualora l'architettura della memoria fosse distribuita allora la struttura dati verrebbe suddivisa in sottostrutture ognuna delle quali risiede nella memoria locale al task.

6.3.4 Modello Ibrido

Si tratta della combinazione di modelli diversi di programmazione parallela (Mahinthakumar e Saied 2002). Un classico esempio è quello che prevede l'uso di OpenMP all'interno del nodo e di MPI all'esterno del nodo.

6.4 Modelli d'esecuzione

Le principali tipologie d'esecuzione fanno capo a due approcci. Il primo, SPMD, acronimo di Single Program Multiple Data, fa sì che un solo programma venga eseguito da più processi, ognuno dei quali opera su dati differenti; i processi possono eseguire solo una parte del codice, operando, quindi, su sottoinsiemi dei dati originali. Essi possono eseguire la stessa istruzione o istruzioni diverse.

Il secondo approccio prende il nome di Multiple Program Multiple Data (MPMD): un'applicazione di questo tipo consta di diversi programmi eseguiti separatamente da uno o più processi; i dati su cui i singoli programmi operano possono essere differenti.

6.5 Prestazioni di un codice parallelo

L'unità di misura delle prestazioni del codice parallelizzato è lo speedup, ovvero l'aumento della velocità (o la diminuzione del tempo) effetto dell'uso di Mc processori. Analiticamente lo speedup è

$$SU(Mc) = T_0 / T_{Mc}, \quad (6.1)$$

dove T_0 è il tempo totale impiegato dal codice seriale, mentre T_{Mc} è il tempo impiegato quando operano Mc processori. Se $SU = Mc$, allora si tratta del caso ideale, ovvero di speedup lineare. Il caso reale prevede $SU < Mc$.

Vale che il tempo seriale T_0 è dato dalla somma di una parte seriale T_{0S} e non parallelizzabile e di una parte parallelizzabile T_{0P} . È possibile, dunque, scrivere

$$SU(Mc) = (T_{0S} + T_{0P}) / (T_{0S} + T_{0P}/Mc). \quad (6.2)$$

La (6.2) ammette un limite asintotico nell'uso di infiniti processori, per cui

$$SU(Mc \rightarrow \infty) = (T_{0S} + T_{0P}) / (T_{0S}), \quad (6.3)$$

nota come legge di Amdhal, che definisce speedup massimo raggiungibile.

6.6 Modelli prescelti

Molti sono i lavori di letteratura inerenti la parallelizzazione di un codice DEM (Hustrulid 1997, Dowding et al. 1999, Sawley e Cleary 1999), ma molto più difficoltoso risulta affrontare anche la parte inerente la risoluzione CFD della fase fluida (Darmana et al. 2006).

Per la parallelizzazione del codice DEM-CFD si è scelto di operare tramite un modello di Message Passing con un'esecuzione SPMD, seguendo lo schema in figura 6-I-(b). Si entrerà di seguito nel dettaglio della strategia di parallelizzazione, mentre necessita specificare al momento che la libreria di cui si è fatto uso è MPI: trattasi di un insieme di funzioni che implementano un modello astratto e standard per il Message Passing, fornendo un paradigma di programmazione consolidato per linguaggi quali Fortran, C, C++, ecc. MPI interfaccia in maniera efficiente con qualsiasi tipologia di hardware.

Nel passaggio dei dati, cuore del problema secondo questa tipologia di approccio, ogni volta è necessario individuare il processore mittente e quale o quali siano quelli destinatari. Anche il dato inviato va identificato, nel tipo, nella quantità e nel posizionamento finale. Le comunicazioni possono essere “punto a punto” o “collettive”, a seconda che solo due processori o tutti quelli appartenenti ad uno specifico gruppo siano coinvolti; possono poi essere sincrone o asincrone.

MPI demanda al programmatore la decisione della strategia con cui gestire i processi ed il modo in cui essi suddividono la struttura dati iniziale in sottostrutture: quando queste sottostrutture formano sottoinsiemi le cui intersezioni non sono nulle, bisogna

allora intervenire attraverso il passaggio dei messaggi, al fine di mantenere aggiornata la struttura dati nel suo complesso, per come la vede ogni singolo processo, da una iterazione all'altra. Si tratta di una sincronizzazione temporale e spaziale della struttura dati coinvolta nelle operazioni che sono distribuite fra i processi.

6.7 Strategia di parallelizzazione

Una buona parallelizzazione di un codice sequenziale passa sempre per l'osservazione del problema, da cui intuire possibili simmetrie ed analogie nella struttura dati da computare. Nel caso del codice DEM-CFD si è affrontata la parallelizzazione della sola parte lagrangiana dell'algoritmo, ovvero la parte relativa agli elementi distinti.

6.7.1 Osservazione della geometria del sistema

Se si osserva la figura 6-II è possibile osservare che al momento il codice prevede un moto 3D per la sola fase solida: il fluido non sviluppa i propri profili di velocità nella direzione z , poiché si ipotizza un sistema sottile in cui le dimensioni preponderanti siano la lunghezza e l'altezza. Si supera questa limitazione assumendo che le pareti siano periodiche, ovvero ci sia toroidalità nella direzione z . La figura 6-II mostra un sistema in cui lungo l'asse x si sia suddiviso il dominio in Mx celle computazionali, My lungo l'asse y , mentre $Mz = 1$. In tutte le direzioni, come detto, si aggiungono due file di celle fittizie, utili ad imporre ad esempio la condizione di aderenza del fluido alle pareti. Il solido giace nella zona delimitata dalle celle che vanno lungo l'asse x per $i_c = 2..Mx$, lungo l'asse y per $j_c = 2..My$, lungo l'asse z per $k_c = 2$. Attorno alle particelle, un "involucro" spesso una cella per le condizioni al contorno.

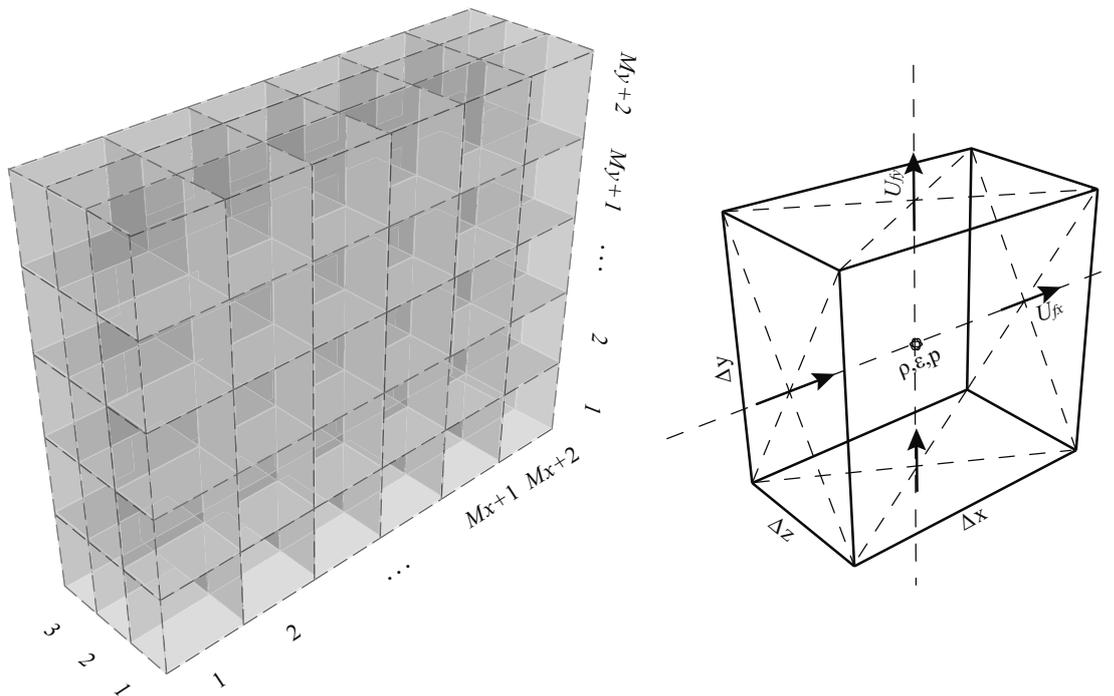


Fig. 6-II: Discretizzazione del sistema. La figura mostra la suddivisione in celle del sistema studiato mediante algoritmo DEM-CFD. Si osserva come in direzione z siano sempre presenti sole 3 celle computazionali, in quanto la soluzione del fluido viene affrontata con approccio bidimensionale. Le celle più esterne servono ad imporre le condizioni al contorno, questo in ognuna delle direzioni spaziali.

6.7.2 Possibili approcci alla parallelizzazione ed effetti sul calcolo

A primo acchito si potrebbe immaginare di distribuire il calcolo di ogni singolo insieme di particelle per ognuno dei processi. Questa strategia prevede l'individuazione di gruppi di particelle, le quali abbiano delle proprietà che le accomunino. Alcuni codici DEM si fondano sull'uso di celle contenenti un'unica particella, in questo caso l'identificazione tra particelle e cella computazionale diviene evidente e ciò comporta una facile parallelizzazione.

Nel caso in esame ogni cella computazionale contiene un numero abbastanza elevato di particelle da rendere significativo al suo interno il grado di vuoto; le celle sono poi

abbastanza piccole da rendere accettabile l'ipotesi di discretizzazione del dominio attraverso esse. Se si dovesse individuare un gruppo di particelle con proprietà comuni, bisognerebbe osservare come esse interagiscano con la geometria del sistema.

Si può ritenere più omogenea una suddivisione della popolazione particellare sezionando il sistema in fasce verticali piuttosto che orizzontali. Questo perché le particelle, in presenza di sbuffi o bolle affioranti, generalmente ad una quota y non si distribuiscono uniformemente in direzione x .

Da questa osservazione si è scelta, dunque, una distribuzione dell'onere del problema partendo da considerazioni di tipo geometrico e coinvolgendo, indirettamente, le particelle che giacciono nel dominio in esame. Come indica la figura 6-III-(e), si è suddiviso il dominio geometrico-particellare, attraverso piani verticali e trasversali, in M_c regioni, ognuna delle quali abbraccia la totalità delle celle in direzione y e z , ma considera solo M_r celle delle M_x totali in direzione x . Vale $M_r = M_x/M_c$ (intesa come divisione intera).

La figura 6-III-(a) illustra la suddivisione del dominio in M_c processi composti ognuno da $(M_r+2) \cdot (M_y+2) \cdot 3$ celle (salvo resto della divisione intera di cui sopra). L'area contrassegnata in grigio chiaro abbraccia le particelle effettivamente presenti nel dominio del processo, il quale, però, deve portare con sé informazioni inerenti anche gli strati di celle immediatamente adiacenti alla sua destra ed alla sua sinistra. Questo perché se si considerano le particelle ai bordi del processo p , appartenenti alla k -esima cella lungo l'asse x , queste andranno ad interagire con le altre presenti al bordo del processo $p+1$ ($i_c = k+1$). I casi più emblematici di interazione sono quelli legati agli urti, o ad altri casi di forze interparticellari legati a distanze caratteristiche fra le sferette solide. Si vedrà più avanti che l'aspetto più problematico di interazione riguarda la funzione di distribuzione dei volumi particellari di cui si è parlato nel terzo capitolo. Di questi problemi e di altri si entrerà nel merito nei paragrafi successivi.

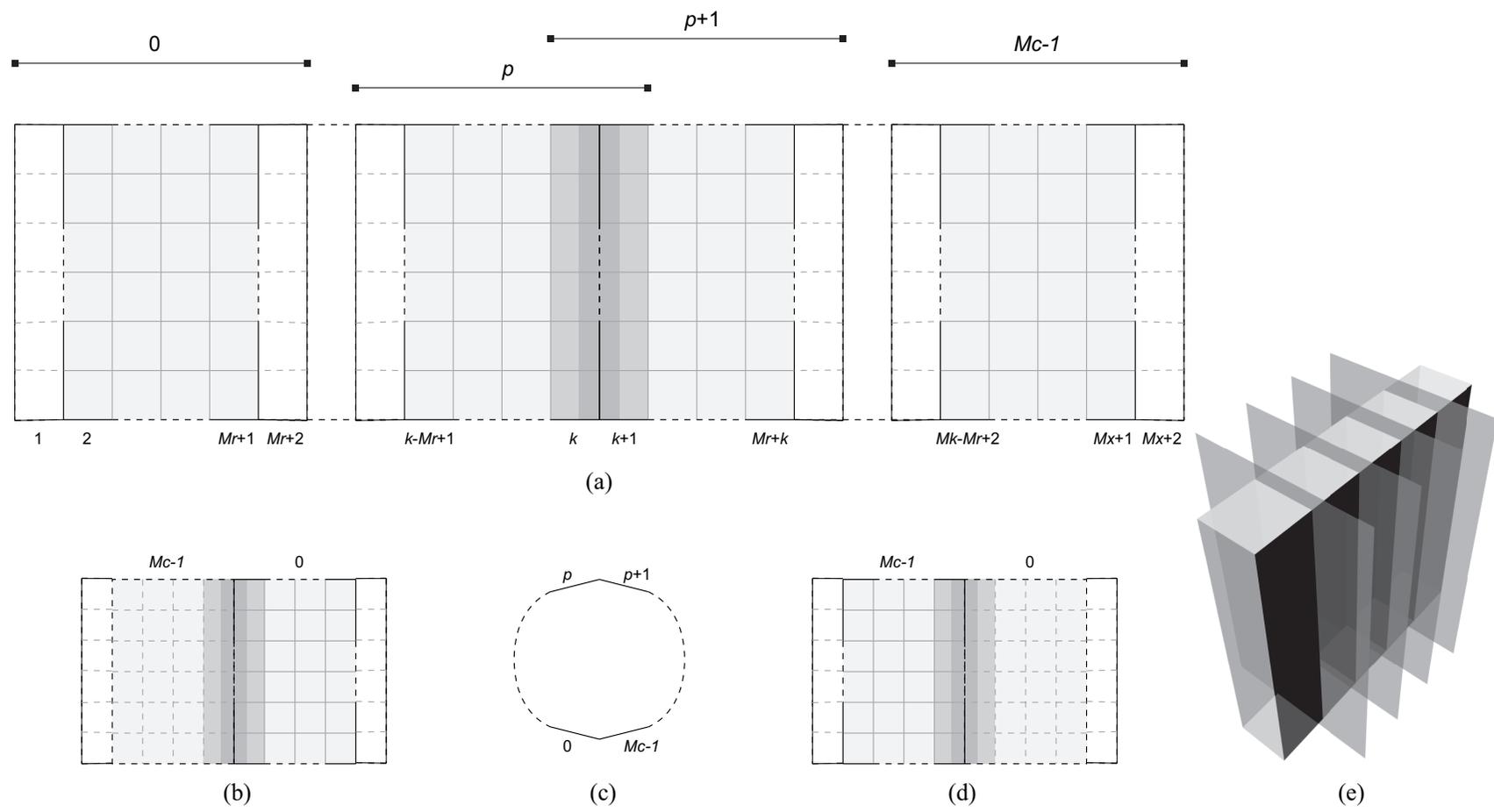


Fig. 6-III: Suddivisione del problema fra i vari processi. La figura mostra la distribuzione del dominio partellare tra gli M_c processi (a) mediante suddivisione in sezioni verticali e trasversali al sistema (e). Si evidenzia l'effetto della toroidalità del sistema (c) sui processi iniziale (b) e finale (d). In figura vale che $k = (p+1) \cdot Mr+1$ ed $Mr = Mx/M_c$ (risultato delle divisione intera). Le aree in diverse tonalità di grigio scuro evidenziano le zone di interconnessione e sono quelle che determinano scambi di messaggi tra i processi contigui.

Al momento è utile comprendere il motivo che induce lo scambio di messaggi tra il processo p e quello $p+1$. Proprio l'esempio dell'urto tra una particella appartenente alla cella k e quella $k+1$ lungo l'asse x , è particolarmente emblematico. Come osservato nel secondo capitolo, al fine di ridurre l'onere di calcolo, l'algoritmo DEM considera ogni urto una sola volta. Supponendo che l'iterazione sia giunta alla i -esima particella, il codice scorre gli indici j delle particelle restanti alla ricerca di urti, facendo in modo che l'impatto venga registrato solo se l'indice j della particella destinataria dell'urto ha un valore superiore a quello della i -esima oggetto d'indagine.

La premessa ora discussa serve a comprendere il meccanismo che si instaura quando la particella i appartenga al processo p e quella j al processo $p+1$. Se si osserva ciò che accade dal punto di vista del processo p , esso vede, durante l'urto, modificare la posizione di entrambe le particelle, appartenenti al proprio dominio computazionale. Il processo $p+1$ non considererà l'urto in quanto $i > j$, dunque, dal suo punto di vista, le posizioni delle due particelle rimarranno immutate ed identiche a quelle che occupavano all'istante di tempo precedente. Ciò detto si evidenzia la necessità di sincronizzare le posizioni particellari fra i due processi: essi scambieranno dei messaggi per cui il processo $p+1$ si avvedrà delle mutate posizioni, evitando di incorrere in errori nella valutazione delle forze che dipendono dalle distanze interparticellari.

Ad ognuno dei processi, indicizzati da $p = 0..Mc-1$, appartiene un gruppo di particelle giacenti nelle celle di indici appartenenti al range $i_c = (i_{pf} + 1)..(i_{pl} - 1)$ lungo l'asse x , dove $i_{pf} = p \cdot Mr + 1$, $i_{pl} = (p+1) \cdot Mr + 2$. Ogni processo deve contenere una serie di informazioni che attingono alle celle adiacenti di indici i_{pf} (first) ed i_{pl} (last).

6.8 Parallelizzazione delle procedure

In questo paragrafo si individueranno le diverse fasi del codice seriale in cui agire per ottenere un calcolo parallelo: il codice consta di due fasi che, come visto nel secondo capitolo, agiscono in maniera sequenziale (figura 2-X). L'insieme delle procedure il cui onere computazionale si vuole distribuire ai diversi processi fa capo alla sola fase particellare, la prima fra le due in sequenza ad essere risolta, seguita dalla fase fluida, che rimarrà di tipo seriale. Prima del codice CFD, il DEM deve ricomporre tutte le informazioni ed i dati distribuiti nelle singole memorie dei processori, ma saranno necessari scambi anche prima dell'intervento del SIMPLE. Di seguito si elencano gli interventi sul codice, seguendo gli step del DEM evidenziati in figura 6-IV.

6.8.1 Inizializzazione delle variabili e strutture dati

Inizialmente tutti i processi leggono i dati di input, quindi ognuno di essi possiede nel proprio spazio di memoria dati inerenti il numero di particelle, delle specie presenti con i loro parametri fisici e geometrici, il numero totale di celle ed i modelli prescelti per il calcolo delle forze di contatto, di drag e di altro tipo. Se la prova dovesse ripartire da una precedentemente interrotta ogni processo leggerebbe i dati salvati in file binari contenenti uno l'ultima disposizione e velocità particellari, l'altro l'ultima soluzione del campo di moto fluido. Unitamente a questi file prodotti al tempo di stampa (figura 2-X) ne vengono prodotti altri binari contenenti la storia della fase particellare e di quella fluida, al fine di renderli disponibile, come detto nel secondo capitolo, per un'analisi condotta tramite script MATLAB®. La scrittura di tali file viene sempre demandata al processo 0, il quale, come si vedrà, raccoglie tutte le informazioni dagli altri e stampa.

Dopo aver letto da input, il processo 0 calcola parametri inerenti le varie energie (cinetica, potenziale, totale) e la perdita di carico, valori che sono poi stampati a schermo; esso procede alle prime stampe dei file di ripartenza del solido e del fluido, e

si sottolinea come ancora non si sia scambiato alcun messaggio, poiché ogni processo conosce tutte le variabili, di conseguenza anche lo 0 che, appunto, sta procedendo alle stampe. Finisce la fase di preambolo e si entra in quella appartenente all'iterazione sequenziale visibile in figura 2-X e sviluppata in ottica di parallelizzazione nella 6-IV.

A questo punto inizia la programmazione MPI, con una prima subroutine che assegna ad ogni processo la propria cella iniziale (i_{pf}) e finale (i_{pl}) di competenza. Ad ogni processo viene indicato quale sia quello alla sua sinistra e quale quello alla sua destra. I processi scambieranno messaggi solo con i loro contigui per cui identificarli in questa fase è un'operazione fondamentale. Quest'ultima operazione può sembrare banale se non si considera la possibilità che anche l'asse x possa essere periodico: come illustra la figura 6-III-(c) si considera toroidale il sistema lungo quest'asse, per cui il processo 0 individua come processo alla sua sinistra l'ultimo di indice M_c-1 , mentre l'ultimo vede come processo di destra il primo, come viene rispettivamente illustrato nelle figure 6-III-(b) e 6-III-(d).

A questo punto si entra nel cuore del problema: ad ogni processo viene assegnata una lista di particelle; sono le particelle che occupano la zona grigio chiaro in figura 6-III-(a), comprese tra le celle lungo l'asse x di indice $i_c = (i_{pf} + 1)..(i_{pl} - 1)$; si identifica questa come "clear list". Si sta distribuendo la memoria, ovvero si assegna lo spazio di memoria proprio di ogni processo. Come nel codice seriale originario anche nel parallelo le particelle saranno indicizzate nelle liste di appartenenza in maniera ordinata. Questo risulta di cruciale importanza se si ricorda il metodo secondo il quale un urto viene preso in considerazione una sola volta.

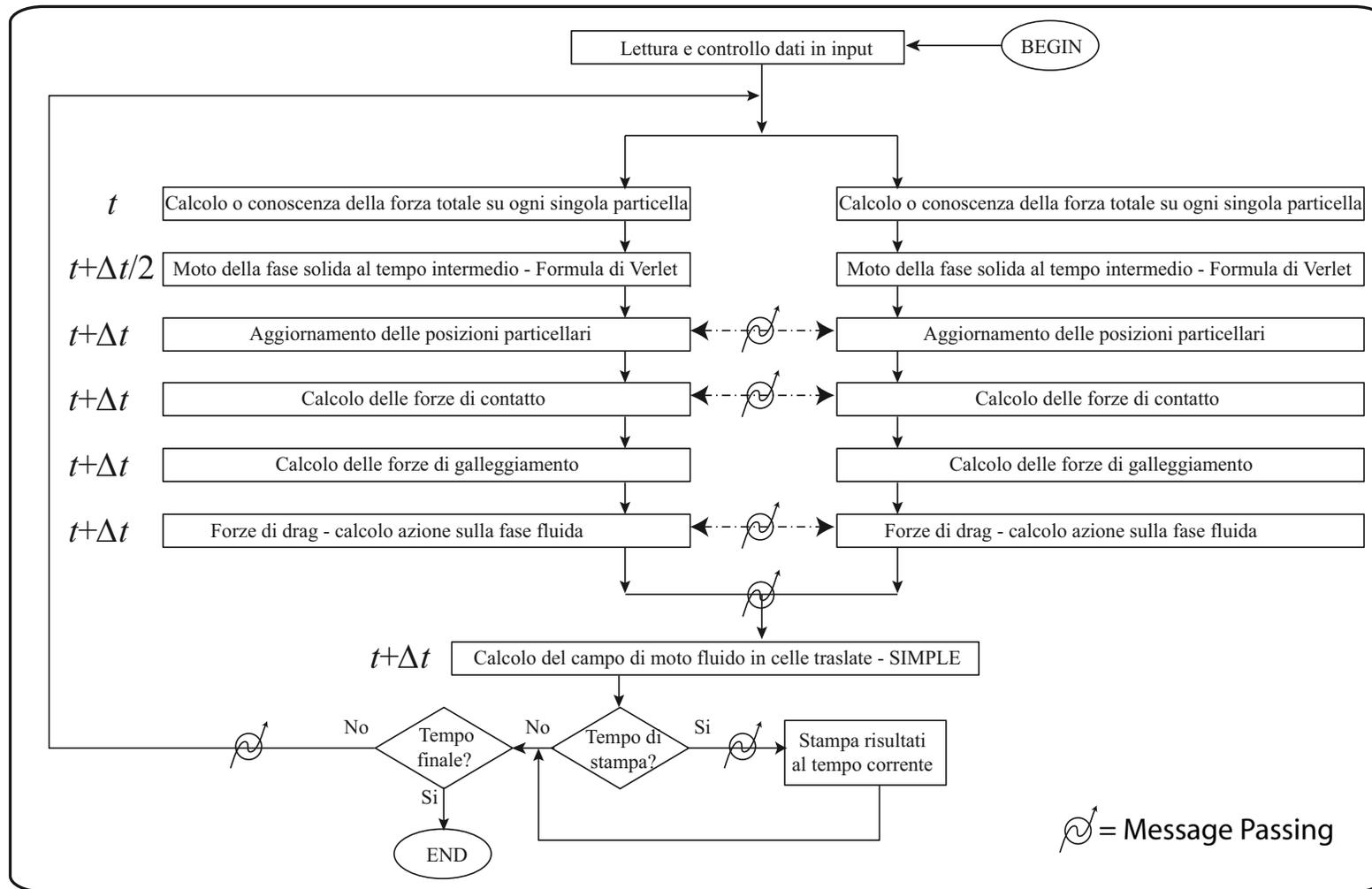


Fig. 6-IV: Struttura di parallelizzazione dell'algoritmo DEM-CFD.

Ma cosa significa dal punto di vista del codice che una particella appartiene ad un determinato processo? Numericamente questo corrisponde al fatto che l'area di memoria dedicata al singolo processo deve contenere dati inerenti la posizione e la velocità, lineari e rotazionali delle particelle. Ogni particella porta con sé poi una storia degli urti precedenti: anche questi dati devono essere incamerati dal processo, e si tratta soprattutto di liste, tra cui la più importante è quella contenente gli indici delle particelle a contatto; anche queste liste sono ordinate e si tratta di particelle "destinatari" di un urto che vede protagonista la particella cui la lista si riferisce: l'indice di ognuna di queste particelle, per ciò che richiede l'algoritmo di ricerca univoca dell'urto, è sicuramente maggiore dell'indice della particella in esame; gli indici delle particelle esterne al processo destinatari di un urto che vede come protagoniste particelle della "clear list", entrano in una "dark list". La peculiarità di quest'ultima struttura dati appartenente al processo, è che stavolta di ogni particella indicizzata bisogna conoscere solo posizione e velocità.

Da quanto osservato il senso di appartenenza di una particella ad un determinato processo si traduce in una serie di dati che la particella reca con sé, anche nel caso essa si trasferisca al processo adiacente.

6.8.2 Calcolo della fase particellare

Si entra al passo indicato in figura 6-IV come tempo t . In questo step si eredita dal tempo precedente la soluzione del campo di moto fluido, il grado di vuoto e le posizioni, nonché le velocità particellari, sia lineari che di rotazione. Ogni processo è in grado di calcolare la prima parte della formula di Verlet (2.11), ovvero ottenere le velocità delle particelle appartenenti alla propria lista, nonché le velocità delle stesse attribuite ad un tempo intermedio e, successivamente calcolare anche le posizioni particellari a $t+\Delta t$.

L'integrazione al tempo intermedio comporta lo spostamento spaziale delle particelle: siccome i processi si sono divisi il dominio particellare su considerazioni di appartenenza topologica, è necessario verificare che qualche particella non abbia attraversato i confini del dominio del proprio processo; in tal caso i processi adiacenti coinvolti devono scambiarsi dei messaggi in tal senso, che aggiornino la propria lista di particelle di appartenenza. Le liste vengono aggiornate utilizzando un ciclo che per ogni processo scorre la lista delle particelle di appartenenza interrogandosi sulla posizione da loro occupata lungo l'asse x . A questo punto interviene un accorgimento che riduce la quantità di messaggi scambiati.

Si supponga di dover analizzare i dati che un processo deve trasferire a quello alla sua sinistra. Si immagini, dunque, di considerare il processo $p+1$ in figura 6-III-(a). Tale processo, come affermato precedentemente, deve censire le particelle della propria lista di appartenenza, le quali occupano lungo l'asse x le posizioni corrispondenti al range di celle che va dalla $k+1$ fino alla $Mr+k$. Per prima cosa si deve interrogare su quali particelle abbiano attraversato il confine tra la cella $k+1$ e la cella k ; queste particelle, infatti, andranno ad aggiungersi alla clear list del processo p . Non tutte le particelle appartenenti al gruppo di celle di indice $i_c = k+1$ dovranno aggiungersi alla dark list destra del processo p : questo perché solo le particelle "a tiro", raggiungibili da particelle nelle celle di indice $i_c = k$, saranno potenziali destinatarie di urto. In figura 6-III-(a) tale gruppo di particelle viene individuata dal grigio più scuro, ed affonda nel processo $p+1$ di una distanza cautelativa pari al raggio massimo particellare sommato al raggio della particella censita: analiticamente ciò si traduce nel fatto che, se il centro della particella censita affonda nel processo $p+1$, a partire dal confine con quello p , di una distanza non maggiore della somma del suo raggio e di quello massimo delle specie presenti, allora essa dovrà essere aggiunta alla dark list destra del processo p . Delle proprietà di tale particella saranno passate tramite messaggi solo le componenti della posizione e della velocità, uniche variabili necessarie per un eventuale urto che le veda destinatarie,

ovvero con un indice superiore a quello delle particelle protagoniste dell'urto che risiedono nel processo p . Analogo discorso si può effettuare qualora si debbano analizzare i dati che un processo deve trasferire a quello alla sua destra. In tal caso si può osservare in figura 6-III-(a) il processo p : esso passerà al processo $p+1$ tutte le informazioni inerenti le particelle che hanno migrato oltre il confine, mentre solo le posizioni e le velocità di quelle che affondano nella propria area di colore grigio scuro. In caso di pareti periodiche anche in direzione x , le stesse considerazioni investono il primo e l'ultimo processo che diventano adiacenti, situazione illustrata nelle figure 6-III-(b) e 6-III-(d).

In questa fase ogni processo aggiorna anche la lista delle particelle presente in ognuna delle celle di appartenenza, ed inizia la fase successiva di calcolo delle forze al tempo intermedio.

- ***Forze scaturite dagli urti ed eventuali forze interparticellari***

La prima tipologia di forze che va considerata, al tempo intermedio in seguito all'aggiornamento delle posizione particeolari, è quella inerenti gli urti.

L'algoritmo di ricerca degli urti viene eseguito da ogni singolo processo: viene scorsa tutta la lista delle particelle strettamente appartenenti al dominio topologico del processo, ovvero gli indici della clear list; per ogni particella corrispondente all'indice correntemente raggiunto, si ricerca l'urto nelle tre celle adiacenti rispetto a quella di appartenenza della particella stessa (figura 2-VI). Per le particelle di confine, l'aver passato le posizioni e le velocità della dark list, consente di calcolare le forze che scaturiscono dall'urto anche con particelle destinarie che sconfinino nel processo adiacente, sia a destra che a sinistra. Il codice parallelo interviene in questa fase tenendo memoria locale delle particelle che sono state effettivamente destinarie di un urto: queste, in effetti, subiscono gli effetti di una forza di contatto uguale e contraria a quella che si è registrata sulla protagonista dell'urto direttamente appartenente al processo.

Solo il processo corrente si avvede di questo che corrisponde ad un contributo alla forza totale agente sulla particella destinataria dell'urto: bisogna tenerne traccia col solito metodo della lista dinamica. Come fatto per la dark list, si crea una lista (anche stavolta distinta nella parte sinistra e destra) definita "additional forces list".

Nessun cambiamento, rispetto al codice seriale, investe la ricerca di urti con le pareti che contornano il sistema. Al momento il codice non le compendia del tutto, ma in questa fase ed in maniera analoga vengono ricercate eventuali forze che scaturiscano da posizione reciproca particellare: il concetto rimane il medesimo e se qualche particella nel dominio del processo ne dovesse influenzare qualcuna oltre i confini destro o sinistro, il contributo di forza generato sulla particella destinataria si sommerebbe nella lista delle additional forces.

- ***Calcolo del galleggiamento***

L'obiettivo finale, lo si ricorda, è calcolare tutti i membri della (1.29). Tra questi i contributi di galleggiamento che vengono immediatamente calcolati da ogni processo: come visto il galleggiamento viene calcolato come gradiente della pressione; nella direzione verticale y , ciò ai fini della parallelizzazione non comporta alcun problema; nel calcolare il gradiente di pressione lungo l'asse x , invece, si potrebbe attingere ad un valore di pressione che afferisce al processo adiacente. Questo conduce ad anticipare qualcosa che avverrà dopo la soluzione della fase fluida: questa viene affrontata dal solo processo zero come detto, ma dopo averla ottenuta dovrà distribuire i valori di pressione ai diversi processi, conferendo loro anche quelli ai loro bordi esterni, proprio perché poi al passo successivo si possa calcolarne il gradiente sicuri di accedere a valori che il processo possiede. Questo deve accadere anche per la componente di velocità orizzontale, che come si vedrà, sarà utilizzata nel calcolo della forza di drag.

- ***Calcolo della forza di drag e dell'attrito sul fluido***

Questa fase del calcolo deve essere vista come duplice: da un lato su ogni particella si calcola la forza di drag determinata dal campo di moto fluido, dal grado di vuoto e distribuzione dei diametri particellari provenienti dal tempo t ; dall'altro lato, attraverso la (1.19) si valuterà il termine S_d che la (1.16) contiene al suo interno, come effetto del principio di azione e reazione dovuto alla massa particellare al tempo intermedio.

Un ciclo spazza tutti gli indici delle particelle appartenenti al processo (clear list) e, per prima cosa, al fine di calcolare la forza di drag, necessita conoscere la velocità intorno alla particella raggiunta dal ciclo. Come detto nel secondo capitolo esiste una funzione per distribuire i volumi pesati delle particelle alle celle viciniori e di appartenenza, ed analogamente, sempre in funzione della posizione particellare ne esiste un'altra per raccogliere le informazioni attorno alla particella.

Nel valutare la velocità del fluido nella direzione orizzontale x , bisogna tener conto delle celle traslate di $\Delta x/2$ ed illustrate in figura 2-IX. Anche tali celle, traslate lungo l'asse x , sono state suddivise tra i processi, con medesimi indici: il p -esimo processo conterrà fino alla cella traslata di indice $(p+1) \cdot Mr+1$, spostata di mezza cella in avanti rispetto alla cella centrata per la fase solida. Le celle traslate lungo l'asse y non comportano problemi di indicizzazione in termini di parallelizzazione. Le due funzioni di distribuzione e raccolta delle informazioni possono, quindi, operare indifferentemente su celle centrate o traslate.

Come detto nel precedente paragrafo, si suppone che ogni processo contenga, anche in corrispondenza dei bordi delle celle traslate lungo l'asse x , informazioni inerenti la velocità del fluido. Usando un'equazione simile alla (2.10) sarà, quindi possibile raccogliere dalle celle interessate, nell'intorno di una particella, i valori della velocità del fluido nella sua componente orizzontale, senza rischio di attingere a variabili sconosciute al processo. Il problema non si pone neanche se si considera la componente

verticale, in quel caso non si attingerà mai ad informazioni oltre i confini del processo corrente.

Altre variabili necessarie al calcolo della forza di drag sono il diametro medio, il grado di vuoto e la frazioni volumetriche delle specie solide: esse devono essere calcolate nell'intorno della particelle su cui il ciclo si è fermato. Tutte le variabili citate sono calcolabili, nell'intorno della singola particella, se si conosce il volume delle diverse specie nella cella di appartenenza ed in quelle viciniori, raccogliendo come già detto queste informazioni in base alla posizione particellare. Questo volume è frutto della funzione di distribuzione che ha operato al passo temporale precedente, o analogamente si può dire opererà in questa fase prima del calcolo della fase fluida, allorché sarà necessario ottenere un grado di vuoto aggiornato. Il punto quindi consta nel fatto che per il momento di ipotizza ogni processo conosca il volume delle specie anche in corrispondenza delle celle di bordo, in maniera tale da poter calcolare le variabili, citate in precedenza, da passare alla subroutine che si occupa del calcolo della forza di drag sulla singola particella; bisognerà poi ricordarsi che il volume distribuito nelle celle di bordo è un valore che va aggiornato tramite scambio di messaggi tra i processi adiacenti.

Una volta calcolato la forza di drag sulla particella, essa deve distribuire, con la funzione di distribuzione dei pesi, in base alla sua posizione nella cella di appartenenza, la componente verticale e quella orizzontale della forza stessa. La componente orizzontale va distribuita sulle celle traslate in direzione x , quella verticale sulle celle traslate in direzione y . Quando il ciclo sulle particelle sarà terminato sarà possibile conoscere, come frutto della sommatoria del contributo di ogni singola particella del dominio, il termine S_d . Ancora una volta le particelle confinanti col processo adiacente scaricheranno su celle al di fuori del dominio corrente i loro contributi di forza di drag. Questi contributi rappresentano uno dei messaggi che il processo deve scambiare con

quelli adiacenti, per mantenere aggiornato il valore della forza agente sul fluido nelle celle di confine.

- ***Composizione delle forze***

Come richiesto dal metodo DEM, calcolate le diverse tipologie di forze, ogni processo deve comporle su ogni particella del dominio con un ciclo che spazzi gli indici della clear list. È in questo preciso momento che ogni processo deve considerare l'additional forces list sul lato destro e su quello sinistro, in maniera tale, come già spiegato, da mantenere aggiornata la forza scaturita dall'urto sulle particelle appartenenti al bordo. Si conosce adesso al tempo $t+\Delta t$ la forza totale agente su ogni singola particella. Si può accedere alla seconda parte della formula di Verlet, e quindi al calcolo della velocità delle particelle al tempo $t+\Delta t$, valore che sarà utilizzato al passo temporale successivo per valutare gli effetti degli urti ad esempio.

- ***Calcolo del grado di vuoto***

Ci si appresta al calcolo della fase fluida, ma prima che questo avvenga è necessario valutare il grado di vuoto dovuto alla nuova disposizione particellare al tempo intermedio. Come detto ciò avviene mediante la funzione di distribuzione dei volumi delle singole particelle, pesati mediante la loro posizione spaziale. Come ci si era ripromessi nelle considerazioni fatte in precedenza, del volume distribuito oltre i confini effettivi del processo, devono essere informati, tramite messaggi, i processi adiacenti.

- ***Preparazione al SIMPLE***

Il codice non esegue, come la figura 6-IV, lascia intendere la parte riguardante la risoluzione del fluido ad ogni iterazione. In effetti il Δt particellare è spesso molto piccolo, ciò che induce, anche per motivi di onere computazionale di usare un Δt della fase fluida che ne sia un multiplo. Qualora si sia raggiunto il tempo necessario al

calcolo della fase fluida, risulta importante passare le variabili necessarie al processo 0 affinché esso possa procedere all'esecuzione del SIMPLE.

In pratica le variabili passate sono: il nuovo grado di vuoto appena calcolato, e l'azione delle particelle sul fluido nelle sue componenti orizzontale e verticale. Tutti questi valori sono riferiti non già al tempo t , ma a quello $t+\Delta t$.

Successivamente al calcolo della fase fluida, il processo 0, e ciò si era anticipato in precedenza nelle considerazioni effettuate sul galleggiamento, deve ridistribuire alcune variabili ai vari processi ed ai loro bordi esterni: tra queste variabili la densità, la pressione relativa e le componenti orizzontali e verticali del campo di moto fluido.

- ***Eventuale stampa***

Come illustrato in figura 6-IV, il codice a questo punto si chiede se è tempo di stampa. Qualora questo sia vero, tutti i processi debbono inviare i dati necessari affinché quello 0 possa scrivere sui file binari, sia quelli necessari alla ripartenza dopo arresto, sia quelli contenenti la storia delle posizioni particellari e quella del campo di moto fluido. Queste variabili sono molte di più di quelle necessarie al calcolo del fluido, e ciò influisce sull'onere finale di calcolo.

In ogni modo si passa al tempo successivo reiterando.

Capitolo 7

Convalida e prestazioni del codice parallelo

Questo capitolo contiene il risultato fornito da una serie di prove in cui si è utilizzato il codice parallelo al fine di ottenere una sua convalida ed una misura delle prestazioni ottenibili su architetture parallele. Si sono confrontati i risultati forniti dalle simulazioni effettuate da codice parallelo con quelli ottenuti mediante il codice seriale per verificare che entrambe le versioni forniscano i medesimi risultati. Inoltre si è effettuato un test, su alcune configurazioni di partenza ad elevato numero di particelle, dello speedup ottenibile con la nuova versione del codice nella sua parte DEM.

7.1 Verifica della validità del codice e speedup

Si ricorda che il codice è stato modificato solo nella sua parte DEM, quindi essenzialmente nella parte che riguarda la risoluzione Lagrangiana della fase solida. Il primo problema che ci si è posti è stato quello di verificare che il codice parallelizzato fornisca gli stessi risultati di quello seriale quando applicato su una medesima configurazione. Per effettuare tale confronto si sono scelte alcune fra i sistemi e le prove già analizzati nel capitolo 5.

Sono state poi effettuati dei test per verificare lo speedup ottenuto.

7.2 Speedup del codice parallelo

Un raffronto tra le velocità di esecuzione del codice, quando questo sia eseguito da 1, 2 o più processi, risente della condizione iniziale da cui esso viene fatto partire. La condizione ideale è ovviamente quella che, dalla suddivisione in aree a strisce verticali del dominio, intercetti un numero equidistribuito di particelle fra i vari processi; questo per evitare un carico computazionale disomogeneo fra i vari thread. Tutto ciò è possibile solo partendo da una configurazione in cui le particelle siano perfettamente ordinate; questo caso, però, sarebbe poco significativo dal punto di vista dell'uso cui nella realtà operativa sarà destinato il codice, ovvero distribuzione particellare casuale (frutto dell'interazione con la fase fluida) e sistemi per lo più bidispersi.

Altro aspetto importante riguarda il tipo di sistema da sottoporre a simulazione mediante il codice: si può partire, infatti, da un sistema con le sole particelle solide in caduta o si può anche prevedere la presenza del fluido, la cui risoluzione in griglia euleriana CFD è rimasta di tipo seriale e che interagisce, come detto, con la parte DEM dell'algoritmo di simulazione. L'esecuzione della risoluzione CFD impiega, in media, gli stessi tempo, sia nel codice seriale che in quello parallelizzato. Si rende necessario,

dunque, nel caso di presenza del fluido, scorporare la parte seriale del codice dai tempi di esecuzione, in maniera tale da rendere confrontabili col codice originario i tempi necessari alla simulazione.

Ultimo aspetto, tutt'altro che secondario, riguarda l'hardware a disposizione su cui effettuare le prove: l'architettura, la quantità di memoria, la velocità dei processori in uso, la rete di interconnessione, il software MPI e quello di compilazione del codice Fortran, influenzano in maniera significativa le prestazioni ed i tempi di calcolo.

7.2.1 Hardware a disposizione

Le macchine a disposizione per l'effettuazione delle prove sono state essenzialmente di due tipi. Ci si è dotati di un cluster a 4 nodi DELL™ PE1950, ognuno dual Quad-Core Xeon X5365, 3.0GHz/2x4MB, per un totale di 8 unità di calcolo (core) a nodo e 32 core totali. L'interconnessione tra i nodi è garantita tramite rete dual fast ethernet. Il sistema operativo è Red Hat Enterprise Linux, con MPICH2 e compilatore Intel® Fortran 10.1.012 Free per Linux.

Alcune prove sono state, invece, effettuate su macchina con sistema operativo Microsoft Windows XP Professional x64, 4Gb DDR2, Quad-Core AMD Phenom II X4 940, compilatore commerciale Intel® Fortran 10.0.025 per Windows x64.

7.2.2 Prove effettuate e confronto dei tempi di calcolo

Si è deciso di operare un confronto dei risultati tra il codice seriale e quello parallelo a partire dal sistema [C] di Moritomi et al. (1982), nelle condizioni di 12 mm/s rappresentate in figura 5-XXV-(b). I dati della simulazione sono raccolti nella tabella 5-vi, rispetto alla quale si può ancora aggiungere che il rapporto tra Δt della fase fluida rispetto a quello della fase solida è di 16: ciò significa che ogni 16 iterazioni per la fase solida si risolve la fase fluida; questa modalità di risoluzione, come discusso in precedenza, permette un risparmio notevole sui tempo di calcolo.

Questo confronto preliminare, in cui non sono importanti i tempi di calcolo, ma i risultati della simulazione, è stato operato su macchina AMD Phenom II. Un primo confronto è stato operato sulla risoluzione della sola fase solida distribuendo l'onere del calcolo su due processi: si sono eseguite 1000 iterazioni, corrispondenti a $2 \cdot 10^{-3}$ s di simulazione, verificando che avvenissero casi particolari come ad esempio il passaggio di alcune particelle da un processo ad un altro o che particelle appartenenti a processi differenti dessero origine ad urti fra loro. Alla fine della prova si sono confrontati i file binari, contenenti la storia delle posizioni e delle velocità particellari, prodotti dal codice seriale e da quello parallelo.

Il confronto, in doppia precisione, dei dati binari ha fornito esito positivo, verificando che i valori erano identici fra loro. Si è verificato, inoltre, che la velocità del codice parallelo nella prova appena menzionata era circa 1.95 volte quella del codice seriale, il che rappresenta un risultato ottimo. Si operato anche con 3 processi, ottenendo anche in questo caso identici risultati rispetto al caso seriale nel confronto operato sui file binari, ma quasi nessun vantaggio in termini di velocità della prova.

Nella prova in questione si è poi deciso di inserire anche la risoluzione della fase fluida. Si sono eseguite 20 iterazioni per la fase fluida, corrispondenti ad $6.4 \cdot 10^{-4}$ s ed 320 iterazioni per la fase solida. Si è operato un confronto tra i file binari per il solido e per il fluido generati dal codice seriale e quelli generati col codice parallelo con 2 e 3 processi. Il confronto ha fornito ancora una volta risultati positivi ed in figura 7-I sono state indicate le stampe a schermo prodotte dai codici nella versione parallela e seriale. Le stampe sono identiche e, con 2 processori, proseguendo la prova fino ad 1 s di simulazione, in modo da renderla indipendente dalla condizione iniziale, si è ottenuto una velocità pari ad 1.4 volte quella del codice seriale: ovviamente andrebbero scorporati i tempi necessari al calcolo (seriale) della fase fluida.

Per ottenere dati significativi nel confronto dello speedup si è pensato ad una prova con un numero molto elevato di particelle.

(a)

```

3.200E-04 Ep=2.2020117E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.722E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.445E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 16 s; Residuo: 16 s; Totale: 33 s
3.520E-04 Ep=2.2020122E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.337E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.445E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 19 s; Residuo: 15 s; Totale: 34 s
3.840E-04 Ep=2.2020127E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.374E-09 Ee=3.442E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 20 s; Residuo: 13 s; Totale: 34 s
4.160E-04 Ep=2.2020132E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.377E-09 Ee=1.047E-11 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 22 s; Residuo: 12 s; Totale: 35 s
4.480E-04 Ep=2.2020136E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.378E-09 Ee=2.435E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 24 s; Residuo: 10 s; Totale: 35 s
4.800E-04 Ep=2.2020141E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.377E-09 Ee=1.825E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 26 s; Residuo: 8 s; Totale: 35 s
5.120E-04 Ep=2.2020146E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.376E-09 Ee=3.085E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 28 s; Residuo: 7 s; Totale: 35 s
5.440E-04 Ep=2.2020150E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.611E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 29 s; Residuo: 5 s; Totale: 35 s
5.760E-04 Ep=2.2020155E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.495E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 31 s; Residuo: 3 s; Totale: 35 s
6.080E-04 Ep=2.2020160E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.412E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 33 s; Residuo: 1 s; Totale: 35 s
6.400E-04 Ep=2.2020165E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.374E-09 Ee=2.529E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 35 s; Residuo: 0 s; Totale: 35 s

```

(b)

```

3.200E-04 Ep=2.2020117E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.722E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.445E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 22 s; Residuo: 22 s; Totale: 45 s
3.520E-04 Ep=2.2020122E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.337E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.445E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 25 s; Residuo: 20 s; Totale: 46 s
3.840E-04 Ep=2.2020127E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.374E-09 Ee=3.442E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 27 s; Residuo: 18 s; Totale: 46 s
4.160E-04 Ep=2.2020132E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.377E-09 Ee=1.047E-11 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 29 s; Residuo: 15 s; Totale: 45 s
4.480E-04 Ep=2.2020136E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.378E-09 Ee=2.435E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 31 s; Residuo: 13 s; Totale: 45 s
4.800E-04 Ep=2.2020141E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.377E-09 Ee=1.825E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 34 s; Residuo: 11 s; Totale: 45 s
5.120E-04 Ep=2.2020146E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.376E-09 Ee=3.085E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 36 s; Residuo: 9 s; Totale: 45 s
5.440E-04 Ep=2.2020150E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.611E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 38 s; Residuo: 6 s; Totale: 45 s
5.760E-04 Ep=2.2020155E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.495E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 40 s; Residuo: 4 s; Totale: 44 s
6.080E-04 Ep=2.2020160E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.375E-09 Ee=1.412E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 42 s; Residuo: 2 s; Totale: 44 s
6.400E-04 Ep=2.2020165E-04 Ec=2.195E-07 Er=6.374E-09 Ee=2.529E-12 Et= 2.204E-04 uIn= 1.200E-02 DP= 1.444E+03
Tempi di calcolo. Trascorso: 44 s; Residuo: 0 s; Totale: 44 s

```

Fig. 7-I: Convalida del codice parallelo. Le figure e mostrano rispettivamente i dati stampati a schermo della medesima prova (solido e fluido entrambi presenti) effettuata con 2 processori (a) e con 1 (b). Si nota che i dati stampati sono identici. Ogni stampa contiene sulla prima linea il tempo simulato [s], le energie [J] potenziale, cinetica, rotazionale, elastica e totale, la velocità superficiale del fluido in ingresso [m/s], la differenza totale di pressione [Pa]; sulla seconda riga il tempo di calcolo [s] trascorso, residuo e totale stimati.

Tab. 7-i: Simulazione mediante codice parallelo. Per il sistema di Moritomi et al. (1982), le colonne della tabella contengono nell'ordine la lunghezza e la profondità del sistema, il numero di celle considerato lungo le direzioni x, y e z, il numero di particelle per ognuna delle due specie, il rapporto d'aspetto a letto fisso, il rapporto tra le dimensioni del passo di griglia lungo i tre assi ed il diametro massimo particellare, il passo temporale di integrazione per la fase solida e quello per la fase fluida.

L / B [mm]	$M_x / M_y / M_z$	Ms_1 / Ms_2	$\frac{H_{\text{letto}}}{L}$	$\frac{\Delta x}{D_2} / \frac{\Delta y}{D_2} / \frac{\Delta z}{D_2}$	Δt [s]	Δt [s]
16.800 / 1.600	24 / 125 / 1	97643 / 1857	1.20	1.55 / 1.55 / 2.06	$2.0 \cdot 10^{-6}$	$3.2 \cdot 10^{-5}$

7.3 Confronto dello speedup

I dati della simulazione effettuata sono disponibili in tabella 7-i. Si è scelto di operare con un sistema ad ampia popolazione particellare, bidisperso del tipo di quello analizzato in precedenza di Moritomi et al. (1982). La prova è stata condotta su cluster Xeon, operando col codice seriale in confronto a quello parallelo distribuito rispettivamente su 2, 4 ed 8 processi.

Si sono simulati 0.3 s, sufficienti a coprire un arco temporale nel quale si ritiene possano essere osservate un numero rappresentativo di configurazioni della fase solida. Si è operato in presenza della sola fase solida ed i risultati della prova sono indicati in figura 7-II-(a). Si osserva che i tempi parziali di calcolo, registrati nel passaggio tra una stampa e l'altra, del codice parallelo distribuito su due processi scalano di un rapporto che oscilla tra 1.8 e 2.2 rispetto a quello seriale.

La figura 7-II-(b) mostra gli speedup frutto del rapporto delle pendenze delle rette interpolanti i punti ottenuti attraverso il codice seriale e quello parallelo. Con due processi ($Mc = 2$) si registra uno speedup di 1.94; per $Mc = 4$ si ottiene uno speedup medio di 3.55 rispetto al codice seriale. Per $Mc = 8$ di 4.08 rispetto al seriale.

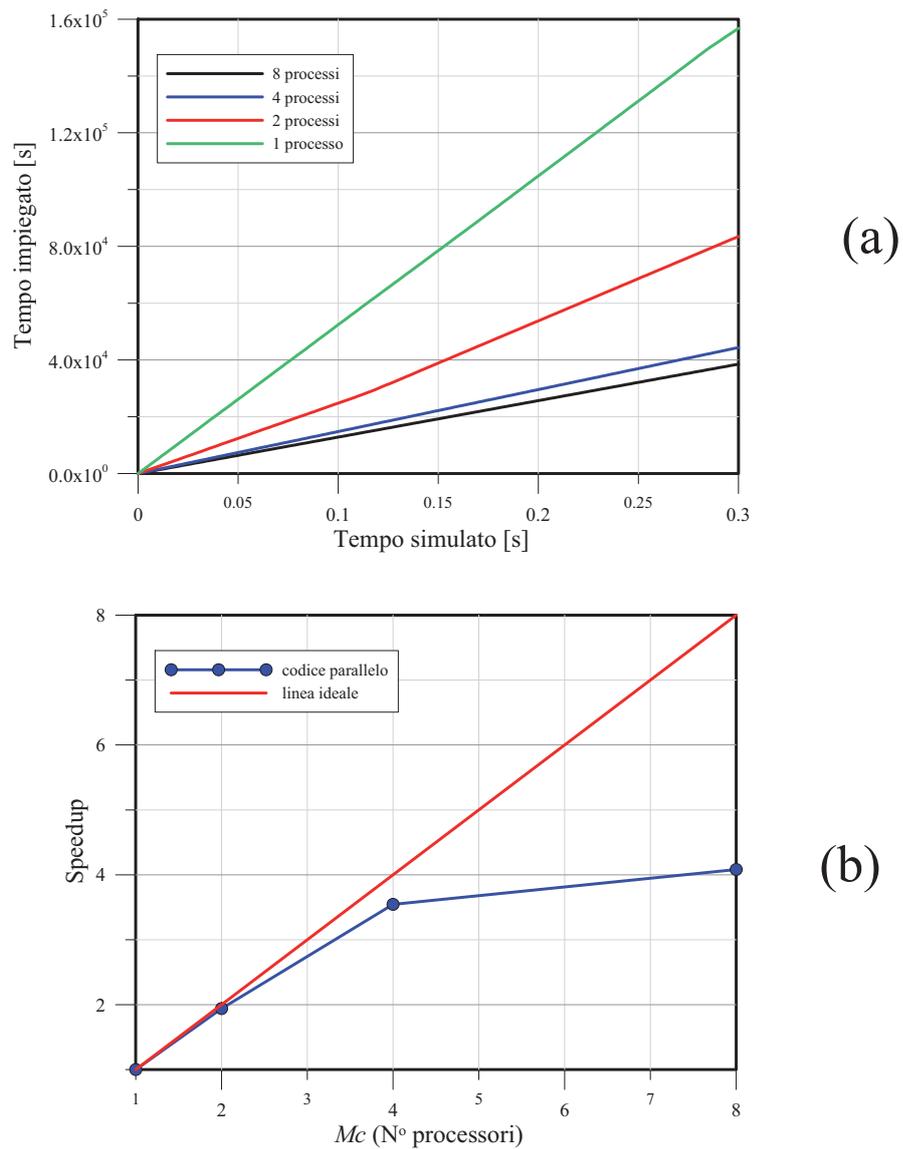


Fig. 7-II: Prestazioni del codice parallelo. La figura (a) mostra in ascisse il tempo simulato ed in ordinate il tempo di CPU necessario al codice per elaborare i dati. Sono messi a confronto il tempo necessario alla simulazione attraverso il codice seriale con quelli richiesti dal codice parallelo distribuito su 2, 4 ed 8 processi. La figura (b) mostra lo speedup al variare di Mc .

A partire dalla stessa prova si è indicato al codice di risolvere anche il campo di moto fluido per una velocità di 2 mm/s, utilizzando un tempo di integrazione per il fluido 5 volte superiore a quello del solido. Dopo 10^{-4} s di simulazione, corrispondenti a 50 passi per il solido e 10 per il fluido, lo speedup, rispettivamente per 2 e 4 processi, è stato pari

a 1.59 ed 2.66. Intervenendo sul codice in maniera tale da scorporare i tempi del calcolo della parte CFD seriale, per la medesima prova, con $Mc = 2$ si è ottenuto uno speedup di 1.70 e con $Mc = 4$ di 2.81.

Si può concludere che il codice parallelo scala in maniera ottimale fino al limite di 8 processi nella configurazione inerente il caso di solo solido presente nel sistema. In presenza della fase fluida il vantaggio risulta accettabile e, comunque, non giudicabile in assoluto essendo i risultati fortemente dipendenti dalla configurazione iniziale del sistema.

CONCLUSIONI

CONCLUSIONI

Le apparecchiature dell'industria farmaceutica, petrolchimica ed alimentare, quelle finalizzate alla produzione dei materiali ceramici e dei cementi, fanno uso di solidi particellari, spesso in flussi multifase. La modellazione dei solidi particellari risulta difficoltosa per la peculiarità del loro comportamento, ma nel campo dell'ingegneria chimica risulta di fondamentale importanza la comprensione dei meccanismi che regolano le interazioni fluido-solido. Una delle più rilevanti conseguenze che il contatto fluido-solido determina è la "forza di drag", ovvero l'azione che un letto di particelle solide ed un fluido che si insinua attraverso esso si scambiano reciprocamente, causa delle perdite di carico nelle singole apparecchiature. Storicamente, gli studi in letteratura basati su un approccio macroscopico, hanno condotto ad una libreria di equazioni finalizzate al calcolo della forza di drag e rese disponibili al progettista; mentre recenti lavori, sfruttando il miglioramento delle prestazioni dei calcolatori, adottano strategie legate alla risoluzione numerica di modelli matematici; queste ultime si differenziano a seconda della scala dimensionale di indagine e permettono di meglio comprendere le fenomenologie dell'interazione fra le fasi.

In questo lavoro di tesi, si è scelto di analizzare il problema del flusso multifase in cui sia disperso un solido con diametri particellari polidistribuiti attraverso un approccio microscopico e computazionale agente su scala poco più che particellare. Questa tipologia di indagine, agendo su una scala che ignora quanto accade negli interstizi particellari, richiede di trarre dall'intorno della singola particella oggetto di indagine informazioni inerenti lo scambio di quantità di moto col fluido interagente. Per perseguire questo obiettivo si è ricorso a dati di letteratura inerenti simulazioni che analizzano l'interazione fluido-solido su scala molecolare. Si è, dunque, partiti da dati di simulazioni dettagliate LBM inerenti l'interazione fluido-solido in un cluster di particelle distribuite in maniera casuale e di diametro mono- o polidisperso: i dati permettono di valutare la forza media di interazione che agisce a livello microscopico su ognuna delle specie particellari coinvolte. Da considerazioni teoriche si è determinata la

forma analitica del nuovo modello, poi sottoposto a regressione per determinarne i parametri. Si è operato in due fasi di indagine consecutive e concettualmente contigue: nella prima si è ricavata una correlazione per la previsione della forza di drag in sistemi monodispersi e, nella seconda fase, si è definita una strategia per specificizzare la forza media agente in un cluster di particelle polidisperse su ogni singola specie solida.

Il nuovo modello, per sistemi monodispersi, è stato ideato partendo da considerazioni critiche su quelli presenti in letteratura per ottenere, mediante regressione dei dati cui precedentemente si è fatto riferimento, una correlazione valida in un ampio range dei regimi fluidodinamici e del grado di vuoto. Si è dimostrato che il modello per sistemi monodispersi proposto, oltre a possedere un'elevata accuratezza nel dominio $\varepsilon-Re$ dei dati LBM, conserva validità sia nei casi estremi di moto intorno ad una singola particella, che nei casi con grado di vuoto molto basso che possono verificarsi nella fluidizzazione, mostrando un ottimo accordo con le correlazioni teoriche presenti in letteratura. Accade, infatti, che nei punti in cui mancano dati di simulazioni LBM, ovvero ad alta o bassa concentrazione solida, il modello proposto segue rispettivamente i valori della correlazione di Fand et al. (1987) e di quella di Di Felice (1994), per i valori di Reynolds in cui esse sono state ricavate. La forma analitica del nuovo modello, ovvero polinomiale, rende la valutazione della forza di drag anche semplice a livello computazionale e, conseguentemente, di basso onere di calcolo. Ciò rende la nuova correlazione facilmente implementabile nel codice DEM-CFD scelto come strumento di analisi microscopico-computazionale dell'interazione multifase.

Si è poi estesa la validità del nuovo modello (NM) anche a casi di sistemi che presentino polidispersione dei diametri particellari. L'approccio è già stato perseguito da Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b), ma si è introdotto un nuovo parametro che descrive più accuratamente la distribuzione dei diametri delle specie solide in cui una singola particella si trova immersa. L'uso di questo parametro (y_m) permette di dedurre la forma del modello direttamente da

CONCLUSIONI

considerazioni teoriche, e non solo da correzioni basate esclusivamente su regressione statistica dei dati. La derivazione teorica conferisce alla correlazione validità generale ed applicabilità ai casi monodispersi o di sistemi estremamente diluiti.

La strategia di calcolo della forza di interazione fluido-solido sintetizza le due fasi precedentemente descritte: difatti, per prima cosa si definisce una distanza caratteristica o, per meglio dire, un volume di controllo di dimensioni opportune, all'interno del quale valutare il diametro medio particellare fra le specie solide presenti. Si valuta, attraverso il modello monodisperso, la forza media di drag, ovvero la forza di cui risentirebbe l'azione una particella di diametro pari a quello medio di Sauter immersa in un sistema di pari grado di vuoto e medesima velocità superficiale. A questo punto interviene la nuova correlazione per il calcolo del drag in sistemi polidispersi: si specifica la forza agente su ognuna delle specie solide coinvolte attraverso l'uso di opportuni coefficienti, a loro volta funzione del grado di vuoto del sistema e del grado di polidispersione generale dello stesso.

Il modello proposto, derivato da considerazioni teoriche del tutto generali, ma basato su dati LBM validi solo per sistemi bidispersi, è stato testato anche nella previsione della forza di drag agente su una singola specie quando questa si trovi immersa in un sistema con solido a più di due diametri differenti. Dal confronto con dati LBM si è concluso che il NM riesce a conservare ottima validità anche in caso di polidispersione, in distribuzioni log-normali o Gaussiane in cui sia possibile individuare fino a 10 classi di diametri fra i solidi presenti.

Si è voluto, in seguito, testare il modello proposto anche mediante un suo uso a livello macroscopico, nel caso particolare del fenomeno dell'inversione, determinato, appunto, prevalentemente dalla forza di drag. Si è inserita la correlazione proposta in modelli macroscopici di letteratura per la previsione del punto critico di inversione: i risultati possono ritenersi incoraggianti.

Come detto il modello proposto è stato pensato e analiticamente costruito al fine di essere implementato in un codice DEM-CFD, in maniera tale da essere richiamato come tool di calcolo laddove sia richiesto il valore della forza di interazione fluido-particella. Il suo percorso di validazione ha trovato, quindi, naturale approdo nella simulazione DEM-CFD di sistemi di letteratura che presentassero la fenomenologia dell'inversione. Anche in questo caso il confronto, nei tre casi studiati, con le velocità critiche e con le altezze sperimentali in colonna delle singole specie e quelle della fase miscelata, ha mostrato un ottimo accordo e la validità del nuovo modello

In contemporanea, durante tutto il lavoro di ricerca, ci si è occupati, visto l'elevato onere di calcolo che scaturisce dalla simulazione di sistemi quanto più realistici, anche della parallelizzazione del codice DEM-CFD. La parallelizzazione ha riguardato la parte DEM del codice, quella Lagrangiana, facendo in modo che l'onere computazionale venisse distribuito su più processi, ognuno dei quali si occupa del calcolo di una frazione dell'intera popolazione particellare. Il codice parzialmente parallelizzato è stato testato al fine di convalidarne i risultati, ma anche di saggiarne lo speedup: le prove hanno mostrato una significativa riduzione dei tempi di calcolo, soprattutto a basso numero di CPU impegnate.

CONCLUSIONI

Appendice A

REGRESSIONE CON I DATI LBM

Tab. A-i: Confronto tra i dati LBM VBK ed i vari modelli.

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) con i valori di forza adimensionale di puro drag previsti dai modelli NM, VBK e HKL. Sono indicati, quando forniti dagli autori, anche gli errori Δf rispetto alla forza media risultante dalle simulazioni.

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.400	1.0000E-03	38.85	0.33	38.40	37.85	37.50
0.400	2.1000E+01	48.47	0.35	49.64	48.13	47.83
0.400	3.0600E+01	54.62	0.45	54.94	53.96	52.56
0.400	1.0490E+02	96.87	1.78	94.45	92.13	89.11
0.400	1.5310E+02	121.37	1.70	118.75	114.56	112.83
0.400	2.0990E+02	147.33	2.96	146.18	140.11	140.78
0.400	3.0630E+02	189.70	2.57	190.07	182.22	188.21
0.400	4.1980E+02	234.54	3.06	238.10	230.59	244.05
0.400	6.1250E+02	306.62	3.49	312.71	310.89	338.87
0.400	1.0494E+03	455.85	5.88	467.66	488.29	553.83
0.450	1.0000E-03	27.40	0.24	27.52	27.59	27.16
0.450	2.1000E+01	34.43	0.46	35.31	35.46	33.97
0.450	1.0494E+03	333.62	6.72	340.50	360.68	367.44
0.500	1.0000E-03	20.10	0.22	20.26	20.52	20.00
0.500	2.1000E+01	25.51	0.29	26.03	26.72	24.81
0.500	1.0490E+02	48.70	0.57	49.39	51.75	44.01
0.500	2.0990E+02	74.81	0.67	77.32	79.03	68.05
0.500	4.1990E+02	123.82	1.89	129.46	130.18	116.13
0.500	6.1250E+02	164.29	1.90	173.53	175.33	160.22
0.500	1.0494E+03	255.40	2.83	263.32	274.75	260.23
0.550	1.0000E-03	15.45	0.13	15.24	15.48	14.88
0.550	1.0494E+03	210.81	2.83	210.38	214.22	194.86

Continua alla pagina seguente

Tab. A-i: continua dalla pagina precedente.

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.600	1.0000E-03	11.97	0.12	11.66	11.81	11.11
0.600	2.1000E+01	16.13	0.20	15.28	15.93	13.95
0.600	1.0490E+02	31.92	0.42	29.78	31.58	25.29
0.600	2.0990E+02	49.54	0.69	47.35	48.67	39.48
0.600	4.2000E+02	83.11	1.30	80.93	80.55	67.87
0.600	6.1250E+02	108.73	1.65	110.08	108.54	93.88
0.600	1.0494E+03	164.74	3.25	171.41	170.00	152.92
0.650	1.0000E-03	8.90	0.14	9.04	9.08	8.43
0.700	1.0000E-03	7.22	0.06	7.08	7.02	6.61
0.700	2.1000E+01	10.19	0.16	9.61	9.91	8.58
0.700	1.0490E+02	20.70	0.33	19.32	20.24	16.48
0.700	2.0990E+02	32.72	0.48	31.06	31.54	26.36
0.700	1.0494E+03	110.05	2.20	116.56	110.97	105.38
0.800	1.0000E-03	4.25	0.07	4.40	4.19	4.17
0.800	2.1000E+01	6.24	0.09	6.29	6.30	5.69
0.800	1.0490E+02	13.02	0.17	12.87	13.32	11.75
0.800	2.0990E+02	20.75	0.29	20.64	20.99	19.33
0.800	1.0494E+03	77.31	1.05	77.81	74.28	79.94
0.900	1.0000E-03	2.44	0.04	2.63	2.43	2.54
0.900	2.1000E+01	3.95	0.05	4.16	3.99	3.75
0.900	1.0490E+02	8.37	0.12	8.40	8.81	8.57

Tab. A-ii: Confronto tra i dati LBM, HKL ed i vari modelli.

Confronto tra i dati di letteratura LBM selezionati di Hill et al. (2001a e 2001b) con i valori di forza adimensionale di puro drag previsti dai modelli NM, VBK e HKL. Sono indicati, quando forniti dagli autori, anche gli errori Δf rispetto alla forza media risultante dalle simulazioni.

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.359	0.001	50.62	0.022	51.77	50.02	49.74
0.359	0.010	50.62		51.77	50.02	49.74
0.359	0.100	50.62		51.78	50.02	49.81
0.359	1.000	50.66		52.17	50.04	50.47
0.359	1.500	50.71		52.49	50.07	50.84
0.359	2.000	50.77		52.83	50.13	51.21
0.359	2.500	50.86		53.19	50.20	51.57
0.359	3.000	50.97		53.56	50.31	51.94
0.359	3.500	51.09		53.93	50.44	52.31
0.359	4.000	51.24		54.31	50.59	52.68
0.359	4.500	51.40		54.69	50.78	53.04
0.359	5.000	51.59		55.07	50.98	53.41
0.367	0.000	47.34	0.003	48.74	47.29	47.00
0.380	0.001	41.42		44.28	43.25	42.94
0.380	0.010	41.42		44.28	43.25	42.94
0.380	0.100	41.42		44.29	43.25	43.00
0.380	1.000	41.50		44.62	43.27	43.53
0.411	0.001	34.48		35.59	35.23	34.87
0.411	0.010	34.48		35.59	35.23	34.87
0.411	0.100	34.48		35.60	35.23	34.91
0.411	1.000	34.54		35.85	35.25	35.31
0.411	1.500	34.62		36.06	35.28	35.54
0.411	2.000	34.73		36.28	35.34	35.76

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.411	2.500	34.87		36.52	35.41	35.98
0.411	3.000	35.04		36.76	35.50	36.21
0.411	3.500	35.24		37.01	35.61	36.43
0.411	4.000	35.47		37.25	35.74	36.65
0.411	4.500	35.73		37.50	35.89	36.88
0.411	5.000	36.02		37.75	36.06	37.10
0.411	6.000	36.69		38.26	36.44	37.54
0.411	7.000	37.49		38.77	36.88	37.99
0.411	8.000	38.42		39.27	37.36	38.44
0.411	9.000	39.46		39.78	37.88	38.88
0.432	0.001	31.62		30.92	30.83	30.44
0.432	0.010	31.62		30.92	30.83	30.44
0.432	0.100	31.62		30.92	30.83	30.47
0.432	1.000	31.66		31.14	30.85	30.81
0.432	1.500	31.71		31.32	30.89	31.00
0.432	2.000	31.77		31.51	30.94	31.18
0.432	2.500	31.86		31.71	31.01	31.37
0.432	3.000	31.96		31.92	31.09	31.56
0.432	3.500	32.08		32.13	31.20	31.74
0.432	4.000	32.22		32.34	31.32	31.93
0.432	4.500	32.38		32.55	31.46	32.12
0.432	5.000	32.55		32.77	31.62	32.30
0.432	6.000	32.96		33.20	31.97	32.68
0.432	7.000	33.45		33.63	32.37	33.05
0.432	8.000	34.01		34.07	32.80	33.42
0.432	9.000	34.64		34.50	33.27	33.80

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.453	0.001	27.23		27.00	27.09	26.66
0.453	0.010	27.23		27.00	27.09	26.66
0.453	0.100	27.23		27.00	27.09	26.69
0.453	1.000	27.27		27.19	27.11	26.97
0.453	1.500	27.32		27.34	27.14	27.13
0.453	2.000	27.40		27.51	27.19	27.29
0.453	2.500	27.49		27.68	27.26	27.45
0.453	3.000	27.61		27.86	27.34	27.61
0.453	3.500	27.75		28.04	27.44	27.77
0.453	4.000	27.91		28.23	27.56	27.92
0.453	4.500	28.09		28.41	27.69	28.08
0.453	5.000	28.30		28.60	27.84	28.24
0.453	6.000	28.77		28.97	28.16	28.56
0.453	7.000	29.33		29.35	28.52	28.87
0.453	8.000	29.97		29.73	28.92	29.19
0.453	9.000	30.70		30.10	29.34	29.51
0.453	10.000	31.52		30.48	29.77	29.83
0.453	12.000	33.41		31.24	30.67	30.46
0.526	0.001	17.73		17.43	17.69	17.13
0.526	0.010	17.73		17.43	17.69	17.13
0.526	0.100	17.73		17.43	17.69	17.15
0.526	1.000	17.75		17.56	17.72	17.33
0.526	1.500	17.79		17.66	17.75	17.43
0.526	2.000	17.84		17.77	17.80	17.52
0.526	2.500	17.90		17.89	17.86	17.62
0.526	3.000	17.97		18.00	17.94	17.72

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.526	3.500	18.06		18.12	18.03	17.82
0.526	4.000	18.16		18.24	18.12	17.91
0.526	4.500	18.28		18.37	18.23	18.01
0.526	5.000	18.41		18.49	18.35	18.11
0.526	6.000	18.71		18.74	18.60	18.31
0.526	7.000	19.06		18.98	18.87	18.50
0.526	8.000	19.47		19.23	19.16	18.70
0.526	9.000	19.93		19.48	19.46	18.89
0.587	0.001	12.62	2.792	12.48	12.66	11.99
0.587	0.010	12.62		12.48	12.66	11.99
0.587	0.100	12.62		12.48	12.66	12.00
0.587	1.000	12.65		12.58	12.69	12.13
0.587	1.500	12.69		12.66	12.73	12.20
0.587	2.000	12.75		12.75	12.78	12.27
0.587	2.500	12.82		12.84	12.84	12.34
0.587	3.000	12.90		12.92	12.91	12.42
0.587	3.500	13.00		13.02	12.98	12.49
0.587	4.000	13.12		13.11	13.07	12.56
0.587	4.500	13.25		13.20	13.16	12.63
0.587	5.000	13.40		13.29	13.26	12.70
0.592	0.001	12.14		12.16	12.33	11.64
0.592	0.010	12.14		12.16	12.33	11.64
0.592	0.100	12.14		12.16	12.33	11.66
0.592	1.000	12.16		12.26	12.36	11.78
0.592	1.500	12.20		12.34	12.39	11.85
0.592	2.000	12.25		12.42	12.44	11.92

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.592	2.500	12.31		12.50	12.50	11.99
0.592	3.000	12.39		12.59	12.57	12.06
0.592	3.500	12.48		12.68	12.65	12.13
0.592	4.000	12.59		12.77	12.73	12.20
0.592	4.500	12.71		12.86	12.82	12.27
0.592	5.000	12.85		12.95	12.92	12.34
0.592	6.000	13.16		13.14	13.12	12.48
0.592	7.000	13.53		13.32	13.34	12.62
0.592	8.000	13.95		13.51	13.56	12.76
0.592	9.000	14.44		13.69	13.79	12.90
0.710	0.001	6.64	0.021	6.75	6.66	6.30
0.710	0.010	6.64		6.75	6.66	6.30
0.710	0.100	6.64		6.75	6.66	6.31
0.710	1.000	6.67		6.82	6.71	6.39
0.710	1.500	6.70		6.88	6.75	6.44
0.710	2.000	6.75		6.93	6.80	6.49
0.710	2.500	6.81		6.99	6.85	6.53
0.710	3.000	6.88		7.05	6.91	6.58
0.710	3.500	6.97		7.11	6.97	6.62
0.710	4.000	7.07		7.17	7.04	6.67
0.710	4.500	7.18		7.23	7.10	6.71
0.710	5.000	7.31		7.29	7.17	6.76
0.776	0.001	5.13		4.93	4.75	4.66
0.776	0.010	5.13		4.93	4.75	4.66
0.776	0.100	5.13		4.93	4.75	4.66
0.776	1.000	5.15		5.00	4.80	4.73

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.776	1.500	5.18		5.05	4.84	4.77
0.776	2.000	5.23		5.10	4.89	4.81
0.776	2.500	5.28		5.15	4.94	4.85
0.776	3.000	5.35		5.20	4.99	4.89
0.776	3.500	5.43		5.25	5.05	4.92
0.776	4.000	5.52		5.30	5.10	4.96
0.776	4.500	5.62		5.35	5.16	5.00
0.776	5.000	5.74		5.40	5.22	5.04
0.808	0.001	4.02	0.024	4.23	4.02	4.02
0.808	0.010	4.02		4.23	4.02	4.02
0.808	0.100	4.02		4.23	4.02	4.03
0.808	1.000	4.04		4.30	4.08	4.09
0.808	1.500	4.07		4.35	4.12	4.13
0.808	2.000	4.10		4.39	4.17	4.16
0.808	2.500	4.14		4.44	4.22	4.20
0.808	3.000	4.19		4.49	4.27	4.23
0.808	3.500	4.25		4.54	4.32	4.27
0.808	4.000	4.32		4.58	4.37	4.31
0.808	4.500	4.40		4.63	4.42	4.34
0.808	5.000	4.49		4.68	4.47	4.38
0.904	0.001	2.59	0.004	2.57	2.37	2.48
0.904	0.010	2.59		2.57	2.37	2.48
0.904	0.100	2.59		2.58	2.38	2.49
0.904	1.000	2.61		2.65	2.44	2.54
0.904	1.500	2.64		2.69	2.48	2.57
0.904	2.000	2.67		2.73	2.52	2.60

Continua alla pagina seguente

Tab. A-ii: continua dalla pagina precedente

ε	Re	f_{LBM}	Δf	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.904	2.500	2.72		2.78	2.57	2.63
0.904	3.000	2.77		2.82	2.61	2.65
0.904	3.500	2.83		2.86	2.65	2.68
0.904	4.000	2.91		2.90	2.69	2.71
0.904	4.500	2.99		2.94	2.73	2.74
0.904	5.000	3.08		2.98	2.77	2.77
0.905	0.001	2.61		2.56	2.36	2.47
0.950	0.001	1.93	0.019	1.87	1.76	1.84
0.950	0.001	1.87	0.005	1.87	1.76	1.84
0.950	0.001	1.85	0.000	1.87	1.76	1.84
0.976	0.001	1.51	0.010	1.46	1.43	1.47
0.976	0.001	1.49	0.004	1.46	1.43	1.47
0.990	0.001	1.28	0.010	1.20	1.22	1.25
0.990	0.001	1.26	0.003	1.20	1.22	1.25
0.990	0.001	1.25	0.007	1.20	1.22	1.25
0.995	0.001	1.19	0.009	1.10	1.14	1.16
0.995	0.001	1.17	0.003	1.10	1.14	1.16
0.995	0.001	1.16	0.004	1.10	1.14	1.16
0.998	0.001	1.12	0.006	1.04	1.08	1.10
0.998	0.001	1.11	0.004	1.04	1.08	1.10
0.999	0.001	1.07	0.030	1.02	1.06	1.07

Tab. A-iii: Confronto tra i dati TL ed i vari modelli.

Confronto tra i dati di letteratura LBM selezionati di Turton e Levenspiel (1986) con i valori di forza adimensionale di puro drag previsti dai modelli NM, VBK e HKL nel caso di grado di vuoto unitario.

Re	f_{LBM}	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
0.0000E+00	1.00	1.00	1.00	1.00
1.0000E-03	1.00	1.00	1.00	1.00
2.0000E-03	1.00	1.00	1.00	1.00
4.0000E-03	1.00	1.00	1.00	1.00
6.0000E-03	1.01	1.00	1.00	1.00
8.0000E-03	1.01	1.00	1.00	1.00
1.0000E-02	1.01	1.00	1.00	1.00
2.0000E-02	1.01	1.00	1.00	1.00
4.0000E-02	1.02	1.00	1.00	1.00
6.0000E-02	1.03	1.01	1.00	1.00
8.0000E-02	1.03	1.01	1.01	1.00
1.0000E-01	1.04	1.01	1.01	1.00
2.0000E-01	1.06	1.02	1.02	1.01
4.0000E-01	1.09	1.04	1.03	1.02
6.0000E-01	1.12	1.06	1.05	1.03
8.0000E-01	1.15	1.08	1.07	1.04
1.0000E+00	1.17	1.09	1.08	1.05
2.0000E+00	1.27	1.18	1.15	1.09
3.0000E+00	1.36	1.27	1.22	1.14
4.0000E+00	1.43	1.35	1.29	1.18
5.0000E+00	1.50	1.42	1.35	1.23
6.0000E+00	1.56	1.50	1.41	1.27
7.0000E+00	1.62	1.57	1.46	1.32

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iii: continua dalla pagina precedente

Re	f_{LBM}	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
8.0000E+00	1.68	1.63	1.52	1.36
9.0000E+00	1.73	1.70	1.58	1.41
1.0000E+01	1.79	1.76	1.63	1.45
1.1000E+01	1.84	1.82	1.68	1.50
1.2000E+01	1.89	1.88	1.73	1.54
1.3000E+01	1.93	1.94	1.79	1.59
1.4000E+01	1.98	1.99	1.84	1.63
1.5000E+01	2.03	2.05	1.89	1.68
1.7000E+01	2.11	2.15	1.98	1.77
1.8000E+01	2.16	2.20	2.03	1.81
2.0000E+01	2.24	2.29	2.13	1.91
2.1000E+01	2.28	2.34	2.17	1.95
3.0000E+01	2.62	2.71	2.58	2.36
4.0000E+01	2.95	3.05	3.00	2.81
5.0000E+01	3.26	3.36	3.41	3.26
6.0000E+01	3.55	3.64	3.80	3.72
7.0000E+01	3.83	3.90	4.18	4.17
8.0000E+01	4.09	4.14	4.55	4.62
9.0000E+01	4.34	4.38	4.92	5.07
1.0490E+02	4.70	4.71	5.44	5.75
1.2000E+02	5.04	5.03	5.97	6.43
1.4000E+02	5.48	5.44	6.65	7.34
1.6000E+02	5.90	5.84	7.31	8.24
1.8000E+02	6.30	6.23	7.96	9.15

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iii: continua dalla pagina precedente

Re	f_{LBM}	f_{NM}	f_{VBK}	f_{HKL}
2.0990E+02	6.88	6.79	8.91	10.50
3.0000E+02	8.49	8.41	11.68	14.58
4.2000E+02	10.46	10.44	15.18	20.01
5.0000E+02	11.70	11.72	17.44	23.63
6.1250E+02	13.39	13.46	20.55	28.72
7.0000E+02	14.67	14.77	22.91	32.68
8.0000E+02	16.11	16.20	25.58	37.20
9.0000E+02	17.53	17.59	28.20	41.73
1.0494E+03	19.64	19.57	32.06	48.49

Tab. A-iv: Confronto tra i dati LBM bidispersi ed il nuovo modello (parte 1).

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Beetstra (2005), van der Hoef et al. (2005) e Beetstra et al. (2007b) con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. Le prime 7 colonne si riferiscono a dati LBM, le altre alle previsioni del modello. Per ogni prova si può estrarre $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21).

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.35	0	0.50	0.500	147.0	89.8	302.2	90.6	350.8	158.5
0.40	0	0.50	0.500	93.9	57.7	192.1	56.9	204.6	96.0
0.40	0	0.61	0.183	96.4	50.3	117.0	47.2	118.3	96.0
0.40	0	0.70	0.507	91.1	69.9	127.1	71.4	138.8	96.0
0.50	0	0.25	0.506	44.8	21.4	224.9	19.8	195.1	40.5
0.50	0	0.25	0.252	46.2	13.3	118.6	11.7	104.0	40.5
0.50	0	0.33	0.753	42.3	31.4	213.3	30.3	197.6	40.5
0.50	0	0.33	0.505	44.0	22.9	149.2	21.6	132.4	40.5
0.50	0	0.33	0.250	43.5	14.8	86.3	13.9	79.9	40.5
0.50	0	0.50	0.900	40.7	37.3	123.6	37.2	122.1	40.5
0.50	0	0.50	0.750	43.2	34.7	112.8	32.6	105.1	40.5
0.50	0	0.50	0.500	40.4	25.5	79.8	25.5	80.2	40.5
0.50	0	0.50	0.251	42.9	20.6	62.1	19.2	58.9	40.5
0.50	0	0.50	0.099	42.2	16.9	49.1	15.7	47.4	40.5
0.50	0	0.50	0.050	39.2	14.5	42.5	14.7	43.9	40.5
0.50	0	0.61	0.750	40.3	34.0	78.7	34.2	79.2	40.5
0.50	0	0.61	0.498	40.7	28.5	65.0	28.4	64.8	40.5
0.50	0	0.61	0.247	40.0	23.3	50.7	23.0	51.9	40.5
0.50	0	0.61	0.183	40.8	21.9	49.2	21.7	48.8	40.5
0.50	0	0.70	0.747	41.5	36.4	66.5	35.6	64.7	40.5
0.50	0	0.70	0.507	39.8	30.9	54.9	31.2	56.3	40.5
0.50	0	0.70	0.255	40.5	25.9	48.8	26.9	48.2	40.5
0.60	0	0.25	0.506	23.5	12.1	103.9	10.2	82.0	19.4
0.60	0	0.25	0.252	23.8	7.8	56.2	6.4	45.7	19.4
0.60	0	0.33	0.753	20.4	15.5	93.3	15.0	82.3	19.4

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.60	0	0.33	0.505	20.8	11.6	62.9	11.1	57.0	19.4
0.60	0	0.33	0.250	22.6	8.6	42.1	7.5	35.8	19.4
0.60	0	0.50	0.750	20.1	16.4	48.9	16.0	45.9	19.4
0.60	0	0.50	0.498	20.8	13.6	38.9	12.9	35.8	19.4
0.60	0	0.50	0.248	20.2	10.8	27.6	10.0	27.0	19.4
0.60	0	0.61	0.750	19.2	16.4	35.9	16.7	35.4	19.4
0.60	0	0.61	0.493	20.2	14.7	30.5	14.1	29.5	19.4
0.60	0	0.61	0.183	19.0	11.3	22.2	11.2	22.9	19.4
0.60	0	0.70	0.747	19.1	17.0	29.0	17.3	29.5	19.4
0.60	0	0.70	0.507	18.9	15.1	25.1	15.4	26.1	19.4
0.60	0	0.70	0.255	19.7	14.0	22.7	13.5	22.7	19.4
0.65	0	0.50	0.498	14.5	9.7	26.2	9.4	24.8	13.9
0.65	0	0.70	0.507	14.4	11.6	18.8	11.2	18.4	13.9
0.75	0	0.50	0.750	7.6	6.4	16.1	6.3	15.4	7.4
0.75	0	0.50	0.498	7.5	5.3	12.4	5.2	12.5	7.4
0.75	0	0.50	0.248	7.4	4.4	9.5	4.2	9.8	7.4
0.75	0	0.61	0.750	7.4	6.5	12.2	6.5	12.3	7.4
0.75	0	0.61	0.493	7.8	5.9	11.2	5.7	10.6	7.4
0.75	0	0.61	0.247	7.3	4.8	8.7	4.9	9.0	7.4
0.75	0	0.61	0.183	7.5	4.9	8.5	4.7	8.6	7.4
0.75	0	0.70	0.747	7.4	6.7	10.4	6.7	10.6	7.4
0.75	0	0.70	0.507	7.6	6.2	9.7	6.1	9.5	7.4
0.75	0	0.70	0.255	7.3	5.6	8.2	5.5	8.5	7.4
0.90	0	0.50	0.498	3.0	2.3	4.0	2.1	4.6	2.9
0.90	0	0.70	0.507	2.7	2.4	3.2	2.5	3.6	2.9

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.35	10	0.50	0.500	163.4	99.8	336.1	103.2	364.3	180.5
0.40	10	0.50	0.500	104.3	63.9	213.8	64.5	219.4	108.8
0.40	10	0.61	0.183	106.2	55.4	128.9	53.5	126.9	108.8
0.40	10	0.70	0.507	102.2	78.3	142.9	80.9	148.9	108.8
0.50	10	0.25	0.506	50.6	24.2	254.2	22.4	219.3	45.8
0.50	10	0.25	0.252	51.4	14.8	132.4	13.2	116.9	45.8
0.50	10	0.33	0.753	48.0	35.6	243.4	34.3	222.1	45.8
0.50	10	0.33	0.505	49.8	25.9	169.1	24.4	148.9	45.8
0.50	10	0.33	0.250	48.9	16.6	96.8	15.7	89.8	45.8
0.50	10	0.50	0.900	45.9	42.2	139.4	42.1	137.2	45.8
0.50	10	0.50	0.750	48.8	39.3	126.4	36.8	118.2	45.8
0.50	10	0.50	0.500	46.4	29.2	92.2	28.8	90.2	45.8
0.50	10	0.50	0.251	48.6	23.1	70.4	21.7	66.2	45.8
0.50	10	0.50	0.099	47.3	19.1	55.0	17.8	53.3	45.8
0.50	10	0.50	0.050	44.2	16.2	47.8	16.6	49.4	45.8
0.50	10	0.61	0.750	45.1	38.1	88.2	38.6	89.0	45.8
0.50	10	0.61	0.498	46.0	32.3	73.3	32.1	72.8	45.8
0.50	10	0.61	0.247	45.4	26.4	57.6	26.0	58.3	45.8
0.50	10	0.61	0.183	45.1	24.3	54.4	24.6	54.9	45.8
0.50	10	0.70	0.747	47.0	41.2	75.4	40.2	72.7	45.8
0.50	10	0.70	0.507	45.0	34.9	61.9	35.2	63.3	45.8
0.50	10	0.70	0.255	45.4	29.1	54.7	30.4	54.1	45.8
0.60	10	0.25	0.506	27.0	13.9	119.9	11.7	94.7	22.2
0.60	10	0.25	0.252	27.0	8.8	63.8	7.3	52.8	22.2
0.60	10	0.33	0.753	23.6	17.9	107.9	17.2	95.1	22.2

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.60	10	0.33	0.505	23.7	13.3	71.9	12.6	65.8	22.2
0.60	10	0.33	0.250	25.6	9.7	47.8	8.6	41.4	22.2
0.60	10	0.50	0.750	23.2	19.0	56.5	18.3	53.0	22.2
0.60	10	0.50	0.498	24.0	15.6	45.0	14.7	41.4	22.2
0.60	10	0.50	0.248	23.1	12.4	31.4	11.4	31.2	22.2
0.60	10	0.61	0.750	22.2	19.0	41.4	19.1	40.9	22.2
0.60	10	0.61	0.493	23.1	16.8	34.8	16.1	34.0	22.2
0.60	10	0.61	0.183	21.6	12.7	25.3	12.8	26.5	22.2
0.60	10	0.70	0.747	22.0	19.6	33.3	19.8	34.1	22.2
0.60	10	0.70	0.507	21.6	17.3	28.7	17.6	30.1	22.2
0.60	10	0.70	0.255	22.3	15.7	25.9	15.4	26.2	22.2
0.65	10	0.50	0.498	16.9	11.4	30.3	10.9	28.9	16.0
0.65	10	0.70	0.507	16.7	13.6	21.8	12.9	21.4	16.0
0.75	10	0.50	0.750	9.1	7.6	19.3	7.5	18.1	8.8
0.75	10	0.50	0.498	8.9	6.3	14.7	6.2	14.7	8.8
0.75	10	0.50	0.248	8.7	5.2	11.1	5.0	11.6	8.8
0.75	10	0.61	0.750	8.8	7.8	14.5	7.8	14.5	8.8
0.75	10	0.61	0.493	9.2	7.0	13.1	6.7	12.4	8.8
0.75	10	0.61	0.247	8.7	5.7	10.4	5.8	10.5	8.8
0.75	10	0.61	0.183	9.0	5.7	10.4	5.5	10.0	8.8
0.75	10	0.70	0.747	8.8	8.0	12.3	8.0	12.4	8.8
0.75	10	0.70	0.507	8.6	7.1	11.1	7.2	11.2	8.8
0.75	10	0.70	0.255	8.6	6.5	9.6	6.5	9.9	8.8
0.90	10	0.50	0.498	3.9	3.0	5.2	2.8	5.6	3.8
0.90	10	0.70	0.507	3.5	3.1	4.1	3.2	4.4	3.8

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.35	100	0.50	0.500	378.5	229.4	785.7	220.4	795.1	385.5
0.40	100	0.50	0.500	234.0	142.4	483.5	136.1	478.3	229.8
0.40	100	0.61	0.183	220.7	117.1	266.7	112.9	276.7	229.8
0.40	100	0.70	0.507	235.0	177.2	334.2	170.8	324.5	229.8
0.50	100	0.25	0.506	113.5	54.2	569.8	47.0	485.4	96.1
0.50	100	0.25	0.252	112.0	32.1	289.0	27.7	258.8	96.1
0.50	100	0.33	0.753	108.9	80.7	552.6	72.0	491.7	96.1
0.50	100	0.33	0.505	112.8	58.5	384.2	51.2	329.6	96.1
0.50	100	0.33	0.250	109.8	37.2	217.8	33.0	198.7	96.1
0.50	100	0.50	0.900	104.8	96.2	320.4	88.3	303.8	96.1
0.50	100	0.50	0.750	109.8	88.4	284.6	77.3	261.7	96.1
0.50	100	0.50	0.500	101.6	63.8	202.0	60.5	199.6	96.1
0.50	100	0.50	0.251	111.4	52.1	162.8	45.6	146.5	96.1
0.50	100	0.50	0.099	105.6	42.4	123.0	37.3	117.9	96.1
0.50	100	0.50	0.050	100.5	36.7	108.8	34.8	109.3	96.1
0.50	100	0.61	0.750	100.0	84.2	197.1	81.1	197.1	96.1
0.50	100	0.61	0.498	103.1	72.8	163.1	67.3	161.2	96.1
0.50	100	0.61	0.247	104.1	59.9	132.6	54.6	129.1	96.1
0.50	100	0.70	0.747	107.4	94.4	171.2	84.4	161.0	96.1
0.50	100	0.70	0.507	101.5	78.5	140.3	74.0	140.1	96.1
0.50	100	0.70	0.255	101.8	65.0	122.7	63.7	119.8	96.1
0.60	100	0.25	0.506	63.4	32.6	281.0	25.4	216.3	48.2
0.60	100	0.25	0.252	61.5	20.1	145.9	15.8	120.6	48.2
0.60	100	0.33	0.753	56.3	42.8	256.9	37.3	217.1	48.2

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.60	100	0.33	0.505	55.3	30.8	168.8	27.5	150.3	48.2
0.60	100	0.33	0.250	57.8	21.8	108.2	18.6	94.5	48.2
0.60	100	0.50	0.750	55.9	45.7	136.6	39.8	120.9	48.2
0.60	100	0.50	0.498	57.5	37.3	109.0	31.9	94.5	48.2
0.60	100	0.50	0.248	52.7	28.3	71.8	24.8	71.3	48.2
0.60	100	0.61	0.750	52.8	45.2	98.4	41.5	93.4	48.2
0.60	100	0.61	0.493	54.2	39.2	82.6	35.0	77.7	48.2
0.60	100	0.61	0.183	50.9	30.2	59.6	27.8	60.5	48.2
0.60	100	0.70	0.747	51.7	46.2	78.0	43.0	77.8	48.2
0.60	100	0.70	0.507	50.8	40.5	67.9	38.3	68.7	48.2
0.60	100	0.70	0.255	51.5	36.1	59.9	33.5	59.8	48.2
0.65	100	0.50	0.498	41.2	27.9	73.5	24.1	67.2	35.6
0.65	100	0.70	0.507	39.7	32.0	52.2	28.6	49.7	35.6
0.75	100	0.50	0.750	23.0	19.3	49.6	17.3	44.0	20.4
0.75	100	0.50	0.498	22.0	15.4	36.9	14.3	35.7	20.4
0.75	100	0.50	0.248	20.9	12.5	26.8	11.6	28.1	20.4
0.75	100	0.61	0.750	22.1	19.5	36.7	18.0	35.3	20.4
0.75	100	0.61	0.493	22.5	17.0	32.3	15.5	30.2	20.4
0.75	100	0.70	0.747	21.5	19.5	30.5	18.5	30.2	20.4
0.75	100	0.70	0.507	21.4	17.7	27.2	16.8	27.2	20.4
0.75	100	0.70	0.255	20.6	15.3	23.3	15.0	24.2	20.4
0.90	100	0.50	0.498	10.2	7.9	14.5	6.7	14.8	9.1
0.90	100	0.70	0.507	9.3	8.1	11.0	7.7	11.8	9.1

Continua alla pagina seguente

Tab. A-iv: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.35	500	0.50	0.500	1106.7	667.1	2311.9	654.2	2349.4	1144.3
0.40	500	0.50	0.500	656.9	399.5	1357.9	399.9	1407.6	675.2
0.40	500	0.70	0.507	668.5	507.0	945.0	501.9	954.9	675.2
0.50	500	0.25	0.506	300.8	143.6	1510.7	145.0	1435.7	296.4
0.50	500	0.33	0.505	290.7	149.6	1000.5	158.0	974.8	296.4
0.50	500	0.50	0.900	293.7	269.6	898.6	272.4	898.4	296.4
0.50	500	0.50	0.750	277.2	222.1	731.0	238.4	773.9	296.4
0.50	500	0.50	0.500	278.2	177.1	543.2	186.7	590.4	296.4
0.50	500	0.50	0.251	295.4	138.2	431.9	140.7	433.3	296.4
0.50	500	0.50	0.099	284.0	111.8	331.8	115.1	348.8	296.4
0.50	500	0.50	0.050	273.7	98.8	296.8	107.3	323.3	296.4
0.50	500	0.61	0.498	268.5	189.5	425.3	207.5	476.7	296.4
0.50	500	0.70	0.507	271.6	211.0	373.6	228.2	414.5	296.4
0.40	500	0.50	0.500	656.9	399.5	1357.9	399.9	1407.6	675.2
0.40	500	0.70	0.507	668.5	507.0	945.0	501.9	954.9	675.2
0.75	500	0.50	0.498	59.9	41.4	103.6	47.7	110.2	67.8
0.75	500	0.70	0.507	63.2	51.2	82.6	55.7	84.0	67.8
0.90	500	0.50	0.498	28.4	21.3	42.5	20.7	46.8	28.2

Tab. A-v: Confronto tra i dati LBM bidispersi ed il nuovo modello (parte 2).

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Sundaresan (2009b) con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. Le prime 7 colonne si riferiscono a dati LBM, le altre alle previsioni del modello. I valori originali prevedevano la forza adimensionale di puro drag, che sono stati convertiti in forza netta mediante la (3.15), mentre la forza media adimensionale netta, non fornita dagli autori, è stata calcolata mediante la (3.16) dai dati delle simulazioni. Per ogni prova si può estrarre $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21). Sono stati omessi gli errori rispetto al valor medio.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.90	0	0.67	0.200	2.8	2.2	3.0	2.1	3.2	2.9
0.90	0	0.67	0.500	3.0	2.5	3.5	2.4	3.7	2.9
0.90	0	0.67	0.800	2.6	2.5	3.4	2.7	4.2	2.9
0.85	0	0.67	0.333	3.9	3.1	4.5	3.1	4.8	4.0
0.85	0	0.67	0.467	3.9	3.3	4.7	3.3	5.1	4.0
0.85	0	0.67	0.533	3.9	3.3	4.9	3.4	5.3	4.0
0.85	0	0.67	0.667	3.9	3.5	5.1	3.5	5.6	4.0
0.80	0	0.67	0.250	5.4	4.0	6.1	3.9	6.3	5.5
0.80	0	0.67	0.500	5.4	4.4	6.9	4.4	7.2	5.5
0.75	0	0.67	0.200	7.4	5.2	8.3	5.1	8.4	7.4
0.75	0	0.67	0.600	7.3	6.2	10.1	6.2	10.4	7.4
0.70	0	0.67	0.333	10.1	7.4	12.4	7.3	12.4	10.1
0.70	0	0.67	0.667	10.1	8.6	14.8	8.7	14.9	10.1
0.65	0	0.67	0.143	14.1	9.0	15.5	8.8	15.3	13.9
0.60	0	0.67	0.250	19.9	13.2	23.7	12.9	23.1	19.4
0.60	0	0.67	0.500	19.6	15.0	27.5	14.9	27.1	19.4
0.60	0	0.67	0.750	19.3	16.9	31.6	17.1	31.4	19.4
0.80	0	0.40	0.500	5.8	3.9	11.1	3.6	10.9	5.5
0.70	0	0.40	0.333	10.9	5.8	18.6	5.3	17.5	10.1
0.70	0	0.40	0.667	10.6	7.8	28.4	7.6	26.4	10.1
0.60	0	0.40	0.250	21.0	9.3	33.7	8.5	31.3	19.4
0.60	0	0.40	0.500	20.3	12.2	48.6	11.7	45.7	19.4
0.60	0	0.40	0.750	19.9	15.6	67.1	15.4	62.6	19.4

Continua alla pagina seguente

Tab. A-v: continua dalla pagina precedente.

ε	\overline{Re}	y_1/y_2	x_1	\bar{n}	n_1	n_2	$n_{1,NM}$	$n_{2,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.85	0	0.25	0.333	5.0	2.4	9.5	1.9	9.1	4.0
0.80	0	0.25	0.250	6.5	2.8	11.6	2.2	11.0	5.5
0.80	0	0.25	0.500	6.2	3.6	19.1	3.2	17.6	5.5
0.75	0	0.25	0.200	9.0	3.3	15.5	2.5	13.6	7.4
0.75	0	0.25	0.600	8.1	5.2	34.0	4.8	30.0	7.4
0.70	0	0.25	0.333	11.8	5.0	30.6	4.3	26.4	10.1
0.70	0	0.25	0.667	10.8	7.3	56.8	7.0	49.0	10.1
0.65	0	0.25	0.143	16.4	4.8	26.4	3.8	23.1	13.9
0.65	0	0.25	0.714	14.7	10.4	91.8	10.0	78.9	13.9
0.60	0	0.25	0.250	22.8	7.5	53.3	6.3	45.5	19.4
0.60	0	0.25	0.500	21.4	10.9	93.9	10.1	81.0	19.4
0.60	0	0.25	0.750	20.2	14.7	144.6	14.5	127.1	19.4
0.85	0	0.25	0.333	5.0	2.4	9.5	1.9	9.1	4.0
0.80	0	0.25	0.250	6.5	2.8	11.6	2.2	11.0	5.5
0.80	0	0.25	0.500	6.2	3.6	19.1	3.2	17.6	5.5
0.75	0	0.25	0.200	9.0	3.3	15.5	2.5	13.6	7.4
0.75	0	0.25	0.600	8.1	5.2	34.0	4.8	30.0	7.4
0.70	0	0.25	0.333	11.8	5.0	30.6	4.3	26.4	10.1
0.70	0	0.25	0.667	10.8	7.3	56.8	7.0	49.0	10.1
0.65	0	0.25	0.143	16.4	4.8	26.4	3.8	23.1	13.9
0.65	0	0.25	0.714	14.7	10.4	91.8	10.0	78.9	13.9
0.60	0	0.25	0.250	22.8	7.5	53.3	6.3	45.5	19.4
0.60	0	0.25	0.500	21.4	10.9	93.9	10.1	81.0	19.4

Appendice B

VALIDAZIONE CON I DATI LBM

Tab. B-i: Confronto tra i dati LBM polidispersi gaussiani ed il nuovo modello.

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Sarkar et al. (2009) inerenti le distribuzioni gaussiane di tipo I e II, con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. Le prime 6 colonne si riferiscono a dati LBM, le altre alle previsioni del modello. I valori originali non forniscono la forza media adimensionale netta \bar{n} che è stata calcolata mediante la (3.16) dai dati delle simulazioni. Per ogni prova è possibile estrarre i valori di $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21). Sono stati omessi gli errori rispetto al valor medio.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.5	1	41.9	0.472	13.1	13.0	40.8
I	0.5	1	41.9	0.577	18.0	17.5	40.8
I	0.5	1	41.9	0.682	23.1	22.6	40.8
I	0.5	1	41.9	0.787	28.5	28.4	40.8
I	0.5	1	41.9	0.892	34.7	34.7	40.8
I	0.5	1	41.9	0.997	41.7	41.7	40.8
I	0.5	1	41.9	1.102	49.1	49.2	40.8
I	0.5	1	41.9	1.207	57.5	57.4	40.8
I	0.5	1	41.9	1.311	66.1	66.1	40.8
I	0.5	1	41.9	1.417	73.7	75.6	40.8
I	0.5	10	47.0	0.472	15.4	14.6	45.8
I	0.5	10	47.0	0.577	20.4	19.6	45.8
I	0.5	10	47.0	0.682	26.1	25.4	45.8
I	0.5	10	47.0	0.787	31.9	31.9	45.8
I	0.5	10	47.0	0.892	39.0	39.0	45.8
I	0.5	10	47.0	0.997	46.8	46.8	45.8
I	0.5	10	47.0	1.102	54.8	55.3	45.8
I	0.5	10	47.0	1.207	64.8	64.5	45.8
I	0.5	10	47.0	1.311	74.9	74.3	45.8
I	0.5	10	47.0	1.417	82.6	84.8	45.8
I	0.5	100	102.5	0.472	31.8	31.7	96.1
I	0.5	100	102.5	0.577	44.0	42.8	96.1
I	0.5	100	102.5	0.682	56.9	55.4	96.1
I	0.5	100	102.5	0.787	69.7	69.5	96.1

Continua alla pagina seguente

Tab. B-i: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.5	100	102.5	0.892	84.9	84.9	96.1
I	0.5	100	102.5	0.997	102.0	102.0	96.1
I	0.5	100	102.5	1.102	119.9	120.5	96.1
I	0.5	100	102.5	1.207	140.6	140.5	96.1
I	0.5	100	102.5	1.311	161.7	161.8	96.1
I	0.5	100	102.5	1.417	182.6	184.9	96.1
I	0.5	500	298.8	0.472	90.5	92.5	296.4
I	0.5	500	298.8	0.577	124.2	124.7	296.4
I	0.5	500	298.8	0.682	166.1	161.4	296.4
I	0.5	500	298.8	0.787	202.9	202.4	296.4
I	0.5	500	298.8	0.892	246.4	247.5	296.4
I	0.5	500	298.8	0.997	297.9	297.2	296.4
I	0.5	500	298.8	1.102	349.9	351.1	296.4
I	0.5	500	298.8	1.207	409.7	409.4	296.4
I	0.5	500	298.8	1.311	471.3	471.6	296.4
I	0.5	500	298.8	1.417	534.8	538.8	296.4
I	0.7	1	10.3	0.472	4.3	4.1	10.2
I	0.7	1	10.3	0.577	5.5	5.1	10.2
I	0.7	1	10.3	0.682	6.5	6.3	10.2
I	0.7	1	10.3	0.787	7.5	7.5	10.2
I	0.7	1	10.3	0.892	8.9	8.9	10.2
I	0.7	1	10.3	0.997	10.2	10.2	10.2
I	0.7	1	10.3	1.102	11.6	11.7	10.2
I	0.7	1	10.3	1.207	12.9	13.2	10.2
I	0.7	1	10.3	1.311	15.5	14.8	10.2
I	0.7	1	10.3	1.417	17.1	16.5	10.2
I	0.7	10	12.0	0.472	4.8	4.7	11.8
I	0.7	10	12.0	0.577	6.3	6.0	11.8

Continua alla pagina seguente

Tab. B-i: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.7	10	12.0	0.682	7.6	7.4	11.8
I	0.7	10	12.0	0.787	8.8	8.8	11.8
I	0.7	10	12.0	0.892	10.4	10.3	11.8
I	0.7	10	12.0	0.997	11.9	11.9	11.8
I	0.7	10	12.0	1.102	13.5	13.6	11.8
I	0.7	10	12.0	1.207	15.0	15.4	11.8
I	0.7	10	12.0	1.311	17.9	17.2	11.8
I	0.7	10	12.0	1.417	20.4	19.2	11.8
I	0.7	100	28.4	0.472	12.0	11.2	26.8
I	0.7	100	28.4	0.577	14.2	14.2	26.8
I	0.7	100	28.4	0.682	18.2	17.5	26.8
I	0.7	100	28.4	0.787	20.9	20.9	26.8
I	0.7	100	28.4	0.892	24.6	24.5	26.8
I	0.7	100	28.4	0.997	28.2	28.3	26.8
I	0.7	100	28.4	1.102	32.1	32.3	26.8
I	0.7	100	28.4	1.207	35.9	36.5	26.8
I	0.7	100	28.4	1.311	41.9	40.9	26.8
I	0.7	100	28.4	1.417	47.4	45.5	26.8
I	0.7	500	89.3	0.472	37.1	35.2	88.8
I	0.7	500	89.3	0.577	43.2	44.7	88.8
I	0.7	500	89.3	0.682	56.9	54.8	88.8
I	0.7	500	89.3	0.787	65.5	65.6	88.8
I	0.7	500	89.3	0.892	77.4	76.9	88.8
I	0.7	500	89.3	0.997	88.7	88.9	88.8
I	0.7	500	89.3	1.102	100.5	101.5	88.8
I	0.7	500	89.3	1.207	113.5	114.7	88.8
I	0.7	500	89.3	1.311	133.2	128.5	88.8
I	0.7	500	89.3	1.417	146.7	143.0	88.8

Continua alla pagina seguente

Tab. B-i: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
II	0.5	1	39.6	0.303	7.9	6.5	40.8
II	0.5	1	39.6	0.437	10.9	11.0	40.8
II	0.5	1	39.6	0.571	16.1	16.3	40.8
II	0.5	1	39.6	0.706	22.5	22.6	40.8
II	0.5	1	39.6	0.840	29.8	29.8	40.8
II	0.5	1	39.6	0.975	37.7	38.0	40.8
II	0.5	1	39.6	1.110	46.7	47.1	40.8
II	0.5	1	39.6	1.244	57.5	57.1	40.8
II	0.5	1	39.6	1.379	71.5	68.1	40.8
II	0.5	1	39.6	1.514	82.7	80.0	40.8
II	0.5	10	44.6	0.303	9.0	7.4	45.8
II	0.5	10	44.6	0.437	12.2	12.4	45.8
II	0.5	10	44.6	0.571	18.3	18.4	45.8
II	0.5	10	44.6	0.706	25.4	25.5	45.8
II	0.5	10	44.6	0.840	33.6	33.6	45.8
II	0.5	10	44.6	0.975	42.5	42.8	45.8
II	0.5	10	44.6	1.110	52.7	53.0	45.8
II	0.5	10	44.6	1.244	64.7	64.3	45.8
II	0.5	10	44.6	1.379	80.6	76.7	45.8
II	0.5	10	44.6	1.514	92.9	90.2	45.8
II	0.5	100	102.0	0.303	20.1	16.9	96.1
II	0.5	100	102.0	0.437	26.3	28.2	96.1
II	0.5	100	102.0	0.571	40.9	42.0	96.1
II	0.5	100	102.0	0.706	57.5	58.2	96.1
II	0.5	100	102.0	0.840	77.0	76.8	96.1
II	0.5	100	102.0	0.975	96.8	97.9	96.1
II	0.5	100	102.0	1.110	121.3	121.3	96.1
II	0.5	100	102.0	1.244	147.3	147.0	96.1

Continua alla pagina seguente

Tab. B-i: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
II	0.5	100	102.0	1.379	185.4	175.3	96.1
II	0.5	100	102.0	1.514	211.6	206.1	96.1
II	0.5	500	311.2	0.303	57.0	51.4	296.4
II	0.5	500	311.2	0.437	82.7	86.1	296.4
II	0.5	500	311.2	0.571	124.6	128.2	296.4
II	0.5	500	311.2	0.706	172.8	177.7	296.4
II	0.5	500	311.2	0.840	232.7	234.4	296.4
II	0.5	500	311.2	0.975	296.8	298.6	296.4
II	0.5	500	311.2	1.110	370.9	369.9	296.4
II	0.5	500	311.2	1.244	453.4	448.6	296.4
II	0.5	500	311.2	1.379	564.4	534.8	296.4
II	0.5	500	311.2	1.514	629.1	628.7	296.4

Tab. B-ii: Confronto tra i dati LBM polidispersi lognormali ed il nuovo modello.

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Sarkar et al. (2009) inerenti le distribuzioni lognormali di tipo I e II, con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. Le prime 6 colonne si riferiscono a dati LBM, le altre alle previsioni del modello. I valori originali non forniscono la forza media adimensionale netta \bar{n} che è stata calcolata mediante la (3.16) dai dati delle simulazioni. Per ogni prova è possibile estrarre i valori di $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21). Non sono riportati gli scarti dal valor medio.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.5	1	41.6	0.486	14.3	13.5	40.8
I	0.5	1	41.6	0.593	18.5	18.1	40.8
I	0.5	1	41.6	0.701	23.8	23.5	40.8
I	0.5	1	41.6	0.809	29.6	29.5	40.8
I	0.5	1	41.6	0.917	35.6	36.0	40.8
I	0.5	1	41.6	1.025	42.8	43.3	40.8
I	0.5	1	41.6	1.133	50.6	51.1	40.8
I	0.5	1	41.6	1.241	59.7	59.6	40.8
I	0.5	1	41.6	1.348	69.4	68.7	40.8
I	0.5	1	41.6	1.457	79.2	78.5	40.8
I	0.5	10	46.5	0.486	16.0	15.0	45.8
I	0.5	10	46.5	0.593	21.1	20.3	45.8
I	0.5	10	46.5	0.701	26.0	26.3	45.8
I	0.5	10	46.5	0.809	32.7	33.0	45.8
I	0.5	10	46.5	0.917	39.9	40.3	45.8
I	0.5	10	46.5	1.025	47.9	48.4	45.8
I	0.5	10	46.5	1.133	56.6	57.2	45.8
I	0.5	10	46.5	1.241	67.4	66.7	45.8
I	0.5	10	46.5	1.348	78.4	76.8	45.8
I	0.5	10	46.5	1.457	88.8	87.8	45.8
I	0.5	100	100.0	0.486	34.2	32.4	96.1
I	0.5	100	100.0	0.593	45.0	43.7	96.1
I	0.5	100	100.0	0.701	56.9	56.5	96.1
I	0.5	100	100.0	0.809	71.4	70.9	96.1

Continua alla pagina seguente

Tab. B-ii: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.5	100	100.0	0.917	85.6	86.7	96.1
I	0.5	100	100.0	1.025	103.6	104.1	96.1
I	0.5	100	100.0	1.133	121.2	123.1	96.1
I	0.5	100	100.0	1.241	144.1	143.5	96.1
I	0.5	100	100.0	1.348	166.0	165.3	96.1
I	0.5	100	100.0	1.457	190.5	188.9	96.1
I	0.5	500	291.0	0.486	98.1	94.2	296.4
I	0.5	500	291.0	0.593	130.7	127.0	296.4
I	0.5	500	291.0	0.701	165.1	164.5	296.4
I	0.5	500	291.0	0.809	208.1	206.3	296.4
I	0.5	500	291.0	0.917	251.4	252.3	296.4
I	0.5	500	291.0	1.025	301.4	303.0	296.4
I	0.5	500	291.0	1.133	353.3	358.0	296.4
I	0.5	500	291.0	1.241	414.9	417.5	296.4
I	0.5	500	291.0	1.348	479.5	481.0	296.4
I	0.5	500	291.0	1.457	559.0	549.6	296.4
I	0.7	1	10.3	0.486	4.3	4.2	10.2
I	0.7	1	10.3	0.593	5.5	5.3	10.2
I	0.7	1	10.3	0.701	6.6	6.5	10.2
I	0.7	1	10.3	0.809	7.7	7.8	10.2
I	0.7	1	10.3	0.917	9.0	9.2	10.2
I	0.7	1	10.3	1.025	10.6	10.6	10.2
I	0.7	1	10.3	1.133	11.9	12.1	10.2
I	0.7	1	10.3	1.241	13.7	13.7	10.2
I	0.7	1	10.3	1.348	15.2	15.4	10.2
I	0.7	1	10.3	1.457	17.2	17.1	10.2
I	0.7	10	12.0	0.486	5.1	4.9	11.8
I	0.7	10	12.0	0.593	6.5	6.2	11.8

Continua alla pagina seguente

Tab. B-ii: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
I	0.7	10	12.0	0.701	7.7	7.6	11.8
I	0.7	10	12.0	0.809	9.0	9.1	11.8
I	0.7	10	12.0	0.917	10.6	10.7	11.8
I	0.7	10	12.0	1.025	12.3	12.4	11.8
I	0.7	10	12.0	1.133	13.9	14.1	11.8
I	0.7	10	12.0	1.241	15.9	16.0	11.8
I	0.7	10	12.0	1.348	17.8	17.9	11.8
I	0.7	10	12.0	1.457	20.0	19.9	11.8
I	0.7	100	28.4	0.486	11.9	11.6	26.8
I	0.7	100	28.4	0.593	15.0	14.7	26.8
I	0.7	100	28.4	0.701	18.1	18.1	26.8
I	0.7	100	28.4	0.809	21.4	21.6	26.8
I	0.7	100	28.4	0.917	25.2	25.4	26.8
I	0.7	100	28.4	1.025	29.4	29.3	26.8
I	0.7	100	28.4	1.133	33.2	33.5	26.8
I	0.7	100	28.4	1.241	38.0	37.9	26.8
I	0.7	100	28.4	1.348	42.3	42.5	26.8
I	0.7	100	28.4	1.457	48.3	47.3	26.8
I	0.7	500	89.3	0.486	36.0	36.4	88.8
I	0.7	500	89.3	0.593	46.1	46.2	88.8
I	0.7	500	89.3	0.701	55.8	56.8	88.8
I	0.7	500	89.3	0.809	66.3	68.0	88.8
I	0.7	500	89.3	0.917	78.7	79.7	88.8
I	0.7	500	89.3	1.025	91.8	92.2	88.8
I	0.7	500	89.3	1.133	104.2	105.3	88.8
I	0.7	500	89.3	1.241	119.2	119.1	88.8
I	0.7	500	89.3	1.348	133.4	133.4	88.8
I	0.7	500	89.3	1.457	152.5	148.6	88.8

Continua alla pagina seguente

Tab. B-ii: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
II	0.5	1	39.3	0.382	9.5	9.1	40.8
II	0.5	1	39.3	0.551	15.7	15.5	40.8
II	0.5	1	39.3	0.721	22.7	23.3	40.8
II	0.5	1	39.3	0.891	32.2	32.6	40.8
II	0.5	1	39.3	1.060	43.5	43.3	40.8
II	0.5	1	39.3	1.230	55.6	55.5	40.8
II	0.5	1	39.3	1.399	67.9	69.1	40.8
II	0.5	1	39.3	1.569	85.7	84.1	40.8
II	0.5	1	39.3	1.739	104.7	100.6	40.8
II	0.5	1	39.3	1.909	120.8	118.7	40.8
II	0.5	10	44.6	0.382	10.5	10.3	45.8
II	0.5	10	44.6	0.551	17.8	17.6	45.8
II	0.5	10	44.6	0.721	25.5	26.4	45.8
II	0.5	10	44.6	0.891	36.5	37.0	45.8
II	0.5	10	44.6	1.060	48.7	49.1	45.8
II	0.5	10	44.6	1.230	61.5	63.0	45.8
II	0.5	10	44.6	1.399	75.5	78.4	45.8
II	0.5	10	44.6	1.569	96.5	95.4	45.8
II	0.5	10	44.6	1.739	117.7	114.2	45.8
II	0.5	10	44.6	1.909	132.6	134.7	45.8
II	0.5	100	102.0	0.382	23.8	23.6	96.1
II	0.5	100	102.0	0.551	39.5	40.1	96.1
II	0.5	100	102.0	0.721	58.3	60.4	96.1
II	0.5	100	102.0	0.891	84.6	84.5	96.1
II	0.5	100	102.0	1.060	111.7	112.3	96.1
II	0.5	100	102.0	1.230	142.9	143.9	96.1
II	0.5	100	102.0	1.399	176.4	179.2	96.1
II	0.5	100	102.0	1.569	218.7	218.2	96.1

Continua alla pagina seguente

Tab. B-ii: continua dalla pagina precedente.

<i>Distribuzione</i>	ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
II	0.5	100	102.0	1.739	273.3	261.1	96.1
II	0.5	100	102.0	1.909	293.5	307.8	96.1
II	0.5	500	311.2	0.382	70.8	71.9	296.4
II	0.5	500	311.2	0.551	116.0	122.4	296.4
II	0.5	500	311.2	0.721	173.3	184.3	296.4
II	0.5	500	311.2	0.891	252.5	257.8	296.4
II	0.5	500	311.2	1.060	334.0	342.6	296.4
II	0.5	500	311.2	1.230	425.6	439.0	296.4
II	0.5	500	311.2	1.399	514.8	546.6	296.4
II	0.5	500	311.2	1.569	646.4	665.6	296.4
II	0.5	500	311.2	1.739	807.7	796.4	296.4
II	0.5	500	311.2	1.909	886.6	939.1	296.4

Tab. B-iii: Confronto tra i dati LBM polidispersi ed il nuovo modello.

Confronto tra i dati di letteratura LBM di Beetstra (2005), inerenti una distribuzione a 4 specie con i valori di forza adimensionale netta previsti dal nuovo modello. Le prime 5 colonne si riferiscono a dati LBM, le altre alle previsioni del modello. I valori originali non forniscono la forza media adimensionale netta \bar{n} che è stata calcolata mediante la (3.16) dai dati delle simulazioni. Per ogni prova è possibile estrarre i valori di $\alpha_j^{sim} = n_j / \bar{n}$, mentre α_j^{pred} può essere calcolato tramite le (4.18) e (4.21). Sono stati omessi gli errori rispetto al valor medio.

ε	\overline{Re}	\bar{n}	y_j	n_j	$n_{j,NM}$	\bar{n}_{NM}
0.502	0.2	42.3	0.521	15.6	14.6	39.9
0.502	0.2	42.3	1.042	44.3	42.6	39.9
0.502	0.2	42.3	1.563	88.7	84.0	39.9
0.502	0.2	42.3	2.083	149.9	138.7	39.9
0.502	10.0	47.4	0.521	17.5	16.5	45.1
0.502	10.0	47.4	1.042	49.7	48.2	45.1
0.502	10.0	47.4	1.563	99.3	94.9	45.1
0.502	10.0	47.4	2.083	168.2	156.7	45.1
0.502	100.0	105.4	0.521	38.8	34.7	94.6
0.502	100.0	105.4	1.042	110.3	101.1	94.6
0.502	100.0	105.4	1.563	221.2	199.2	94.6
0.502	100.0	105.4	2.083	375.5	329.1	94.6
0.502	500.0	295.6	0.521	107.7	107.1	292.2
0.502	500.0	295.6	1.042	310.2	312.2	292.2
0.502	500.0	295.6	1.563	625.5	615.1	292.2
0.502	500.0	295.6	2.083	1056.6	1015.8	292.2

Simbologia

C_d	-	coefficiente di drag
C_j	-	coefficiente della forza di interazione sulla specie j
D_{avg}	m	diametro particellare pesato sulle frazioni volumetriche relative
D_i	m	diametro della i -esima particella solida
$D_{s,j}$	m	diametro delle particelle appartenenti alla j -esima specie
\bar{D}	m	diametro medio particellare di Sauter
f_j	-	forza adimensionale di puro drag su una particella di specie j
f_{mono}	-	forza sulla particella in un sistema monodisperso
f_{TL}	-	forza adimensionale di puro drag mediante modello TL
\bar{f}	-	forza adimensionale media di puro drag
$F_{b,j}$	N	forza di galleggiamento agente su una particella di specie j
$F_{c,i-k}$	N	forza di contatto tra la particella i ed un ostacolo k
$F_{d,j}$	N	forza di puro drag su una particella appartenente alla specie j
$F_{g,j}$	N	forza peso agente su una particella di specie j
$F_{Stokes,i}$	N	forza di Stokes sulla singola particella
F_{VDW}	N	forza di van der Waals
\mathbf{g}	m/s ²	vettore accelerazione di gravità
m_i	kg	massa della i -esima particella solida
m_t	kg	massa particellare totale
$m_{t,j}$	kg	massa totale delle particelle di specie j
M_p	-	numero totale di particelle
M_{p_j}	-	numero totale di particelle appartenenti alla j -esima specie
M_s	-	numero di specie particellari presenti
n_j	-	forza adimensionale netta su una particella di specie j

\bar{n}	-	forza adimensionale media netta
N_j	N	forza netta su una particella appartenente alla specie j
p	N/m ²	pressione dissipativa, al netto del contributo idrostatico
P	N/m ²	pressione assoluta
R_h	m	raggio idraulico
Re	-	numero di Reynolds
\overline{Re}	-	numero di Reynolds medio
\mathbf{s}_i	m	vettore posizione della particella i -esima
$s_{y,i}$	m	componente lungo l'asse y del vettore posizione della particella i
\mathbf{S}_d	N/m ³	forza di interazione solido-fluido di puro drag per unità di volume
\mathbf{S}_w	N/m ³	forza di interazione solido-fluido complessiva per unità di volume
$\tilde{\mathbf{S}}_f$	N/m ²	tensore degli sforzi
$\tilde{\mathbf{S}}_j$	N/m ²	tensore degli sforzi per j -esima fase particellare
t	s	tempo di integrazione
u	m/s	velocità superficiale di scorrimento relativo
\mathbf{U}_f	m/s	velocità del fluido
\mathbf{U}_i	m/s	velocità della i -esima particella solida
V_{avg}	m ³	volume della particella di diametro D_{avg}
V_i	m ³	volume della i -esima particella solida
$V_{t,j}$	m ³	volume complessivo della j -esima specie
w_j	-	forza adimensionale complessiva su una particella di specie j
\mathbf{W}_j	N	forza complessiva su una particella appartenente alla specie j
x_j	-	frazione volumetrica relativa della j -esima specie solida
$X(D)$	1/m	PDF della distribuzione particellare
y_j	-	indice di polidispersione specifico per la specie j
y_m	-	indice di polidispersione media

SIMBOLI A LETTERE GRECHE

α_j	-	coefficiente di specificazione della forza netta sulla specie j
β	kg/(m ³ ·s)	coefficiente di trasferimento interfase della quantità di moto
γ	-	parametro di fitting
Δp	N/m ³	perdita di carico tra ingresso e uscita in direzione verticale y
Δt	s	passo temporale di integrazione
ε	-	grado di vuoto
ε_j	-	grado di vuoto raggiunto dalla specie j quando fluidizzata pura
θ_i	rad	vettore rotazione della particella i -esima
μ_f	kg/(m·s)	viscosità di shear
μ_f^*	kg/(m·s)	viscosità di massa (o di bulk)
ρ_f	kg/m ³	densità del fluido
ρ_j	kg/m ³	densità della j -esima specie solida
ρ_s	kg/m ³	densità dell'unica specie solida presente
σ	m	dimensione caratteristica della scala di indagine
$\bar{\tau}_f$	N/m ²	tensore deviatorico degli sforzi
ϕ	-	frazione volumetrica assoluta (concentrazione) del solido
ϕ_j	-	frazione volumetrica assoluta della j -esima specie solida
ψ	m ³	volume di controllo
ω_i	rad/s	velocità angolare della particella i -esima
Ω_j	-	coefficiente di specificazione della forza di puro drag sulla specie j

SIMBOLI LEGATI AL DEM-CFD

B	m	spessore del sistema rappresentativo del letto particellare
D_c	m	diametro della colonna

$\mathbf{F}_{tot,i}^n$	N	forza totale agente al passo temporale n sulla particella i
H	m	altezza del sistema rappresentativo del letto particellare
$H_{b,j}$	m	altezza del baricentro della j -esima
$H_{b,t}$	m	altezza del baricentro totale del sistema polidisperso
H_t	m	altezza totale del letto
L	m	larghezza del sistema rappresentativo del letto particellare
Mc	-	numero dei processi su cui si distribuisce il calcolo
Mr	-	numero delle celle lungo x coinvolte nel processo
Mx	-	numero di celle in direzione x
My	-	numero di celle in direzione y
Mz	-	numero di celle in direzione z
$r_{i,x}$	-	frazione del volume della particella i distribuita in direzione x
$r_{i,y}$	-	frazione del volume della particella i distribuita in direzione x
$\mathbf{R}_{c,i-k}$	m	vettore orientato dall'ostacolo k fino al centro della particella i
SU	-	speedup effetto dell'uso di Mc processi
T_0	s	tempo totale impiegato nel calcolo dal codice seriale
T_{0P}	s	tempo inerente la parte parallelizzabile di T_0
T_{0S}	s	tempo inerente la parte seriale e non parallelizzabile di T_0
T_{Mc}	s	tempo impiegato quando operano Mc processi
$u _i$	m/s	velocità superficiale di scorrimento mediata intorno alla particella i
$V_{t,j} _i$	m ³	volume complessivo della specie j mediato intorno alla particella i
$V_{t,j} _{L,J}$	m ³	volume totale della specie j nella cella di indice L,J
$\langle \dots \rangle$	[...]	grandezza ottenuta da una media temporale

Bibliografia

Anderson K., Sundaresan S. and Jackson R., 1995. *Instabilities and the formation of bubbles in fluidized beds.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 303, 327-366.

pag. 10, 27

Anderson T. B. and Jackson R., 1967. *A fluid mechanical description of fluidized beds.* INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY FUNDAMENTALS 6, 527-539.

pag. 10, 18, 19, 20, 22, 25, 26, 56, 59

Baeyens J. and Geldart D., 1974. *An investigation into slugging fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 29 (1), 255-265.

pag. 6

Basset A. B., 1888. *On the motion of a sphere in a viscous liquid.* PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS OF THE ROYAL SOCIETY A 179, 43-63.

pag. 36

Batchelor G. K. and Wen C.-S., 1982. *Sedimentation in a dilute polydisperse system of interacting spheres. Part 2. numerical results.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 124, 495-528.

pag. 91

Batchelor G. K., 1972. *Sedimentation in a dilute dispersion of spheres.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 52, 245-268.

pag. 82, 83

Batchelor G. K., 1982. *Sedimentation in a dilute polydisperse system of interacting spheres. Part 1. general theory.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 119, 379-408.

pag. 91

Beetstra R., 2005. *Drag force in random arrays of mono- and bidisperse spheres.* PHD THESIS, UNIVERSITY OF TWENTE, ENSCHEDE.

pag. 17, 88, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 120, 123, 129, 130, 134, 139, 151, 156, 245, 250, 262, 282

Beetstra R., van der Hoef M. A. and Kuipers J. A. M., 2007a. *Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-Boltzmann simulations.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 62 (1-2), 246-255.

pag. 10

Beetstra R., van der Hoef M. A. and Kuipers J. A. M., 2007b. *Drag Force of Intermediate Reynolds Number Flow Past Mono- and Bidisperse Arrays of Spheres.* AIChE JOURNAL 53 (2), 489-501.

pag. 71, 75, 85, 86, 87, 88, 98, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 125, 129, 130, 134, 139, 245, 250, 262

Beetstra R., van der Hoef M. A. and Kuipers J. A. M., 2007c. *Erratum.* AIChE JOURNAL 53 (11), 3020.

pag. 74, 75

Benyahia S., Syamlal M. and O'Brien T. J., 2009. *Extension of Hill–Koch–Ladd drag correlation over all ranges of Reynolds number and solids volume fraction.* POWDER TECHNOLOGY 162, 166-174.

pag. 75, 86, 107, 112

Berlemont A., Desjonqueres P. and Gouesbet, G., 1990. *Particle Lagrangian simulation in turbulent flows.* INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW 16, 19-34.

pag. 36

Bhattacharya S. and Dutta B. K., 2002. *Effective voidage model of a binary solid–liquid fluidized bed: application to solid layer inversion.* INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH 41, 5098-5108.

pag. 92, 164

- Bird G. A., 1976.** *Molecular Gas Dynamics*. CLARENDON PRESS, OXFORD.
pag. 13
- Bird G. A., 1994.** *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. CLARENDON PRESS, OXFORD.
pag. 13
- Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N, 1960.** *Transport phenomena*. WILEY (NEW YORK).
pag. 13, 22, 78
- Bokkers G. A., Laverman J. A., van Sint Annaland M. and Kuipers J. A. M., 2007a.** *Modelling of large-scale dense gas-solid bubbling fluidised beds using a novel discrete bubble model*. CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 61, 5590-5602.
pag. 11
- Boussinesq J., 1885.** *Sur la resistance qu'oppose un liquide indefini en repos*. COMPTES RENDUS DE L'ACADÉMIE DES SCIENCES 100, 935-937.
pag. 36
- Cai P., Chen S. P., Jin Y., Yu Z.-Q. and Wang Z.-W., 1989.** *Effect of Operating Temperature and Pressure on the Transition from Bubbling to Turbulent Fluidization*. AIChE SYMP SER. 85, 37-43.
pag. 7
- Carman P. C., 1937.** *Fluid flow through granular beds*. TRANSACTIONS OF THE INSTITUTION OF CHEMICAL ENGINEERS 15, 150-166.
pag. 10, 73, 75, 82, 83, 121, 144
- Castellanos A., 2000.** *The relationship between attractive interparticle forces and bulk behaviour in dry and uncharged fine powders*. ADVANCES IN PHYSICS 54 (4), 263-376.
pag. 40, 41

Cate A. T. and Sundaresan S., 2006. *Analysis of unsteady forces in ordered arrays of monodisperse spheres.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 552, 257-287.

pag. 36

Chen S. and Doolen G. D., 1998. *Lattice Boltzmann method for fluid flows.* ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS 30, 329-364.

pag. 14

Clift R., Grace J. R. and Weber M. E., 1978. *Bubbles, Drops and Particles.* ACADEMIC PRESS, NEW YORK.

pag. 24, 29, 37, 76

Cundall P. A. and Strack O. D. L., 1979. *A discrete numerical model for granular assemblies.* GÉOTECHNIQUE 29 (1), 47-65.

pag. 10, 46

Dagum L. and Menon R., 1998. *Open MP: An Industry-Standard API for Shared-Memory Programming.* IEEE COMPUTATIONAL SCIENCE AND ENGINEERING 5 (1), 46-55.

pag. 214

Dallavalle J., 1948. *Micromeritics: the technology of fine particles.* PITMAN, LONDON.

pag. 76, 168

Darmana D., Deen N. G. and Kuipers J. A. M., 2006. *Parallelization of an Euler-Lagrange model using mixed domain decomposition and a mirror domain technique: Application to dispersed gas-liquid two-phase flow.* JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 220 (1), 216-248.

pag. 218

Di Felice R., 1994. *The voidage function for fluid-particle interaction systems.* INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW 20, 153-159.

pag. 71, 85, 120, 165, 167, 245

Di Felice R., 1995. *Hydrodynamics of liquid fluidisation.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 50, 1213-1245.

pag. 29

Di Felice R., 2007. *Liquid suspensions of single and binary component solid particles—An overview.* CHINA PARTICUOLOGY 5 (5), 312-320.

pag. 96

Di Felice R., Gibilaro L. G. and Foscolo P. U., 1988. *On the inversion of binary solid liquid fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 43, 979-981.

pag. 161, 167

Di Maio F. P., Di Renzo A. and Trevisan D., 2009. *Comparison of heat transfer models in DEM-CFD simulations of fluidized beds with an immersed probe.* POWDER TECHNOLOGY 193, 257-265.

pag. 10

Di Renzo A. and Di Maio F. P., 2005. *An improved integral non-linear model for the contact of particles in Distinct Element simulation.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 60 (5), 1303-1312.

pag. 38, 47, 54, 174

Di Renzo A. and Di Maio F. P., 2007. *Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations: hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 62 (1-2), 116-130.

pag. 27

Di Renzo A., Di Maio F. P., Girimonte R. and Formisani B., 2008. *DEM simulation of the mixing equilibrium in fluidized beds of two solids differing in density.* POWDER TECHNOLOGY 184 (2), 214-223.

pag. 10

Ding J. and Gidaspow G., 1990. *A bubbling fluidization model using kinetic-theory of granular flow.* AICHE JOURNAL 36 (4), 523-538.

pag. 25, 27

Dowding C. H., Dymytryshyn O. and Belytschko T. B., 1999. *Parallel processing for a discrete element program.* COMPUTERS AND GEOTECHNICS 25 (2), 281-285.

pag. 218

Epstein B., 2005. *The voidage function for the drag force ratio in a liquid-fluidized bed.* CANADIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING 83, 566-572.

pag. 164

Epstein N. and LeClair B. P., 1985. *Liquid fluidization of binary particle mixtures—II. Bed inversion.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 40, 1517-1526.

pag. 164, 175, 176, 183, 184, 187

Ergun S., 1952. *Fluid flow through packed columns.* CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS 48 (2), 89-94.

pag. 6, 10, 32, 71, 75, 82, 85, 93

Escudié R., Epstein N., Grace J. R. and Bi H. T., 2006. *Layer inversion phenomenon in binary-solid liquid-fluidized beds: Prediction of the inversion velocity.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 61, 6667-6690.

pag. 161, 168, 174, 177, 198

Fand R. M., Kim B. Y. K., Lam A. C. C. and Phan R. T., 1987. *Resistance to the flow of fluids through simple and complex porous media whose matrices are composed of randomly packed spheres.* ASME JOURNAL OF FLUIDS ENGINEERING 109, 268-273.

pag. 71, 82, 84, 88, 89, 111, 112, 113, 117, 122, 123, 245

Feng J., Hu H. H. and Joseph D. D., 1994a. *Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 1. Sedimentation.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 261, 95-134.

pag. 16

Feng J., Hu H. H. and Joseph D. D., 1994b. *Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. 2. Couette and Poiseuille flows.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 277, 271-301.

pag. 16

Feng Y. Q. and Yu A. B., 2004. *Assessment of Model Formulations in the Discrete Particle Simulation of Gas-Solid Flow.* INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH 43, 8378-8390.

pag. 23

Fletcher C. A., 1988a. *Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol I: Fundamental and General Techniques.* SPRINGER VERLAG, BERLINO.

pag. 14

Fletcher C. A., 1988b. *Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol II: Specific Techniques for Different Flow Categories.* SPRINGER VERLAG, BERLINO.

pag. 14

Flynn M. J., 1972. *Some Computer Organizations and Their Effectiveness.* IEEE TRANSACTIONS ON COMPUTING C-21 9, 948-960.

pag. 213

Formisani B., De Cristofaro G. and Girimonte R., 2001. *A fundamental approach to the phenomenology of fluidization of size segregating binary mixtures of solids.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 56, 109-119.

pag. 9

Foscolo P. U., Gibilaro L. G. and Waldram S. P., 1983. *A unified model for particulate expansion of fluidised beds and flow in fixed porous media.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 38, 1251-1260.

pag. 29, 73, 93

Fox G. C., Johnson M. A., Lyzenga G. A., Otto S. W., Salmon J. K. and Walker D. W., 1988. *Solving Problems on Concurrent Processors.* PRENTICE HALL ENGLEWOOD CLIFFS, NEW YORK.

pag. 214

Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y., 1986. *Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation.* PHYSICAL REVIEW LETTERS 56, 1703-1759.

pag. 13

Funamizu N. and Takakuwa T., 1995. *An improved Richardson-Zaki formula for computing mixed layer composition in binary solid-liquid fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 50, 3025-3032.

pag. 161, 165, 167

Gady B., Schleef D., Reifenberger R., Rimai D. and DeMejo L. P., 1996. *Identification of electrostatic and van der Waals interaction forces between a micrometer-size sphere and a flat substrate.* PHYSICAL REVIEW B - CONDENSED MATTER 53 (12), 8065-8070.

pag. 40

Geldart D., 1973. *Types of gas fluidization.* POWDER TECHNOLOGY 7, 285-292.

pag. 7, 8, 9, 40

Gelderbloom S. J., Gidaspow D. and Lyczkowsky R. W., 2003. *CFD simulations of bubbling/collapsing fluidized beds for three Geldart groups.* AIChE JOURNAL 49, 844-858.

pag. 22

- Gibilaro L. G., 2001.** *Fluidization-Dynamics*. BUTTERWORTH-HEINEMANN (OXFORD).
pag. 10, 75
- Gibilaro L. G., Di Felice R., Waldram S. P. and Foscolo P. U., 1986.** *A predictive model for the equilibrium composition and inversion of binary-solid liquid fluidized beds*. CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 41, 379-387.
pag. 34, 73, 93, 95, 161, 163, 165, 167
- Gidaspow D., 1994.** *Multiphase flow and fluidization*. ACADEMIC PRESS (NEW YORK).
pag. 18, 20, 21, 22, 23
- Girimonte R. and Formisani B., 2009.** *The minimum bubbling velocity of fluidized beds operating at high temperature*. POWDER TECHNOLOGY 189, 74-81.
pag. 9
- Giusti A., Lucci F. and Soldati A., 2005.** *Influence of the lift force in direct numerical simulation of upward/downward turbulent channel flow laden with surfactant contaminated microbubbles*. CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 60, 6176-6187.
pag. 37
- Glowinski R., Pan T. W., Helsen T. I., Joseph D. D. and Périaux J., 2001.** *A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: application to particulate flow*. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 169 (2), 363-426.
pag. 16, 17
- Gropp W., Lusk E. and Skjellum A., 1999.** *Using MPI Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*. MIT PRESS.
pag. 216
- Hasimoto H., 1959.** *On the periodic fundamental solutions of the stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres*. JOURNAL OF FLUID MECHANICS 5, 317-328.
pag. 24, 29, 81

Hill R. J., Koch D. L. and Ladd A. J. C., 2001a. *The first effects of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 448, 213–241.

pag. 10, 24, 29, 75, 81, 87, 88, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 252

Hill R. J., Koch D. L. and Ladd A. J. C., 2001b. *Moderate-reynolds-number flows in ordered and random arrays of spheres.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 448, 243-278.

pag. 10, 24, 29, 75, 81, 85, 87, 88, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 252

Hillis W. D. and Steele G. L. J., 1986. *Data parallel algorithms.* COMMUNICATIONS OF THE ACM 29 (12), 1170-1183.

pag. 216

Hoomans B. P. B., 1999. *Granular dynamics of gas-solid two-phase flows.* PHD THESIS, UNIVERSITY OF TWENTE, ENSCHEDE.

pag. 93

Hoomans B. P. B., Kuipers J. A. M., Briels W. J. and van Swaaij W. P. M., 1996. *Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidized bed: a hard-sphere approach.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 51 (1), 99-118.

pag. 10, 27, 38, 46

Howley M. A. and Glasser B. J., 2002. *Hydrodynamics of a uniform liquid-fluidized bed containing a binary mixture of particles.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 57, 4209-4226.

pag. 170

Hu X., 2002. *The segregation in the binary-solid liquid fluidized bed.* CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY 25, 911-915.

pag. 164

Hustrulid A. I., 1997. *Parallel implementation of the discrete element method.*
REPORT, ENGINEERING DIVISION, COLORADO SCHOOL OF MINES, GOLDEN.

pag. 218

Jackson R., 2000. *Dynamics of Fluidized Particles. Cambridge Monographs on Mechanics.* CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, CAMBRIDGE.

pag. 22, 30, 31

Jankovic D. and Wolf-Gladrow D. A., 2006. *Lattice Gas Automata: Drying simulation in heterogeneous models.* MATHEMATICS AND COMPUTERS IN SIMULATION 72, 147-155.

pag. 13

Jean R. H. and Fan L. S., 1986. *On the criteria of solids layer inversion in a liquid-solid fluidized bed containing a binary mixture of particles.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 41, 1213-1245.

pag. 161, 167, 168, 169, 170

Koo S. and Sangani A. S., 2002. *Effective-medium theories for predicting hydrodynamic transport properties of bidisperse suspensions.* PHYSICS OF FLUIDS 14, 3522-3533.

pag. 92

Kuipers J. A. M., van Duin K. J., van Beckum F. H. P. and van Swaaij W. P. M., 1992. *numerical model of gas-fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 47, 1913-1924.

pag. 10, 27

Kuwagi K., Mikami T. and Horio M., 2000. *Numerical simulation of metallic solid bridging particles in a fluidized bed at high temperature.* POWDER TECHNOLOGY 109, 27-40.

pag. 42

Ladd A. J. C., 1994a. *Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1: theoretical foundation.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 271, 285-309.

pag. 16

Ladd A. J. C., 1994b. *Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2: numerical results.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 271, 311-339.

pag. 16

Leva M., 1959. *Fluidization.* MCGRAW-HILL BOOK COMPANY, NEW YORK.

pag. 6

Lin C. J., Wei W. C., Iwai T., Hong C. W. and Greil P., 2000. *Discrete element method (DEM) simulation and processing of Mo/Al₂O₃ granules in a fluidizing bed.* PROC. NATL. SCI. COUNC. ROC(A) 24 (5), 394-404.

pag. 41

Liu G. R. and Liu M. B., 2003. *Smoothed Particle Hydrodynamics - A Meshfree Particle Method.* WORLD SCIENTIFIC, SINGAPORE.

pag. 13

Mabrouk R., Chaouki J. and Guy C., 2007. *Effective drag coefficient investigation in the acceleration zone of an upward gas–solid flow.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 62, 318-327.

pag. 37

Mahinthakumar G. and Saied F., 2002. *A hybrid MPI-OpenMP implementation of an implicit finite-element code on parallel architectures.* INTERNATIONAL JOURNAL OF HIGH PERFORMANCE COMPUTING APPLICATIONS 16 (4), 371-393.

pag. 216

Maier R. S., Kroll D. M., Davis H. T. and Bernard R. S., 1999. *Simulation of flow in bidisperse spheres packings.* JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 217, 341-347.

pag. 10

Makkawi Y. T. and Wright P. C., 2003. *The voidage function and effective drag force for fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 58, 2035-2051.

pag. 85

Malevanets A., Kapral R., 1999. *Mesosopic model for solvent dynamics.* JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 110, 8605-8613.

pag. 13

Malone K. F., Xu B. H. and Fairweather M., 2007. *Numerical Investigation of the Layer-Inversion Phenomenon in Binary Solid Liquid Fluidized Beds.* 2007 ECI CONFERENCE ON THE 12TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON FLUIDIZATION - NEW HORIZONS IN FLUIDIZATION ENGINEERING 35, 297-304.

pag. 170, 171

Martignoni W. and de Lasa H. I., 2001. *Heterogeneous reaction model for FCC riser units.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 56, 605-612.

pag. 9

Masliyah J. H., 1954. *Hindered settling in a multispecies particle system.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 34, 1166-1168.

pag. 165

Matsuura A. and Akehata T., 1985. *Distribution of solid particles and bed expansion in a fluidised bed containing a binary mixture of particles.* 50TH ANNUAL MEETING OF SOCIETY OF CHEMICAL ENGINEERS OF JAPAN C-108.

pag. 161, 167, 176, 187, 188, 196

Maxey M. R. and Riley J. J., 1983. *Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow.* PHYSICS OF FLUIDS 26, 883-889.

pag. 36

McKeen T. and Pugsley T., 2003. *Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst.* POWDER TECHNOLOGY 129, 129-152.

pag. 39

McLaughlin L. J. and Rhodes M. J., 2001. *Prediction of fluidized bed behaviour in the presence of liquid bridges.* POWDER TECHNOLOGY 114, 213-223.

pag. 40

McNamara G. R. and Zanetti G., 1988. *Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata.* PHYSICAL REVIEW LETTERS 61, 2332-2335.

pag. 14

Mei R., Lawrence C. J. and Adrian R. J., 1991. *Unsteady drag on a sphere at finite Reynolds number with small fluctuations in the free-stream velocity.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 233, 613-631.

pag. 36

Mikami T., Kamiya H. and Horio M., 1998. *Numerical simulation of cohesive powder behaviour in a fluidized bed.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 53, 1927-1940.

pag. 40

Mittal R. and Iaccarino G., 2005. *Immersed boundary methods.* ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS 37, 239-261.

pag. 16

Monaghan J. J., 2005. *Smoothed particle hydrodynamics.* REPORTS ON PROGRESS IN PHYSICS 68 (8), 1703-1759.

pag. 13

Moritomi H., Iwase T. and Chiba T., 1982. *A comprehensive interpretation of solid layer inversion in liquid fluidised beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 37 (12), 1751-1757.

pag. 157, 159, 161, 167, 168, 169, 170, 176, 177, 178, 198, 199, 203, 206, 237, 240

Moritomi H., Yamagishi T. and Chiba T., 1986. *Prediction of complete mixing of liquid-fluidised binary solid particles.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 41, 297-305.

pag. 157, 161, 165

Nguyen N. Q. and Ladd A. J. C., 2002. *Lubrication corrections for lattice-boltzmann simulations of particle suspensions.* PHYSICAL REVIEW E 66 (2), 046708.1-046708.12.

pag. 16

Oseen C. W., 1927. *Über die Stokes'sche formel, und über eine verwandte aufgabe in der hydrodynamik.* HYDROMECHANIK 82, 21-29.

pag. 36

Owoyemi O., Mazzei L. and Lettieri P., 2007. *CFD modelling of binary fluidized suspensions and investigation of the role of particle-particle drag on mixing and segregation.* AIChE JOURNAL 53 (8), 1924-1940.

pag. 10, 22

Patankar S. V., 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow.* HEMISPHERE PUBLISHING CORPORATION (NEW YORK).

pag. 14

Patwardhan V. S. and Tien C., 1985. *Sedimentation and liquid fluidization of solid particles of different sizes and densities.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 40, 1051-1060.

pag. 92, 164

- Peskin C. S., 2002.** *The immersed boundary method.* ACTA NUMERICA 11, 479-517.
pag. 16
- Ran J., Zhang I., Tang Q. and Xin M., 2006.** *Numerical Simulation of the Particle Motion Characteristics in Boundary Layer of Gas-Solid Rotary Flow.* JOURNAL OF FLUIDS ENGINEERING 128 (3), 596-602.
pag. 37
- Rhodes M. J., Wang X. S., Nguyen M., Stewart P. and Liffman K., 2001a.** *Use of discrete element method simulation in studying fluidization characteristics: influence of interparticle force.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 56, 69-76.
pag. 41
- Rhodes M. J., Wang X. S., Nguyen M., Stewart P. and Liffman K., 2001b.** *Onset of cohesive behavior in gas fluidized beds: a numerical study using DEM simulation.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 56, 4433-4438.
pag. 41
- Richardson J. F., Zaky W. N., 1954.** *Sedimentation and fluidization. Part. I.* TRANSACTION OF THE INSTITUTION OF CHEMICAL ENGINEERS 32, 35-53.
pag. 84, 164
- Sangani A. S. and Acrivos A., 1982.** *Slow flow through a periodic array of spheres.* INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW 8, 343-360.
pag. 24, 29, 81
- Sarkar S., van der Hoef M. A. and Kuipers J. A. M., 2009.** *Fluid-particle interaction from lattice Boltzmann simulations for flow through polydisperse random arrays of spheres.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 64, 2683-2691.
pag. 74, 75, 149, 150, 151, 156, 272, 277
- Sawley M. L. and Cleary P. W., 1999.** *A parallel discrete element method for industrial granular flow simulations.* EPFL SUPERCOMPUTING REVIEW 11, 23-29.
pag. 218

Schiller L. and Naumann A., 1933. *Über die grundlegenden berechnungen bei der schwerkraftaufbereitung.* ZEITSCHRIFT DES VEREINES DEUTSCHER INGENIEURE 77, 318-320.

pag. 76, 78

Seibert K. D. and Burns M. A., 1996. *Simulation of Fluidized Beds and Other Fluid Particle Systems Using Statistical Mechanics.* AICHE JOURNAL 42 (3), 660-670.

pag. 13

Seville J. P. K., Willet C. D. and Knight P. C., 2000. *Interparticle forces in fluidisation: a review.* POWDER TECHNOLOGY 113, 261-268.

pag. 40, 42

Sharma N. and Patankar N. A., 2005. *A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particle flows.* JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 205, 439-457.

pag. 17

Souza J. A., Vargas J. V. C., von Meien O. F., Martignoni W. P. and Ordonez J. C., 2009. *The inverse methodology of parameter estimation for model adjustment, design, simulation, control and optimization of fluid catalytic cracking (FCC) risers.* JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY 84 (3), 343-355.

pag. 9

Succi S., 2001. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond.* CLARENDON, OXFORD.

pag. 14

Syamlal M. and O'Brien T. J., 1988. *Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds.* INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW 14, 473-481.

pag. 170

Syamlal M., 1985. *Multiphase hydrodynamics of gas-solid flow.* PHD THESIS, ILLINOIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY, CHICAGO.

pag. 93

Tanenbaum A. S., 1999. *Structured Computer Organization.* PRENTICE HALL, 4TH EDITION.

pag. 212

Theologos K. N. and Markatos N. C., 1993. *Advanced modeling of fluid catalytic cracking riser-type reactors.* AIChE JOURNAL 39, 1007-1017.

pag. 9

Tsuji Y., Kawaguchi T. and Tanaka T., 1993. *Discrete particle simulation of twodimensional fluidized bed.* POWDER TECHNOLOGY 77, 79-87.

pag. 10, 46

Tsuo Y. P. and Gidaspow D., 1990. *Computations of flow patterns in circulating fluidized beds.* AIChE JOURNAL 36, 885-896.

pag. 10, 27

Turton R. and Levenspiel O., 1986. *A short note on the drag correlation for spheres.* POWDER TECHNOLOGY 47, 83-86.

pag. 76, 78, 106, 107, 108, 110, 259

Uhlmann M., 2005. *The immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows.* JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 209, 448-476.

pag. 16

- van der Hoef M. A., Beetstra R. and Kuipers A. M., 2005.** *Lattice-Boltzmann simulations of low-Reynolds-number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres: results for the permeability and drag force.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 528, 233-254.
pag. 10, 15, 22, 29, 34, 70, 72, 73, 80, 86, 87, 88, 95, 96, 97, 98, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 127, 128, 129, 130, 134, 139, 245, 250, 262
- van der Hoef M. A., van Sint Annaland M., Deen N. G. and Kuipers J. A. M., 2008.** *Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Fluidized Beds: A Multiscale Modeling Strategy.* ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS 40, 47-70.
pag. 11, 12, 20, 21, 22
- Verlet L., 1967.** *Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules.* PHYSICAL REVIEW 159 (1), 98-103.
pag. 62
- Weber M. W. and Hrenya C. M., 2006.** *Square-well model for cohesion in fluidized beds.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 61, 4511-4527.
pag. 39
- Wen C. Y. and Yu Y. H., 1966.** *Mechanics of fluidization.* CHEMICAL ENGINEERING PROGRAM SYMPOSIUM. SERIES 62, 100-111.
pag. 6, 32, 71, 85, 93, 120
- Wylie J. J., Koch D. and Ladd A. J. C., 2003.** *Rheology of suspensions with high particle inertia and moderate fluid inertia.* JOURNAL OF FLUID MECHANICS 480, 95-118.
pag. 10
- Xu B. H. and Yu A. B., 1997.** *Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 52, 2785-2809.
pag. 10, 18, 20, 21, 22, 23, 27, 46

Xu B. H. and Yu A. B., 1998. *Authors reply to comments.* CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 53 (14), 2646-2647.

pag. 18, 20, 21, 22, 23

Xu B. H., Zhou Y. C., Yu A. B. and Zulli P., 2002. *Force structures in gas fluidized beds of fine powders.* WORLD CONGRESS ON PARTICLE TECHNOLOGY 4, SYDNEY.

pag. 41

Ye M., van der Hoef M. A. and Kuipers J. A. M., 2004. *A numerical study of fluidization behavior of Geldart A particles using a discrete particle model.* POWDER TECHNOLOGY 139, 129-139.

pag. 41

Yin X. and Sundaresan S., 2009a. *Drag Law for Bidisperse Gas–Solid Suspensions Containing Equally Sized Spheres.* INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH 48 (1), 227-241.

pag. 25, 37

Yin X. and Sundaresan S., 2009b. *Fluid-Particle Drag in Low-Reynolds-Number Polydisperse Gas–Solid Suspensions.* AIChE JOURNAL 55 (6), 1351-1368.

pag. 75, 80, 99, 101, 130, 134, 139, 147, 148, 269

Zhang Q., Yu H., Liu Y., Qian W. Z., Wang Y., Luo G. H. and Wei F., 2008. *Few Walled Carbon Nanotube Production in Large-scale by Nano-agglomerate Fluidized-bed Process.* NANO 3 (1), 45-50.

pag. 9

Zhang W., Noda R. and Horio M., 2004. *Evaluation of Lubrication Force on Colliding Particles for DEM Simulation of Fluidized Beds.* PROCEEDINGS OF THE SCEJ SYMPOSIUM ON FLUIDIZATION 10, 27-35.

pag. 37

Zhang Z. and Prosperetti A., 2005. *A second-order method for three-dimensional particle simulations.* JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 210, 292-324.

pag. 17, 22

Zhong W. Q., Jin B. S., Zhang Y., Wang X. F., Zhang M. Y. and Xiao R., 2009. *Description of Dynamic Behaviour of a Fluidized Bed with Biomass Fuels by Shannon Entropy Increment Analysis.* ENERGY & FUELS 23, 3167-3171.

pag. 9

Zhou Z. Y., Yu A. B. and Zulli P., 2009. *Particle Scale Study of Heat Transfer in Packed and Bubbling Fluidized Beds.* AIChE JOURNAL 55 (4), 868-884.

pag. 10

Ringraziamenti

Un primo e fondamentale ringraziamento va al Prof. Francesco Paolo Di Maio e l'Ing. Alberto Di Renzo, non solo per la disponibilità dimostratami, ma anche per il proficuo scambio di idee che ha rappresentato, nel cordiale confronto, uno stimolo essenziale nel lavoro di ricerca nel corso di questo lavoro di tesi. Sono loro grato per avermi proposto l'occasione di migliorarmi professionalmente mediante il dottorato ed i vari corsi e conferenze di grande interesse seguiti in questi tre anni. Per i dati sperimentali forniti, ma ancor più per gli utili suggerimenti ed i consigli ricevuti ringrazio il Prof. Brunello Formisani, l'Ing. Rosella Girimonte ed il Prof. Renzo Di Felice. Ringrazio nuovamente i miei supervisor ed il Prof. Girolamo Giordano per aver permesso che io potessi confrontarmi con l'insegnamento che era e rimane un sogno ed un'aspirazione. Un ricordo particolare dedico all'umanità Sig. Renato Mazzitelli.

Un grazie voglio giunga alla mia famiglia, composta di persone per me modello di ispirazione verso il sacrificio e l'onestà, parole spesso sinonimi nella società odierna; ai miei amici di una vita Giuseppe, Raffaella, Fabio ed Eliano, o di recente acquisizione, ma di non meno rilevante valore, Ambra, Vincenzino, Serena, Barbara, Alessio ed Azzurra, che mi hanno sostenuto ed incoraggiato nei momenti tristi, sorridendo insieme a me alla vita nei momenti di felicità; a tutte le persone che hanno popolato in questi anni il laboratorio, "compagni di merenda" e di allegria: tra gli altri Piera, Serafino, Giovanna, Francesco P., Giuliana, Alessandra, Maria Teresa, Francesco C. e Daniela.

Grazie alla sensibilità di Marzia ed al suo splendido modo di essere e di amare; un grazie alla mia umana imperfezione ed al sorriso, compagno di vita anche di fronte alle avversità.

*«Preferisco essere un sognatore fra i più umili, immaginando quel che avverrà,
piuttosto che essere signore fra coloro che non hanno sogni e desideri.»*

- Kahlil Gibran -