

POLITECNICO DI TORINO

Collegio di Ingegneria Chimica e dei Materiali

**Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Chimica e dei Processi Sostenibili**

Tesi di Laurea Magistrale

Modellizzazione di colonne a bolle slurry: regimi fluido-dinamici ed effetto del solido sospeso



Relatori

prof. Marco Vanni
prof. Antonio Buffo
prof. Daniele Marchisio

Candidato

Antonello Raponi

Anno Accademico 2019/2020
Sessione di ottobre 2020

Indice

Introduzione	XIX
Nozioni Teoriche.....	1
1 Caratteristiche delle colonne a bolle	3
1.1 Tipologie di colonne a bolle	3
1.2 Regimi di flusso e hold-up in sistemi gas-liquido	4
1.3 Distributore del gas	7
1.3.1 Distributore a piatto forato e correlazione di Geary e Rice	7
1.3.2 Distributore a piatto poroso	9
1.4 Colonne a bolle con solido sospeso: <i>slurry</i>	9
1.4.1 Effetto della concentrazione del solido sospeso	10
1.4.2 Effetto simultaneo della concentrazione e delle dimensioni del solido	10
1.4.3 Effetto dell'altezza iniziale del liquido	12
1.4.4 Effetto simultaneo della concentrazione del solido sospeso e dell'altezza iniziale di liquido	12
1.5 Metodologie di indagine	14
1.5.1 <i>Image analysis</i>	14
1.5.2 <i>Optical probe</i>	14
2 Modellizzazione del sistema e metodi di risoluzione	15
2.1 Modello Euleriano-Euleriano	15
2.2 Bilanci di popolazione	16
2.2.1 Equazione di bilancio di popolazione per CFD	18
2.2.2 Cinetiche di coalescenza e rottura.....	19
2.3 Equazioni di bilancio per il regime turbolento	20
2.3.1 Modello di chiusura della turbolenza: $k - \epsilon$	21
2.3.2 Modello di chiusura della turbolenza: $k - \omega$	24
2.3.3 Modello di chiusura della turbolenza: $k - \omega$ SST	24
2.3.4 <i>Bubble-Induced Turbulence: BIT</i>	25
2.4 Quantità di moto all'interfaccia, formule di chiusura.....	26
2.4.1 La forza di drag	27
2.4.2 Forza di Lift	32
2.4.3 Forze di lubrificazione alla parete.....	32
2.4.4 Forza di dispersione per la turbolenza	33
2.4.5 Forza della massa virtuale (o massa aggiunta)	34
2.5 Influenza del solido sospeso sulle proprietà del sistema	35

2.6 Metodologie di risoluzione delle equazioni di trasporto	37
2.6.1 Metodo ai volumi finiti: discretizzazione spaziale	37
2.6.2 Metodo ai volumi finiti: discretizzazione temporale	42
2.6.3 Accoppiamento pressione-velocità: PIMPLE	47
3 Sistemi investigati	53
3.1 Colonna di Orvalho <i>et al.</i>	53
3.2 Colonna di Ojima <i>et al.</i>	54
3.3 Colonna di Guan <i>et al.</i>	55
3.4 Colonna di Lakhdissi <i>et al.</i>	56
Metodologia e Risultati	57
4 Metodologia	59
4.1 Strumenti computazionali	59
4.2 <i>Pre-processing</i> e generazione della mesh	59
4.3 Risoluzione e impostazioni di calcolo	61
4.4 <i>Post-processing</i>	72
4.5 Procedura di simulazione	73
4.5.1 Proprietà chimico-fisiche dei fluidi	73
4.5.2 Geometria e Mesh	74
4.5.3 Velocità superficiale	74
4.5.4 Modello di chiusura della turbolenza	75
4.5.5 Scelta del diametro di bolla	75
4.5.6 Scelta del modello di drag	77
5 Sistema bifase	79
5.1 Definizione della griglia di calcolo	79
5.1.1 Scelta della griglia: direzione radiale	80
5.1.2 Scelta della griglia: direzione assiale	83
5.2 Considerazioni preliminari	85
5.3 Scelta del modello di chiusura della turbolenza	87
5.4 Risultati	89
5.4.1 Predizione dei profili locali di hold-up	89
5.4.2 Predizione dell'hold-up globale	91
6 Sistema trifase	99
6.1 Indagine sperimentale	99
6.1.1 Studi sperimentali di riferimento	100
6.1.2 Correlazioni semi-empiriche per l'hold-up	104
6.2 Proprietà dello slurry	105

6.3 Risultati.....	106
6.3.1 Scelta del diametro di bolla.....	106
6.3.2 Scelta della correlazione di confronto.....	110
6.3.3 Sistema trifase: concentrazione di solido del 5%	112
6.3.4 Sistema trifase: concentrazione di solido del 10%	113
6.3.5 Sistema trifase: concentrazione di solido del 20%	115
6.3.6 Confronto degli andamenti (correlazioni).....	116
6.3.7 Confronto degli andamenti (dati sperimentali).....	117
6.3.8 Stabilità del sistema	118
Conclusioni.....	121
Appendice.....	123
A.1 Transizione dei regimi e <i>swarm velocity</i>	123
A.1.1 Transizione dal regime omogeneo al regime di transizione	123
A.1.2 Transizione dal regime di transizione al regime eterogeneo.....	124

Elenco delle figure

1.1	Tipologie di colonne a bolle utilizzate nell'industria di processo [14]	3
1.2	Mappa dei regimi di flusso e rappresentazione fisica nella colonna. (a) regime di flusso omogeneo (b) hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas e regime di transizione. (c) regime di flusso eterogeneo [15]	4
1.3	Effetto del diametro della colonna sull'hold up globale a parità di <i>aspect ratio</i> [6]	5
1.4	Confronto tra sistema aria-acqua distillata e aria-soluzione elettrolitica per la colonna dello studio di Zahradník <i>et al.</i> [6]	6
1.5	Fasi della formazione della bolla. (a) Bolla formata e nuova bolla nascente. (b) Nascita della bolla. (c) Inizio della fase di ascesa (d) Continuo della fase di ascesa e accrescimento (e) Termine della fase di accrescimento e distacco della bolla [20]	8
1.6	Variazione dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas al variare della concentrazione su base volumica di solido e a diverse altezze iniziali di liquido [2]	10
1.7	Studio di Ojima <i>et al.</i> nel quale si mostra la dipendenza a parità di concentrazione di solido sospesa dell'hold-up locale per diversi valori del diametro di particella solida [3]	11
	Variazione dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas. (a) Sistema bifasico aria-acqua usato come riferimento per l'indagine per diversi valori dell'altezza iniziale del liquido. (b) Effetto sull'hold-up globale per un valore costante di altezza del liquido per bassi valori della concentrazione del solido. (c) Effetto sull'hold-up globale per un valore costante di altezza del liquido per alti valori della concentrazione del solido. [2]	12
1.8		
1.9	Effetto della concentrazione del solido con diverse altezze iniziali di liquido. (a) Altezza iniziale di 0.4 m (b) Altezza iniziale di 0.8 m (c) Altezza iniziale di 1.2 m. [2]	13
1.10	Effetto dell'altezza iniziale di liquido a diversi valori della concentrazione iniziale di solido sospeso. (a) Concentrazione di solido sospeso 0% (b) Concentrazione di solido sospeso 0.2% (c) Concentrazione di solido sospeso 10%. [2]	13
2.1	Schema del sistema per il quale è scritto il bilancio di popolazione	17
2.2	Schematizzazione della forza di drag [36]	27
2.3	Dipendenza della velocità terminale in funzione del diametro di bolla [37]	29

2.4	Diagramma delle correzioni di swarm tratte dalle studio di Marschall <i>et al.</i> [36]	31
2.5	Schematizzazione della forza di lift agente sulla fase gassosa dispersa [31]	32
2.6	Schematizzazione della forza di dispersione turbolenta [36]	33
2.7	Schematizzazione della forza di massa virtuale o aggiunta agente sulla fase gassosa dispersa [36]	34
2.8	Rappresentazione della densità apparente in funzione della concentrazione del solido con la densità corretta per il solido ($\rho_p = 1323 \frac{kg}{m^3}$) e incorretta ($\rho_s = 2354 \frac{kg}{m^3}$) [2].	35
2.9	Rappresentazione grafica delle principali correlazioni per il calcolo della viscosità apparente del liquido [2]	36
2.10	Metodo ai volumi finiti con nodi centrati all'interno dei volumi di controllo [1]	38
2.11	Schema bidimensionale dei nodi usato nel metodo dei volumi finiti e rappresentazione della notazione [1]	38
2.12	Schema tridimensionale dei nodi usato nel metodo dei volumi finiti e rappresentazione della notazione [1]	39
2.13	Confronto tra gli schemi di discretizzazione temporale [1]	47
2.14	Loop dell'algoritmo PIMPLE [50]	51
3.1	Assetto sperimentale utilizzato per lo studio della fluido-dinamica dell'articolo di Orvalho <i>et al.</i> [2].	53
3.2	Dominio computazionale usato nel lavoro di Ojima <i>et al.</i> [3]	55
3.3	Assetto sperimentale della colonna utilizzata dal gruppo di Guan <i>et al.</i> [4]	55
3.4	Assetto sperimentale della colonna utilizzata dal gruppo di Lakhdissi <i>et al.</i> [5]	56
4.1	Struttura degli ambienti di OpenFOAM [51]	58
4.2	Mesh di primo tentativo con partizione radiale 5 celle nel cerchio centrale, 5 celle nella prima corona circolare, 1 cella nella seconda corona circolare.	59
5.1	Profilo universale della friction velocity funzione della coordinata adimensionata y^+ per la scelta del modello della turbolenza	78
5.2	<i>SnapShoot</i> della discretizzazione spaziale della mesh A	79
5.3	<i>SnapShoot</i> della discretizzazione spaziale della mesh B	79
5.4	Confronto dei profili locali di hold-up ricavati attraverso le due mesh, A e B, sopra riportate per lo studio della <i>grid independence</i> . Velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$	80

5.5	Confronto tra la mesh A con suddivisione assiale di 200 celle e mesh C con suddivisione assiale di 400 celle in prossimità della base della colonna	81
5.6	Rappresentazione grafica del plateau per lo studio della <i>grid independence</i>	82
5.7	Schema riassuntivo dei parametri che influenzano il moto di ascesa dello sciame [37]	84
5.8	Istantanea del plume di bolle con velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e diametro di bolla di 4.5 mm	84
5.9	Istantanea del plume di bolle con velocità superficiale di $14 \frac{cm}{s}$ e diametro di bolla di 8 mm	85
5.10	Confronto dei profili locali di hold-up dei modelli $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ simulati sulla colonna in esame e il profilo sperimentale ottenuto per optical probe dalla colonna sperimentale	87
5.11	Confronto del profilo locale di hold-up alla velocità di $2 \frac{cm}{s}$ con quello sperimentale	88
5.12	Confronto del profilo locale di hold-up alla velocità di $14 \frac{cm}{s}$ con quello sperimentale	88
5.13	Hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas secondo Guan <i>et al.</i> [4]	92
5.14	Valori di hold-up in funzione della velocità superficiale del gas secondo Orvalho <i>et al.</i> [2] per diverse altezze di liquido	93
5.15	Confronto delle mappe costruite con dati sperimentali, simulazioni e correlazioni empiriche	94
6.1	Funzione di distribuzione delle particelle [2]	95
6.2	Variazione della mappa dei regimi di Orvalho <i>et al.</i> [2]	96
6.3	Profilo dell'hold-up locale alla velocità di $2 \frac{cm}{s}$ e concentrazione di solido $C_s = 0$ dell'articolo di Sarhan <i>et al.</i> [3]	97
6.4	Profilo dell'hold-up locale alla velocità di $2 \frac{cm}{s}$ e concentrazione di solido $C_s = 0.3$ dell'articolo di Sarhan <i>et al.</i> [3]	97
6.5	Confronto dei regimi di flusso con il sistema bifase in blu e slurry a concentrazione costante di solido sospeso ma diametro di particella crescente (da Lakhdissi <i>et al.</i> [5])	99
6.6	Confronto dei regimi di flusso con il sistema bifase in blu e slurry a concentrazione costante di solido sospeso ma diametro di particella crescente (da Lakhdissi <i>et al.</i> [5])	99
6.7	Diagramma dei profili locali di hold-up per i sistemi bifase e trifase con concentrazione del solido sospeso del 10% di Ojima <i>et al.</i> [3] alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$	104

6.8	Confronto delle correlazioni di Koide <i>et al.</i> e Reilly <i>et al.</i> con il sistema bifase convalidato con i dati sperimentali	106
6.9	Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly <i>et al.</i>	107
6.10	Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly <i>et al.</i>	109
6.11	Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly <i>et al.</i>	110
6.12	Confronto dell'andamento di hold-up globale in funzione delle diverse concentrazioni in volume di solido sospeso	111
6.13	Confronto dell'andamento dell'hold-up globale dello slurry con $C_s = 0.2$ in funzione della velocità superficiale tra la simulazione CFD, la correlazione di Reilly e i dati sperimentali dei gruppi di Orvalho <i>et al.</i> [2] e Lakhdiissi <i>et al.</i> [5]	117
6.14	<i>SnapShoot</i> del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.05$	118
6.15	<i>SnapShoot</i> del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.1$	118
6.16	<i>SnapShoot</i> del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.2$	119
A.1	Individuazione del punto critico c_1 . (a) mappa del regime nel piano α_{glob}, u_{sv} in cui è mostrato il punto critico c_1 e il punto SPO. (b) individuazione del punto c_1 nel piano $\frac{\alpha_{glob}}{1-\alpha_{glob}}, u_{sv}\alpha_{glob}$. (c) rappresentazione grafica del metodo per la scelta del valore critico c_1 . [29]	124
A.2	Individuazione del punto critico c_2 . (a) mappa del regime nel piano α_{glob}, u_{sv} in cui è mostrato il punto critico c_2 e il punto iniziale che corrisponde al punto in cui il regime eterogeneo è completamente sviluppato. (b) individuazione del punto c_2 nel piano $u_{sv}\alpha_{glob}, u_{sv}$. (c) rappresentazione grafica del metodo per la scelta del valore critico c_2 . [29]	125

Elenco delle tabelle

1.1	Confronto delle proprietà geometriche della colonna a bolle in esame e della colonna tratta dallo studio di Zahradnik <i>et al.</i> [6]	6
2.1	Condizioni al contorno e iniziali per risolvere il bilancio di popolazione	18
2.2	Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k- ϵ	23
2.3	Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k- ω	24
2.4	Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k- ω SST	25
2.5	Confronto tra correlazione e valore sperimentale calcolato [2].	36
3.1	Proprietà fisiche dell'acqua.	54
3.2	Caratteristiche geometriche e operative usate nello studio di Sarhan <i>et al.</i>	54
3.3	Proprietà chimico-fisiche dello studio di Sarhan et al.	54
4.1	Proprietà chimico-fisiche	59
4.2	Informazioni numeriche della geometria e della mesh del sistema in esame	60
4.3	Schemi di discretizzazione numerica, file fvScheme	61
4.4	Impostazioni solver, file fvSolution	62
4.5	File thermophysicalProperties.water	65
4.6	File turbulenceProperties.water	66
4.7	File thermophysicalProperties.air	66
4.8	File turbulenceProperties.air	67
4.9	File phaseProperties	67
4.10	File Allrun	70
4.11	Diametro di bolla usato per le simulazioni del sistema bifase	71
4.12	Diametro di bolla usato per le simulazioni del sistema trifase	71
4.13	Altezze a cui avviene la mediazione locale, lungo lo sviluppo radiale, delle principali grandezze di interesse	71
4.14	Parametri utilizzati nei file thermophysicalProperties.water e thermophysicalProperties.air	72
4.15	Parametri utilizzati nel file blockMeshDict.m4	73

4.16	Parametri utilizzati nel file Allrun	73
4.17	Parametri utilizzati nel file turbulenceProperties.water e turbulenceProperties.air	74
4.18	Parametri utilizzati nel file phaseProperties	74
4.19	Parametri utilizzati nel file sparger.py	75
4.20	Parametri utilizzati nel file phaseProperties	76
5.1	Caratteristiche delle griglie utilizzate per la <i>grid independence</i> radiale	78
5.2	Valori numerici di hold-up locale calcolati attraverso la mesh A e mesh B a parità di coordinata radiale adimensionata	80
5.3	Caratteristiche delle griglie utilizzate per la <i>grid independence</i> assiale	81
5.4	Valori numerici di hold-up globale calcolati attraverso la mesh A e mesh C a parità di infittimento radiale	81
5.5	Schematizzazione dei risultati di hold-up globali per ogni griglia	82
5.6	Schematizzazione del numero totale di celle per ogni griglia indagata	83
5.7	Valori di hold-up globale derivanti dai dati sperimentali e da simulazioni con modello $k - \varepsilon$ e $k - \omega$	86
5.8	Confronto tra la colonna simulata e quella di Guan <i>et al.</i> [4]	86
5.9	Limiti di validità per la correlazione di Hungmark <i>et al.</i> [52]	90
5.10	Valori numerici di hold-up globale ricavati con la correlazione di Hughmark <i>et al.</i>	90
5.11	Limiti di validità per la correlazione di Kumar <i>et al.</i> [52]	91
5.12	Valori numerici di hold-up globale ricavati con la correlazione di Kumar <i>et al.</i>	91
5.13	Valori numerici di hold-up globale reperiti nell'articolo di Guan <i>et al.</i> [4]	91
5.14	Valori numerici di hold-up globale reperiti nell'articolo di Orvalho <i>et al.</i> per $H_0 = 0.8 m$ [29]	93
5.15	Valori numerici di hold-up globale ottenuti tramite simulazione CFD con OpenFOAM	94
6.1	Densità delle tre fasi presenti	95
6.2	Principali caratteristiche del sistema studiato da Lakhdissi <i>et al.</i> [5]	98
6.3	Diametri delle particelle e concentrazione del solido sospeso studiati [5]	98

6.4	Limiti di validità della correlazione di Kito <i>et al</i> [7]	100
6.5	Limiti di validità della correlazione di Koide <i>et al</i>	101
6.6	Limiti di validità della correlazione di Reilly <i>et al</i>	101
6.7	Proprietà chimico-fisiche dello slurry in funzione delle concentrazioni in volume di solido sospeso	102
6.8	ThermophysicalProperties.water per $C_s = 0.1$	103
6.9	Valori numerici dei profili locali di hold-up per i sistemi bifase e trifase con concentrazione del solido sospeso del 10% di Ojima <i>et al.</i> [3] alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e abbassamento medio percentuale	104
6.10	Parametri utilizzati nel file phaseProperties (sistema trifase)	105
6.11	Valori numerici di hold-up globale ed errore medio percentuale riferito al sistema bifase	106
6.12	Errore medio percentuale	107
6.13	Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 5% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly <i>et al.</i>	108
6.14	Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_s = 0.05$	108
6.15	Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 10% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly <i>et al.</i>	109
6.16	Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_s = 0.1$	109
6.17	Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 20% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly <i>et al.</i>	110
6.18	Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_s = 0.2$	110

Elenco dei simboli

C_1^ε	Parametro adimensionato del modello $k - \varepsilon$	-
C_1^ω	Parametro adimensionato del modello $k - \omega$	-
C_2^ε	Parametro adimensionato del modello $k - \varepsilon$	-
C_2^ω	Parametro adimensionato del modello $k - \omega$	-
C_μ	Parametro adimensionato del modello $k - \varepsilon$	-
C_d	Coefficiente di drag di Schiller Naumann	-
C_{td}	Coefficiente di <i>turbulent dispersion</i>	-
C_{vm}	Coefficiente di <i>virtual mass</i>	-
C_{wl}	Coefficiente di <i>wall lubrication</i>	-
C_D	Coefficiente di drag	-
d_{eb}	Diametro di bolla	m
EO	Numero di <i>Eötvös</i>	-
F_{pk}	Forza per unità di superficie esercitata tra la fase p e k	$kg\ m^{-3}s^{-1}$
F_1	Parametro del modello $k - \omega$ SST	-
\mathbf{g}	Accelerazione di gravità	$m\ s^{-2}$
\mathbf{I}	Matrice identità	-
k	Energia cinetica turbolenta per unità di massa fluida	$m^{-2}s^{-2}$
l	Lunghezza caratteristica del modello <i>BIT</i>	m
L	Lunghezza caratteristica del modello $k - \varepsilon$	m
Mo	Numero di Morton	-
p	Pressione del fluido	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
\bar{p}	Pressione media del fluido	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
\bar{p}'	Pressione fluttuante del fluido	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
P_ε	Velocità di generazione dell'energia cinetica turbolenta	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
P_ω	Velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
q	Velocità caratteristica del modello $k - \varepsilon$	$m\ s^{-1}$
Re_b	Numero di Reynolds di bolla	-
S_{pk}	Velocità di scambio di materia tra la fase p e k	$kg\ m^{-3}s^{-1}$

\mathbf{u}	Vettore velocità del fluido	$m s^{-1}$
$\bar{\mathbf{u}}$	Vettore velocità media del fluido	$m s^{-1}$
$\bar{\mathbf{u}}'$	Vettore velocità fluttuante del fluido	$m s^{-1}$
\bar{u}'_x	Componente della velocità fluttuante lungo x	$m s^{-1}$
\bar{u}'_y	Componente della velocità fluttuante lungo y	$m s^{-1}$
\bar{u}'_z	Componente della velocità fluttuante lungo z	$m s^{-1}$
\mathbf{u}_g	Vettore velocità del gas	$m s^{-1}$
\mathbf{u}_k	Vettore velocità della fase k -esima	$m s^{-1}$
\mathbf{u}_l	Vettore velocità del liquido	$m s^{-1}$
\mathbf{u}_r	Vettore velocità relativa	$m s^{-1}$
u_x	Componente della velocità lungo x	$m s^{-1}$
u_y	Componente della velocità lungo y	$m s^{-1}$
u_z	Componente della velocità lungo z	$m s^{-1}$
y	Distanza dalla parete	m

Simbologia greca

α_{glob}	Hold-up globale	-
α_g	Frazione volumica della fase gassosa	-
α_k	Frazione volumica della fase k -esima	-
α_l	Frazione volumica della fase <i>liquida</i>	-
ε	Velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta	$m^{-2}s^{-3}$
σ	Tensione superficiale	$kg s^{-2}$
σ_k	Parametro adimensionato del modello $k - \varepsilon$	-
σ_ε	Parametro adimensionato del modello $k - \varepsilon$	-
σ_ω	Parametro adimensionato del modello $k - \omega$	-
$\sigma_{\omega 1}$	Parametro adimensionato del modello $k - \omega$	-
$\sigma_{\omega 2}$	Parametro adimensionato del modello $k - \omega$	-
ρ	Densità del fluido	$kg m^{-3}$
ρ_k	Densità della fase k -esima	$kg m^{-3}$

$\mu^{(t)}$	Viscosità dinamica turbolenta	$kg\ m^{-1}s^{-1}$
$\mu^{(v)}$	Viscosità dinamica molecolare	$kg\ m^{-1}s^{-1}$
$\nu_{SI}^{(t)}$	Viscosità cinematica turbolenta <i>shear-induced</i>	$m^{-2}s^{-1}$
$\nu_{BI}^{(t)}$	Viscosità cinematica turbolenta <i>bubble-induced</i>	$m^{-2}s^{-1}$
$\boldsymbol{\tau}$	Tensore flusso di quantità di moto	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
$\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)}$	Tensore flusso di quantità di moto turbolento	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
$\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(v)}$	Tensore flusso di quantità di moto molecolare o viscoso	$kg\ m^{-1}s^{-2}$
ω	Velocità specifica di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta in energia interna del fluido	$m^{-2}s^{-3}$

Introduzione

Le colonne a bolle sono apparecchiature bifasiche in cui la fase gassosa viene dispersa sotto forma di bolle nella fase continua liquida. Esiste, inoltre, la variante trifase in cui il gas e il solido granulare sono dispersi nella fase liquida; tale apparecchiatura è detta *slurry bubble column*, essendo lo *slurry* la sospensione solido-liquido.

Queste due tipologie di apparecchiature trovano ampio impiego nell'ambito reattoristico. In particolare, le colonne a bolle sono utilizzate quando è necessario abbattere inquinanti presenti in correnti gassose i quali vengono assorbiti fisicamente o chimicamente all'interno del liquido nel quale ha luogo la reazione; il parametro adimensionato che quantifica il peso relativo tra il trasporto dei reagenti lato liquido e la cinetica chimica è il *numero di Hatta*. Lo *slurry*, invece, è utilizzato quando è necessario procedere con particolari tipologie di reazioni in cui il solido agisce da catalizzatore come, ad esempio, idrogenazioni, ossidazioni con ossigeno molecolare o alchilazioni; il parametro adimensionato che descrive il rapporto tra la resistenza al trasporto all'interno della particella solida e la velocità di reazione è, in questo caso, il *modulo di Thiele*.

Le colonne a bolle, nella loro forma più semplice, sono apparecchiature verticali di forma cilindrica con un distributore per il gas nella sezione d'ingresso la cui funzione è la generazione dello sciame di bolle. Il rapporto tra l'altezza iniziale di liquido e il diametro è variabile ma in generale compreso tra 3 e 10.

Le apparecchiature multifase possono essere raggruppate secondo diverse classificazioni. Il modo più semplice è classificare il sistema relativamente alle fasi termodinamiche presenti; ogni fase presente può ulteriormente essere classificata sulla base del suo moto di flusso. In particolare, si possono distinguere sistemi con flusso disperso, miscelato oppure segregato. Le colonne a bolle, con e senza la presenza di solido sospeso, rientrano nella categoria di sistemi gas-liquido (solido) con flusso disperso del gas. Inoltre, la fase liquida può sia operare in batch che procedere in equi-corrente oppure in contro-corrente rispetto al moto del gas, sempre diretto dal basso verso l'alto; quest'ultimo è generalmente alimentato alla stessa velocità con cui viene consumato. A tal proposito, intervalli comuni delle velocità superficiali del liquido e del gas, basati cioè sulla sezione di passaggio della colonna, sono generalmente compresi tra 0 e $3 \frac{cm}{s}$ per il primo e tra 3 e $25 \frac{cm}{s}$ per il secondo.

La comprensione della dinamica dei sistemi multifase gas-liquido (solido) costituisce un problema aperto e di cruciale importanza dal punto di vista ingegneristico e, in senso lato, scientifico. Dal punto di vista matematico, i sistemi multifase sono notoriamente complessi e molto di ciò che conosciamo è ottenuto attraverso prove sperimentali e *scaling analysis*. Infatti, non solo le equazioni governanti il moto delle fasi presenti sono altamente non-lineari, ma anche la posizione dell'interfaccia deve essere trovata come parte della soluzione. Soluzioni analitiche esatte, dunque, esistono solo per sistemi semplici che obbediscono a ipotesi specifiche il cui interesse è puramente accademico. L'esigenza di soluzioni numeriche per le equazioni di governo, dunque, ha portato la comunità scientifica ad impegnarsi per un rapido sviluppo della fluido dinamica computazionale dalla fine degli anni sessanta.

Sono stati sviluppati, dunque, diversi approcci per modellizzare matematicamente questi sistemi e ottenerne la soluzione. I tre più comunemente usati sono:

- a) approccio “*Volume of fluid*” (*VOF*): con identificazione dell’interfaccia gas-liquido
- b) approccio Euleriano per la fase continua e Lagrangiano per tutte le fasi disperse
- c) approccio Euleriano per tutte le fasi presenti

Il primo approccio è quello concettualmente più semplice. Con questo approccio, infatti, il moto di tutte le fasi presenti è modellato dalla formulazione locale, cioè in termini differenziali, delle equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto considerando opportune condizioni al contorno per il salto di proprietà all’interfaccia. Il limite di questo approccio consiste nella necessità di risolvere l’interfaccia di ogni bolla presente, oltre alla non stazionarietà nel tempo e nello spazio dell’interfaccia che può portare a una formulazione complessa in cui le condizioni all’interfaccia possono variare: si riformula, perciò, il problema in termini di forze per unità di volume per superare questo ostacolo.

Nell’approccio Euleriano-Lagrangiano, le traiettorie delle fasi disperse sono simulate risolvendo le equazioni di moto per ogni particella di fase dispersa presente: il moto della fase continua è modellata tramite approccio Euleriano. Storicamente, l’equazione del moto per una singola particella solida in un fluido stagnante è stata studiata da Stokes il quale ha derivato la nota formula per il *drag*. Nel corso degli anni diverse generalizzazioni sono state proposte. Un ottimo punto di partenza risiede nelle equazioni BBO, *Basset-Boussinesq-Oseen* (Gouesbet *et al.*, 1984, [8]), successivamente generalizzate da Tchen, 1947, [9], nel caso di fase continua in moto fino a giungere alla forma generalizzata proposta da Maxey e Riley, 1983, [10].

L’ultimo approccio, Euleriano-Euleriano, considera e risolve le equazioni modellando anche la fase dispersa come un continuo. Questa metodologia di risoluzione è particolarmente adatta quando il sistema multifase ha una significativa frazione in volume della fase dispersa (maggiore del 10%), situazione tipica in particolari reattori industriali come letti fluidizzati e, appunto, colonne a bolle. Inoltre, al contrario dei flussi a singola fase per i quali possono essere formulate equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto rigorose, per i processi multifase con sistemi dispersi tali equazioni non possono essere formulate senza considerare un’opportuna mediazione. Infatti, differenti metodi per la mediazione sono stati proposti e usati: in particolare medie temporali (Ishii, 1975, [11], e Drew, 1983, [12],) oppure medie volumiche (Harlow e Amsden, 1975, [13]).

Questo lavoro di tesi, dunque, si prefigge l’obiettivo di indagare la capacità di modelli euleriani-euleriani di predire il comportamento di colonne a bolle: in particolare di mappare l’hold up globale in funzione della velocità superficiale del gas in un sistema bifasico (colonna a bolle) e, in seconda analisi, la risposta del sistema, sempre in termini di flusso, quando un solido granulare viene finemente disperso nel liquido (*slurry*).

Nel seguito, sarà brevemente descritta la struttura della tesi e il contenuto dei capitoli; globalmente essa è stata suddivisa in due macro-sezioni. La prima nella quale vengono sviluppati i concetti teorici alla base del fenomeno indagato, la seconda nella quale sono discusse le modalità di indagine, i principali strumenti utilizzati, i risultati ottenuti e attesi.

Il primo capitolo tratta inizialmente l’aspetto impiantistico-progettuale delle colonne e fornisce uno stato dell’arte. In particolare, vengono discussi la fluido-dinamica delle colonne, i principali layout impiantistici utilizzati e le tipologie di piatti utilizzati e loro modellizzazione matematica per il processo di formazione delle bolle. In seconda istanza,

invece, si fornisce un quadro generale dei principali parametri che possono influenzare l'hold-up globale e il rapporto funzionale che li lega.

Il secondo capitolo tratta e sviluppa le equazioni che governano i sistemi multifase, con particolare interesse per i sistemi bifase. In particolare, nella prima metà del capitolo vengono descritti i principali modelli di chiusura della turbolenza sia dal punto di vista teorico che della fluido-dinamica computazionale con particolare riferimento ai valori numerici dei parametri utilizzati nelle simulazioni. La seconda parte del capitolo, invece, sviluppa nel dettaglio le principali forze che possono agire sulla bolla per la risoluzione della seconda equazione di Newton. Infine nell'ultima vengono descritte le tecniche di simulazione numerica

Nel terzo capitolo, ultimo della prima sezione, sono riportate le principali caratteristiche dei sistemi sperimentali indagati.

Il terzo capitolo, dunque, conclude la prima sezione della tesi e introduce la seconda: in particolare, il quarto capitolo. In quest'ultimo, infatti, i protagonisti sono i metodi d'indagine dal punto di vista computazionale con riferimento al software utilizzato e ai principali passi atti al corretto lancio delle simulazioni per la modellizzazione del sistema bifase.

Il quinto capitolo, basato sulle ipotesi discusse nel quarto, analizza i dati sperimentali di diversi autori tratti da più articoli e di correlazioni empiriche atti a validare quelli derivanti dal processo di simulazione. In particolare vengono descritti i principali passi concettuali percorsi in fase di modellizzazione: le forze da dover considerare e quelle trascurabili, lo studio della *grid independence*, la scelta del modello di chiusura della turbolenza e, in ultimo, il confronto tra dati attesi e simulati che ha mostrato ottima qualità del modello utilizzato

Il sesto, e ultimo, capitolo studia il comportamento delle colonne a bolle slurry a diverse concentrazioni di solido sospeso. In, ultimo, seguono le conclusioni relative al lavoro modellistico condotto.

Parte I

Nozioni Teoriche

1 Caratteristiche delle colonne a bolle

Lo scopo principale di una colonna a bolle è quello di realizzare l'intimo contatto tra una fase gassosa, detta dispersa, e una fase liquida, detta continua attraverso la dispersione del gas come bolle.

1.1 Tipologie di colonne a bolle

Nell'ambito delle apparecchiature multifase le colonne a bolle godono di una certa variabilità; infatti, a seconda delle diverse esigenze richieste dal processo, molte sono le configurazioni che possono essere impiegate. Un particolare caso, mostrato in Figura 1.1, è la colonna a bolle *downflow* nella quale il gas è alimentato dall'alto verso il basso. Il principale vantaggio di questa configurazione risiede nella possibilità di aumentare il tempo di residenza che nella tradizionale colonna a bolle, altrimenti, sarebbe solo determinato dal tempo di risalita legato alla velocità terminale dello sciame di bolle [14].

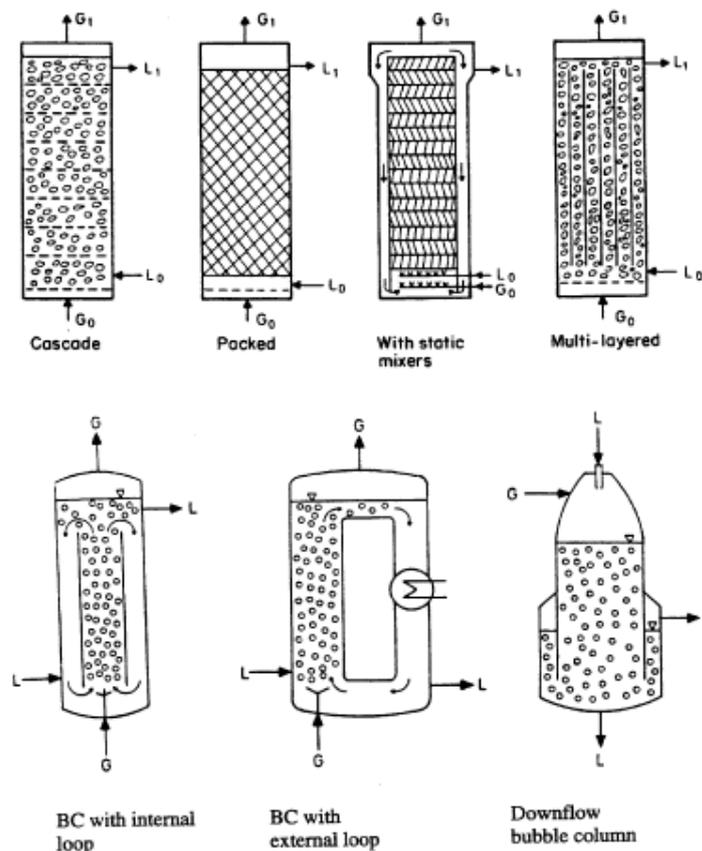


Figura 1.1, Tipologie di colonne a bolle utilizzate nell'industria di processo [14]

La particolarità di queste configurazioni rispetto al caso canonico risiede nella presenza di loop a circolazione forzata i quali permettono di realizzare processi con alte quantità di gas disperso attraverso un regime puramente omogeneo. In virtù di queste caratteristiche di flusso, le colonne a bolle con loop a circolazione forzata si prestano bene alle esigenze dei processi con biomassa che necessita di essere circondata da liquido a composizione

costante. In questo lavoro di tesi sarà investigata la configurazione più semplice: liquido fermo e gas alimentato uniformemente dal fondo.

1.2 Regimi di flusso e hold-up in sistemi gas-liquido

La fluidodinamica delle colonne a bolle rappresenta l'aspetto fondamentale da studiare per poterne ottimizzare le prestazioni. In particolare, sulla base dell'esperienza di laboratorio, si deduce che il regime dominante che si instaura all'interno della colonna dipende da specifici parametri. I regimi di flusso vengono convenzionalmente classificati in funzione della velocità superficiale del gas e se ne osservano tre :

- Regime di flusso omogeneo:** è il regime di flusso in cui le bolle non sono soggette a coalescenza. Il regime di flusso omogeneo può essere diviso, inoltre, in *omogeneo puro* o *omogeneo poli-disperso* a seconda che la dispersione della fase gassosa venga realizzata con distributori a fori piccoli o grossolani.
- Regime di transizione:** il cambiamento dal regime a flusso omogeneo e quello a flusso eterogeneo non è istantaneo ma passa attraverso il regime di transizione. Questo regime è caratterizzato dalla presenza delle bolle a dimensione maggiore che si formano in seguito a coalescenza
- Regime di flusso eterogeneo:** è il regime che si instaura quando si raggiungono elevate velocità superficiali del gas. A questo regime di flusso sono associate delle cinetiche di formazione e scomparsa delle bolle e una grande variabilità nella funzione di distribuzione delle dimensioni di bolla.

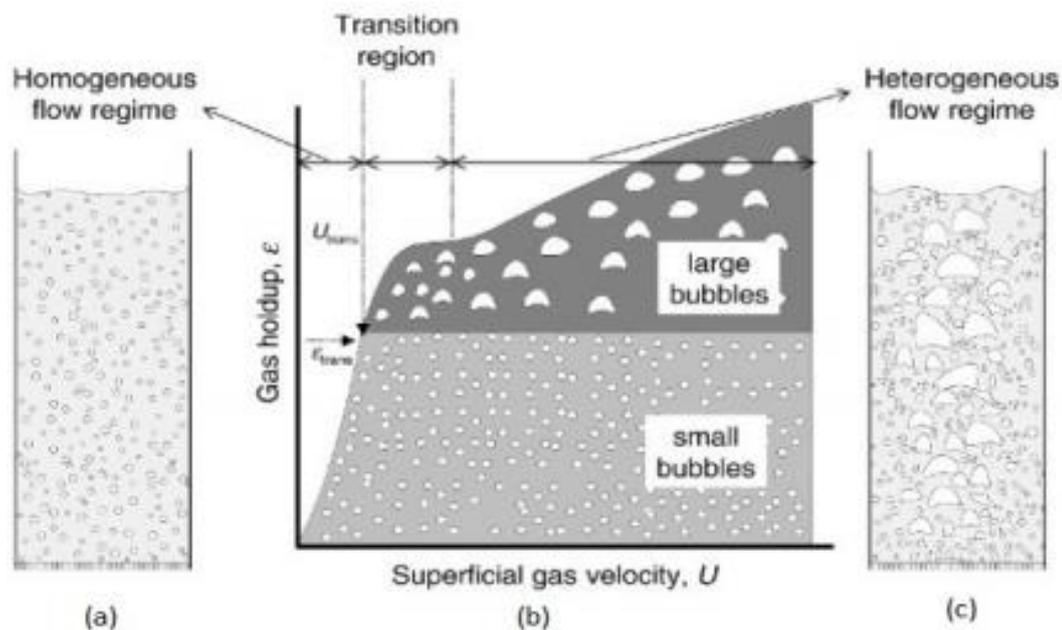


Figura 1.2, Mappa dei regimi di flusso e rappresentazione fisica nella colonna. (a) regime di flusso omogeneo; (b) hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas e regime di transizione; (c) regime di flusso eterogeneo [15]

In letteratura esistono numerosi articoli dedicati agli effetti delle dimensioni della colonna a bolle sui dati di hold-up in quanto è di fondamentale importanza se si pensa ad uno *scale up* dalla scala laboratoriale a impianto pilota o impianto industriale. I parametri geometrici che vengono usati sono il diametro della colonna, D_c , l'altezza iniziale del liquido, H_0 , e il loro rapporto, $AR = \frac{H_0}{D_c}$, definito *aspect ratio*. Secondo i criteri di scale up di *Wilkinson et*

al., le dimensioni della colonna risultano ininfluenti sulla fluido dinamica se sono contemporaneamente soddisfatte tre condizioni [16]:

1. Diametro della colonna a bolle maggiore di 0.15
2. L'*aspect ratio* maggiore di 5
3. Il diametro dei fori del distributore maggiore di 1-2 mm

Si noti, per completezza, che la definizione rigorosa dell'*aspect ratio*, di cui si tratterà nel continuo di questo paragrafo, è data dal rapporto tra l'altezza iniziale di liquido presente in colonna e il diametro della stessa, come già riportato e a cui si farà riferimento, ma è possibile trovare un'altra definizione, di validità pratica ma non usata nell'approccio teorico, che prevede il rapporto tra l'altezza della colonna e il suo diametro. In particolare, si può notare dalla Figura 1.3 [6], l'effetto separato del diametro della colonna a parità di *aspect ratio*:

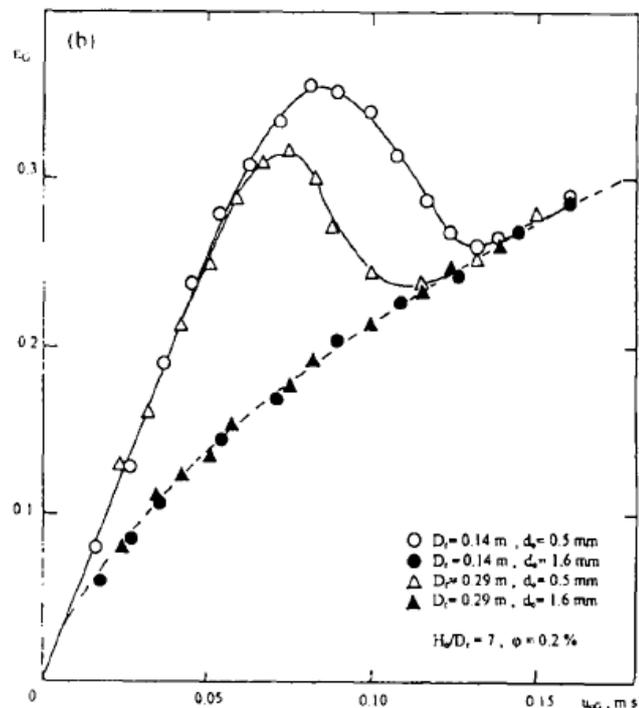


Figura 1.3, Effetto del diametro della colonna sull'hold up globale a parità di *aspect ratio* [6]

La Figura 1.3, infatti, mostra l'influenza negativa dell'aumento del diametro della colonna sia sull'estensione della regione di transizione sia sul massimo valore dell'hold up globale del gas in presenza di fori di piccola dimensione (<1 mm) nel distributore di gas.

In altri termini, il fatto che il regime eterogeneo si sposti a più bassi valori di velocità superficiali del gas può essere spiegato grazie all'assunzione (Joshi and Lali, 1984, [6]) secondo la quale la scala della turbolenza del regime eterogeneo è proporzionale al diametro della colonna e quindi aumenta con l'aumentare dello stesso. Nessuna influenza, invece, si riscontra quando il diametro dei fori dello sparger è uguale a 1.6 mm.

Lo studio dell'effetto di elettroliti sul comportamento delle colonne a bolle e quindi dell'hold-up globale, riportato in letteratura, fa riferimento ad una colonna geometricamente identica [6] a quella che questo studio tratta. In particolare, si riportano in Tabella 1.1 il confronto tra le due:

Tabella 1.1, Confronto delle proprietà geometriche della colonna a bolle in esame e della colonna tratta dallo studio di Zahradnik *et al.* [6]

	Zahradnik <i>et al.</i>	Colonna in esame
Diametro della colonna, m	0.14	0.14
Aspect Ratio, -	~5	5.7
Diametro dei fori, mm	0.5	0.5

La prima importante conclusione cui si giunge tramite l'analisi dei valori sperimentali riportati nell'articolo di Zahradnik *et al.* è che l'hold-up globale aumenta rispetto al caso del sistema con acqua distillata indipendentemente dalla natura dell'elettrolita presente nell'acqua come mostrato nella Figura 1.4:

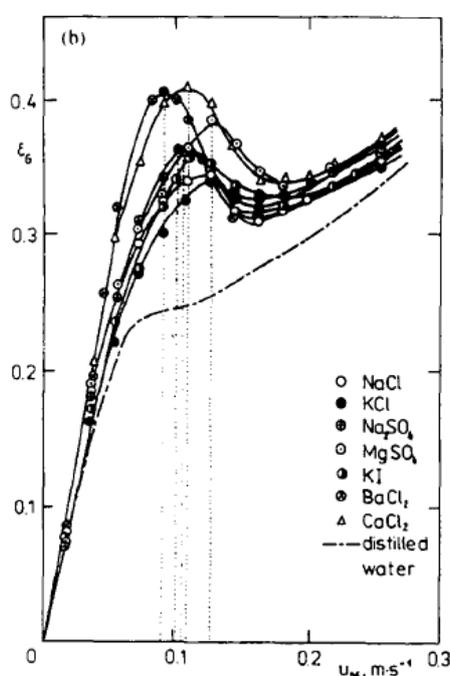


Figura 1.4, Confronto tra sistema aria-acqua distillata e aria-soluzione elettrolitica per la colonna dello studio di Zahradnik *et al.* [6]

Dalla Figura 1.4, inoltre, si deduce che la presenza di specie elettrolitiche nel liquido comportano una variazione sostanziale, in termini di dipendenza dell'hold-up dalla velocità superficiale, solo per il regime omogeneo e di transizione mentre convergono agli stessi valori nel caso del regime eterogeneo.

Un secondo studio sperimentale, inoltre, ha indagato l'effetto dell'aggiunta di tensioattivi. Infatti, dalle prove sperimentali condotte da Saito *et al.* [17] emerge che l'aggiunta di tensioattivo, il cui effetto è quello di diminuire la tensione interfacciale, determina la diminuzione della velocità terminale della bolla e del suo diametro.

L'altro aspetto trattato nell'ambito dell'influenza delle proprietà del liquido sulla fluidodinamica è l'effetto che una variazione di viscosità comporta al sistema. In generale il metodo di indagine utilizzato per studiare l'effetto della viscosità in fluidi Newtoniani è quello ottico sperimentale. Si riscontra che una variazione nella viscosità del liquido

comporta un cambiamento nella risalita della bolla: a tal proposito, un aumento della viscosità comporta una diminuzione della curvatura dello sciame di bolle che tende al limite a diventare lineare. Relativamente all'influenza sui regimi di flusso, uno studio condotto da Olivieri *et al.* (2011) [18] ha evidenziato che l'aumento della viscosità del liquido tende a stabilizzare il regime di flusso omogeneo. In particolare, lo studio di Olivieri *et al.* è stato comprovato dallo studio di Gemello *et al.* le cui prove sono state condotte utilizzando acqua distillata, acqua parzialmente contaminata e acqua con aggiunta di etanolo. L'evidenza più importante, a conferma del precedente studio, riguarda la diminuzione delle dimensioni di bolla con conseguente aumento dell'hold-up globale fino a valori di viscosità pari a $4.25 \text{ Pa} \cdot \text{s}$; infatti, un ulteriore aumento comporterebbe l'aumento delle dimensioni di bolla con conseguente diminuzione dell'hold-up. È stato inoltre riscontrato uno spostamento dei regimi di flusso e quindi della transizione tra i due nel caso del sistema aria-acqua con aggiunta di etanolo.

In ultimo, è importante citare anche lo studio di Ozturk *et al.* [19] il quale si è concentrato sull'hold-up globale in diversi liquidi organici e, in particolare, sulle loro miscele constatando che gli hold-up risultavano sempre più alti rispetto al caso che prevedeva un liquido puro con le medesime proprietà fisiche (tensione superficiale, viscosità, densità) [19]. Lo stesso studio ha anche dimostrato che gas a maggiore densità determinano un maggiore hold-up.

1.3 Distributore del gas

La tipologia di distributore della fase gassosa è un importante variabile da tenere in considerazione in quanto è legato indirettamente all'hold-up globale; infatti a seconda del distributore scelto è possibile variare le caratteristiche fisiche della bolla alle quali è direttamente legato l'hold-up. Si noti, ad esempio, che nel regime omogeneo cioè quello che si instaura per bassi valori della velocità superficiale un distributore con fori più piccoli, *ceteris paribus*, può comportare la formazione di bolle con dimensioni inferiori e, di conseguenza, di hold-up globali maggiori.

1.3.1 Distributore a piatto forato e correlazione di Geary e Rice

Di particolare importanza è lo studio, di cui si riportano i passaggi di interesse per il caso in esame, condotto da Geary e Rice [20]. In particolare, le considerazioni che verranno fatte in questo paragrafo sono valide per il solo regime omogeneo nel quale, cioè, possono essere completamente trascurate le interazioni, in termini di coalescenza e rottura, tra bolle e la dinamica dipende esclusivamente dalla loro formazione. Nel dettaglio, si parlerà di distributori a fori piccoli per i quali, si è visto sperimentalmente, che il termine dominante è quello dato dalla quantità di moto

L'ipotesi principale per la trattazione è la bassa velocità superficiale del gas poiché solo nel rispetto di questa condizione la formazione della bolla è governata dal solo bilancio di forze escludendo quindi le cinetiche di coalescenza e rottura. È infatti noto che a velocità superficiali maggiori il regime di flusso stabile diventa quello eterogeneo nel quale le cinetiche sopracitate assumono un ruolo di primaria importanza. Si assume inoltre che la velocità nel foro sia modesta, in modo da avere formazione di bolle singole, evitando il fenomeno del *jetting* che consiste nella formazione di un getto, appunto, a valle del foro del distributore con la formazione di bolle con dimensioni casuali.

Il caso analizzato, perciò, è quello relativo al regime omogeneo con basse velocità superficiali del gas; in queste condizioni la forma e la dimensione della bolla possono essere facilmente ottenute tramite il bilancio di forze introdotto originariamente dallo studio di *Davidson e Harrison* (1963) [21]. Prima di procedere con lo sviluppo teorico si riporta in Figura 1.5 il processo di formazione della bolla tratto dall'articolo di *Geary e Rice*:

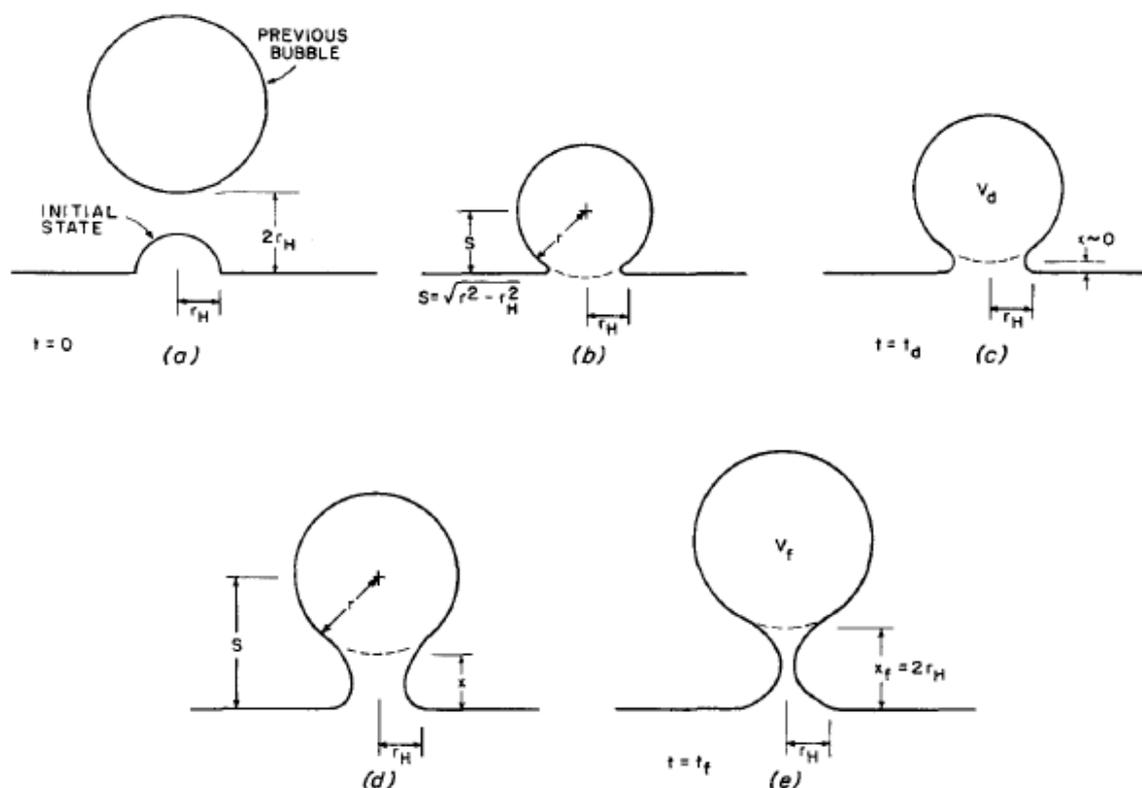


Figura 1.5, Fasi della formazione della bolla. (a) Bolla formata e nuova bolla nascente. (b) Nascita della bolla. (c) Inizio della fase di ascesa (d) Continuazione della fase di ascesa e accrescimento (e) Termine della fase di accrescimento e distacco della bolla [20]

Lo sviluppo teorico, supportato dal bilancio delle forze, richiede, in prima istanza, di introdurre le ipotesi alla base del modello. Innanzitutto, infatti, si suppone che nella fase preliminare di formazione, (a) in Figura 1.5, la bolla abbia lo stesso diametro del foro; tale ipotesi è avvalorata e confermata da evidenza sperimentale presentata nei lavori di *Pinczewski* [22], *Marmur e Rubin* [23]. Inizia, dunque, l'accrescimento della bolla, fino al momento in cui le sue dimensioni sono tali da permetterne l'allontanamento. Da questo momento, perciò, si avrà l'allontanamento della bolla dal foro e contemporaneamente il suo accrescimento grazie alla coda che crea un ponte tra bolla e foro fino al momento in cui avviene l'effettivo distacco. Tale distacco avviene quando la bolla si trova ad una distanza di circa due volte il raggio del foro ($2r_H$). Il bilancio di quantità di moto, valido per basse velocità superficiali, include diversi termini che tengono in considerazione le principali forze agenti sulla bolla come riportato nello studio di *LaNauze e Harris* [24] e successivamente di *Pinczewski* [22].

$$V\rho_l\mathbf{g} + \frac{G^2\rho_g}{\pi r_H^2} - 2\pi\sigma r_H \cos\vartheta - \mathbf{F}_D = \frac{d}{dt}(\alpha\rho_l V\mathbf{u}_b) \quad 1.1$$

I termini che compaiono nell'equazione 1.1 fanno riferimento, nel caso in cui $\rho_l \gg \rho_g$, alle principali forze cui la bolla è soggetta. Nell'ordine sono:

1. Forza di galleggiamento in cui compare solo il termine ρ_l come spinta netta in virtù dell'ipotesi che la viscosità del liquido sia molto maggiore di quella del gas
2. Quantità di moto della bolla
3. Tensione superficiale
4. Forza di drag

La forza di drag, \mathbf{F}_D , è definita come segue:

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} A_b \rho_l C_D \mathbf{u}_b^2 \quad 1.2$$

con C_D , coefficiente di drag, funzione del raggio istantaneo della bolla durante la sua formazione. In particolare, a seconda del numero di Reynolds e quindi del regime di flusso della bolla, la forza di drag viene definita attraverso una funzione per casi:

$$Re < 1 \quad \mathbf{F}_D = 6\pi\mu r \mathbf{u}_b \quad 1.3$$

$$1 \leq Re \leq 500 \quad \mathbf{F}_D = 5\pi \sqrt{\frac{\rho_l \mu}{2}} (r \mathbf{u}_b)^3 \quad 1.4$$

A questo punto, con l'aggiunta del bilancio di materia e una condizione iniziale per il volume della bolla a seconda che sia prima o dopo l'inizio dell'ascesa, si possono risolvere iterativamente le equazioni di bilancio e ottenere il valore del volume finale della bolla e quindi il suo diametro.

1.3.2 Distributore a piatto poroso

Questa tipologia di distributore viene impiegata quando è necessario ottenere una grande superficie specifica tra gas e liquido a vantaggio di un trasferimento di materia e calore più efficiente. Ciò è reso possibile dal fatto che questo tipo di distributore è in grado di generare un elevato numero di bolle decisamente più piccole delle bolle formate a partire da un distributore a piatto forato (Mouza *et al.*, [25]). Lo studio di Mouza *et al.* ha indagato l'effetto del distributore sulla fluidodinamica della colonna a bolle concludendo che la tipologia ha effetti rilevanti sulle prestazioni della colonna e sulla sua ottimizzazione. In particolare, Kaji *et al.* [26] ha condotto uno studio per valutare l'influenza del diametro dei pori e della tensione interfacciale sulla fluidodinamica della colonna e sull'hold-up globale; la conclusione cui lo studio ha condotto è che il regime di transizione si sposta a valori inferiori della velocità superficiale per pori con diametro decrescente [25].

1.4 Colonne a bolle con solido sospeso: *slurry*

Le colonne a bolle *slurry* sono l'estensione trifasica delle colonne gas-liquido in cui la terza fase è rappresentata dal solido sospeso le cui dimensioni possono variare nell'intervallo compreso tra 0.05 e 1 millimetro. Una delle principali ragioni per cui si scelgono diametri prossimi all'estremo inferiore è quella di massimizzare la superficie specifica che entra nei principali bilanci dei fenomeni di trasporto. Oltre alle dimensioni delle particelle catalitiche, si può variare la concentrazione del solido sospeso il cui valore

dipende da considerazioni di natura cinetica. Nell'industria di processo i reattori slurry garantiscono particolari vantaggi come l'elevata capacità termica che garantisce un'elevata stabilità termica e quindi un efficiente scambio di calore.

1.4.1 Effetto della concentrazione del solido sospeso

Diversi studi sono stati condotti per comprendere la fluido-dinamica dei reattori slurry e, soprattutto, l'effetto del solido sospeso sull'hold-up globale; la conclusione comune è che un aumento della concentrazione del solido sospeso determina sempre una diminuzione sia dei profili locali che globali di hold-up e un aumento delle dimensioni delle bolle. A tal proposito, Sasaki *et al.* [27] hanno riscontrato, utilizzando particelle di 100 μm porose e idrofile di ossido di silicio, dapprima una significativa diminuzione dell'hold-up globale per concentrazioni di solido fino allo 0.4 vol/vol e, in seguito, una sostanziale costanza per concentrazioni più elevate di solido. Il risultato può essere giustificato considerando gli studi sulle cinetiche di rottura e aggregazione di Ojima *et al.* [28] i quali sono giunti alla conclusione che un aumento della concentrazione del solido sospeso determina un aumento della cinetica di coalescenza. Nella figura 1.6 è riportata la variazione dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas a diverse concentrazioni del solido [2].

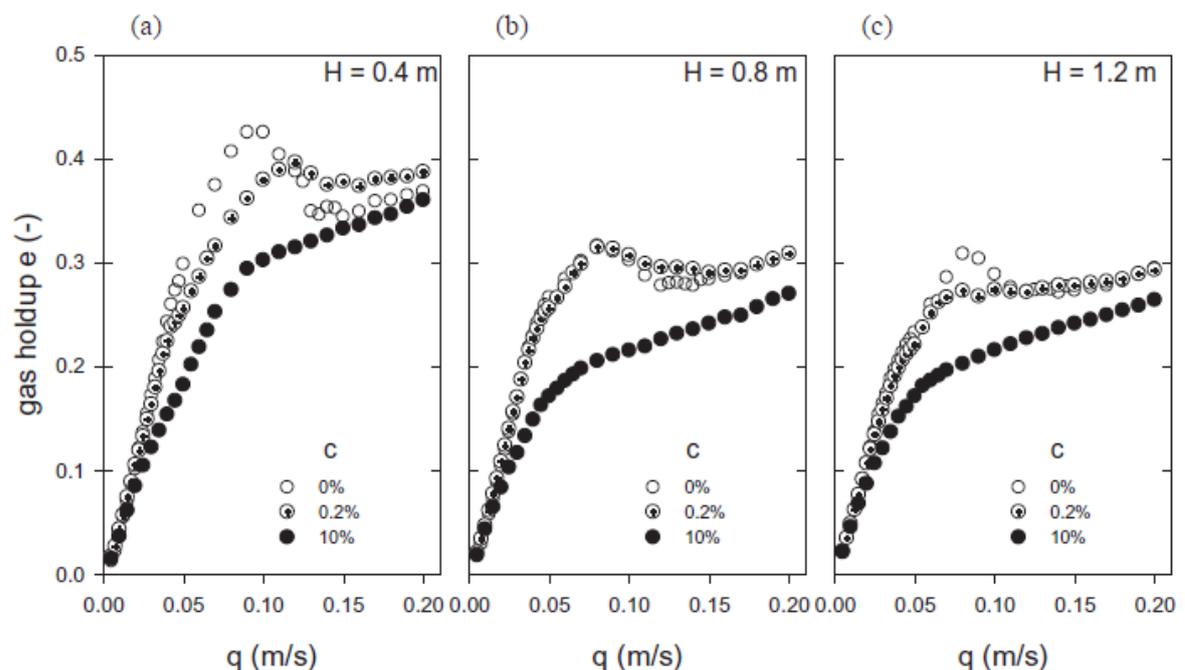


Figura 1.6, Variazione dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas al variare della concentrazione su base volumica di solido e a diverse altezze iniziali di liquido [2]

Il sistema considerato è una colonna di diametro di 0.14 m, in cui si ha uno slurry stagnante di particelle di silice con diametro di 100 μm in acqua con aria

1.4.2 Effetto simultaneo della concentrazione e delle dimensioni del solido

È noto dalla letteratura che l'effetto delle dimensioni del solido costituiscono ancora argomento di ricerca perché i risultati noti sono quantitativamente pochi e, in generale, non tutti in accordo gli uni con gli altri; dall'analisi dei documenti scientifici, infatti, emerge che gli effetti della variazione delle dimensioni e della forma del solido sospeso

sono trattati da pochissimi autori. A tal proposito, uno degli articoli di riferimento è quello di Rabha *et al.* nel quale è stato studiato l'effetto delle dimensioni del solido sospeso sulla fluido-dinamica di una colonna a bolle slurry del diametro di 7 centimetri a basse velocità superficiali. A valle dello studio è stato, dunque, riscontrato che l'hold-up globale è indipendente sia dalle dimensioni del solido sospeso che dalla sua concentrazione fino a che si opera, rispettivamente, a valori inferiori a 100 μm e a 0.03 su base volumica. Il comportamento fluido-dinamico cambia quando o le dimensioni o la concentrazione del solido sospeso aumentano e si osserva una significativa diminuzione dell'hold-up. Si è, infatti, ipotizzato che l'aggiunta del solido o un aumento delle sue dimensioni determinino una maggiore ricopertura delle bolle che si traduce dal punto di vista fisico in un aumento della viscosità dello slurry; conseguentemente, la maggiore viscosità aumenta le cinetiche di coalescenza tra le bolle. Come accennato all'inizio del paragrafo, però, i risultati non sono tutti in perfetto accordo. Infatti, nel lavoro di Ojima *et al.* [28] è riportato che una diminuzione delle dimensioni del solido ha come conseguenza la diminuzione dell'hold-up globale. Nell'articolo, infatti, si motiva tale fenomeno sulla base dell'aumento della densità numerica di particelle, cioè del numero di particelle solide per unità di volume, in corrispondenza all'interfaccia tra il gas e il liquido; come conseguenza, perciò, si avrà la formazione di un film di solido a struttura pseudo-porosa che favorirà le cinetiche di rottura.

Si riporta in figura 1.7 il grafico tratto dell'articolo in esame [28] nel quale, a concentrazione crescente di solido sospeso, è stato studiato sperimentalmente e tramite CFD l'effetto delle dimensioni delle particelle sull'hold-up globale; la stessa trattazione può essere estesa qualitativamente anche all'hold-up globale. I grafici si riferiscono a una colonna semi-batch a base quadrata aria-acqua in cui il solido è costituito da particelle di silice. La velocità superficiale è pari a $2 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$.

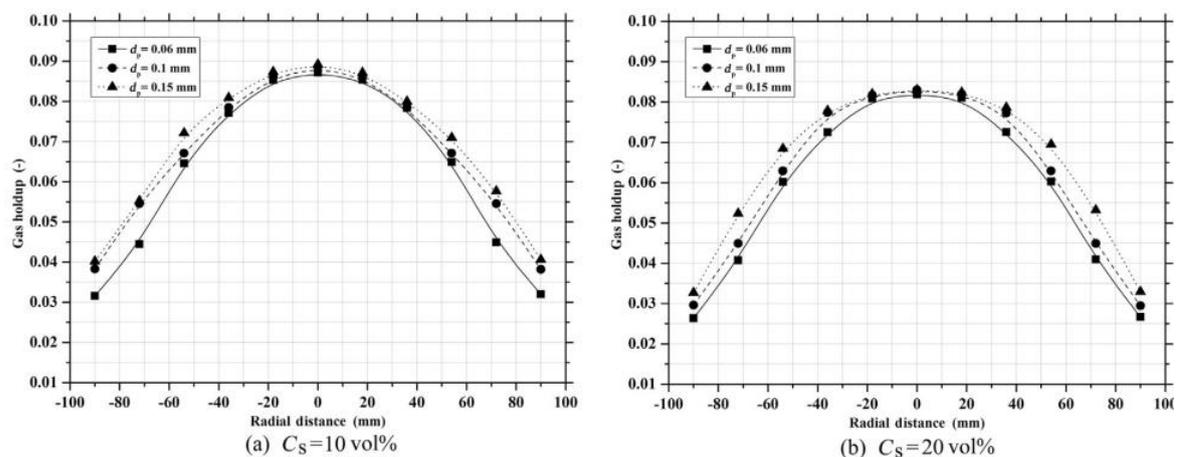


Figura 1.7, Studio di Ojima *et al.* nel quale si mostra la dipendenza a parità di concentrazione di solido C_S dell'hold-up locale per diversi valori del diametro di particella solida [3]

1.4.3 Effetto dell'altezza iniziale del liquido

Nell'articolo di Orvalho *et al.* è presente lo studio dell'effetto combinato tra la variazione di altezza iniziale di liquido e concentrazione del solido sospeso il cui stato di riferimento per l'indagine è il sistema bifasico per valori diversi di altezza iniziale del liquido.

In generale, l'evidenza sperimentale suggerisce che un aumento dell'altezza del liquido comporta una diminuzione dell'hold-up globale come mostrato nel grafico di Orvalho *et al.* in figura 1.8:

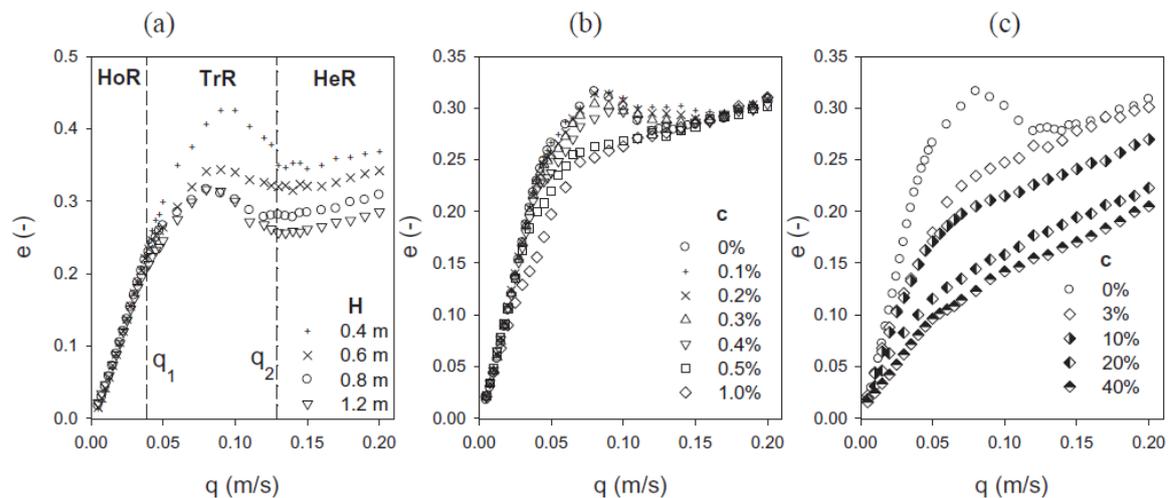


Figura 1.8. Variazione dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas. (a) Sistema bifasico aria-acqua usato come riferimento per l'indagine per diversi valori dell'altezza iniziale del liquido. (b) Effetto sull'hold-up globale per un valore costante di altezza di 0.8 m del liquido per bassi valori della concentrazione del solido. (c) Effetto sull'hold-up globale per un valore costante di altezza del liquido per alti valori della concentrazione del solido. [2]

1.4.4 Effetto simultaneo della concentrazione del solido sospeso e dell'altezza iniziale di liquido

Nello stesso articolo di Orvalho *et al.* si studia anche l'effetto simultaneo della variazione tra l'altezza iniziale del liquido e della concentrazione di solido sospeso. La presenza del solido induce, infatti, non solo una diminuzione dell'hold-up globale ma anche un cambiamento dell'andamento di quest'ultimo in funzione della velocità superficiale; tale cambiamento è, però, sufficientemente pronunciato soltanto per colonne la cui altezza iniziale del liquido sia relativamente modesta. Infatti, nelle colonne con elevata altezza iniziale di liquido, l'hold-up globale è meno sensibile all'incremento della concentrazione del solido.

Le figure 1.9 e 1.10, riportate di seguito, mostrano l'effetto simultaneo dell'altezza iniziale di liquido e della concentrazione di solido sospeso sulla variazione dell'hold-up globale sia dal punto di vista numerico che di forma. In particolare, l'evidenza sperimentale suggerisce che colonne a bolle con diverse concentrazioni di solido sospeso tendono a non risentire eccessivamente del carico di solido per bassi valori della velocità superficiale del gas tanto da collassare sugli stessi valori sperimentali; per valori più elevati della velocità superficiale, invece, si assiste ad uno scostamento più sensibile tra i profili dovuti alle diverse concentrazioni di solido.

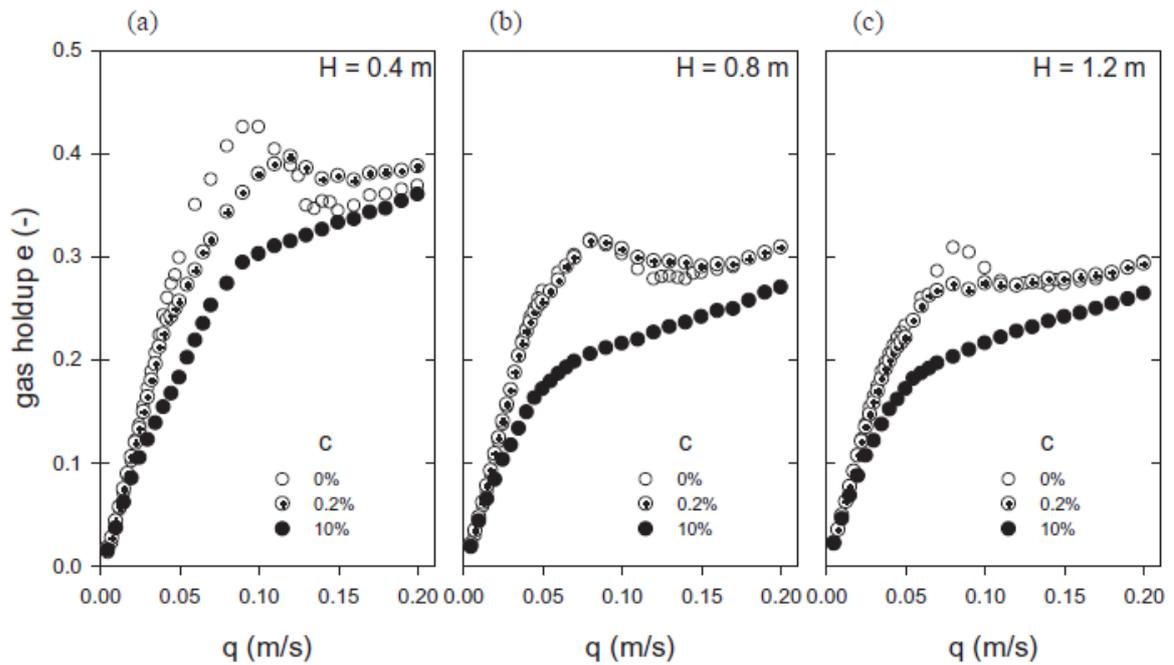


Figura 1.9, Effetto della concentrazione del solido con diverse altezze iniziali di liquido. (a) Altezza iniziale di 0.4 m (b) Altezza iniziale di 0.8 m (c) Altezza iniziale di 1.2 m. [2]

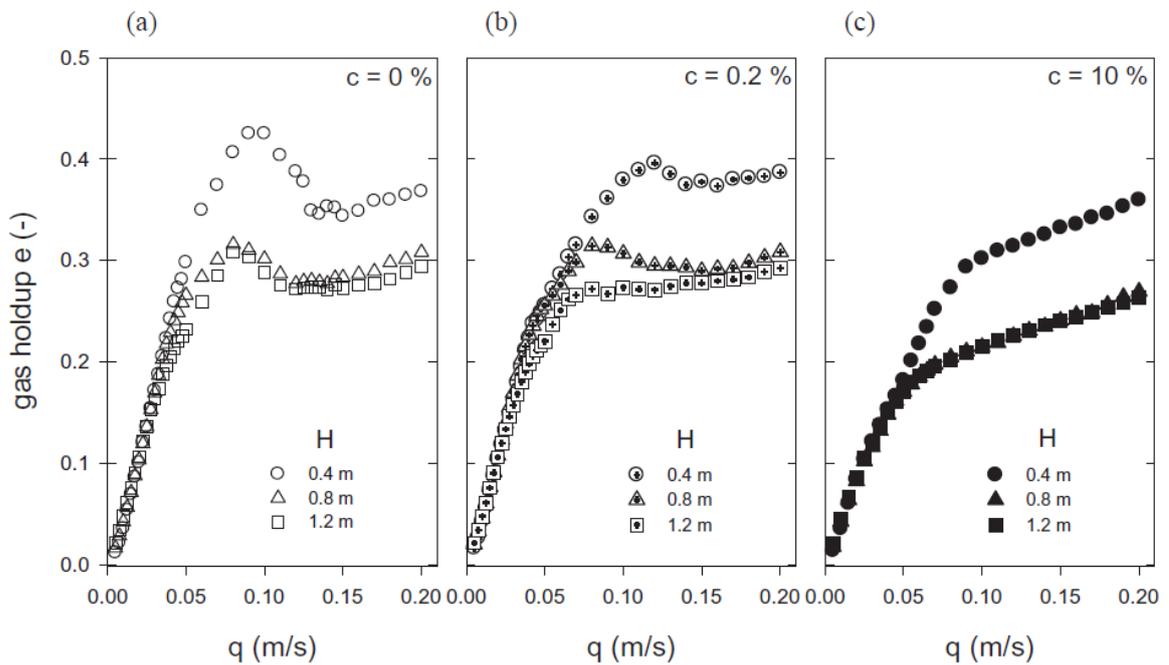


Figura 1.10, Effetto dell'altezza iniziale di liquido a diversi valori della concentrazione iniziale di solido sospeso. (a) Concentrazione di solido sospeso 0% (b) Concentrazione di solido sospeso 0.2% (c) Concentrazione di solido sospeso 10%. [2]

1.5 Metodologie di indagine

Lo studio completo della fluido-dinamica delle colonne a bolle comprende lo studio delle funzioni di distribuzione delle dimensioni delle bolle e della loro forma, variabile a seconda del regime nel quale si opera; infatti, nel regime omogeneo è verosimile approssimare la forma delle bolle con una sfera rigida, mentre nel regime eterogeneo, in virtù della maggiore dimensione della bolla, la sfera può deformarsi durante la risalita e assumere forma di un ellissoide. Diverse tecniche, quindi, sono state sviluppate per condurre tale indagine.

1.5.1 *Image analysis*

L'analisi per immagine, di cui si parlerà brevemente nel seguito del paragrafo [29], è una delle tecniche maggiormente utilizzate il cui obiettivo è quello di ottenere sia la forma delle bolle che la loro funzione distributiva. La principale ipotesi su cui la tecnica si basa e che è stata oggetto della ricerca di Ellingsen e Risso [30] è che la forma della bolla è univocamente individuata noti i due assi di simmetria, quello maggiore e quello minore. La procedura è riassunta in quattro fasi:

1. **Taratura:** durante questa fase viene definito il fattore di conversione tra pixel e millimetri
2. **Rilevamento dei bordi:** si scelgono sei punti per il rilevamento e l'individuazione di ciascuna bolla
3. **Ricostruzione:** attraverso metodi di ottimizzazione numerica si ricavano i cinque parametri necessari per scrivere l'equazione che descrive l'immagine della bolla nello spazio bidimensionale
4. **Definizione della bolla:** si processano le informazioni ottenute nella fase precedente per ottenere l'ellisse equivalente e ricavare da quest'ultima il valore dei due assi, maggiore e minore, dai quali si può calcolare il diametro equivalente e l'*aspect ratio*.

È bene sottolineare che, nonostante il limite maggiore dettato dall'impossibilità di individuare l'angolo di inclinazione nel piano perpendicolare al piano visuale, questa tecnica è considerata completamente affidabile e tale, grazie alle informazioni che è in grado di fornire, da permettere la formulazione di criteri per l'individuazione della transizione tra regimi.

1.5.2 *Optical probe*

Questa tecnica di misura è largamente utilizzata per ottenere i profili sperimentali locali, soprattutto di hold-up e di velocità delle due fasi. Si basa sull'utilizzo di una sonda ottica che viene generalmente inserita all'interno della colonna tramite un'apposita apertura praticata lateralmente all'altezza cui si voglia condurre la misurazione. La sonda, infatti, è in grado di rilevare le due diverse fasi grazie all'intensità del laser che viene rifratto in corrispondenza alla sommità della sonda in base, rispettivamente, all'indice di rifrazione del gas oppure del liquido; il segnale rifratto viene quindi tradotto in un segnale digitale dal quale è possibile ricavare la frequenza di risalita ovvero il numero di bolle nell'unità di tempo e l'hold-up locale.

2 Modellizzazione del sistema e metodi di risoluzione

2.1 Modello Euleriano-Euleriano

Un sistema multifase è un sistema costituito da più fluidi per i quali possono essere scritte equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto. L'approccio seguito, di solito, è quello di generalizzare le equazioni di governo per un singolo fluido attraverso l'introduzione di equazioni aggiuntive di congruenza. Nel caso di singola fase fluida, le equazioni di bilancio di materia e quantità di moto coincidono con le equazioni di continuità (2.1) e di Navier-Stokes (2.2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad 2.1$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad 2.2$$

Le equazioni 2.1 e 2.2 per il moto di una singola fase fluida sono rigorosi bilanci di materia e quantità di moto locali e istantanei che possono essere risolte tramite integrazione definito un opportuno volume di controllo e adeguate condizioni al contorno. Per i sistemi multifase è necessario introdurre equazioni di congruenza aggiuntive il cui obiettivo è permettere un'opportuna mediazione delle variabili dei bilanci. Diverse sono le tipologie di media che si possono usare: quelle proposte e maggiormente usate sono la media temporale (Ishii, 1975, [11], Drew, 1983, [12]) oppure volumica (Harlow e Amsden, 1975, [13]).

Il concetto di frazione volumica è un concetto intuitivo che non presenta, dunque, una trattazione teorica rigorosa. Questo approccio, infatti, considera che in ogni volume di controllo scelto per la risoluzione delle equazioni di bilancio la sommatoria della frazione volumica delle n fasi presenti al suo interno sia unitaria [31]:

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 \quad 2.3$$

È possibile, perciò, generalizzare le equazioni di bilancio di materia e quantità di moto per sistemi multifase come segue sulla base della frazione in volume. Per la materia si ottiene:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k) = \sum_{p=1, p \neq k}^n S_{pk} \quad 2.4$$

L'equazione 2.4 rappresenta, dunque, l'equazione di continuità scritta rispetto alla fase k . Si noti che, in virtù della 2.3, il numero di equazioni indipendenti da risolvere è proprio

pari al numero di fasi n presenti nel sistema multifase. La 2.4 è un'equazione di continuità per la fase k quindi tutti i termini hanno le dimensioni di una massa per unità di tempo e volume, cioè una velocità specifica volumica di ingresso di materia nel volume di controllo; il termine S_{pk} rappresenta, dunque, la velocità con cui la materia viene scambiata tra due fasi diverse, per esempio tra quella p -esima e quella k -esima, contenute nel volume di controllo. Nel caso studiato in questo lavoro il termine di scambio è posto uguale a zero; si suppone, in altri termini, che due fasi contigue non scambino materia. L'equazione di bilancio della quantità di moto può, analogamente, essere riscritta usando la definizione di frazione volumica:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) = -\nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\tau}) + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + \mathbf{F}_{kp} \quad 2.5$$

Rispetto all'equazione di Navier-Stokes, è stato necessario introdurre un termine che tenesse in considerazione la forza che due fasi distinte si scambiano in corrispondenza all'interfaccia. Si noti che sia nell'equazione 2.2 che 2.5 il termine dovuto al trasporto molecolare o diffusivo è stato espresso come tensore della quantità di moto; significa, quindi, che scelta la tipologia di liquido che costituisce la fase continua quel termine sarà sviluppato nota la sua espressione reologica. Per il caso in esame, essendo il liquido acqua, l'espressione reologica è di tipo newtoniano con costante di proporzionalità uguale alla viscosità.

2.2 Bilanci di popolazione

L'ambiente del *pre-processing* permette, inoltre, di attivare i bilanci di popolazione, di cui viene fornita una descrizione generale, per valutare il cambiamento dinamico della popolazione di bolle durante la risalita, note le cinetiche di coalescenza e rottura. Nel caso di sistemi dispersi, in cui il numero di particelle, che si riferisce nell'accezione generale al monomero di cui la fase dispersa è costituita, (i.e. bolle, gocce, particelle solide in senso stretto) è particolarmente alto, si ricorre alla statistica che permette di prevedere, tramite una funzione densità di numero n , l'evoluzione del sistema disperso; nel particolare di questo lavoro si farà solo riferimento alle bolle.

In prima istanza, è necessario definire un parametro che identifichi le bolle; in generale, quindi, si identifica la singola bolla attribuendole una lunghezza caratteristica che indichiamo genericamente con L . È, a questo punto, necessario definire la funzione *densità di numero*, n , che dipenderà sia dalla dimensione caratteristica delle bolle che dal tempo in quanto il sistema evolve dinamicamente. Prima di caratterizzare le principali proprietà della funzione densità di numero (NDF) è bene spiegarne il significato fisico; infatti, la NDF, espressa nella forma $n(L, t)dL$, rappresenta il numero di bolle per unità di volume di dimensione compresa tra L e $L+dL$ nell'istante di tempo t . Graficamente è individuato dall'area infinitesima del rettangolo di base $L, L+dL$ e altezza $n(L, t)$.

La NDF, come detto, è definita dalle seguenti proprietà:

- $\int_0^\infty n(L, t)dL = N$, l'integrale esteso a tutte le possibili dimensioni del sistema disperso deve fornire il numero totale per unità di volume delle bolle
- $n(L, t) > 0$ per $L > 0$ e il suo integrale deve esistere ed essere finito e positivo
- $n(L, t) = 0$ per $L < 0$, in altri termini non esistono bolle con dimensione caratteristica negativa

Per valutare il cambiamento dinamico della popolazione di bolle è necessario, quindi, scrivere un bilancio per la funzione densità di numero che prende il nome di *bilancio di popolazione*. Supponiamo, dunque, di voler scrivere il bilancio di popolazione per un sistema perfettamente miscelato come quello mostrato in figura 2.1.

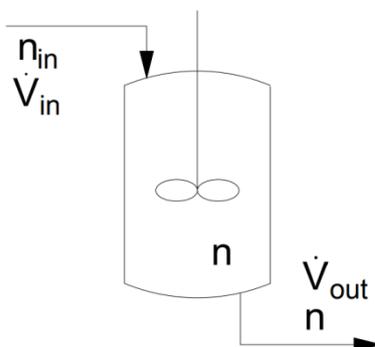


Figura 2.1, Schema del sistema per il quale è scritto il bilancio di popolazione

Il bilancio generale suggerisce che l'accumulo, dovuto alla non-stazionarietà del sistema in esame, dovrà essere uguale all'ingresso netto, inteso cioè come monomeri entranti meno quelli uscenti dal sistema, al quale si aggiunge la generazione netta, in termini di monomeri soggetti a coalescenza e di dimeri, trimeri, polimeri soggetti a rottura secondo specifiche cinetiche.

Accumulo di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 nell'intervallo di tempo compreso tra $t + \Delta t$

=

numero netto di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 dovuto alla convezione della corrente in ingresso e uscita	+	numero netto di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 dovuto all'accrescimento	+	numero netto di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 dovuto alla nucleazione, coalescenza e rottura
--	---	--	---	--

Nel dettaglio possiamo dividere i termini del bilancio come segue considerando di scriverlo per bolle di dimensione compresa tra L_1 ed L_2 sul volume di controllo mostrato in figura 4.4:

- $\int_{L_1}^{L_2} (n(L, t + \Delta t) - n(L, t)) V dL$ è il termine di accumulo che rappresenta la variazione del numero di bolle di dimensione compresa tra L e $L+dL$ tra l'istante di tempo t e l'istante $t + \Delta t$
- $\int_{L_1}^{L_2} n_{in}(L, t) \dot{V}_{in} \Delta t dL$ è il termine relativo alla corrente in ingresso e rappresenta il numero di bolle con dimensione compresa tra L e $L+dL$ entranti nel sistema con la corrente \dot{V}_{in} nell'intervallo di tempo Δt
- $\int_{L_1}^{L_2} n(L, t) \dot{V}_{out} \Delta t dL$ è il termine relativo alla corrente in uscita e rappresenta il numero di bolle con dimensione compresa tra L e $L+dL$ entranti nel sistema con la corrente \dot{V}_{out} nell'intervallo di tempo Δt

- $\int_{L_1}^{L_2} n(L_1)G(L_1)\Delta tVdL$ rappresenta il numero di particelle che, crescendo, eccedono la dimensione L_1 ed entrano nell'intervallo compreso tra L_1 ed L_2 dove $G(L)$ è la velocità di accrescimento, $G(L) = \frac{dL}{dt}$
- $\int_{L_1}^{L_2} n(L_2)G(L_2)\Delta tVdL$ rappresenta il numero di particelle che, crescendo, eccedono la dimensione L_2 ed escono dall'intervallo compreso tra L_1 ed L_2
- $\int_{L_1}^{L_2} n(L,t)B\Delta tVdL$ è il termine relativo alla nascita di bolle di dimensione compresa tra L_1 ed L_2 seguendo la cinetica di coalescenza B (*birth*)
- $\int_{L_1}^{L_2} n(L,t)D\Delta tVdL$ è il termine relativo alla scomparsa di bolle di dimensione compresa tra L_1 ed L_2 seguendo la cinetica di rottura D (*death*)

Riassumendo in espressione matematica, si ottiene:

$$\int_{L_1}^{L_2} (n(L, t + \Delta t) - n(L, t)) = \int_{L_1}^{L_2} n_{in}(L, t) \dot{V}_{in} \Delta t dL - \int_{L_1}^{L_2} n(L, t) \dot{V}_{out} \Delta t dL + \quad 2.6$$

$$\int_{L_1}^{L_2} n(L_1)G(L_1)\Delta tVdL - \int_{L_1}^{L_2} n(L_2)G(L_2)\Delta tVdL + \int_{L_1}^{L_2} n(L, t)B\Delta tVdL - \int_{L_1}^{L_2} n(L, t)D\Delta tVdL$$

Attraverso manipolazione dei termini, nell'ipotesi in cui $\dot{V}_{in} = \dot{V}_{out} = \dot{V}$, l'equazione può essere scritta nella forma:

$$\frac{\partial n(L, t)}{\partial t} + \frac{\partial (G(L)n(L, t))}{\partial L} = \frac{\dot{V}}{V} (n_{in}(L, t) - n(L, t)) + B - D \quad 2.7$$

L'equazione 2.7 è un'equazione differenziale alle derivate parziali del primo ordine sia rispetto alla variabile t che L ; sono, dunque, necessarie due condizioni, una condizione al contorno per la dimensione e una condizione iniziale per il tempo riassunte in tabella 2.1:

Tabella 2.1, Condizioni al contorno e iniziali per risolvere il bilancio di popolazione

$G > 0$	$n(L, 0) = n_i(L)$
	$n(0, t) = n_0(t)$
$G < 0$	$n(L, 0) = n_i(L)$

Il problema risulta a questo punto risolubile e l'esistenza della soluzione analitica dipenderà dal particolare caso in esame; in generale, per i problemi dell'industria si processo si percorre sempre la strada numerica.

2.2.1 Equazione di bilancio di popolazione per CFD

Come nel caso dell'equazione di bilancio 2.7 valida per un sistema perfettamente miscelato, è possibile ricavare un bilancio di popolazione generalizzato. Infatti, in maniera analoga al procedimento usato per ricavare i bilanci di quantità di moto, materia ed energia generalizzati, si può scrivere un bilancio per le particelle considerando un volume di controllo reale nello spazio fisico e uno virtuale nello spazio delle fasi [32]. La forma

finale dell'equazione generalizzata, in cui la NDF è una funzione multivariabile del tempo, dello spazio e di una coordinata interna, $n(t, \mathbf{x}, \xi)$, è la seguente:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}n) + \nabla_{\xi}(\xi n) = h \quad 2.8$$

nella quale h rappresenta il termine di variazione discontinua e istantanea che contribuisce al bilancio (i.e. collisioni).

Nell'equazione generalizzata di bilancio di popolazione, al contrario dei bilanci di quantità di moto, materia ed energia, non compaiono termini diffusivi nello spazio fisico; esistono, tuttavia, termini diffusivi nello spazio delle fasi o velocità dovuti, ad esempio, ai moti browniani o alla dispersione turbolenta se compaiono le velocità medie.

È bene, in ultimo, analizzare i termini dell'equazione 2.8 per capirne il significato fisico sottinteso:

- Il primo termine rappresenta l'accumulo di particelle
- Il secondo termine è, invece, legato allo spostamento: la divergenza rispetto alla variabile spaziale, infatti, suggerisce che si tratta di un termine che tiene in considerazione lo spostamento per convezione delle particelle nello spazio fisico
- Il terzo termine, omologo al secondo, esprime, infatti, lo spostamento delle particelle nello spazio delle fasi dovuto alla variazione di velocità delle particelle (i.e. accelerazione)

Definita la funzione di bilancio generalizzata, è bene chiedersi e discutere circa la chiusura del problema; in generale, è possibile affermare che l'equazione 2.8 si definisce chiusa se e solo se tutti i termini presenti sono ricavabili attraverso la NDF e momenti di diverso ordine della funzione densità di numero stessa.

2.2.2 Cinetiche di coalescenza e rottura

La studio alla base dei fenomeni di rottura e coalescenza combina due importanti teorie, la teoria della frequenza delle collisioni e la turbolenza relativa all'energia posseduta, su scale diverse, dagli eddies turbolenti [33].

Per lo sviluppo della teoria e la modellizzazione matematica vengono, in genere, assunte le seguenti condizioni:

- il flusso turbolento deve essere isotropo
- le particelle fluide hanno dimensione compresa nell'intervallo inerziale della turbolenza
- soltanto gli eddies turbolenti con la stessa dimensione della particella solida o dimensione inferiore che però posseggano sufficiente energia possono condurre alla rottura della particella fluida

Diversi studi, (Coulaloglou and Tavlarides, 1977; Luo and Svendsen, 1996; Venneker et al., 2002) hanno dimostrato che le cinetiche, in termini di frequenza di collisione, della rottura di una goccia oppure di una bolla sono tra di loro analoghe e, a volte, coincidono. In particolare, si considera, per la modellizzazione della cinetica o frequenza di rottura che, in virtù della bassa viscosità delle fasi aeriformi, la resistenza alla rottura della bolla sia interamente localizzata nel film liquido come ipotizzato nella seguente formula:

$$g(a_j) = C_1 \varepsilon^{\frac{1}{3}} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{C_2 \frac{\sigma}{\rho_l \varepsilon^{\frac{2}{3}} a_j^{\frac{5}{3}}} + C_3 \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \rho_g} \varepsilon^{\frac{1}{3}} a_j^{\frac{4}{3}}}} \right) \quad 2.9$$

dove $g(a_j)$ è una frequenza di collisione con dimensioni di s^{-1} . Perché si possa risolvere la 2.9 è necessario introdurre una distribuzione chiamata *daughter bubble size distribution* (*kernel* di rottura) grazie al quale è possibile calcolare la frequenza con cui la bolla j -esima dà origine a un frammento di dimensione a_i :

$$\beta(a_i, a_j) = \left(9 + \frac{33}{2} C_4 + 9C_4^2 + \frac{3}{2} C_4^3 \right) \left(\frac{a_i^2}{a_j^3} \right) \left(\frac{a_i^3}{a_j^3} \right)^2 \left(1 - \frac{a_i^3}{a_j^3} \right)^{C_4} \quad 2.10$$

in cui C_4 è un parametro che viene determinato sulla base dei dati sperimentali

In maniera analoga alla cinetica di rottura, la cinetica di coalescenza combina la teoria probabilistica della frequenza di coalescenza tra bolle e l'efficienza di coalescenza; in altri termini, solo le bolle con energia sufficiente riescono ad avvicinarsi abbastanza e unirsi. In molti studio l'elemento dominante perché avvenga coalescenza bolla-bolla è la turbolenza (*Coulaloglou e Tavlarides, 1977*); infatti, l'efficienza legata al fenomeno della coalescenza è stato legato alla tendenza del film liquido di drenare e, quindi, all'energia necessaria perché tale fenomeno si realizzi. Il modello maggiormente usato è quello proposto da *Coulaloglou et al.* che fornisce una relazione per la frequenza di coalescenza:

$$h(a_i, a_j) = C_7 \varepsilon^{\frac{1}{3}} (a_i + a_j)^2 \sqrt{\left(\frac{2}{a_i^3} + \frac{2}{a_j^3} \right)} \lambda(a_i, a_j) \quad 2.11$$

nella quale il parametro C_7 è generalmente posto uguale a 0.28; inoltre, in maniera analoga al *kernel* di rottura, è possibile ricavare un'espressione matematica per il *kernel* di coalescenza:

$$\lambda(a_i, a_j) = \exp \left(-C_8 \frac{\mu_l \rho_l \varepsilon}{\sigma^2} \left(\frac{a_i a_j}{a_i + a_j} \right)^4 \right) \quad 2.12$$

In questo caso il parametro C_8 può essere ricavato dalla pratica sperimentale.

2.3 Equazioni di bilancio per il regime turbolento

È importante, prima di spiegare quali siano le principali forze in gioco della dinamica della risalita della bolla, entrare nel dettaglio delle equazioni 2.1 e 2.2; si noti, infatti, che in quella forma le equazioni di Navier-Stokes rimangono valide nel regime laminare, per quel regime, cioè, che si instaura per bassi valori del numero di Reynolds ($Re < 2100$),. Per i casi di interesse pratico, tuttavia, è raro che il regime sia laminare e spesso si cade nella condizione di turbolenza completamente sviluppata. Per modellare questo regime, perciò, si ricorre alla scomposizione di Reynolds per tutte quelle variabili che variano nel tempo; in particolare, quindi, si può scomporre il vettore velocità \mathbf{u} in una componente

media, e quindi indipendente dal tempo, e in una componente fluttuante. In questa maniera, tramite manipolazione algebrica e assiomi statistici¹, è possibile riformulare l'equazione di continuità 2.1 e le equazioni di Navier-Stokes 2.2 per il regime turbolento:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) = 0 \quad 2.13$$

$$\frac{\partial (\rho \bar{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p} - \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(v)} + \bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)}) + \rho \mathbf{g} \quad 2.14$$

Rispetto all'equazione di Navier-Stokes per il bilancio in regime laminare si nota, oltre alla comparsa delle variabili medie, la presenza di un tensore aggiuntivo noto come *flusso di quantità di moto turbolento*. In generale, per la risoluzione delle equazioni 2.14 è necessario, oltre ad un opportuno algoritmo di accoppiamento pressione-velocità, conoscere la natura reologica del fluido per modellare il tensore $\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(v)}$; nel caso in esame, essendo il liquido acqua, si può utilizzare come formula di chiusura quella per un fluido newtoniano:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(v)} = \mu^{(v)} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \mathbf{I} \right] \quad 2.15$$

L'equazione 2.15 esprime la relazione tra il gradiente di velocità e lo sforzo di taglio tramite una relazione lineare, essendo appunto il comportamento reologico di tipo newtoniano, in cui la costante di proporzionalità è la viscosità dinamica o molecolare, $\mu^{(v)}$, del fluido. Analogamente si è introdotta una formula di chiusura formalmente analoga alla precedente per il tensore *flusso di quantità di moto turbolento* $\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)}$;

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)} = -\mu^{(t)} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \mathbf{I} \right] \quad 2.16$$

Rispetto all'equazione 2.15, l'equazione 2.16 presenta come costante di proporzionalità $\mu^{(t)}$ nota come *viscosità turbolenta* il cui significato fisico, sebbene appunto la formulazione sia formalmente uguale per entrambe, è diverso. Infatti, la viscosità dinamica $\mu^{(v)}$ è una proprietà fisica del fluido e quindi intrinseca della materia, mentre la viscosità turbolenta $\mu^{(t)}$ è legata alla turbolenza del sistema perciò sia nel tempo che nello spazio.

2.3.1 Modello di chiusura della turbolenza: $k - \varepsilon$

Il bilancio in regime turbolento, come introdotto nel precedente paragrafo, necessita di modelli di chiusura per modellare i termini aggiuntivi che compaiono nella formulazione delle equazioni di Navier-Stokes mediate attraverso la scomposizione di Reynolds. Infatti, il tensore riportato in 2.16 può essere anche letto come il trasporto di quantità di moto per convezione dovuto alla convezione turbolenta degli eddies e, quindi, legato alle fluttuazioni di velocità:

¹ Si noti, ad esempio, che i prodotti di grandezze fluttuanti scompaiono perché uguali a zero a causa della rapida perdita di correlazione dovuta alla turbolenza stessa.

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)} = \rho \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} \quad 2.17$$

Si definisce energia cinetica turbolenta k l'emi-traccia o traccia, a seconda della convenzione cui si fa riferimento, del tensore in 2.17 e quindi formalmente si ha:

$$k = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\frac{\rho \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}}{\rho} \right) = \frac{1}{2} (\overline{u'_x u'_x} + \overline{u'_y u'_y} + \overline{u'_z u'_z}) \quad 2.18$$

si noti, in ultimo, che k è quindi, per definizione, un'energia cinetica per unità di massa di fluido. Nella descrizione computazionale più semplice si definisce, tramite analisi dimensionale, una viscosità turbolenta come segue:

$$\mu^{(t)} = C_\mu \rho q L \quad 2.19$$

In particolare C_μ è una costante adimensionata, $q = \sqrt{2k}$ una velocità e L una dimensione caratteristica del problema. A questo punto, dunque, nota la definizione di k e un modello per la chiusura del tensore *flusso di quantità di moto turbolento* espresso dalla 2.17 è possibile derivare con facilità l'equazione di bilancio per k a partire dalle equazioni di Navier-Stokes mediate ottenendo la seguente espressione:

$$\begin{aligned} \frac{D(\rho k)}{Dt} = & \nabla \cdot (\mu \nabla \times k) - \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{2} \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}' \mathbf{u}'} + \overline{p' \mathbf{u}'} \right) - \rho \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} \cdot (\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \\ & - \mu (\nabla \times \bar{\mathbf{u}'}) (\nabla \times \bar{\mathbf{u}'})^T \end{aligned} \quad 2.20$$

L'ultimo termine della 2.20 rappresenta la dissipazione turbolenta, ε . In altri termini coincide con la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta che irreversibilmente viene convertita in energia interna del fluido.

Inoltre, di quelli a secondo membro, solo il primo termine non necessita di modellazione matematica mentre gli altri sono generalmente approssimati come riportato di seguito. In particolare il secondo termine rappresenta la diffusione dell'energia cinetica turbolenta e generalmente viene approssimata utilizzando il gradiente dell'energia cinetica turbolenta stessa:

$$- \left(\frac{\rho}{2} \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}' \mathbf{u}'} + \overline{p' \mathbf{u}'} \right) \sim \frac{\mu^{(t)}}{\sigma_k} \nabla k \quad 2.21$$

Nella 2.21 il termine σ_k , noto come *numero della turbolenza di Prandtl*, è generalmente preso pari al valore unitario.

In ultimo, il terzo termine rappresenta la *velocità di generazione* dell'energia cinetica turbolenta ed è affidata al flusso medio del fluido. Per stimarlo, quindi, si ricorre di nuovo all'utilizzo di gradienti di proprietà medie:

$$P_k = -\rho \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} \cdot (\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \sim \mu^{(t)} (\nabla \bar{\mathbf{u}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T) \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} \quad 2.22$$

Risulta, quindi, necessaria un'equazione aggiuntiva perché si possa chiudere il problema; in altri termini perché il numero di incognite e di equazioni sia lo stesso. A tal proposito, perciò, si ricorre ad un'ipotesi di bilancio; si suppone, infatti, che la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta e la velocità di generazione della stessa siano in *pseudo-equilibrio* e legate dalla seguente relazione:

$$\varepsilon \sim \frac{k^{\frac{3}{2}}}{L} \quad 2.23$$

Questa ipotesi si basa sulla teoria di Kolmogorov secondo cui generazione e dissipazione sono legate dalle scale intermedie della turbolenza; in particolare l'energia cinetica turbolenta viene generata alle scale più grandi, trasportata dalle scale intermedie fino a quelle più piccole e quindi dissipata. Si può, perciò, utilizzando la definizione di ε derivare dalle equazioni di Navier-Stokes un'equazione che descriva la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta in genere riportata nella seguente forma:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla(\rho\varepsilon\bar{\mathbf{u}}) = C_1^\varepsilon P_k \frac{\varepsilon}{k} - \rho C_2^\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{k} + \nabla \cdot \left(\frac{\mu^{(t)}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \times \varepsilon \right) \quad 2.24$$

In questo caso la viscosità turbolenta è calcolata con la seguente formula:

$$\mu^{(t)} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 2.25$$

La combinazione delle equazioni 2.20 e 2.24 costituiscono in modello di chiusura k - ε della turbolenza. I parametri del modello possono essere variati da caso a caso ma è pratica comune utilizzare i valori riportati nella seguente tabella per la modellazione del flusso:

Tabella 2.2, Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k - ε

Parametri del modello k - ε	Valore numerico di uso comune
C_μ	0.09
C_1^ε	1.44
C_2^ε	1.92
σ_k	1
σ_ε	1.3

Si noti, infine, che le equazioni di Navier-Stokes mediate utilizzando la scomposizione di Reynolds (RANS, *Reynolds averaged Navier-Stokes equations*) sono state riscritte in maniera formalmente analoga al caso laminare in cui la viscosità effettiva del fluido è maggiorata dalla presenza, oltre che della viscosità dinamica del fluido stesso, anche della

viscosità turbolenta; inoltre, per il modello k-ε, così come per molti dei modelli di chiusura della turbolenza, devono essere risolte due equazioni di bilancio aggiuntive.

2.3.2 Modello di chiusura della turbolenza: k – ω

Un secondo modello che prevede sempre due equazioni aggiuntive per la modellazione della turbolenza è il modello k-ω. In particolare rimane valida la definizione e l'equazione di bilancio per l'energia cinetica turbolenta, k, e al posto della velocità di dissipazione ε si formula un bilancio per l'energia dissipata per unità di energia cinetica turbolenta

$$\omega = \frac{\varepsilon}{C_\mu k} \quad 2.26$$

come segue in analogia alla 2.24:

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla(\rho\omega\bar{\mathbf{u}}) = C_1^\omega \mathbf{P}_\omega \frac{\rho\omega}{k} - \rho C_2^\omega \omega^2 + \nabla \cdot \left(\frac{\mu^{(t)}}{\sigma_\omega} \nabla \times \omega \right) \quad 2.27$$

Anche per questo modello i parametri che in maniera ottimale permettono la descrizione della turbolenza sono riportati in tabella 2.3:

Tabella 2.3, Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k-ω

Parametri del modello k-ω	Valore numerico di uso comune
C_1^ω	0.52
C_2^ω	0.072
σ_ω	2

Il modello k-ω è numericamente più stabile del modello k-ε, inoltre permette una formulazione più accurata in prossimità della parete.

2.3.3 Modello di chiusura della turbolenza: k-ω SST

L'ultimo modello di chiusura della turbolenza presentato è il k-ω SST, *Shear Stress Transport*; anch'esso è un modello a due equazioni ampiamente usato che combina i vantaggi del k-ε e del k-ω. Infatti il modello SST utilizza il modello k-ω in prossimità della parete mentre nel bulk turbolento sfrutta il modello k-ε. In altri termini, questo modello, grazie all'utilizzo sinergico di entrambi i modelli di base, è in grado di descrivere la transizione dei flussi passando dal turbolento completamente sviluppato in corrispondenza al bulk fluido a quello molecolare o viscoso in corrispondenza alla parete.

In particolare, l'equazione di governo per k ha la stessa forma della 2.20 mentre l'equazione per ω diventa:

$$\frac{D(\rho\omega\mathbf{u})}{Dt} = \frac{\gamma_1}{\nu_t} \mathbf{P} - \beta\rho\omega^2 + \nabla[(\mu_v + \sigma_{\omega 1})\nabla\omega] + 2(1 - F_1) \frac{\rho\sigma_{\omega 2}}{\omega} \nabla k \nabla\omega \quad 2.28$$

con

$$\mathbf{P} = \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad 2.29$$

e i seguenti valori di inizializzazione:

Tabella 2.4, Valori standard dei parametri utilizzati nel modello k- ω SST

Parametri del modello k- ω	Valore numerico di uso comune
γ_1	0.56
β	0.075
$\sigma_{\omega 1}$	0.65
$\sigma_{\omega 2}$	0.856
β^*	0.09
a_1	0.31

In ultimo rimane da determinare il valore di F_1 che è funzione di altri parametri, β^* e a_1 , il cui valore è mostrato in tabella, da inizializzare e dell'energia cinetica turbolenta, oltre che delle proprietà del fluido.

2.3.4 Bubble-Induced Turbulence: BIT

I modelli sopra descritti per la descrizione della turbolenza devono essere, però, integrati quando si parla di sistemi gas-liquido in virtù dell'aumento della turbolenza dovuta allo sciame di bolle. Esistono a tal proposito, dunque, diversi approcci per modellare la viscosità turbolenta indotta dalla risalita dello sciame; l'approccio più semplice ricorre all'utilizzo della formulazione *BIT*. In particolare, si assume che la turbolenza del sistema sia data dalla sovrapposizione dei due contributi, quello dovuto al trasporto di quantità di moto turbolenta e quello indotto dallo sciame di bolle.

Segue che la viscosità cinematica risultante sarà data dalla somma del contributo turbolento, calcolato in base al modello scelto, e di quello indotto dalle bolle.

$$\nu^{(t)} = \nu_{SI}^{(t)} + \nu_{BI}^{(t)} \quad 2.30$$

dove i pedici fanno riferimento alla turbolenza *shear-induced* e *bubble-induced*. In particolare, come specificato, il termine $\nu_{SI}^{(t)}$ è espresso da relazioni che dipendono dal modello scelto per descrivere la turbolenza (k- ε , k- ω , k- ω SST) mentre per il termine $\nu_{BI}^{(t)}$ sono state proposte specifiche relazioni [34]:

$$\nu_{BI}^{(t)} = C_{\mu\alpha} \alpha_g |\mathbf{u}_r| d_{eb} \quad 2.31$$

Il parametro da imporre è $C_{\mu\alpha}$ che comunemente viene preso uguale a 0.6.

Altri approcci per tenere in considerazione l'aumento della turbolenza dovuto allo sciame di bolle ipotizzano che il principio di sovrapposizione sia valido per le scale della turbolenza. In questo caso si ha che la viscosità cinematica turbolenta risultante ha la seguente forma:

$$\nu^{(t)} = C_{\mu\alpha} l \sqrt{k_1} \quad 2.32$$

nella quale la scala della turbolenza è data dalla somma delle scale $l = l_{SI} + l_{BI}$ con

$$l_{SI} = 0.4y \quad 2.33$$

in cui y è la distanza dalla parete e

$$l_{BI} = \frac{\alpha_g d_{eb}}{3} \quad 2.34$$

Rimane, in ultimo, da definire l'espressione per k_1 :

$$k_1 = \frac{3}{4} \frac{\alpha_g C_D l}{0.04 \alpha_l C_D + \alpha_g l} |\mathbf{u}_r|^2 \quad 2.35$$

2.4 Quantità di moto all'interfaccia, formule di chiusura

Il termine \mathbf{F}_{kp} , in 2.36, rappresenta la forza per unità di volume del sistema che la fase k -esima e p -esima si scambiano all'interfaccia. In accordo con la formulazione della terza legge di Newton si può, quindi, scrivere:

$$\mathbf{F}_{kp} = -\mathbf{F}_{pk} \quad 2.36$$

Nel sistema bifasico aria-acqua la bolla può essere soggetta a diverse forze. Quelle implementate in OpenFoam, studiate e proposte da Michta [35], sono quella di *drag*, *lift*, *wall lubrication*, *turbulent dispersion* e *virtual mass*. Segue che la forza totale che le due fasi si scambiano, uguale in modulo e opposta in verso, è data da:

$$\mathbf{F}_{kp} = \mathbf{F}_{kp}^d + \mathbf{F}_{kp}^l + \mathbf{F}_{kp}^{wl} + \mathbf{F}_{kp}^{td} + \mathbf{F}_{kp}^{vm} \quad 2.37$$

Nel caso di moto completamente sviluppato, la forza di drag concorre alla determinazione della velocità terminale della bolla attraverso un bilancio con la forza di galleggiamento. Le altre forze, invece, influenzano diversamente la bolla, in particolare:

- a) la forza di *wall lubrication* tende a spingere la bolla lontano dalla parete
- b) la forza di *lift* è significativa quando l'ingresso del gas è di lato rispetto alla base perpendicolare all'asse della colonna e tende a spingere la bolla lateralmente rispetto alla direzione di risalita
- c) la forza di *turbulent dispersion* tende ad uniformare i gradienti in termini di frazione volumica

Stabilite le forze che entrano nel bilancio all'interfaccia il termine per descrivere il trasferimento di quantità di moto all'interfaccia è stato modellato nel codice come segue:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_g = & -\frac{3}{4} \alpha_g \frac{C_{dg} \rho_l}{d_g} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l| (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l) - \alpha_g (C_{lg} \rho_l (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l) \times (\nabla \times \mathbf{u}_l)) \\ & + \alpha_g C_{vmg} \rho_l \left(\frac{D\mathbf{u}_l}{Dt} - \frac{D\mathbf{u}_g}{Dt} \right) + \mathbf{F}_g^{wl} + \mathbf{F}_g^{td} \end{aligned} \quad 2.38$$

dove il pedice g fa riferimento alla fase dispersa gassosa mentre il pedice l alla fase continua liquida.

2.4.1 La forza di drag

La forza di drag, nota anche come forza di trascinamento, esprime in generale la resistenza tra due fasi diverse che si muovono di moto relativo l'una rispetto all'altra. Nel caso in esame la forza di drag si oppone al moto della bolla che procede dal basso verso l'alto per effetto della forza di galleggiamento. L'espressione che la forza di drag per unità di volume di miscela è:

$$\mathbf{F}_g^d = -\frac{3}{4} \frac{C_D}{d_{eb}} \alpha_g \rho_l |\mathbf{u}_r| \mathbf{u}_r \quad 2.39$$

dove $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b$ è la velocità relativa tra le due fasi e d_{eb} è il diametro di Sauter, definito come il diametro della sfera avente lo stesso rapporto volume su superficie della bolla in esame e C_D è il coefficiente di drag.

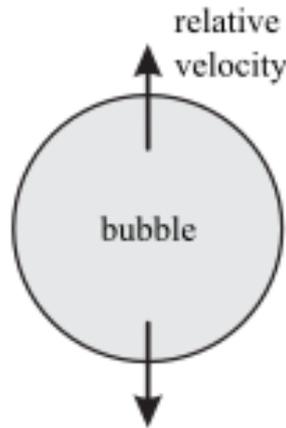


Figura 2.2, Schematizzazione della forza di drag [36]

Dividendo la 2.39 per il diametro di bolla per unità di volume $\frac{d_{eg}}{(\frac{\pi}{6} d_{eb}^3)}$, si ritrova l'espressione della forza di drag per particella singola:

$$\mathbf{F}_g^d = C_D \rho_l \frac{|\mathbf{u}_r| \mathbf{u}_r}{2} \left(\frac{\pi}{4} d_{eb}^2 \right) \quad 2.40$$

I modelli implementati nel codice sono diversi, ma quello usato per le simulazioni è il coefficiente di drag calcolato dalla correlazione di Tomiyama per liquidi parzialmente contaminati.

Coefficiente di drag di Tomiyama

Per il calcolo della forza di drag, associata alla quantità di moto trasferita sulla bolla durante il suo moto, bisogna conoscere un'espressione per il coefficiente di drag C_D : infatti, a seconda delle caratteristiche della bolla, riassunte in numeri adimensionati, e delle caratteristiche del liquido in cui la bolla si muove, è possibile esprimere il coefficiente di drag attraverso delle relazioni matematiche. Di seguito si riportano le principali [37] usate nelle simulazioni e implementate nel codice.

A seconda del *Reynolds di bolla*,

$$Re_b = \frac{\rho_l u_T d_{eb}}{\mu_l} \quad 2.41$$

del numero di *Eötvös*, definito come il rapporto tra forza gravitazionale e tensione superficiale agenti sulla bolla,

$$Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_g)d_{eb}^2}{\sigma} \quad 2.42$$

e del numero di Morton, che insieme al numero di *Eötvös* è in grado di caratterizzare la forma delle bolle,

$$Mo = \frac{g\mu_l^4(\rho_l - \rho_g)}{\rho_l^2\sigma^3} \quad 2.43$$

sono state proposte diverse relazioni per il coefficiente di drag. La seguente espressione

$$C_D = \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re_b^{0.687}) \quad 2.44$$

ricavata per particelle sferiche rigide è valida se il Re_b è inferiore a 1000 e se la superficie all'interfaccia risulta essere contaminata. Per valori più alti del numero di Reynolds e superficie parzialmente contaminata il coefficiente di drag assume la seguente forma:

$$C_D = \frac{72}{Re_b} \quad 2.45$$

Come detto, le relazioni proposte sono valide per bassi valori del numero di *Eötvös* tale da poter considerare la bolla perfettamente sferica. Nel caso in cui la bolla non lo fosse il coefficiente di drag assumerebbe valori maggiori e a seconda del livello di contaminazione dell'interfaccia sono disponibili diverse correlazioni. In particolare per sistemi puri, non contaminati e quindi un'interfaccia completamente mobile, il coefficiente di drag è modellato dalla seguente espressione:

$$C_D = \max \left\{ \min \left[\frac{16}{Re_b} (1 + 0.15Re^{0.687}), \frac{48}{Re_b} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{(Eo + 4)} \right\} \quad 2.46$$

Nell'eventualità in cui l'interfaccia dovesse risultare parzialmente contaminata, come per il caso in esame, l'espressione da utilizzare per il coefficiente di drag avrebbe la seguente forma:

$$C_D = \max \left\{ \min \left[\frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re^{0.687}), \frac{72}{Re_b} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{(Eo + 4)} \right\} \quad 2.47$$

In ultimo per sistema completamente contaminati l'espressione da utilizzare è la seguente:

$$C_D = \max \left\{ \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{(Eo + 4)} \right\} \quad 2.48$$

L'andamento della dipendenza della velocità terminale in funzione del diametro di bolla per un sistema aria-acqua è riportato in figura:

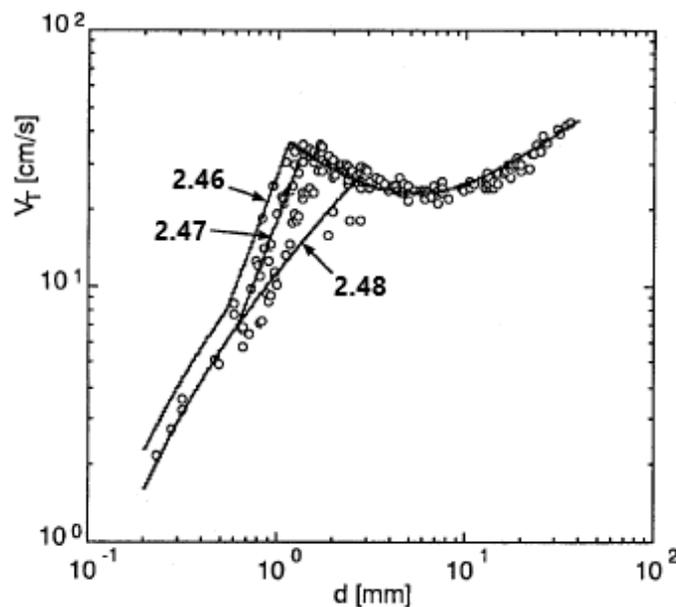


Figura 2.3, Dipendenza della velocità terminale in funzione del diametro di bolla [37]

Il grafico riportato mostra graficamente la dipendenza della velocità terminale in funzione del diametro di bolla al variare del grado di contaminazione dell'interfaccia. Si noti, in ultimo, che le correlazioni utilizzate sono valide per $Re_b < 1000$ e per $Eo < 40$.

Effetto di sciame sul coefficiente di drag

In letteratura sono presenti diversi articoli sullo studio dell'effetto che l'hold-up locale ha sul coefficiente di drag; infatti esistono diverse correlazioni che mettono in funzione la velocità relativa, che dipende direttamente dal coefficiente di drag, all'hold-up globale [38, 39]. In particolare, la forma dell'espressione che ha ispirato le diverse correlazione presenti in letteratura si basa sul lavoro di *Richardson e Zaki* (1954) ed è normalmente generalizzata nel modo seguente [40]:

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_\infty (1 - \alpha_{glob})^n \quad 2.49$$

in cui n prende il nome di *esponente di Richardson e Zaki* ed dipende dal Reynolds di bolla mentre \mathbf{u}_∞ è la velocità di una bolla isolata che si muove all'interno di un liquido stagnante e può essere facilmente calcolata note le opportune correlazioni [38];

$$\mathbf{u}_\infty = \frac{\mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2}{\sqrt{\mathbf{u}_1^2 + \mathbf{u}_2^2}} \quad 2.50$$

con

$$\mathbf{u}_1 = \frac{3}{18} \frac{(\rho_l - \rho_g)}{\mu_l} g d_{eb}^2 \frac{\mu_l + \mu_g}{3\mu_g + 2\mu_l} \quad 2.51$$

e

$$\mathbf{u}_2 = \sqrt{\frac{2\sigma}{d_{eb}(\rho_l + \rho_g)} + \frac{g d_{eb}}{2}} \quad 2.52$$

Si noti, dunque, che la velocità relativa viene considerata una variabile locale relativamente allo spazio e media rispetto al tempo. In ultimo, quindi, si può considerare un coefficiente di drag, funzione della velocità relativa, che tenga in considerazione lo sciame di bolle, ottenendo la seguente espressione:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_l} g d_{eb} \frac{1 - \alpha_{glob}}{\mathbf{u}_r^2} \quad 2.53$$

dove il termine $1 - \alpha_{glob}$ serve come fattore correttivo rispetto al caso di bolla isolata. L'utilizzo di questa espressione, infatti, migliora la descrizione del comportamento fluidodinamico tramite CFD soprattutto nel regime eterogeneo in cui si hanno forti disomogeneità locali [38].

Swarm effect: Marschall et al.

Un'altra correlazione particolarmente nota e che si è ispirata a quelle descritte nel paragrafo precedente è la correlazione di Marschall *et al.* [36].

In particolare, come mostrato nel lavoro di Marschall *et al.*, l'effetto di *swarm* può essere tenuto in considerazione all'interno del coefficiente di drag:

$$C_{d,sw} = C_d f(\alpha_{glob}) \quad 2.54$$

dove

$$f(\alpha_{glob}) = \frac{1}{(1 - \alpha_{glob})^m} \quad 2.55$$

Nella 2.55 l'esponente m che compare nella funzione correttiva $f(\alpha_{glob})$ prende il nome di *esponente di swarm* ed è funzione del regime fluido-dinamico della bolla nel suo moto di risalita.

In particolare, a seconda del Reynolds di bolla l'esponente di swarm può assumere il valore:

- $m = 4.65$ nel caso di regime laminare
- $m = 2.39$ nel caso di regime turbolento

Inoltre, le equazioni 2.54 e 2.55 fanno riferimento alla teoria di Richardson e Zaki, 1954. In questo lavoro di tesi la correzione per tenere in considerazione l'effetto di swarm è la correlazione di Simmonet *et al.*, 2007.

In figura 2.4 sono riportate le principali correlazioni per tenere in considerazione l'effetto di swarm:

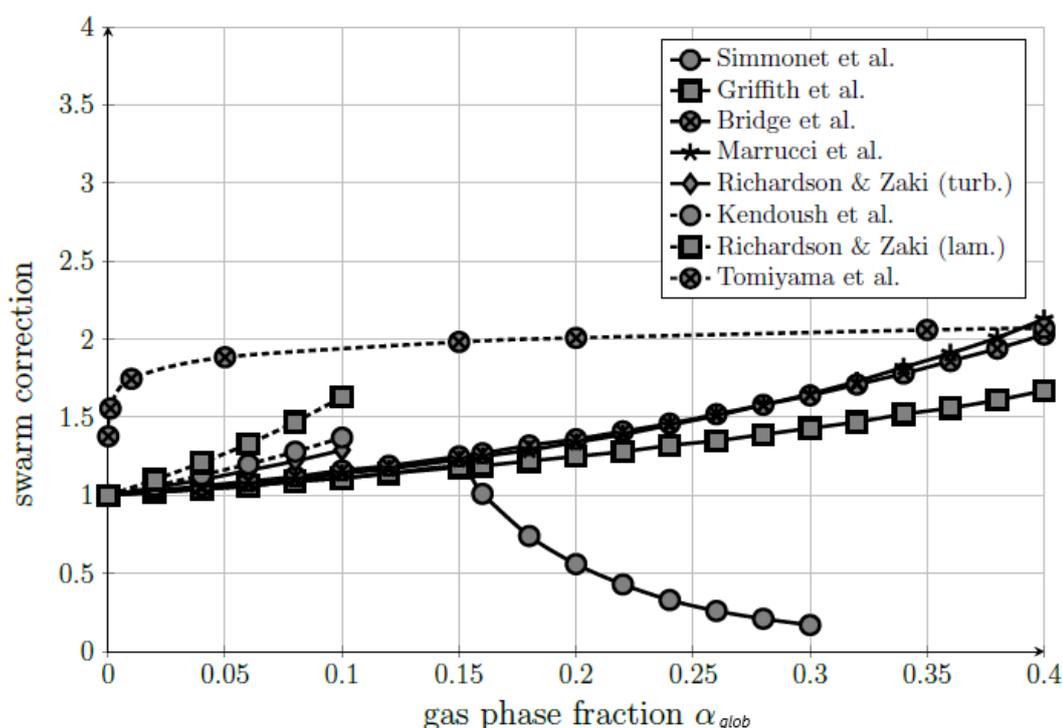


Figura 2.4. Diagramma delle correzioni di swarm tratte dallo studio di Marschall *et al.* [36]

Nel seguito si riporta la funzione per casi che descrive, a seconda del regime fluido-dinamico espresso dal Reynolds di bolla, la variazione di m :

$$m = \begin{cases} 4.65 & Re_b \leq 0.2 \\ \frac{4.35}{Re_b^{0.03}} & 0.2 < Re_b \leq 1 \\ \frac{4.45}{Re_b^{0.1}} & 1 < Re_b \leq 500 \\ 2.39 & Re_b > 500 \end{cases} \quad 2.56$$

È importante notare, in ultimo, che queste correlazioni sono valide sotto l'ipotesi in cui la particella sia perfettamente rigida; segue che perdono di validità quando entrano in gioco alte frazioni volumiche di vuoto [36].

2.4.2 Forza di Lift

La forza di lift consiste in una forza che, a seconda della dimensione della bolla, tende a spingerla verso la parete del reattore oppure verso il centro; ne consegue, perciò, che la forza di lift svolge un importante ruolo nella forma dei profili locali di hold up. La figura 2.5 mostra la schematizzazione della forza:

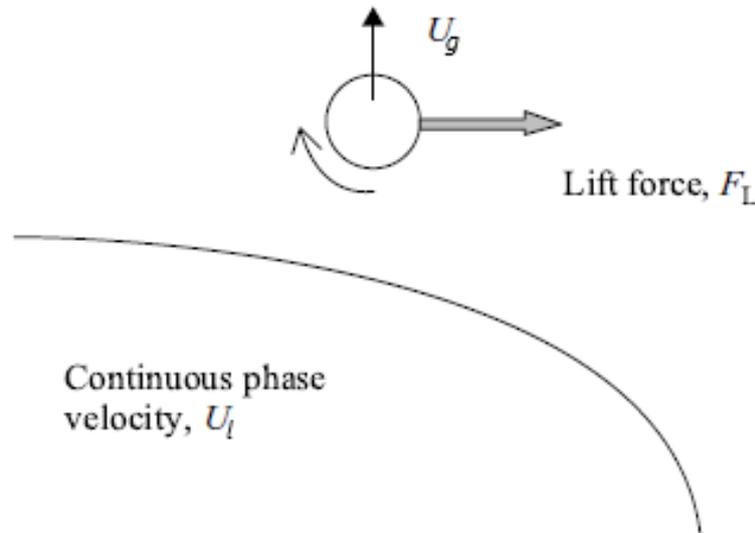


Figura 2.5, Schematizzazione della forza di lift agente sulla fase gassosa dispersa [31]

La forza volumica agente sulla fase dispersa è calcolato tramite la seguente espressione:

$$\mathbf{F}_g^l = -C_l \alpha_g \rho_l (\mathbf{u}_r) \times (\nabla \times \mathbf{u}_l) \quad 2.57$$

Come nel caso della forza di drag, sono state sviluppate diverse correlazioni il cui parametro principale è il diametro medio di Sauter.

Senza perdere di generalità, dunque, si può affermare che nel caso di piccole bolle rigidamente sferiche il coefficiente di lift determina un moto della bolla verso la parete in virtù dei gradienti di pressione che si instaurano ai lati della bolla stessa; nel caso di bolle grandi, invece, la valutazione del coefficiente di lift diventa più complessa tanto da dover essere studiata come *funzione per casi* i cui limiti di validità sono espressi dal numero di *Eötvös* in quanto fisicamente legato alla deformabilità della bolla a seconda della predominanza del contributo gravitazionale oppure capillare.

2.4.3 Forze di lubrificazione alla parete

La forza di lubrificazione alla parete, introdotta da Antal [41], nasce per spiegare i picchi nei profili di hold up in prossimità della parete.

Il modello di chiusura implementato è quello di Frank [42] la cui espressione è:

$$\mathbf{F}_g^{wl} = C_{wl} \alpha_g \rho_l |\mathbf{u}_r - (\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_w) \mathbf{n}_w|^2 (-\mathbf{n}_w) \quad 2.58$$

dove \mathbf{n}_w è il vettore normale alla parete e $\mathbf{u}_r - (\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_w) \mathbf{n}_w$ è la componente della velocità relativa tra le due fasi, bolla-acqua, parallela alla parete. Il C_{wl} è calcolato utilizzando tre correlazioni principali, quella di Tomiyama [37], Hosokawa [43] e Frank [42].

Nel caso in esame non è stata considerata la forza di lubrificazione perché era noto dai dati sperimentali che i profili locali di hold up dovessero essere piatti nel regime omogeneo e parabolici nel regime eterogeneo senza presentare picchi alla parete.

2.4.4 Forza di dispersione per la turbolenza

Questa tipologia di forza tiene in considerazione le fluttuazioni dovute alla turbolenza della velocità locale e istantanea del liquido. L'effetto di tale forza è quello di rendere più uniformi i profili di frazione volumica del gas. I modelli implementati nel software sono tre: il primo riportato è quello di *Gosman* [44].

$$\mathbf{F}_g^{td} = -\frac{3}{4} C_d \frac{\rho_l v_l^t}{d_g \sigma_t} |\mathbf{u}_r| \nabla \alpha_g \quad 2.59$$

in cui $\sigma_t = 0.9$ e C_d è il coefficiente di drag di Schiller-Naumann.

Il secondo modello implementato è quello di *Lopez de Bertodano* [45]:

$$\mathbf{F}_g^{td} = -C_{td} \rho_l k_l \nabla \alpha_g \quad 2.60$$

dove C_{td} è preso uguale a uno. L'ultimo modello implementato è quello di *Burns* [46]:

$$\mathbf{F}_g^{td} = -\frac{3}{4} C_d \frac{\rho_l v_l^t}{d_g \sigma_t} |\mathbf{u}_r| \alpha_g \left(\frac{1}{\alpha_g} + \frac{1}{\alpha_l} \right) \nabla \alpha_g \quad 2.61$$

Viene, in ultimo, riportato in figura 1.5 una schematizzazione della forza di dispersione turbolenta:

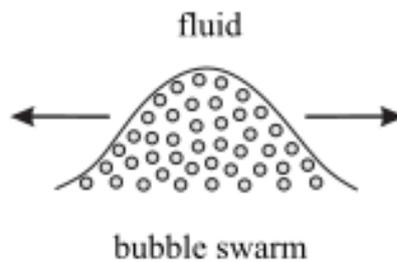


Figura 2.6, Schematizzazione della forza di dispersione turbolenta [36]

Anche la forza di dispersione per la turbolenza non è stata utilizzata nelle simulazioni.

2.4.5 Forza della massa virtuale (o massa aggiunta)

La forza della massa virtuale è l'inerzia aggiunta al sistema dal liquido circostante alle bolle che viene parzialmente trascinato dalla bolla stessa

Nella figura 2.7 è rappresentata una bolla in due istanti temporali successivi il cui obiettivo è quello di fornire una spiegazione grafica del processo fisico che avviene.

Nel dettaglio, è possibile osservare che la resistenza al moto di risalita non è direttamente offerta solo dal film liquido che si trova attorno alla bolla ma anche dalla coda che il moto di risalita stesso genera.

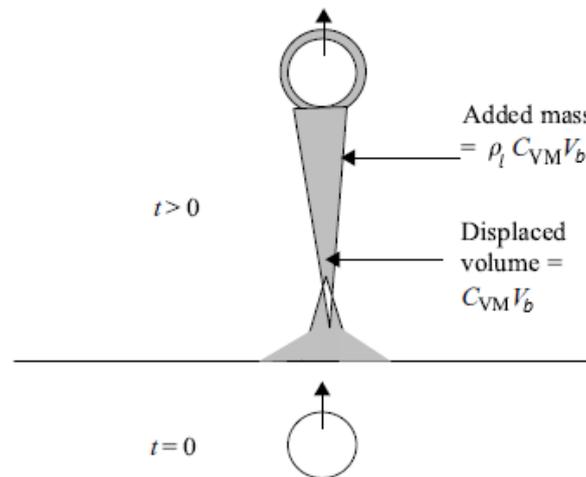


Figura 2.7, Schematizzazione della forza di massa virtuale o aggiunta agente sulla fase gassosa dispersa [36]

In questo caso la forza volumica implementata e impostata di default per la risoluzione del momento è la seguente [47]:

$$\mathbf{F}_g^{vm} = -C_{vm}\alpha_g\rho_l\left(\frac{D\mathbf{u}_l}{Dt} - \frac{D\mathbf{u}_g}{Dt}\right) \quad 2.62$$

Questa forza nelle simulazioni ha un effetto stabilizzante per la soluzione e tende ad annullarsi quando la bolla tende a muoversi con la velocità terminale. Si noti, però, che nella realtà la risalita di uno sciame di bolle è un processo complesso e intrinsecamente non stazionario per cui il termine in parentesi nella 2.62 tenderà, per tempi lunghi, a zero senza mai essere uguale a zero.

2.5 Influenza del solido sospeso sulle proprietà del sistema

Il solido riveste un ruolo di particolare importanza nell'ambito della caratterizzazione delle proprietà del liquido per ottenere una buona descrizione fisica del sistema trifasico; a tal proposito, dunque, verranno fornite le principali caratteristiche del solido particellare e delle formule utilizzare per tenere in considerazione la sua presenza nel liquido. È bene precisare che lo slurry, ossia l'insieme del liquido e del solido sospeso, viene modellato come una fase pseudo-omogenea.

È noto dalla letteratura, infatti, che la presenza del solido è tenuta in considerazione modificando le due principali proprietà della fase continua cioè densità e viscosità. Relativamente al calcolo della densità, in accordo con la teoria di Ruzicka [48], si considera che le bolle salgano lungo la colonna come se si muovessero in un analogo liquido di densità apparente ρ_a maggiore del liquido puro e calcolabile come segue:

$$\rho_a = (1 - c_s)\rho_w + c_s\rho_p \quad 2.63$$

dove c_s è la frazione volumica di solido

Si noti che ρ_p è la densità della particella asciutta e non la densità del solido ρ_s ; infatti qualora scambiate le densità, l'errore sulla densità apparente può essere particolarmente severo soprattutto a più alti valori della concentrazione del solido come mostra la figura 2.8:

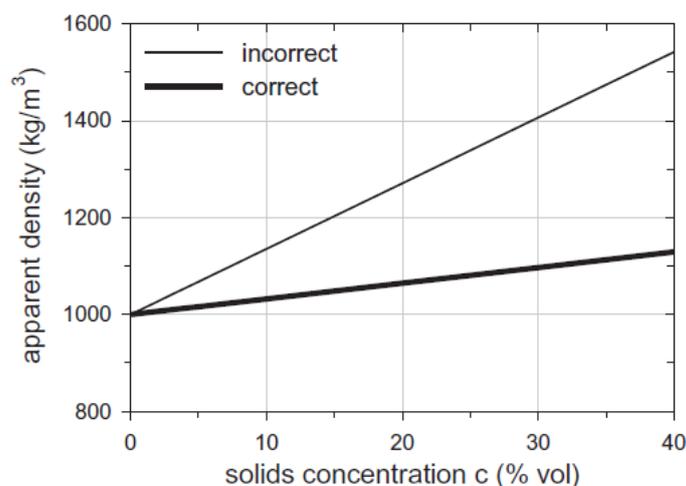


Figura 2.8, Rappresentazione della densità apparente in funzione della concentrazione del solido con la densità corretta per il solido ($\rho_p = 1323 \frac{kg}{m^3}$) e incorretta ($\rho_s = 2354 \frac{kg}{m^3}$) [2].

L'altro parametro fisico che è influenzato dalla presenza delle particelle sospese è la densità; esistono, infatti, correlazioni, come quella riportata di seguito, in grado di predire la viscosità apparente dello pseudo-liquido:

$$\mu_a = \mu_l \exp\left(2.5 \frac{c_s}{1 - 0.609c_s}\right) \quad 2.64$$

In letteratura esistono diversi studi [49] che si occupano di verificare i limiti di validità di tali correlazioni e le principali sono riportati in figura 2.9:

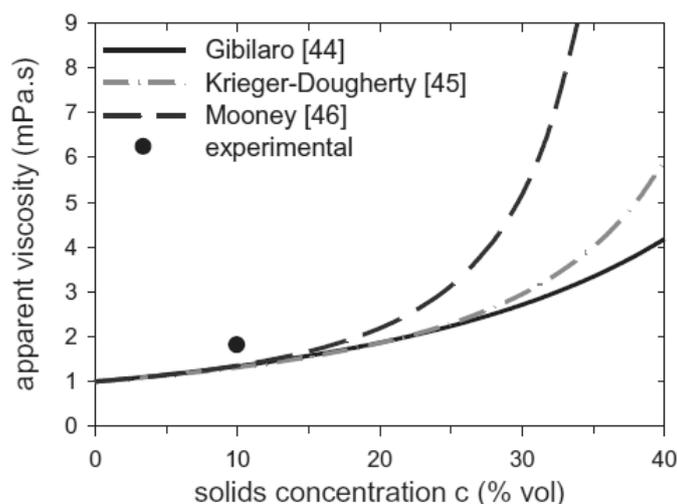


Figura 2.9, Rappresentazione grafica delle principali correlazioni per il calcolo della viscosità apparente del liquido [2]

Si riporta, in ultimo, l'espressione analitica dell'interpolazione di Gibilaro *et al.* rappresentata in figura 2.9 e citata nell'articolo di Orvalho:

$$\mu_a = \mu_l(1 - c_s)^{-2.8} \quad 2.65$$

L'espressione 2.65 viene utilizzata per descrivere, in prima approssimazione, una colonna a bolle slurry che presenti un contenuto di solido entro il limite mostrato in figura 2.9 pari a $C_s = 0.1$.

Infatti, a valori più elevati di concentrazioni, per esempio $C_s = 0.1$, il cui interesse di studio rimane puramente accademico in quanto concentrazioni in solido così elevate si adattano poco alla richiesta impiantistica, la correlazione 2.64 e 2.65 falliscono, come mostrato nella seguente tabella 2.5, considerando la $\mu_a = 6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ricavata da dati sperimentali:

Tabella 2.5, Confronto tra correlazione e valore sperimentale calcolato [2].

Correlazioni	$\mu_a, \text{mPa} \cdot \text{s}$	Errore relativo%
$\mu_a = \mu_l \exp\left(2.5 \frac{c_s}{1 - 0.609c_s}\right)$	3.8	37%
$\mu_a = \mu_l(1 - c_s)^{-2.8}$	4.2	30%

2.6 Metodologie di risoluzione delle equazioni di trasporto

Nel primo capitolo sono state proposte le equazioni di bilancio di materia e quantità di moto la cui risoluzione permette di determinare il moto di fluidi. Tuttavia quest'ultima non è immediata; infatti, le equazioni di Navier-Stokes e di continuità sono equazioni differenziali alle derivate parziali la cui risoluzione non è mai analitica se non per particolari geometrie e condizioni di flusso. In generale, quindi, al fine di ottenere delle soluzioni approssimate di natura numerica, si richiede necessario l'utilizzo di metodi di discretizzazione che permettano di trasformare la risoluzione di un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali in un sistema di equazioni algebriche. È bene, quindi, prima di procedere con le metodologie di discretizzazione, presentare i protagonisti dei metodi di risoluzione numerica.

La partenza per utilizzare un metodo numerico di risoluzione è l'esistenza di un modello matematico rappresentato generalmente da un set di equazioni differenziali o integro-differenziali e le relative condizioni iniziali e al contorno [1]. In particolare, il metodo di risoluzione numerica può essere sviluppato per un particolare set di equazioni e adattato ad esso perché si abbia la massima efficacia.

Definito il modello matematico e, di conseguenza, le equazioni differenziali o integro-differenziali di governo si devono scegliere dei metodi di discretizzazione adeguati affinché si possa passare da complesse equazioni differenziali alle derivate parziali a sistemi di equazioni algebriche. Le metodologie sono diverse ma le più comunemente utilizzate, presentate nel seguito, sono:

- Metodo alle differenze finite
- Metodo ai volumi finiti
- Metodo agli elementi finiti

È bene sottolineare che tutti i metodi portano allo stesso risultato se e solo se la griglia utilizzata è molto fine; altrimenti, a seconda della tipologia del problema è preferibile utilizzare un metodo piuttosto che un altro.

Nel caso di sistemi multifase, come quello in esame, il metodo utilizzato è quello ai volumi finiti.

2.6.1 Metodo ai volumi finiti: discretizzazione spaziale

Per rendere la trattazione di validità generale si considererà un bilancio scritto per la generica quantità ϕ . Il metodo ai volumi finiti viene applicato alla forma integrale delle equazioni di bilancio la cui forma, perciò, è la seguente:

$$\int_A \rho \phi \mathbf{u} d\mathbf{A} = \int_A \Gamma \nabla \phi d\mathbf{A} + \int_V q_\phi dV \quad 2.66$$

Si suppone che tutte le proprietà del fluido siano note. Il metodo dei volumi finiti consiste nella suddivisione del dominio in sotto-domini di volume finito attraverso una griglia. La differenza principale con il metodo alle differenze finite è che quest'ultimo utilizza i nodi mentre il metodo ai volumi finiti i *boundaries* dei sotto-domini.

L'approccio generalmente seguito quando si utilizza il metodo ai volumi finiti è quello di porre i nodi al centro dei volumi di controllo (VC) anche se è possibile porre i nodi al

centro delle facce. Il principale vantaggio nell'utilizzo del primo approccio rispetto al secondo risiede nella maggiore precisione dei valori medi. Infatti l'accuratezza dei valori medi del metodo con nodi centrati nel volume è del secondo ordine rispetto a quella con nodi centrati nelle facce.

Ciò che è importante sottolineare, però, è l'indipendenza del metodo di discretizzazione. Infatti, indipendentemente dalla locazione dei nodi, al centro o sulle facce dei volumi di controllo, i principi di discretizzazione sono universalmente validi.

In figura 2.10 è mostrato l'approccio usuale.

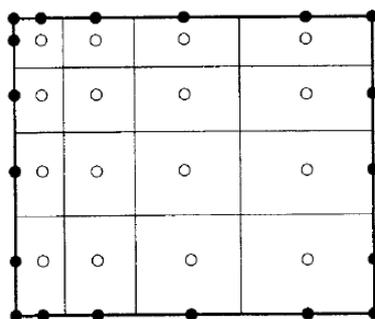


Figura 2.10, Metodo ai volumi finiti con nodi centrati all'interno dei volumi di controllo [1].

Definita la divisione dei domini, l'equazione 2.66 viene applicata e risolta per ogni volume di controllo. Essendo l'integrale un operatore lineare, la somma degli integrali coincide con l'integrale della somma considerando che i contributi interni si elidono vicendevolmente. Come per il metodo agli elementi finiti, gli integrali superficiali e di volume che compaiono quando la 2.66 è applicata al singolo volume di controllo è necessario utilizzare delle formule di quadratura le quali trasformano il problema da integrale ad algebrico.

Integrali di superficie

Per poter rendere più fruibile la trattazione viene riportata in figura 2.11 lo schema dei nodi utilizzato e la relativa notazione [1]:

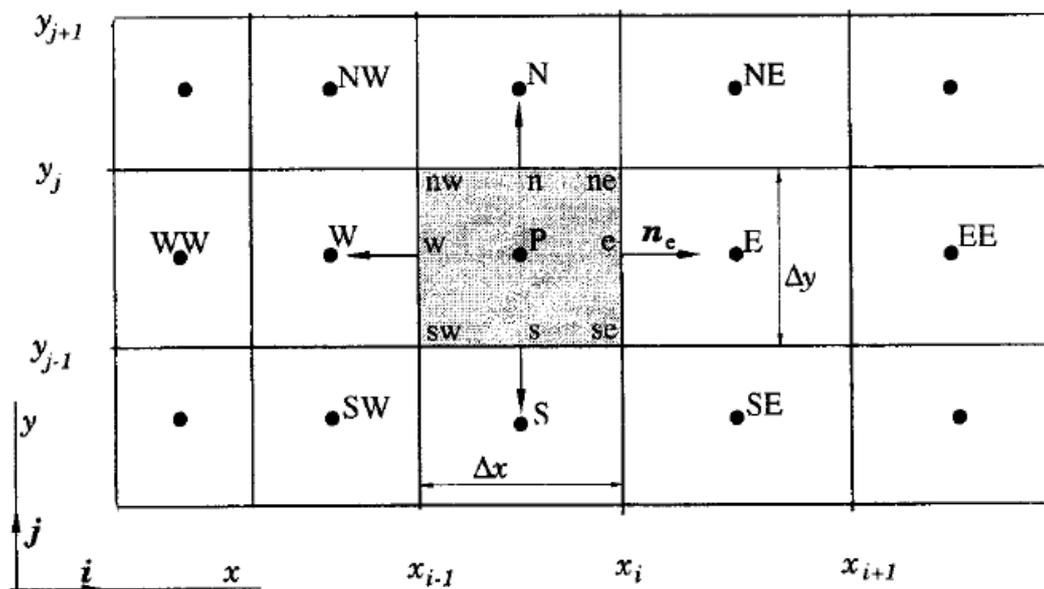


Figura 2.11, Schema bidimensionale dei nodi usato nel metodo dei volumi finiti e rappresentazione della notazione [1]

La figura 2.11 è la rappresentazione in due dimensioni; in realtà i volumi finiti possono essere pensati nelle tre dimensioni dello spazio perciò l'integrale di superficie sarà riferito non a 4 facce ma a 6. La rappresentazione tridimensionale della figura 2.11 è fornita di seguito in figura 2.12. Si vuole sottolineare, inoltre, attraverso la visione tridimensionale del volume di controllo che due volumi di controllo adiacenti devono avere in comune al più una faccia; in altri termini non devono esserci sovrapposizioni o compenetrazioni di volumi altrimenti non sarebbe rispettato il principio di conservazione della proprietà ϕ .

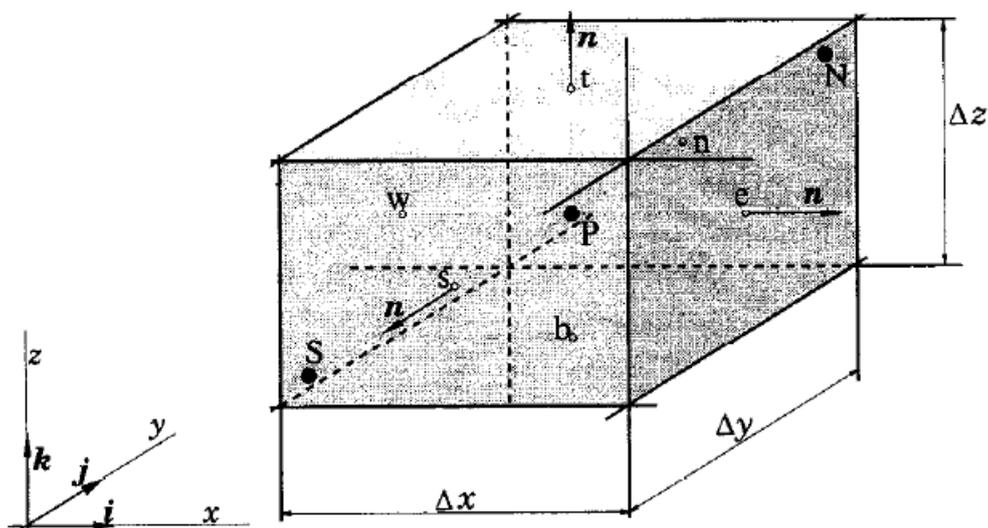


Figura 2.12, Schema bidimensionale dei nodi usato nel metodo dei volumi finiti e rappresentazione della notazione [1]

Nel metodo ai volumi finiti il flusso attraverso la frontiera del volume di controllo può essere inteso come la somma dei flussi su ciascuna delle facce.

$$\int_A f d\mathbf{A} = \sum_k \int_{A_k} f d\mathbf{A}_k \quad 2.67$$

È bene notare che la frontiera A rappresenta le facce e non il centro perciò, in base all'assunzione di collocare i nodi al centro del volume di controllo, la funzione f non è nota sulla frontiera; risulta, quindi, evidente che dovrà essere introdotta un'approssimazione per il calcolo dell'integrale 2.67

L'approssimazione più frequentemente utilizzata consiste nel prendere il valore medio della funzione integranda al centro della faccia e moltiplicarlo per l'area della faccia stessa; l'approssimazione, dunque, risiede nel considerare la funzione integranda costante e pari al valore medio al centro della faccia. Formalmente si ha, con riferimento alla notazione riportata in figura 2.11:

$$\int_{A_e} f d\mathbf{A}_e = \bar{f} S_e \sim f_e S_e \quad 2.68$$

L'approssimazione riportata nella 2.68 è un'approssimazione del secondo ordine. Tuttavia, il valore della funzione integranda al centro della faccia non è noto ed è quindi necessario ricavarlo per interpolazione. Affinché si mantenga un'accuratezza del secondo ordine è bene operare un'interpolazione che sia a sua volta almeno del secondo ordine.

Una delle interpolazioni del secondo ordine è, per esempio, quella dei trapezi la cui formulazione è la seguente:

$$\int_{A_e} f d\mathbf{A}_e = \frac{S_e}{2} (f_{ne} + f_{se}) \quad 2.69$$

nella quale f_{ne} ed f_{se} è il valore della funzione integranda nei vertici del volume di controllo.

Integrali di volume

Presentando il metodo ai volumi finiti, è stata riportata l'equazione generale di bilancio della proprietà ϕ nella quale compare un integrale esteso al volume di controllo $\int_V q_\phi dV$ la cui risoluzione implica, come per quello di superficie, un'approssimazione.

L'approssimazione del secondo ordine più semplice è la seguente:

$$\int_V q_\phi dV = \bar{q}V \sim q_P V \quad 2.70$$

dove q_P rappresenta il valore della funzione integranda al centro del volume di controllo; in questo caso non è richiesta nessuna ulteriore informazione perché tutte le proprietà sono direttamente disponibile al centro del volume di controllo. Si noti che, essendo la 4.5 del secondo ordine, l'approssimazione sarà esatta qualora q_ϕ sia costante o vari in maniera lineare.

Interpolazione *Upwind* (UDS)

Una delle approssimazioni che è possibile utilizzare quando si usa il metodo ai volumi finiti è l'interpolazione *upwind* che prende il valore al centro della cella successiva o precedente a quella per cui è risolto il bilancio 2.66 a seconda della direzione del flusso. In termini formali, seguendo sempre la notazione della figura 2.11, si ha [1]:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \phi_E & \text{se } (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_e < 0 \end{cases} \quad 2.71$$

Il vantaggio di utilizzare questa interpolazione è che, indipendentemente dalle condizioni al contorno, non porterà mai all'instabilità della soluzione. Lo svantaggio è che genera diffusione numerica portando, talvolta, il problema a non convergere.

Infatti, attraverso un'espansione di Taylor centrata in P, si ottiene la seguente forma:

$$\phi_e = \phi_P + (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P + H \quad 2.72$$

dove H rappresenta i termini di ordine superiore al primo. Lo schema di approssimazione UDS tiene in considerazione soltanto il primo termine (si consideri il caso $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_e > 0$). Il termine del primo ordine, perciò, rappresenta il termine di diffusione numerica:

$$f_e^d = \Gamma_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \quad 2.73$$

dove $\Gamma_e = \frac{(\rho u)_e \Delta x}{2}$ rappresenta la diffusione numerica o diffusione fittizia che porta, soprattutto per i sistemi tridimensionali alla non convergenza.

Interpolazione lineare (CDS)

Un secondo metodo di approssimazione del valore al centro della faccia è l'interpolazione lineare tra due nodi adiacenti. Formalmente si ha [1]:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e) \quad 2.74$$

nella quale il parametro λ_e è definito fattore di interpolazione lineare ed è definito come segue:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad 2.75$$

In questo caso, tramite l'espansione di Taylor, si può dimostrare che la 4.9 è un'approssimazione del secondo ordine:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e) - \frac{(x_e - x_P)(x_E - x_e)}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_P + H \quad 2.76$$

È evidente, quindi, che il termine troncato è del secondo ordine quindi più accurato dello schema UDC. Al contrario di quest'ultimo, però, lo schema CDS che garantisce la convergenza non garantisce la stabilità; in altri termini può portare ad una soluzione oscillante.

L'ulteriore vantaggio dello schema CDS risiede nella facilità di esprimere i gradienti della proprietà ϕ . Infatti, questo è garantito dall'ipotesi di linearità del profilo di ϕ tra i due nodi P ed E e il gradiente assume la seguente forma:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \sim \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad 2.77$$

Sempre sfruttando l'espansione di Taylor è semplice dimostrare che l'approssimazione è del secondo ordine.

Interpolazione *Upwind* quadratica (QUICK)

Il miglioramento dello schema CDS porta con se l'idea di interpolare la funzione tra i due nodi P ed E non con un'interpolazione lineare ma con una parabola. Per costruire una parabola, tuttavia, è necessario considerare tre punti. Sempre in accordo con quanto detto per il metodo *upwind* del primo ordine la scelta del terzo punto è dettata dal verso del flusso. Si utilizzerà quindi il nodo W se il moto del fluido sarà diretto da P a E essendo W

il nodo a monte “del vento”, il nodo EE altrimenti. Formalmente, nel caso di moto diretto da P a E:

$$\phi_e = \phi_P + g_1(\phi_E - \phi_P) + g_2(\phi_P - \phi_W) \quad 2.78$$

dove g_1 e g_2 sono coefficienti esprimibili attraverso le coordinate dei nodi. In particolare, g_1 presenta la seguente forma:

$$g_1 = \frac{(x_e - x_P)(x_e - x_W)}{(x_E - x_P)(x_E - x_W)} \quad 2.79$$

mentre

$$g_2 = \frac{(x_e - x_P)(x_E - x_e)}{(x_P - x_W)(x_E - x_W)} \quad 2.80$$

Nel caso particolare di griglia con discretizzazione spaziale uniforme si ha:

$$\phi_e = \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W - \frac{3(\Delta x)^3}{48} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_P + H \quad 2.81$$

In questo caso il termine che rimane fuori dall'interpolazione è un termine del terzo ordine il che rende lo schema QUICK uno schema del terzo ordine.

2.6.2 Metodo ai volumi finiti: discretizzazione temporale

L'equazione di bilancio 2.66 considerata nei paragrafi precedenti non comprende il termine della variazione della proprietà ϕ nel tempo; il altri termini fa riferimento a flussi stazionari. Nel caso di equazione non-stazionaria, in cui sia presente un termine di accumulo, tutti i termini convettivi, diffusivi e di generazione possono essere trattati utilizzando uno schema spaziale mentre il termine di accumulo verrà risolto considerando uno schema temporale.

Nella forma generale, quindi, chiamata $f(t, \phi(t))$ l'equazione 2.66, supponendo di portare tutti i termini allo stesso membro, si ottiene:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = f(t, \phi(t)) \quad 2.82$$

Qualora si utilizzi un metodo esplicito per la discretizzazione temporale, la $f(t, \phi(t))$ dovrà essere nota soltanto all'istante temporale per cui la soluzione è già nota; nel caso di metodo implicito è, invece richiesta la conoscenza dell'istante temporale successivo. Si ottiene, quindi, un sistema di equazioni algebriche che deve essere risolto.

Metodo di Eulero esplicito

Il metodo di Eulero esplicito è il più semplice per valutare i nuovi valori della proprietà ϕ all'istante temporale *i-esimo*. In questo caso, infatti, la proprietà ϕ non è nota all'istante temporale successivo ma può essere calcolata nota all'istante temporale *i-esimo*.

Per semplicità, si considererà nel seguito della trattazione un problema mono-dimensionale esplicitando il termine a secondo membro della 2.82 in cui si suppone assente il termine di generazione.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad 2.83$$

È evidente che se:

- $\phi = u$
- $\Gamma = \mu$

La 2.83 diventa l'equazione di Navier-Stokes monodimensionale. Supponendo che la discretizzazione sia uniforme l'equazione risultante con il metodo ai volumi finiti risulta [1]:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \left(-u \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{\Delta x^2} \right) \Delta t \quad 2.84$$

che può essere riformulata in termini adimensionati come segue:

$$\phi_i^{n+1} = (1 - 2d)\phi_i^n + \left(d - \frac{Co}{2} \right) \phi_{i+1}^n + \left(d + \frac{Co}{2} \right) \phi_{i-1}^n \quad 2.85$$

nella quale

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad 2.86$$

e

$$d = \frac{\Gamma\Delta t}{\rho\Delta x^2} \quad 2.87$$

Il parametro adimensionato d , dunque, rappresenta il rapporto tra l'istante temporale della discretizzazione e la diffusione numerica. Il secondo, invece, prende il nome di *numero di Courant* ed è un parametro importante nelle simulazioni di fluido-dinamica computazionale.

È bene, quindi, descrivere nel dettaglio come avviene la risoluzione per determinare la proprietà ϕ all'istante di tempo successivo. In particolare, il set di equazioni 2.85 può essere formalizzato in maniera più compatta nella forma:

$$\phi^{n+1} = \mathbf{T}\phi^n \quad 2.88$$

Risulta, quindi, trasformato il problema in un sistema di equazioni algebriche facilmente risolubile. In particolare, nota la soluzione nell'istante iniziale e quindi $\phi^{(0)}$, si può calcolare il valore della proprietà ϕ nell'istante temporale successivo.

L'algoritmo, infine, può dirsi arrivato a convergenza se la differenza in valore assoluto tra due istanti successivi è sufficientemente vicina (i.e. tende a zero). A tal proposito, quindi, definiamo la quantità ϵ :

$$\epsilon = \|\phi^{n+1} - \phi^n\| = \sqrt{\sum_i (\phi^{n+1}_i - \phi^n_i)^2} \quad 2.89$$

È semplice dimostrare che se gli autovalori di \mathbf{T} sono tutti maggiori di 1 ϵ tenderà ad aumentare ad ogni step temporale mentre se sono tutti minori di 1 ϵ tenderà a diminuire tendendo al più a zero. Nel primo caso si parla di soluzione non convergente mentre nel secondo caso si parla di soluzione convergente.

La dimostrazione, in virtù della particolarità della matrice \mathbf{T} di essere simmetrica a diagonale principale, risulta semplice. Infatti, gli autovalori possono essere espressi nella forma complessa di Eulero:

$$\phi_j^n = \theta^n e^{i\alpha j} \quad 2.90$$

nella quale i è l'unità immaginaria mentre α rappresenta l'argomento o fase del numero complesso. Sostituendo la 2.90 nella 2.85 si può raccogliere il termine $e^{i\alpha j}$ a fattore comune, semplificandolo, e si ottiene un'espressione esplicita per la formulazione dell'autovalore:

$$\theta = 1 + 2d(\cos\alpha - 1) + i2C\sin\alpha \quad 2.91$$

e poiché siamo interessati a confrontare questo risultato con l'unità calcoliamo il modulo della 2.91 ottenendo:

$$\theta^2 = [1 + 2d(\cos\alpha - 1)]^2 + 4C^2\sin^2\alpha \quad 2.92$$

Determinato il modulo, quindi, cerchiamo la soluzione perché si abbia $\theta^2 < 1$. Si considera, per primo, il caso in cui non avvenga diffusione numerica per cui il parametro adimensionato $d = 0$. La 2.92 diventa:

$$\theta^2 = 1 + 4C^2\sin^2\alpha \quad 2.93$$

Il secondo termine a secondo membro della 2.93, $4C^2\sin^2\alpha$, è sempre positivo e se sommato all'unità, dunque, restituirà sempre un valore maggiore di uno. In questo caso il problema dal punto di vista matematico si definisce *incondizionatamente instabile*. In altri termini, non esistono valori di Courant tali da rendere il problema stabile e convergente alla soluzione.

Viceversa, nel caso in cui non esista convezione, quindi $u = 0$, segue $C_0 = 0$, si ha:

$$\theta^2 = [1 + 2d(\cos\alpha - 1)]^2 \quad 2.94$$

Si ricava dalla 2.94 che gli auto-valori sono strettamente minori dell'unità se $d < 0.5$ e in questo caso il problema si definisce condizionatamente stabile.

Nella formulazione più generale quando entrambi i parametri adimensionati risultino diversi da zero si ottengono le seguenti due relazioni perché il problema risulti matematicamente stabile: $d < 0.5$ e $Co < 2d$. Da queste due condizioni si ricava

$$\Delta t < \frac{\rho(\Delta x)^2}{2\Gamma} \quad 2.95$$

che fornisce una limitazione sull'intervallo temporale. Mentre la seconda condizione porta al seguente risultato:

$$\frac{\rho u \Delta x}{\Gamma} < 2 \quad 2.96$$

Si noti che il primo membro della disuguaglianza è il *Peclet* di cella. La condizione 2.96 può essere facilmente ottenuta se per la discretizzazione spaziale si usa uno schema dell'ordine del CDS o superiore.

Si riporta, in ultimo, la condizione per l'instabilità. Courant e Friedrichs, 1920, notarono che i problemi controllati dalla convezione portassero a un valore negativo del termine ϕ_i^{n+1} e suggerirono che il problema potesse essere risolto utilizzando lo schema UDS. Infatti se nella 2.84 utilizziamo uno schema di discretizzazione spaziale UDS anziché CDS otteniamo:

$$\phi_i^{n+1} = (1 - 2d - Co)\phi_i^n + d\phi_{i+1}^n + (d + Co)\phi_{i-1}^n \quad 2.96$$

Nella 2.96 si comprende che l'unico termine che può portare a avere $\phi_i^{n+1} < 0$ è il coefficiente di ϕ_i^n . Allora la condizione perché sia sempre positivo è:

$$\Delta t < \frac{1}{\frac{2\Gamma}{\rho(\Delta x)^2} + \frac{u}{\Delta x}} \quad 2.97$$

Nel caso particolare in cui la diffusione sia trascurabile rispetto al termine convettivo si ottiene:

$$1 - Co > 0 \quad 2.98$$

La 2.98, quindi, impone che il numero di Courant debba essere minore di 1 oppure in termini di discretizzazione spaziale e temporale si ha:

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{u} \quad 2.99$$

Metodo di Eulero implicito

La necessità di ottenere simulazioni stabili suggerisce di utilizzare un metodo implicito e il più semplice è il metodo di Eulero implicito. Come fatto per il metodo esplicito partiamo dall'equazione di bilancio 2.83 e utilizziamo uno schema del secondo ordine per la discretizzazione spaziale (CDS). Si ottiene:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \left(-u \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \Delta t \quad 2.100$$

La 2.100 può essere scritta in funzione dei parametri adimensionati già descritti nella forma:

$$(1 + 2d)\phi_i^{n+1} - \left(d - \frac{Co}{2}\right)\phi_{i+1}^{n+1} - \left(d + \frac{Co}{2}\right)\phi_{i-1}^{n+1} = \phi_i^n \quad 2.101$$

La 2.101, quindi, mostra che in questo caso la proprietà ϕ deve essere conosciuta nell'istante temporale successivo.

Il vantaggio di utilizzare il metodo di Eulero implicito, rispetto all'esplicito, è che l'intervallo temporale può essere preso "largo" a piacere senza compromettere la stabilità del sistema.

Metodo di Crank-Nicolson

Si riporta, in ultima istanza, il metodo di Crank-Nicolson il cui ordine di accuratezza è il secondo. Sempre in riferimento alle ipotesi citate nei due paragrafi precedenti l'equazione discretizzata risulta:

$$\begin{aligned} \phi_i^{n+1} = \phi_i^n + & \left(-u \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \frac{\Delta t}{2} \\ & + \left(-u \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{\Delta x^2} \right) \frac{\Delta t}{2} \end{aligned} \quad 2.102$$

Può essere utilizzato nelle simulazioni di fluido-dinamica computazionale perché rispetto al metodo di Eulero implicito richiede uno sforzo computazionale aggiuntivo esiguo con il vantaggio di ottenere un'accuratezza superiore; infatti, il metodo di Crank-Nicolson, come detto, è del secondo ordine, mentre il metodo di Eulero implicito del primo. L'analisi della stabilità di *Von Neumann* dimostra che il problema discretizzato con il metodo di Crank-Nicolson risulta incondizionatamente stabile. In figura 2.13 si riporta, in ultimo, il confronto tra i principali schemi di discretizzazione

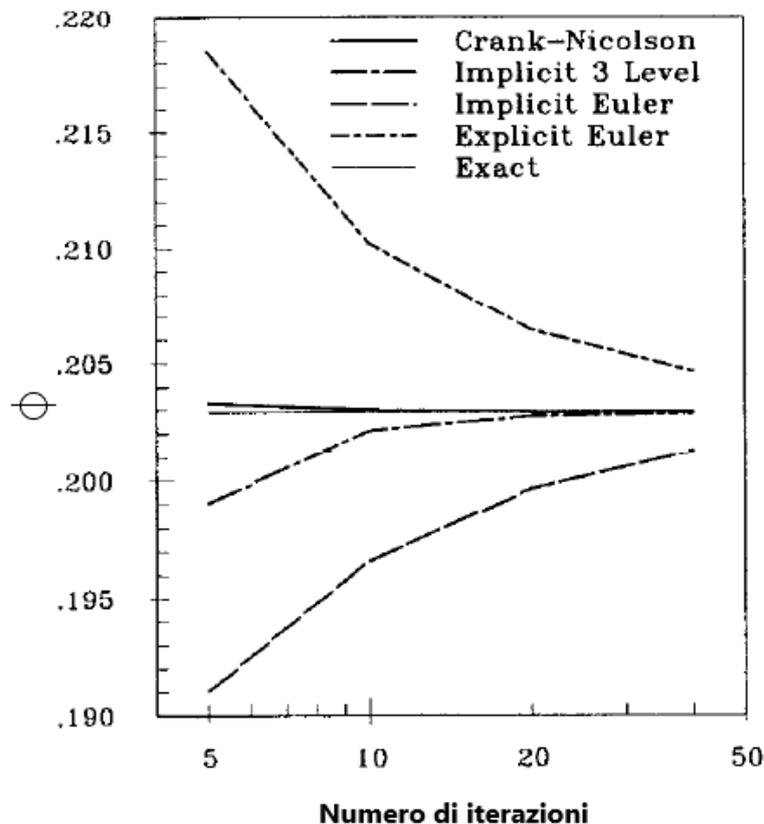


Figura 2.13, Confronto tra gli schemi di discretizzazione temporale [1]

2.6.3 Accoppiamento pressione-velocità: PIMPLE

L'applicazione *twoPhaseEulerFoam* è implementata in OpenFOAM come risolutore numerico per le equazioni di governo (2.4, 2.5) di un sistema bifasico che prevede una fase continua e una fase dispersa, rispettivamente liquido e bolle di gas nel sistema in esame.

La simulazione inizia impostando opportunamente l'incremento temporale in accordo al limite imposto dal numero di Courant per risolvere le equazioni di bilancio relative alla frazione volumica. L'algoritmo PIMPLE, descritto nel paragrafo successivo, è usato per risolvere tramite l'accoppiamento pressione-velocità (*pressure-velocity coupling*) le equazioni di bilancio della quantità di moto. Si noti, in ultimo, che l'applicazione *twoPhaseEulerFoam* si basa sull'utilizzo di due librerie, *phaseModel* e *twoPhaseSystem*, che permettono di descrivere opportunamente sia le proprietà della singola fase che le interazioni tra entrambe le fasi.

L'algoritmo PIMPLE nasce dalla combinazione di PISO, *Pressure Implicit with Splitting of Operator*, e di SIMPLE, *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*; sono entrambi algoritmi iterativi che bene si adattano alla risoluzione di specifici casi dinamici per i quali, quindi, è presente un transiente.

È bene, anzitutto, porre l'attenzione sul perché sia necessario considerare l'accoppiamento pressione-velocità e per semplicità di trattazione si consideri il caso tridimensionale ma laminare per il quale, quindi, non è necessario ricorrere alla decomposizione di Reynolds e alle equazioni aggiuntive per la turbolenza. In questo caso, quindi, le equazioni da risolvere sono le tre equazioni derivanti dal bilancio di quantità di

moto e l'equazione di continuità. Nonostante, quindi, il numero di equazioni e il numero di incognite (u_x, u_y, u_z, p) sia lo stesso, rendendo il problema determinato e risolubile, la soluzione non è immediata e ricavabile analiticamente, ma numerica e iterativa, perché la pressione non compare direttamente nell'equazione di continuità perciò la logica di risoluzione, più o meno sofisticata, seguita dagli algoritmi citati è la seguente:

1. Si ipotizza un profilo di pressione di primo tentativo che viene utilizzato nelle equazioni di Navier-Stokes
2. Si ricavano le tre componenti di velocità incognite u_x, u_y, u_z
3. Si sostituiscono le tre componenti di velocità trovate nel punto 2. nell'equazione di continuità e si verifica che quest'ultima sia soddisfatta
4. Se l'equazione di continuità non è soddisfatta si ripete il loop ripartendo dal punto 1. utilizzando correttori del campo di pressione che dipendono dall'algoritmo utilizzato fino ad arrivare a convergenza

Definito il procedimento generale che si trova alla base dell'accoppiamento pressione-velocità si intende fornire una spiegazione più dettagliata circa l'algoritmo PIMPLE e la sua architettura.

I metodi impliciti o semi-impliciti sono utilizzati per calcolare l'avanzamento della soluzione nel tempo e le equazioni di governo, nel caso in esame continuità e Navier-Stokes, si presentano con un forte grado di non-linearità. L'equazione di Navier-Stokes, utilizzando una notazione più compatta in cui si definiranno dei coefficienti a moltiplicare le variabili principali, risulta per un volume di controllo assume la seguente forma:

$$A_P^{u_i} u_{i,P}^{n+1} + \sum_e A_e^{u_i} u_{i,e}^{n+1} = Q_{u_i}^{n+1} - \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i} \right)_P \quad 2.103$$

Si noti che il pedice P rappresenta il centro del volume di controllo e quindi il nodo mentre e è il pedice che indica i punti nelle vicinanze e che, come descritto nei paragrafi precedenti, compaiono nel bilancio discretizzato. È bene, inoltre, sottolineare che i termini $A_P^{u_i}$ e $A_e^{u_i}$ rappresentano i coefficienti che moltiplicano le variabili e che a loro volta possono dipendere dalle variabili stesse mentre il termine $Q_{u_i}^{n+1}$ è il termine sorgente espresso nella forma più generale dal quale è stato scorporato soltanto il gradiente di pressione. In ultimo, per chiarezza espositiva, con l'apice n si fa riferimento all'istante temporale corrente mentre con l'apice $n+1$ all'istante temporale futuro.

L'eventuale dipendenza dei coefficienti dalle variabili in gioco rende l'equazione 2.103 risolubile iterativamente e proprio quest'idea sta alla base degli algoritmi noti che sfruttano uno o due loop per la convergenza. A tal proposito è bene distinguere due loop iterativi:

- *Outer Iterations* che sono iterazioni che avvengono all'interno di un unico intervallo temporale nel quale le matrici dei coefficienti e del termine sorgente sono aggiornate
- *Inner Iterations* che invece risolvono il sistema linearizzato a coefficienti costanti

In particolare l'equazione risolta durante le *outer iterations* è la seguente:

$$A_P^{u_i} \overline{u_{i,P}^{(n+1)}} + \sum_e A_e^{u_i} \overline{u_{i,e}^{(n+1)}} = Q_{u_i}^n - \left(\frac{\partial p^n}{\partial x_i} \right)_P \quad 2.104$$

Risulta evidente, quindi, che la 2.104 viene risolta per ogni ciclo più esterno conoscendo i valori del secondo membro dell'iterata precedente. Poiché, però, il gradiente di pressione utilizzato nell'outer loop prende i valori del time-step dell'iterata precedente il valore di velocità (ripetuto in ogni direzione) ricavato con la 2.104 non soddisfa l'equazione di continuità. Allora, affinché si possa rispettare il vincolo posto dall'equazione di continuità, si deve correggere la pressione e, di conseguenza, si modifica il campo di velocità; ciò è garantito dalle *inner iterations*.

In particolare, si risolvono le equazioni di bilancio di quantità di moto linearizzate che sono espresse tramite formalismo analitico come segue:

$$\overline{u_{i,P}^{(n+1)}} = \frac{Q_{u_i}^n - \sum_e A_e^{u_i} \overline{u_{i,e}^{(n+1)}}}{A_P^{u_i}} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p^n}{\partial x_i} \right)_P \quad 2.105$$

Si noti che solo la formulazione formale è variata rispetto alla 2.104; infatti, il valore $\overline{u_{i,P}^{(n+1)}}$ non è quello finale ed è per questo stato segnato con una barra a monte. Perché $\overline{u_{i,P}^{(n+1)}}$ sia soluzione deve soddisfare, appunto, l'equazione di continuità. [1]. Il primo termini a secondo membro verrà indicato, per brevità, con $\tilde{u}_{i,P}^{(n+1)}$.

L'inner loop, quindi, permette di correggere la velocità modificando il campo di pressione perché soddisfi la continuità:

$$\left(\frac{\partial \rho u_i^{n+1}}{\partial x_i} \right)_P = 0 \quad 2.106$$

A questo punto, la velocità corretta è legata alla pressione tramite la relazione:

$$u_{i,P}^{n+1} = \tilde{u}_{i,P}^{(n+1)} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i} \right)_P \quad 2.107$$

Combinando la 2.107 con la 2.106 si ottiene l'equazione di Poisson discretizzata:

$$\left(\frac{\partial \rho \tilde{u}_i^{(n+1)}}{\partial x_i} \right)_P = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i} \right)_P \right] \quad 2.108$$

È importante sottolineare che gli schemi di discretizzazione devono essere uguali sia per la pressione che per la quantità di moto. Risolta la 2.108 per la pressione, si ricava il valore di $u_{i,P}^{n+1}$ dalla 2.107.

A questo punto i valori di velocità soddisfano l'equazione di continuità ma non il bilancio di quantità di moto perciò deve essere ripetuto l'outer loop fino a quando si ottiene un campo di velocità che soddisfi la continuità e il bilancio di quantità di moto.

Il metodo PIMPLE come il PISO e il SIMPLE non usa direttamente il valore di pressione calcolato, ma si utilizza un'ulteriore equazione per la correzione della pressione chiamata *pressure-correction equation*. Infatti non viene preso il valore dall'equazione linearizzata dell'inner loop ma viene aggiunto un termine correttivo:

$$u_{i,P}^{n+1} = \overline{u_{i,P}^{(n+1)}} + u' \quad 2.109$$

e

$$p^{n+1} = p^n + p' \quad 2.110$$

A questo punto bisogna sostituire la 2.109 e la 2.110 all'interno della 2.107 per ottenere:

$$u'_{i,P} = \tilde{u}'_{i,P} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)_P \quad 2.111$$

nella quale il primo termine del secondo membro è definito:

$$\tilde{u}'_{i,P} = - \frac{\sum_e A_e^{u_i} u'_{i,e}}{A_P^{u_i}} \quad 2.112$$

Come descritto in precedenza ora è necessario unire la 2.112 con la continuità 2.106 e si ottiene:

$$\left(\frac{\partial \rho \tilde{u}'_i}{\partial x_i} \right)_P + \left(\frac{\partial \rho \overline{u_i^{(n+1)}}}{\partial x_i} \right)_P = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)_P \right] \quad 2.113$$

A questo punto, però, il valore della correzione di velocità, \tilde{u}'_i , non è noto per cui generalmente si trascura. Altri approcci prevedono di approssimarlo, come verrà mostrato nel seguito, piuttosto che trascurarlo.

L'approssimazione generalmente utilizzata è la seguente:

$$\tilde{u}'_{i,P} \sim - \frac{u'_{i,P} \sum_e A_e^{u_i}}{A_P^{u_i}} \quad 2.114$$

La 2.114 può, quindi, essere inserita nella 2.111 per avere una relazione che leghi $u'_{i,P}$ con $p'_{i,P}$.

In figura 2.14, per chiarire quanto detto, vengono riportati i due loop seguiti dal PIMPLE

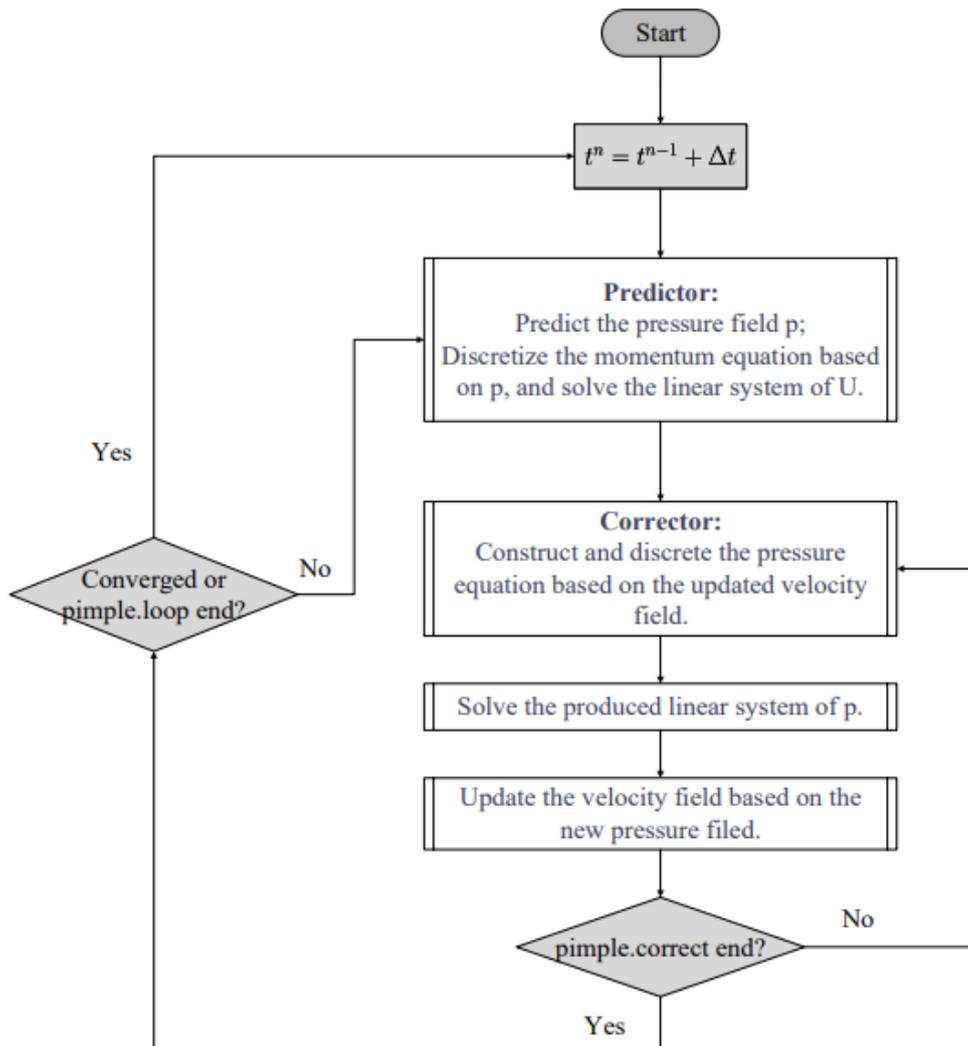


Figura 2.14, Loop dell'algorithmo PIMPLE [50]

3 Sistemi investigati

In questo capitolo verranno affrontati gli aspetti relativi all'indagine metodologica e alle principali proprietà chimico-fisiche sia dei fluidi utilizzati che del solido la cui base risiede nel lavoro di Orvalho *et al.*.

3.1 Colonna di Orvalho *et al.*

La colonna utilizzata sperimentalmente per lo studio della fluido-dinamica da Orvalho *et al.* è una colonna circolare in Plexiglas del diametro di 14 centimetri e altezza di 2 metri; il distributore del gas è un piatto forato in ottone con 121 fori del diametro di 0.5 millimetri. In figura 3.1 è mostrato l'assetto sperimentale utilizzato da Orvalho *et al.*:

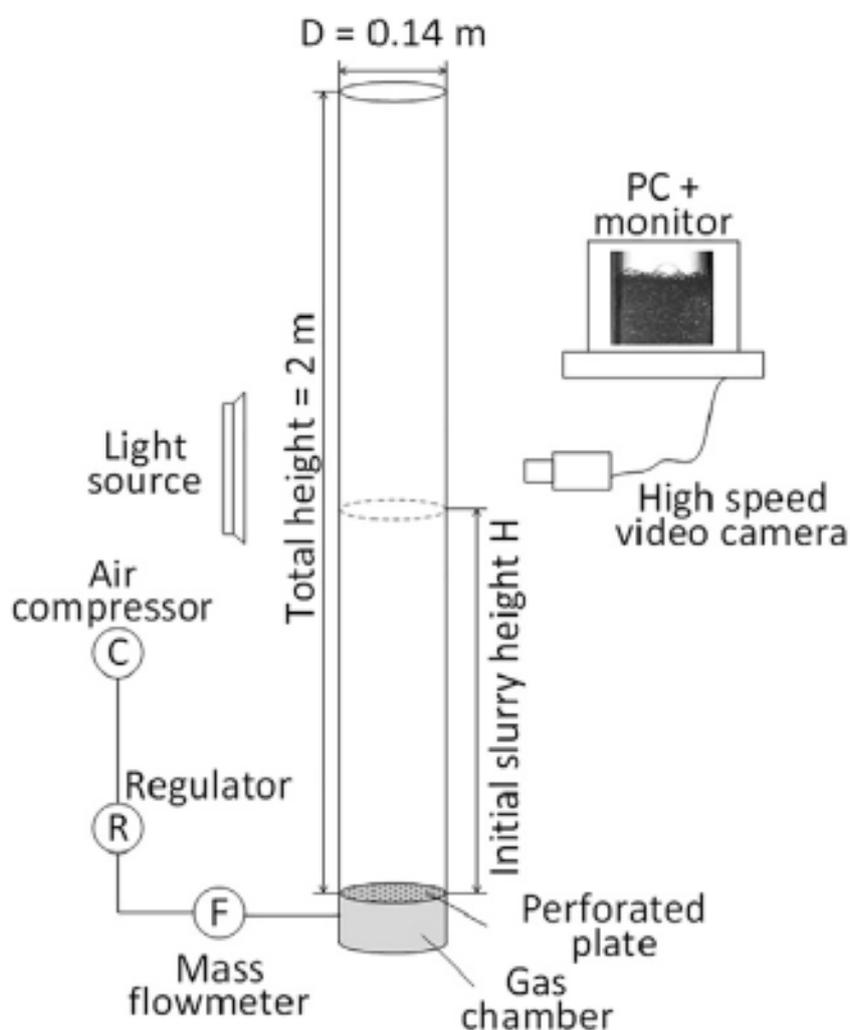


Figura 3.1, Assetto sperimentale utilizzato per lo studio della fluido-dinamica dell'articolo di Orvalho *et al.* [2]

Per lo studio della fluido-dinamica del sistema bifase sono stati utilizzati aria con contenuto di umidità relativa compreso tra il 40 e il 60 % e acqua di rete le cui principali proprietà fisiche sono riportate nella tabella 3.1:

Tabella 3.1, Proprietà fisiche dell'acqua.

Proprietà fisiche	
Densità, $\frac{kg}{m^3}$	998
Viscosità, $mPa \cdot s$	1
Tensione superficiale, $\frac{mN}{m}$	72

La colonna a bolle slurry, invece, è stata ottenuta dall'analogia bifasica alla quale è stato aggiunto un solido granulare; in particolare, la fase solida è rappresentata da particelle di silice ad elevata porosità e idrofile.

3.2 Colonna di Ojima *et al.*

La colonna utilizzata sperimentalmente per lo studio della fluido-dinamica da Ojima *et al.* è una colonna a base quadrata di lato di 20 centimetri e altezza di 1.2 metri. I fluidi utilizzati sono aria e acqua e le particelle solide sono composte da silice. Di seguito vengono riportate le condizioni operative, le principali proprietà chimico-fisiche dei fluidi e le concentrazioni a cui sono state condotte le prove sperimentali.

Tabella 3.2, Caratteristiche geometriche e operative usate nello studio di Sarhan *et al.* [3]

Dimensioni colonna, mm	200x200x1200
Altezza del liquido, m	0.8
Temperatura, K	298
Pressione, atm	1
Velocità superficiale, $\frac{m}{s}$	0.2; 0.034; 0.05
Concentrazioni del solido, %v/v	0; 10; 20; 30; 40
Dimensione delle particelle solide, μm	50; 100

Tabella 3.3, Proprietà chimico-fisiche dello studio di Sarhan *et al.* [3]

Proprietà fase gassosa, aria	Valore numerico
Densità, $\frac{kg}{m^3}$	1.1
Viscosità, $Pa \cdot s$	10^{-5}
Proprietà fase liquida, acqua	Valore numerico
Densità, $\frac{kg}{m^3}$	999
Viscosità, $Pa \cdot s$	10^{-3}

In figura 2.8 viene riportata la colonna simulata con la mesh scelta per la modellazione:

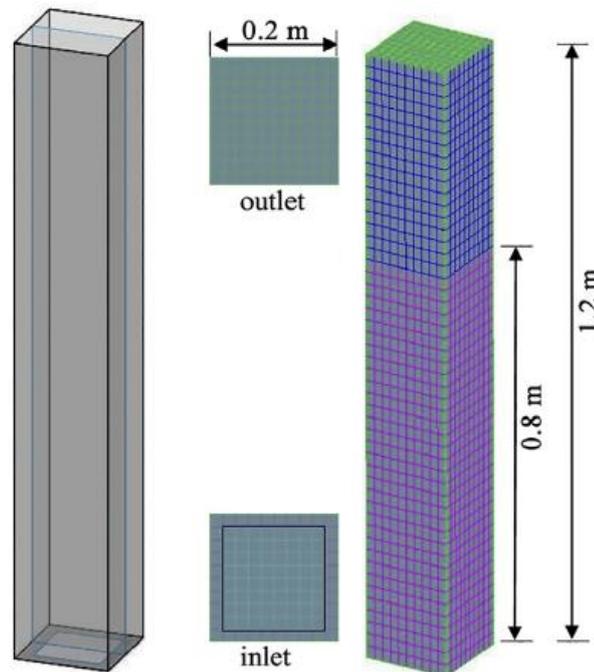


Figura 3.2, Dominio computazionale utilizzato nel lavoro di Ojima *et al.* [3]

3.3 Colonna di Guan *et al.*

La colonna utilizzata dal gruppo di Guan *et al.* [4] è in Plexiglas con un diametro di 0.15 m e altezza di 1.6 m. il distributore del gas è costituito da un piatto forato con 73 orifici il cui diametro è di 1.5 mm con area libera totale pari a 0.73%. La colonna è semi-batch caratterizzata quindi da acqua di rete ferma. In figura 2.3 viene riportato l'assetto sperimentale.

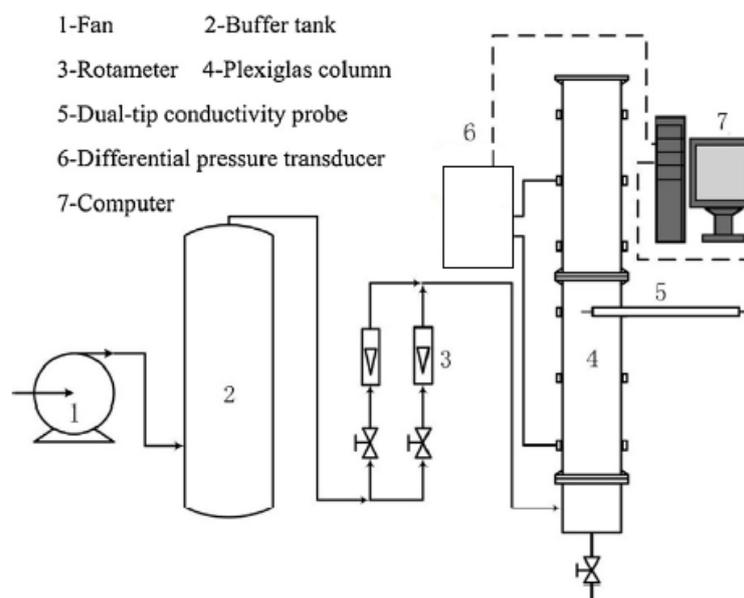


Figura 3.3, Assetto sperimentale della colonna utilizzata dal gruppo di Guan *et al.* [4]

3.4 Colonna di Lakhdissi *et al.*

La colonna del gruppo di Lakhdissi *et al.* [5] è in Plexiglas; l'altezza della colonna è di 2.61 m, l'altezza iniziale di liquido è di 1.1 m e il diametro è di 0.292 m. Il gas è costituito da aria e alimentato attraverso un piatto forato; quest'ultimo è costituito da 94 orifizi il cui diametro è di 1 mm. La fase liquida è costituita da acqua di rete mentre il solido è costituito da particelle di vetro. Le dimensioni del solido investigate sono:

- 35 μm
- 71 μm
- 156 μm

Le concentrazioni investigate, invece, fanno riferimento ad un contenuto in volume di solido del:

- 1% $\frac{\text{vol}}{\text{vol}}$
- 3% $\frac{\text{vol}}{\text{vol}}$
- 5% $\frac{\text{vol}}{\text{vol}}$

In figura 3.4 è riportato l'assetto sperimentale.

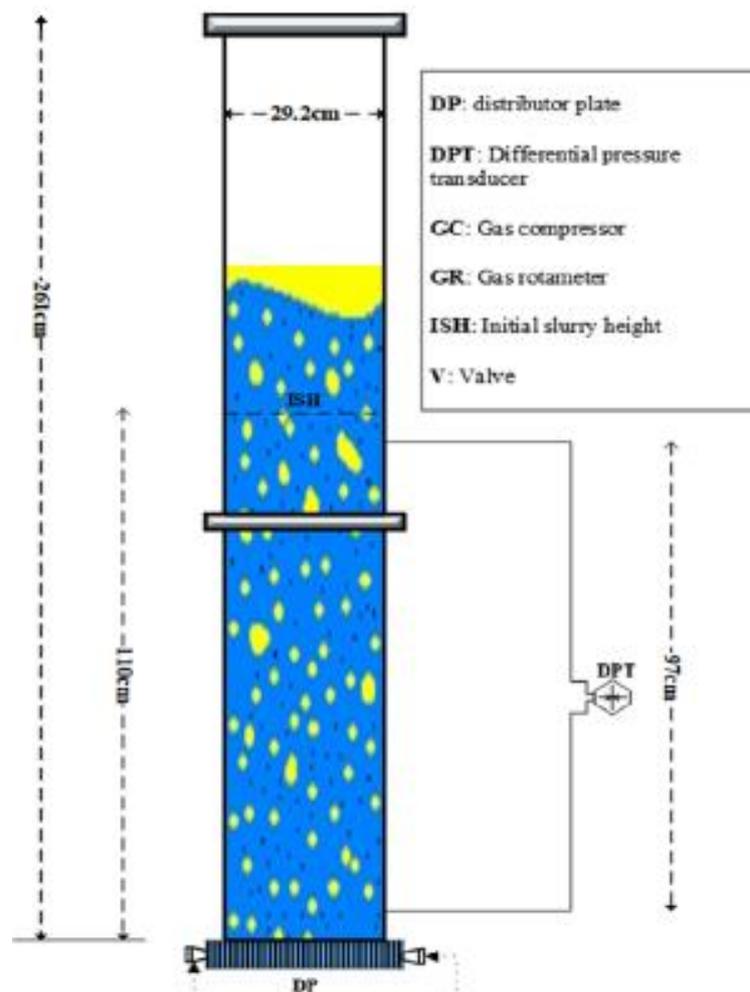


Figura 3.4. Assetto sperimentale della colonna utilizzata dal gruppo di Lakhdissi *et al.* [5]

Parte II

Metodologia e Risultati

4 Metodologia

In questa sezione verrà esposta una breve descrizione dell'approccio computazionale seguito e del principale strumento di calcolo utilizzato. I risultati ottenuti e le attese verranno, invece, analizzate nei capitoli successivi.

4.1 Strumenti computazionali

Per lo studio simulato della colonna a bolle si è usato OpenFOAM, programma Open Source (Open Source *Field Operation and Manipulation*) [51], brevemente dettagliato nel seguito. OpenFOAM è, infatti, un programma eseguibile che sfrutta una vasta gamma di librerie del linguaggio di programmazione C++. L'elevato numero di applicazioni presenti nel framework sono riconducibili a due categorie:

- **Solvers** che sono strutturati in maniera tale da risolvere il set di equazioni differenziali alle derivate parziali di problemi settoriali sia della meccanica dei fluidi che del continuo
- **Utilities** che sono implementate per permettere un'agevole e adeguata manipolazione del set di dati computazionali ottenuti attraverso l'esecuzione del solver.

In ultimo, si noti che il programma dispone di ambienti per il *pre- e post-processing* dei case come mostrato in figura 4.1:

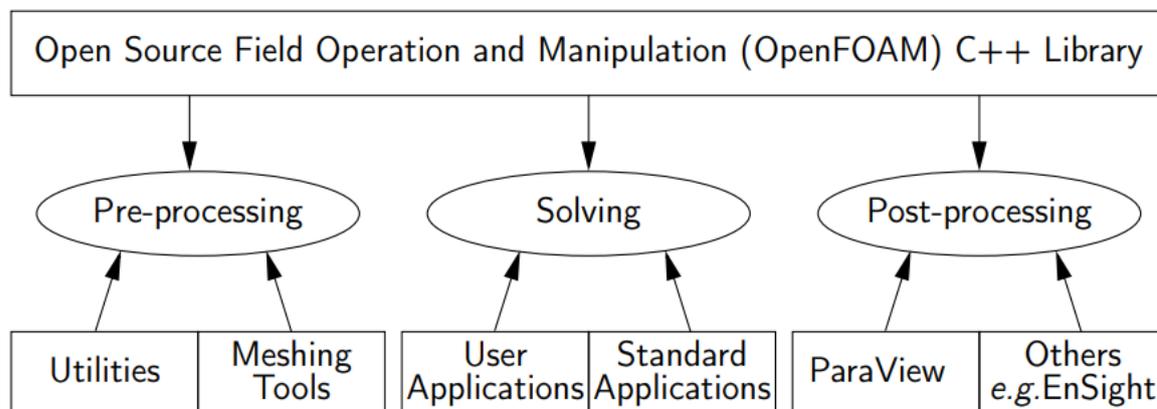


Figura 4.1, Struttura degli ambienti di OpenFOAM [51]

4.2 *Pre-processing* e generazione della mesh

Il primo ambiente di cui discutere è quello del *pre-processing* nel quale ha luogo la generazione della *mesh*: il sistema di riferimento di default in OpenFOAM è quello cartesiano tridimensionale che nel caso in esame è stato riadattato affinché la griglia generata avesse simmetria polare attraverso l'uso di *mirrorMesh*.

Seguendo la logica dell'I/O, è bene analizzare in questo paragrafo tutti i dati che devono essere impostati perché si possa lanciare la simulazione e quindi procedere con il *processing*.

In prima istanza devono essere impostate le proprietà chimico-fisiche del sistema in termini, ad esempio, di densità, viscosità delle fasi in esame e tensione superficiale. Caratterizzato il sistema in termini chimico-fisici è necessario scegliere il modello di

chiusura per la turbolenza per la fase liquida, mentre per la fase gassosa sono risolte le equazioni di governo in regime laminare. Attraverso il file *Allrun* viene stabilita la velocità superficiale del gas cioè la velocità che il gas avrebbe se la sezione di passaggio fosse interamente disponibile. Una sezione particolarmente importante dell'ambiente di *Pre-processing* è quella contenuta nel file *phaseProperties*: in questo file, infatti, è possibile attivare i bilanci di popolazione oppure scegliere un diametro di bolla costante il cui valore può essere impostato a priori oppure calcolato, per bassi valori di velocità superficiale ad esempio, attraverso la correlazione di Geary and Rice (cfr. 1.3.1).

Tabella 4.1, Proprietà chimico-fisiche

Setting iniziale delle simulazioni per la colonna a bolle	
Temperatura, K	300
Densità del liquido, $\frac{kg}{m^3}$	998
Densità del gas, $\frac{kg}{m^3}$	1.225
Viscosità del liquido, $Pa \cdot s$	10^{-3}
Viscosità del gas, $Pa \cdot s$	$1.8 \cdot 10^{-3}$
Tensione superficiale, $\frac{mN}{m}$	72

La generazione della mesh avviene attraverso la *directory system* manipolando il file *blockMeshDict.m4* nel quale è necessario specificare il numero di celle, lungo la direzione radiale che devono essere presenti nel cerchio centrale e nelle due corone circolari esterne al cerchio centrale e interne al cerchio che ha per raggio il raggio della colonna; queste informazioni, definite per un quarto della base della colonna, vengono poi ripetute specularmente ottenendo metà della base e ripetute un'ultima volta specularmente ottenendo il cerchio completo. In figura 4.2 è mostrato il primo quarto generato e successivamente “specchiato” attraverso il comando *mirrorMesh*:

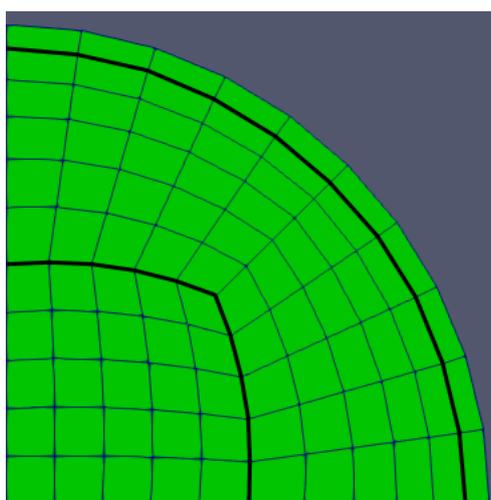


Figura 4.2, Mesh di primo tentativo con partizione radiale 5 celle nel cerchio centrale, 5 celle nella prima corona circolare, 1 cella nella seconda corona circolare.

Assialmente, invece, è bastato scegliere il numero totale di celle. Nella tabella 4.2 vengono riassunte le principali informazioni relative alla geometria e alla mesh del sistema in esame:

Tabella 4.2, Informazioni numeriche della geometria e della mesh del sistema in esame

Geometria	
Diametro, m	0,14
Altezza, m	2
Mesh	
Suddivisione Radiale	5,5,1
Suddivisione Assiale	200
Numero totale di celle	68000

I valori riportati sono di primo tentativo e la loro bontà verrà discussa nel capitolo successivo nel quale verrà affrontato lo studio della *grid independency*.

4.3 Risoluzione e impostazioni di calcolo

In questo paragrafo vengono brevemente descritti e riassunti i gli schemi numerici di discretizzazione utilizzati per le simulazioni su OpenFOAM.

- **Time schemes:** il termine temporale nelle equazioni di bilancio si presenta come derivata parziale rispetto al tempo $\frac{\partial}{\partial t}$ e può essere discretizzata utilizzando uno schema del primo ordine, *Euler*, oppure del secondo, *CrankNicolson*
- **Gradient schemes:** lo schema di discretizzazione numerica dei gradienti utilizzato di default in OpenFOAM è *Gauss linear* che prevede l'integrazione tra i centri e le facce delle celle secondo il modello a volumi finiti
- **Divergence schemes:** in questo caso lo schema di discretizzazione utilizzato di default è *none* cioè non presente ma può essere cambiato, in maniera analoga al gradiente, con uno schema *Gauss linear*. Per la discretizzazione della divergenza di termini del tipo $\nabla(\phi \cdot \mathbf{u})$ si è soliti usare lo schema di tipo *Gauss vanLeer* che interpola la funzione tra celle con polinomi di grado superiore al primo
- **Laplacian schemes:** questi schemi sono implementati per risolvere termini che contengano un laplaciano oppure un oggetto ad esso riconducibile; nelle equazioni di Navier-Stokes, ad esempio, può essere utilizzato per discretizzare il termine $\nabla(\nu \nabla \mathbf{u})$ lo schema *Gauss*

Gli schemi di discretizzazione da utilizzare possono essere cambiati nel file “vim fcScheme” nella directory “\$ cd system” a partire dal case principale. Nella tabella 4.3 vengono riportati gli schemi utilizzati per le simulazioni

Tabella 4.3, Schemi di discretizzazione numerica, file fvScheme

fvScheme

```

ddtSchemes
{
  default      Euler;
}

gradSchemes
{
  default      Gauss linear;
}

divSchemes
{
  default      none;

  div(phi,alpha.air)      Gauss vanLeer;
  div(phir,alpha.air)     Gauss vanLeer;

  div(alphaRhoPhi.water,U.water) Gauss vanLeerV;
  div(alphaRhoPhi.air,U.air)   Gauss vanLeerV;

  div(phi.water,U.water)   Gauss vanLeerV;
  div(phi.air,U.air)       Gauss vanLeerV;

  "div\(\alphaRhoPhi.*,h|e).*\) " Gauss vanLeer;
  "div\(\alphaRhoPhi.*,K.*\) "   Gauss vanLeer;
  "div\(\alphaPhi.*,p\) "       Gauss vanLeer;

  "div\(\alphaRhoPhi.*,k|omega).*\) " Gauss upwind;
  "div\(\phim,(k|omega)m\) "       Gauss upwind;

  div(phirm,M)              Gauss vanLeer;

  div(phicm,M)             Gauss multivariateIndependent
  {
    M0  upwind;
    M1  upwind;
    M2  upwind;
    M3  upwind;
    M4  upwind;
    M5  upwind;
  };

  div(phirByAlpha2,M)     Gauss multivariateIndependent
  {
    M0  upwind;
    M1  upwind;
  }

```

```

M2    upwind;
M3    upwind;
M4    upwind;
M5    upwind;
};

"div\(\(\(\alpha.*\thermo:rho.*)\*nuEff.*)\*dev2\(\(T\(\grad\(\(U.*)\)\)\)\)\)" Gauss
linear;
}

laplacianSchemes
{
    default    Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default    linear;
}

snGradSchemes
{
    default    corrected;
}

wallDist
{
    method meshWave;
}

```

Si riportano in tabella 4.4, inoltre, le impostazioni utilizzate nel solver. Il percorso per accedervi a partire dal case principale è “\$ cd system”. Bisogna poi modificare il file “vim *fvSolution*”.

Tabella 4.4. Impostazioni del solver, file *fvSolution*

fvSolution

```

solvers
{
    alpha.air
    {
        nAlphaCorr    2;
        nAlphaSubCycles 2;
    }

    p_rgh
    {
        solver    GAMG;
        smoother  DIC;
    }
}

```

```
    tolerance    1e-8;
    relTol      0.0;
}

p_rghFinal
{
    $p_rgh;
    relTol      0;
}

"(M0|M1|M2|M3|M4|M5)"
{
    solver       smoothSolver;
    smoother     symGaussSeidel;
    tolerance    1e-7;
    relTol       0;
    minIter      1;
}

"(M0|M1|M2|M3|M4|M5)Final"
{
    solver       smoothSolver;
    smoother     symGaussSeidel;
    tolerance    1e-7;
    relTol       0;
    minIter      1;
}

// "(M0|M1|M2|M3|M4|M5)"
// {
//     solver       diagonal;
//     tolerance    1e-15;
//     relTol       0;
// }

"U.*"
{
    solver       PBiCGStab;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1e-8;
    relTol       0;
}

"(e|h).*"
{
    solver       PBiCGStab;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1;
}
```

```

    relTol    0;
    minIter   0;
    maxIter   0;
}

"(k|omega|Theta).*"
{
    solver     PBiCGStab;
    preconditioner none;
    tolerance  1e-07;
    relTol    0;
    maxIter   4000;
}
}

PIMPLE
{
    nOuterCorrectors 30;
    nCorrectors      2;
    nNonOrthogonalCorrectors 1;
    faceMomentum    on;
    turbOnFinalIterOnly false;

    outerCorrectorResidualControl
    {
        "(p_rgh)" { relTol 0; tolerance 5e-06; }
        "(epsilon|k).*" {relTol 0; tolerance 5e-04;}}
    }

    relaxationFactors
    {
        equations
        {
            "(U|k|epsilon).*"      0.3;
            "(U|k|epsilon)Final.*"  1;
        }
    }
}

```

Il *time step* è di tipo adattativo, cioè viene adattato di iterata in iterata in maniera da rispettare la condizione limite per il numero di Courant.

A tal proposito, è bene porre l'attenzione sulla stabilità numerica degli schemi utilizzati che viene garantita tramite la condizione CFL (Courant-Friedrichs-Lewy).

Tale condizione, infatti, impone che:

$$Co = \frac{|\mathbf{u}|\Delta t}{\Delta x} < 1 \quad 4.1$$

Definite le impostazioni di calcolo, è bene, in ultimo, fornire tutte le impostazioni fisiche utilizzate. In particolare saranno riportati rispettivamente i file “vim

thermophysicalProperties.water”, “*vim turbulenceProperties.water*” per descrivere le proprietà fisiche dell’acqua e i file “*vim thermophysicalProperties.air*”, “*vim turbulenceProperties.air*” per descrivere le proprietà fisiche dell’aria. Tutti i file descritti sono eseguibili, partendo dal case principale, nella directory “\$ cd constant”.

Tabella 4.5, File *thermophysicalProperties.water*

thermophysicalProperties.water

```
thermoType
{
  type      heRhoThermo;
  mixture   pureMixture;
  transport const;
  thermo    hConst;
  equationOfState perfectFluid;
  specie    specie;
  energy    sensibleEnthalpy;
}

mixture
{
  specie
  {
    nMoles  1;
    molWeight 18.0;
  }
  equationOfState
  {
    R      1E10;
    rho0   999.0;
  }
  thermodynamics
  {
    Cp     4183; // J/kg/K
    Hf     0;
  }
  transport
  {
    mu     1.000E-3; //Pa s
    Pr     7.01;
  }
}
```

Tabella 4.6, File turbulenceProperties.water

turbulenceProperties.water

simulationType RAS;

RAS

```
{
  RASModel    kOmegaSST;

  turbulence   on;
  printCoeffs on;
}
```

Tabella 4.7, File thermophysicalProperties.air

thermophysicalProperties.air

thermoType

```
{
  type        heRhoThermo;
  mixture     pureMixture;
  transport   const;
  thermo      hConst;
  equationOfState perfectGas;
  specie      specie;
  energy      sensibleEnthalpy;
}
```

mixture

```
{
  specie
  {
    nMoles    1;
    molWeight 28.9;
  }
  thermodynamics
  {
    Cp        1005;
    Hf        0;
  }
  transport
  {
    mu        1.82e-05; //Pa s
    Pr        0.71;
  }
}
```

Tabella 4.8, File turbulenceProperties.air

turbulenceProperties.air

simulationType laminar;

L'ultimo file da modificare per completare la descrizione fisica del problema è il file "vim *phaseProperties*" eseguibile, partendo dal case principale nella directory "\$ cd constant". Si farà riferimento ad una velocità superficiale di $2 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$.

Tabella 4.9, File phaseProperties

phaseProperties

#include "\$FOAM_CASE/include/boundary"

resAlpha 1e-4;

populationBalance off;

phases (air water);

air

```
{
  diameterModel constant;
  constantCoeffs
  {
    d      $diam_GR;
  }
  // diameterModel sauter;
  // sauterCoeffs
  // {
  //   d0     $diam_32;
  // }

  residualAlpha $resAlpha;
}
```

water

```
{
  diameterModel constant;
  constantCoeffs
  {
    d      1e-4;
  }

  residualAlpha $resAlpha;
}
```

blending

```
{
  default
  {
    type      linear;
    maxFullyDispersedAlpha.air 0.2;
    maxPartlyDispersedAlpha.air 0.8;
    maxFullyDispersedAlpha.water 0.05;
    maxPartlyDispersedAlpha.water 0.2;
    // transitionAlphaScale.water 0.4;
  }
}

sigma
(
  (air and water) 0.072
);

aspectRatio
(
  (air in water)
  {
    type      constant;
    E0        1.0;
  }
  (water in air)
  {
    type      constant;
    E0        1.0;
  }
);

drag
(
  (air in water)
  {
    type      TomiyamaCorrelated;
    A         24.0;
    swarmCorrection
    {
      type      SimonnetModified;
      hmin      0.0;
      residualAlpha $resAlpha;
    }
  }
  // residualAlpha $resAlpha;
  (water in air)
  {
    type      SchillerNaumann;
    residualRe 1e-3;
  }
);
```

```
    swarmCorrection
    {
        type    none;
    }
    residualAlpha $resAlpha;
}
(air in water)
{
    type        segregated;
    m           0.5;
    n           8;
    swarmCorrection
    {
        type    none;
    }
    residualAlpha $resAlpha;
}
);

virtualMass
(
    (air in water)
    {
        type    none;
    }
    (water in air)
    {
        type    none;
    }
);

heatTransfer
(
    (air in water)
    {
        type        RanzMarshall;
        residualAlpha $resAlpha;
    }
);

lift
(
    (air in water)
    {
        //type        none;
        type          none;
        // Cnl         0.025;
    }
);
```

```

wallLubrication
(
  (air in water)
  {
    type          none;
    // type       Hosokawa;
    // Cwd        0.14;
    // residualAlpha $resAlpha;
  }
);

turbulentDispersion
(
  (air in water)
  {
    type          none;
    // type       Burns;
    // sigma      0.9;
    // residualAlpha $resAlpha;
  }
);

// Minimum allowable pressure
pMin          90000;

```

L'ultimo file da riportare per completare la descrizione della fisica del problema è il file “vim *Allrun*” eseguibile nel case principale.

Tabella 4.10, File *Allrun*

```

Allrun

```

```

#!/bin/sh

# Main script for running simulations
# example of call: ./Allrun 3
# First argument: number of processors to be used for calculation (Integer value)

set -x

sh makeMesh
sh preProcessing 0.02 holed 0.0138358 0.0153306 0.439823
sh Processing $1
sh extractComponents

```

È bene specificare che nella riga di codice “sh preProcessing” si fa riferimento a:

1. La velocità superficiale del gas in $\frac{m}{s}$
2. La tipologia di distributore
3. Il valore dell'aria di inlet nella griglia CFD, m^2

4. Il valore dell'area della base della colonna nella griglia CFD, m²
5. Il valore del perimetro della base della colonna nella griglia CFD, m

Si riportano, infine tutti i diametri di bolla utilizzati sia per il sistema bifase che trifase alle velocità indagate:

Tabella 4.11, Diametro di bolla usato per le simulazioni del sistema bifase

<i>Velocità superficiale, $\frac{cm}{s}$</i>	<i>Diametro di bolla, mm</i>
2-6	Correlazione di Geary-Rice
8-16	8

Tabella 4.12, Diametro di bolla usato per le simulazioni del sistema trifase

<i>Velocità superficiale, $\frac{cm}{s}$</i>	<i>Diametro di bolla, mm</i>
4-16	15

4.4 Post-processing

Il secondo ambiente di grande rilevanza per le simulazioni numeriche in OpenFOAM è quello del *post-processing* grazie al quale è possibile mediare i profili sia temporalmente che spazialmente tra lo *startTime* e lo *stopTime* rispettivamente pari a 80 e 180 secondi per il caso in esame. Inoltre, è possibile generare un'interfaccia grafica tramite il lancio dell'applicazione *paraFoam* che consente di visualizzare i contour plot dinamici del sistema multifase.

La caratteristica principale nell'ambiente di *post-processing* è la possibilità di diagrammare i profili locali e di calcolare il valore di hold-up globale mediato nel tempo in maniera tale da essere confrontabili con i profili locali sperimentali.

In particolare la mediazione avviene su diversi livelli, cioè altezze di liquido, in maniera da poter studiare l'evoluzione dell'hold-up locale. Nel caso in esame, in particolare, per cui si ha una colonna iniziale di liquido di 80 cm la mediazione avviene su 6 livelli il cui valore è riportato in tabella 4.13:

Tabella 4.13, Altezze a cui avviene la mediazione locale, lungo lo sviluppo radiale, delle principali grandezze di interesse

<i>Altezze a cui avviene la media dei profili locali, m</i>					
0.2	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8

È bene, quindi, descrivere in sintesi come avviene, dal punto di vista computazionale, l'operazione di media che risulterà essere sia dal punto di vista temporale che spaziale. In particolare, la media temporale è realizzata considerando il valore di cella per ogni time-step e mediandolo tra il valori sopra citati di *StartTime* e *StopTime* rispettivamente di 80 e 180 secondi. La media spaziale, invece, ricorre all'utilizzo di griglie costruite ad hoc per la geometria in esame: si considera, anzitutto, l'altezza alla quale si vuole mediare spazialmente il profilo considerando la sezione circolare individuata dal piano perpendicolare all'asse della colonna e la colonna stessa. Il cerchio, così ottenuto, viene

diviso da un numero di archi, $nArcs$, scelti a priori nel codice, che individuano un numero di diametri pari a $nArcs+1$ e, in seguito, si sceglie il numero di punti su ogni diametro che prenderanno parte all'operazione di media. La necessità di considerare un numero abbastanza elevato di diametri si basa sulla asimmetria del flusso turbolento; a questo punto, i valori su ogni diametro vengono con quelli di tutti gli altri diametri attraverso l'operazione di media spaziale.

4.5 Procedura di simulazione

In questo paragrafo si descriverà la procedura da seguire per il lancio di un case e delle principali impostazioni utilizzate nelle *subdirectories*. Si riporteranno, inoltre, solo le sezioni dei file modificati rispetto al case base *twophaseEulerFoam*. I passi da percorrere per impostare correttamente il problema sono:

- definizione delle proprietà chimico-fisiche dei fluidi protagonisti del sistema multifase
- definizione della geometria e della mesh
- scelta della velocità superficiale del gas
- scelta del modello di chiusura della turbolenza
- scelta del diametro di bolla (o attivazione dei bilanci di popolazione)
- scelta del modello di drag

Nei paragrafi successivi, oltre alle impostazioni, saranno riportati anche i percorsi da seguire nell'ipotesi di trovarsi nel case principale.

4.5.1 Proprietà chimico-fisiche dei fluidi

Per definire le proprietà dei fluidi, in particolare aria e acqua nel sistema bifase, bisogna spostarsi a partire dalla directory principale seguendo il percorso “\$ cd constant” e aprire il file “*vim thermophysicalProperties.water*” per l'acqua. Analogamente si procederà per l'aria aprendo il file “*vim thermophysicalProperties.air*”.

Tabella 4.14, Parametri utilizzati nei file *thermophysicalProperties.water* e *thermophysicalProperties.air*

<i>thermophysicalProperties.water</i>	<i>thermophysicalProperties.air</i>
<pre> mixture { specie { nMoles 1; molWeight 18.0; } equationOfState { R 1E10; rho0 999.0; } thermodynamics { Cp 4183; // J/kg/K Hf 0; } </pre>	<pre> mixture { specie { nMoles 1; molWeight 28.9; } thermodynamics { Cp 1005; Hf 0; } transport </pre>

```

}
transport
{
  mu      1.00E-3; //Pa s
  Pr      7.01;
}
}
}
{
  mu      1.82e-05; //Pa s
  Pr      0.71;
}
}

```

Si noti che quanto detto per il sistema bifase può essere esteso anche al sistema trifase per il quale dovrà essere cambiato il valore di ρ_0 e μ con la densità e viscosità aumentata secondo le equazioni che verranno affrontate nel paragrafo 6, in particolare la 6.4 per la viscosità e 6.5 per la densità.

4.5.2 Geometria e Mesh

Per definire il diametro e l'altezza della colonna a bolle il percorso da seguire è “\$ cd system” e aprire il file “vim *blockMeshDict.m4*”.

In tabella 4.15 vengono riportate le voci che possono essere cambiate dall'utente e in grassetto sono evidenziate le impostazioni per il problema in esame

Tabella 4.15, Parametri utilizzati nel file *blockMeshDict.m4*

```

blockMeshDict.m4

```

```

// User input
define(diameter,140)
define(height,2000)
define(coreToDiameterRatio,0.5)
define(circleToDiameterRatio,0.95)
define(smSqrCells,5)
define(len1Cells,5)
define(len2Cells,1)
define(heightCells,200)
define(cornerStretch, 0.87)
define(arcStretch, 1.05)

```

Le prime due voci rappresentano, rispettivamente, il diametro e l'altezza espressa in millimetri mentre le seconde quattro voci rappresentano la suddivisione radiale, secondo lo schema proposto nel quarto capitolo, e assiale.

4.5.3 Velocità superficiale

In questo caso, il file da aprire è collocato immediatamente nel case principale quindi basta lanciare “vim *Allrun*” e cambiare la voce evidenziata in grassetto.

Tabella 4.16, Parametri utilizzati nel file *Allrun*

```

Allrun

```

```

#!/bin/sh

```

```
set -x
```

```
sh makeMesh
sh preProcessing 0.04 holed 0.0138358 0.0153306 0.439823
sh Processing $1
sh extractComponents
```

La voce evidenziata in grassetto è la velocità superficiale del gas espressa in $\frac{m}{s}$ mentre gli altri parametri fanno riferimento alla geometria e alla tipologia di piatto.

4.5.4 Modello di chiusura della turbolenza

Il modello in esame studia il moto delle bolle all'interno di acqua inizialmente stagnante e poi in regime turbolento; infatti, le simulazioni vengono lanciate nell'ipotesi che l'aria presenti un regime laminare mentre l'acqua un regime turbolento. Risulta, quindi, evidente che dovrà essere scelto il modello per la turbolenza. Il percorso per impostare un modello della turbolenza è "\$ cd constant" e successivamente aprire il file "vim turbulenceProperties.water". Analogamente si procede per l'aria aprendo il file "vim turbulenceProperties.air".

Tabella 4.17, Parametri utilizzati nel file turbulenceProperties.water e turbulenceProperties.air

<i>turbulenceProperties.water</i>	<i>turbulenceProperties.air</i>
simulationType RAS;	simulationType laminar;
RAS { RASModel kOmegaSST ; //LaheyKEpsilon; turbulence on; printCoeffs on; }	

Il modello utilizzato è segnalato in grassetto.

4.5.5 Scelta del diametro di bolla

In questa sezione verranno proposte due alternative: o la scelta di un diametro di bolla costante oppure l'attivazione dei bilanci di popolazione e il calcolo del diametro di Sauter. Bisogna andare nella directory "\$ cd constant" e successivamente aprire il file "vim phaseProperties"

Tabella 4.18, Parametri utilizzati nel file phaseProperties

<i>phaseProperties (d_{eb} costante)</i>	<i>phaseProperties (bilanci di popolazione)</i>
populationBalance off;	populationBalance on;

<pre> phases (air water); air { diameterModel constant; constantCoeffs { d \$diam_GR; } // diameterModel sauter; // sauterCoeffs // { // d0 \$diam_32; // } residualAlpha \$resAlpha; } </pre>	<pre> phases (air water); air //{ //diameterModel constant; //constantCoeffs //{ // d 8E-3; //} diameterModel sauter; sauterCoeffs { d0 \$diam_32; } residualAlpha \$resAlpha; } </pre>
---	--

Poiché nel caso in esame si è scelta una velocità superficiale bassa è stato scelto nella sezione che prevede il diametro di bolla costante quello di Geary-Rice. Nella seconda colonna, invece, viene mostrato come attivare i bilanci di popolazione commentando la parte contenuta nella prima colonna.

La voce “\$diam_GR” fa riferimento nel linguaggio bash ad una variabile chiamata da quel file ma calcolata altrove. In questo caso il percorso è il seguente: “\$ cd pythonScripts” e il file da modificare è “vim *sparger.py*”. Le impostazioni scelte sono riportate in grassetto in tabella.

Tabella 4.19, Parametri utilizzati nel file *sparger.py*

<i>Sparger.py</i>	
<pre> # Physical properties rhol = 998.0 rhog = 1.225 g = 9.81 mu = 0.0013 sig = 0.072 ##### # Sparger characteristic # ##### alpha_in = 0.5 boundary (float) # 1) Holed sparger num_h = 121. dh = 0.0005 </pre>	<pre> # Volume fraction imposed at inlet # Number of holes (float) # Diameter of a single hole (m) (float) </pre>

rh	= dh/2.0	# Radius of a single hole (m) (float)
G	= gflowrate/num_h	# Gas flow rate per hole (m ³ /s)

4.5.6 Scelta del modello di drag

In quest'ultima sezione viene mostrato come attivare la forza di drag e anche la correzione per lo *swarm effect*. Bisogna recarsi nella directory “\$ cd constant” e aprire il file “vim *phaseProperties*” e modificare il file OpenFOAM come segue:

Tabella 4.20, Parametri utilizzati nel file *phaseProperties*

```

phaseProperties

```

```

drag
(
  (air in water)
  {
    type      TomiyamaCorrelated;
    A        24.0;

    swarmCorrection
    {
      type      SimonnetModified;
      hmin      0.0;
      residualAlpha $resAlpha;
    }
  }
)

```

Si fa qui riferimento alla correlazione *TomiyamaCorrelated* già esposta nel primo capitolo; in particolare si fa riferimento alla variante per liquidi parzialmente contaminati per cui il coefficiente è appunto 24.

5 Sistema bifase

In questo capitolo verranno proposti e discussi i risultati derivanti dalle simulazioni di fluido-dinamica computazionale per il sistema bifase gas-liquido e, in seconda istanza, saranno oggetto di confronto con i valori sperimentali attesi.

5.1 Definizione della griglia di calcolo

I codici CFD hanno bisogno di una griglia di calcolo su cui discretizzare il problema. Se possibile, la griglia dovrebbe essere sufficientemente fine da dare una soluzione “*grid independent*” in cui l’errore di discretizzazione è trascurabile ed eventuali raffinamenti non migliorano ulteriormente la qualità della soluzione. In generale, infatti, un infittimento in una delle direzioni principali del numero di celle non comporta automaticamente un cambiamento della soluzione numerica ottenuta e quindi un risultato più accurato, anzi può indurre soltanto ad un aumento, a volte anche significativo, del costo computazionale impiegato dalla simulazione senza avere particolari variazioni della soluzione numerica. Lo studio dell’indipendenza della griglia, quindi, nasce per tentare di individuare la “griglia ottimale” cioè la griglia che realizza il compromesso migliore tra un basso numero di celle e quindi un economico costo computazionale e una soluzione numerica indipendente dalla griglia stessa qualora ulteriormente raffinata.

Lo studio di indipendenza della griglia nei sistemi multifase rappresenta una sfida audace in quanto la soluzione numerica varia sia nel tempo che nello spazio quindi è, in generale, difficile annullare i residui tra le soluzioni anche per numeri di celle che tendano a valori estremamente grandi. Lo studio della *grid independence* per la griglia in esame è stato effettuato considerando la variazione delle proprietà locali nel caso dell’indipendenza radiale e delle proprietà globali nel caso dell’indipendenza assiale. Una ulteriore condizione sulla griglia riguarda la distanza della prima cella dalla parete.

La coordinata *a parete adimensionata* y^+ è definita dal seguente rapporto:

$$y^+ = \frac{u_* y}{\nu} \quad 5.1$$

nella quale

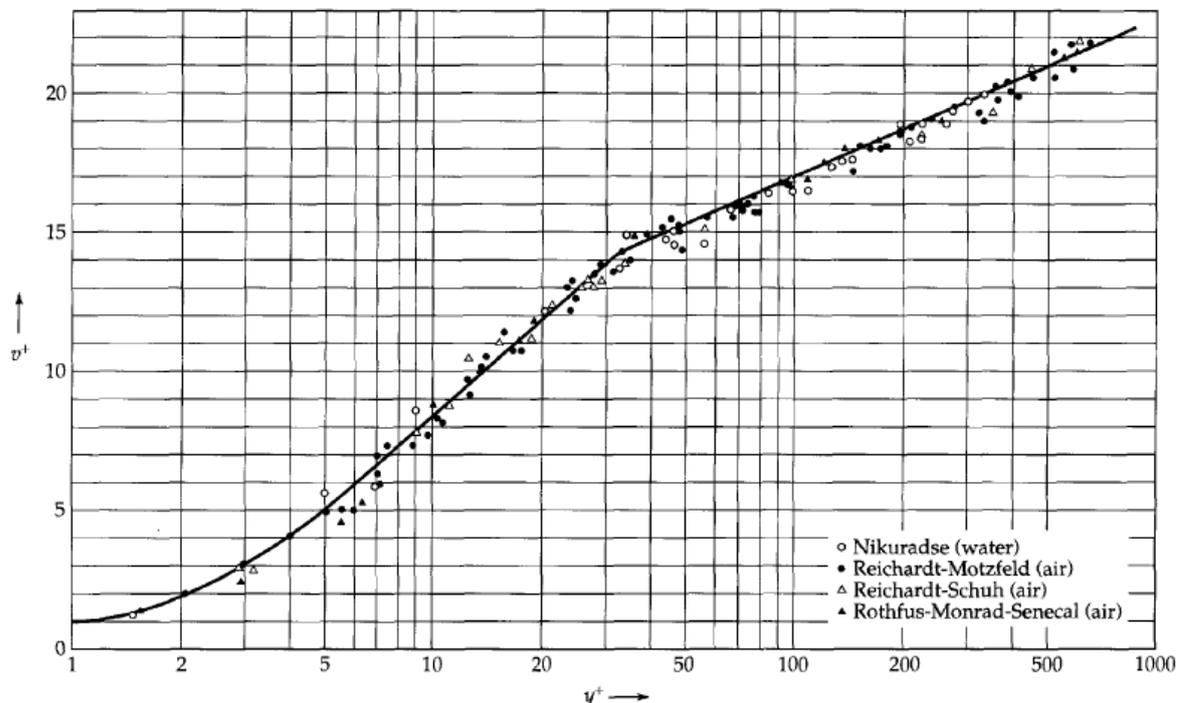
- u_* rappresenta la velocità all’interno della cella adiacente alla frontiera del dominio e quindi nel nostro caso alla parete della colonna
- y è la distanza del centro della prima cella dalla parete
- ν è la viscosità cinematica del fluido

In particolare la u_* è la *friction velocity* ed è definita come:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad 5.2$$

Nella quale τ_w è lo sforzo sulla parete. A seconda del sistema in esame e del valore del parametro y^+ è facile capire in quale *sublayer*, mostrato in figura 5.1, cada la prima cella e di conseguenza scegliere il modello della turbolenza opportuno.

Figura 5.1, Profilo universale della coordinata adimensionata y^+ per la scelta del modello della turbolenza



Il metodo descritto è quello maggiormente utilizzato perché il grafico mostrato in figura 5.4 ha validità universale e quindi può essere impiegato per ogni sistema per il quale siano state definite opportunamente le variabili adimensionate.

Nel caso del modello $k - \epsilon$ con standard wall function la prima cella deve essere nello strato turbolento quindi con $y^+ > 30$. Questa condizione non è stata però verificata in quanto il solver twoPhaseEulerFoam utilizzato non consente il calcolo tramite funzione di “-postProcess” della y^+ .

5.1.1 Scelta della griglia: direzione radiale

Il primo studio condotto è lungo la direzione radiale. La mesh di partenza per entrambe i casi è la mesh di primo tentativo in figura 4.2 con una suddivisione di celle radiali di cinque nel cerchio centrale, cinque nella corona circolare adiacente e una nella corona circolare esterna che rappresenta fisicamente lo spazio in cui il materiale non viene forato per motivi di stabilità e resistenza strutturale. L’indipendenza è stata ritenuta raggiunta nel momento in cui i profili di hold-up locale tra la mesh con minore numero di celle e la successiva fossero tra loro simili, il cui errore, cioè, ingegneristicamente tollerabile. Le caratteristiche delle griglie analizzate sono riportate in tabella 5.1.

Tabella 5.1, Caratteristiche delle griglie utilizzate per la *grid independence* radiale

	Mesh A	Mesh B
<i>Suddivisione radiale del cerchio centrale</i>	5	7
<i>Suddivisione radiale della prima corona circolare</i>	5	7

<i>Suddivisione radiale della seconda corona circolare</i>	1	1
<i>Numero di celle assiali</i>	200	200
<i>Numero totale delle celle</i>	68000	105600

Nella figura seguente viene mostrata la suddivisione della mesh A e mesh B.

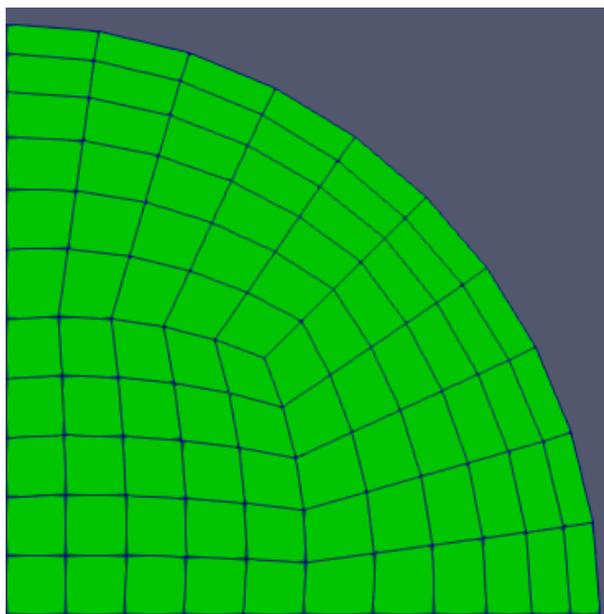


Figura 5.2, *SnapShoot* della discretizzazione spaziale della mesh A

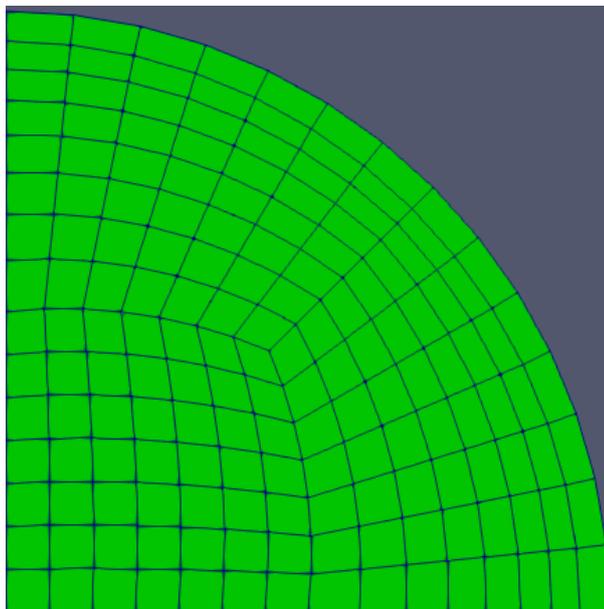


Figura 5.3, *SnapShoot* della discretizzazione spaziale della mesh A

A parità di tutte le altre condizioni, quindi, sono stati ottenuti i profili locali di hold-up riportati in figura 5.4 dimostrando l'assenza di una marcata variazione nella soluzione numerica:

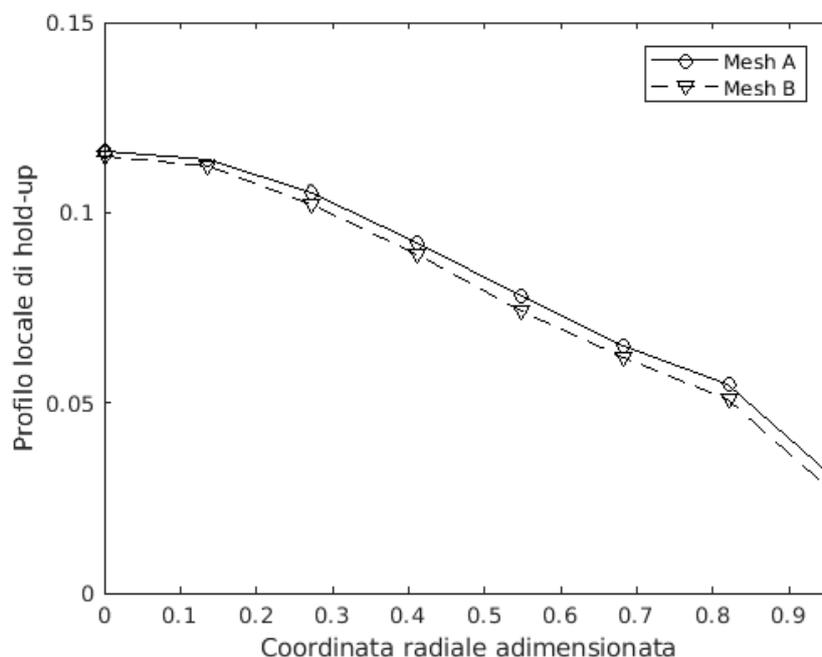


Figura 5.4, Confronto dei profili locali di hold-up ricavati attraverso le due mesh, A e B, sopra riportate per lo studio della *grid independence*. Velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$

Nella tabella 5.2 mostrata di seguito vengono riportati i valori numerici di hold-up locale calcolati attraverso le due mesh per una velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$

Tabella 5.2, Valori numerici di hold-up locale calcolati attraverso la mesh A e mesh B a parità di coordinata radiale adimensionata

<i>Coordinata radiale adimensionata</i>	<i>Mesh A</i>	<i>Mesh B</i>	$\frac{hu_A - hu_B}{hu_{B,max}} \%$
0	0.117	0.115	1.74
0.14	0.114	0.112	1.74
0.28	0.105	0.102	2.61
0.43	0.092	0.089	2.61
0.57	0.078	0.074	3.45
0.71	0.066	0.061	4.35
0.85	0.055	0.050	4.35

Dalla tabella 5.2, perciò, emerge che la massima distanza in termini di errore relativo percentuale medio commesso è inferiore al 5% , ingegneristicamente accettabile. La mesh A, dunque, con partizione cinque, cinque, uno, secondo quanto definito sopra, rappresenta una buona scelta per la suddivisione radiale e sarà utilizzata come base di partenza per lo studio dell'indipendenza assiale.

5.1.2 Scelta della griglia: direzione assiale

Lo studio dell'effetto della griglia sui risultati continua lungo la direzione assiale; fissata, infatti, la suddivisione lungo la direzione radiale è necessario conoscere quale dovrà essere l'infittimento assiale perché l'errore di discretizzazione sia accettabile. In questo caso, quindi, la proprietà indagata è quella maggiormente influenzata dal numero di celle assiali e, in senso lato, dall'estensione assiale totale della colonna a bolle ossia l'hold-up globale.

Il punto di partenza, come detto nel paragrafo precedente, è la suddivisione radiale cinque, cinque, uno; il valore di primo tentativo utilizzato nello studio della *grid independence* assiale è duecento celle per la mesh A e il confronto è fatto raddoppiando il numero di celle assiali e, conseguentemente, il numero di celle totali come mostrato in figura 5.5.

Le caratteristiche delle due griglie sono riportate in tabella 5.3:

Tabella 5.3, Caratteristiche delle griglie utilizzate per la *grid independence* assiale

	Mesh A	Mesh C
<i>Numero di celle assiali</i>	200	400
<i>Numero totale delle celle</i>	68000	136000

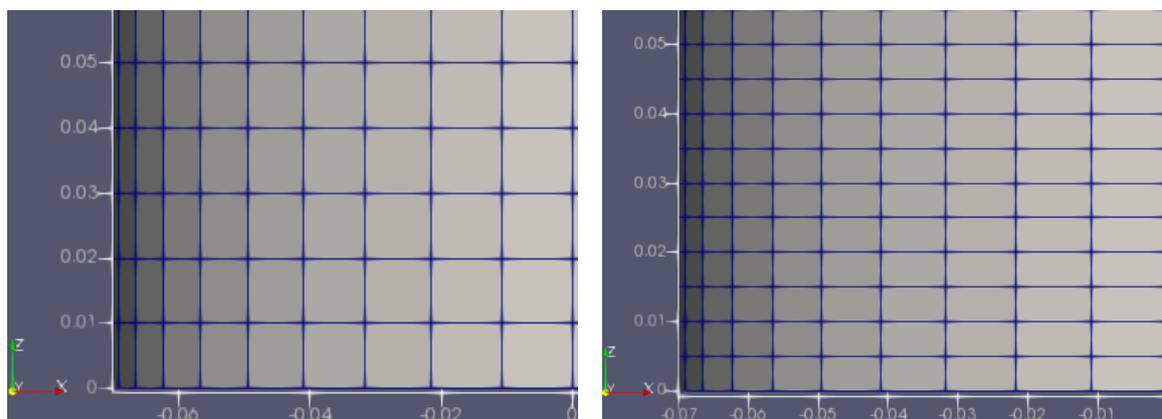


Figura 5.5, Confronto tra la mesh A con suddivisione assiale di 200 celle e mesh C con suddivisione assiale di 400 celle in prossimità della base della colonna

In queste condizioni i valori di hold-up globale, come successo per i profili locali, non risentono più sensibilmente dell'infittimento, come mostrato in tabella 5.4, e quindi possiamo considerare la mesh A una scelta adeguata sia in termini radiali che assiali per il sistema in esame.

Tabella 5.4, Valori numerici di hold-up globale calcolati attraverso la mesh A e mesh C a parità di infittimento radiale

	Mesh A	Mesh C
<i>Hold-up globale</i>	0.073	0.070
<i>Errore relativo %</i>	4.3	

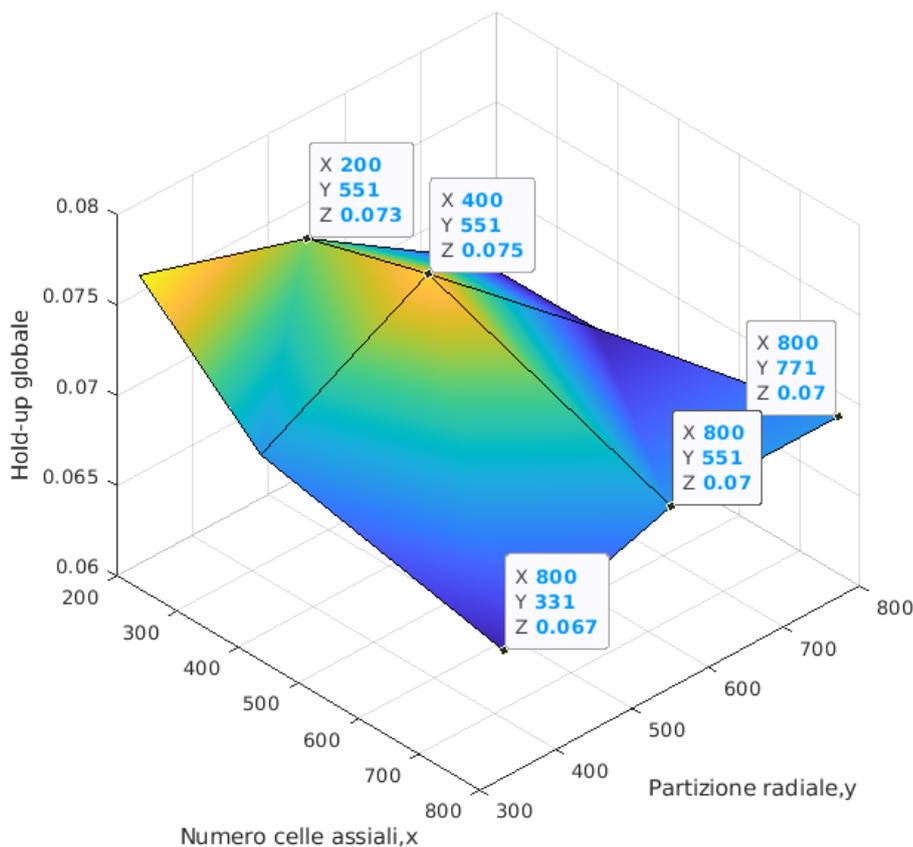
L'analisi è stata quindi ripetuta per la variazione assiale per un totale di nove griglie opportunamente scelte per mostrare che si arrivasse ad un plateau per la soluzione numerica. Le mesh scelte, riportate in tabella 5.5, mostrano i risultati di hold-up globale per ciascuna griglia mentre la rappresentazione è mostrata in figura 5.6.

Tabella 5.5, Schematizzazione dei risultati di hold-up globali per ogni griglia

		<i>Suddivisione radiale</i>		
		3,3,1	5,5,1	7,7,1
<i>Suddivisione assiale</i>	200	0.076	0.073	0.067
	400	0.07	0.075	0.068
	800	0.069	0.070	0.070

È evidente già dalla rappresentazione numerica che i valori numerici di hold-up globale alla velocità di $4 \frac{cm}{s}$ convergono al valore di 0.07 perciò la mesh scelta, come mostra la figura 5.7, è quella con partizione radiale 5,5,1 e numero di celle assiali pari a 200 perché rappresenta un eccellente compromesso fra accuratezza e velocità di calcolo.

Figura 5.6, Rappresentazione grafica del plateau per lo studio della *grid independence*



La figura 5.7 rappresenta i principali valori di hold-up globale, evidenziati per mostrare il plateau che si forma per valori più alti dell'infittimento delle celle; in particolare attorno

alla griglia con partizione radiale 7,7,1 e assiale di 800 celle non si nota più nessuna variazione sull'hold-up globale.

Si riporta, in ultimo, la tabella che riassume il numero di celle totali per ogni mesh studiata

Tabella 5.6, Schematizzazione del numero totale di celle per ogni griglia indagata

		<i>Suddivisione radiale</i>		
		3,3,1	5,5,1	7,7,1
<i>Suddivisione assiale</i>	200	26400	52800	105600
	400	68000	136000	272000
	800	128800	257600	515200

È bene notare, quindi, che a fronte di un errore molto modesto inferiore al 5% l'analisi di sensitività per l'indipendenza della griglia ha permesso di ridurre di un decimo il numero di celle richieste e abbattendo, di fatto, il costo computazionale che altrimenti avrebbe richiesto la mesh con suddivisione radiale 7,7,1 e assiale di 800 celle.

5.2 Considerazioni preliminari

Per una descrizione dettagliata del lavoro computazionale svolto, è importante descrivere in maniera più approfondita il sistema di forze agenti sulle bolle nel moto di risalita: infatti, tra tutte le forze citate nel primo capitolo per le simulazioni si è considerata agente la sola forza di drag che nasce per modellare la resistenza del liquido nel moto di risalita dello sciame di bolle indotto dalla forza di galleggiamento netta diretta verso l'alto. A tal proposito si ricorda che il sistema è costituito da una colonna cilindrica semi-batch alimentata uniformemente di gas alla base con u_{sv} compreso tra 2 e $16 \frac{cm}{s}$.

In queste condizioni, quindi, la dinamica di risalita, dello sciame in senso lato, e della singola bolla in senso stretto, dipende sostanzialmente da parametri come il diametro di bolla e la forza gravitazionale agente, quantificati da grandezze adimensionali quali il numero di *Eötvos* e Morton, e dalla tensione superficiale che determinano la traiettoria del moto di risalita. Nella figura 5.7 sono riassunti i principali parametri che influenzano lo sciame [37]. È noto dalla letteratura scientifica, infatti, che le condizioni terminali che possono instaurarsi sono le tre mostrate in figura 5.7. Il primo caso analizzato è quello per cui la dimensione delle bolle è sufficientemente piccola oppure la tensione superficiale sufficientemente alta in relazione l'una con l'altra tali da determinare un valore per il numero di *Eötvos* sufficientemente piccolo; dal punto di vista fisico, la condizione di numero di *Eötvos* basso indica una bolla sferica. Sotto questa ipotesi, perciò, il moto di risalita dipende dal grado di contaminazione dell'interfaccia: infatti, nel caso di liquidi puri, senza alcun livello di inquinante, vengono indotti moti convettivi di ricircolo tali da diminuire l'ostacolo offerto dalla forza di trascinamento con conseguente aumento della velocità terminale. L'effetto finale, nel caso di sistema parzialmente contaminato, è circa analogo con la differenza che l'interfaccia tende a comportarsi come l'interfaccia di una sfera rigida.

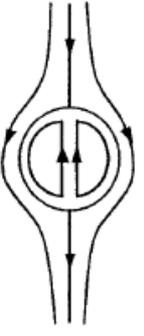
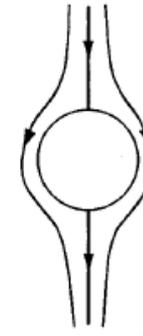
Shape	spherical		non-spherical
Motion	rectilinear		fluctuating
Purity	pure	contaminated	both
Flow pattern			
Governing effects	viscosity	viscosity	surface tension and gravity
Relevant dimensionless number	Re	Re	Eo

Figura 5.7, Schema riassuntivo dei parametri che influenzano il moto di ascesa dello sciame [37]

In entrambi i casi, comunque, il moto di risalita tende ad essere omogeneo e rettilineo a meno dell'effetto di distorsione indotto dalla turbolenza e dalla presenza dello sciame di bolle. Nelle simulazioni, questo comportamento è stato ritrovato per bassi valori delle velocità superficiali, cioè nel regime omogeneo nel quale si hanno bassi valori del diametro di bolla, attestando un buon riscontro tra modellizzazione del sistema con la sola forza di drag e linea teorica come mostrato nella figura 5.8.

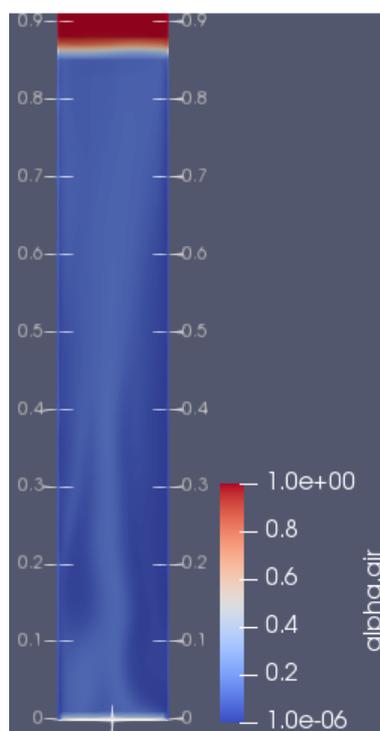


Figura 5.8, Istantanea del *plume* di bolle con velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e diametro di bolla di $4.5 mm$

Il secondo caso, invece, si verifica quando il numero di *Eötvös* è maggiore dell'unità: tale condizione è raggiunta quando la dimensione del diametro di bolla è sufficientemente grande oppure la tensione superficiale sufficientemente piccola. Poiché, però, non cambiando il liquido la tensione superficiale non varia la condizione di $Eötvös \gg 1$ è raggiunta nel regime eterogeneo.

In questo caso, studi di letteratura dimostrano che la risalita del *plume* non è rettilinea e poco influenzata dal livello di contaminazione. Il comportamento atteso è bene espresso dalle simulazioni come mostra la figura 5.9.

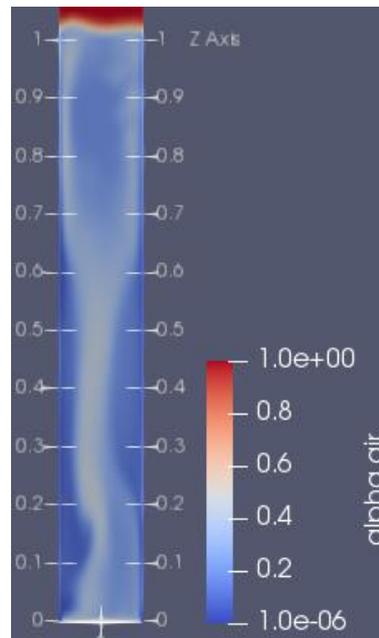


Figura 5.9, Istantanea del *plume* di bolle con velocità superficiale di $14 \frac{cm}{s}$ e diametro di bolla di $8 mm$

Si aggiunge, infine, che per il confronto con il modello simulato verranno utilizzati i dati sperimentali di Guan *et al.* [4] e la correlazione di Hughmark *et al.* che sono coerenti fra loro per l'hold-up globale e anche con la maggior parte dei dati forniti dalla letteratura scientifica. Invece, i risultati di Orvalho sono sistematicamente più elevati e generano qualche incertezza.

5.3 Scelta del modello di chiusura della turbolenza

Il sistema in esame presenta un gas il cui regime fluido-dinamico è quello laminare, per cui risolubile attraverso le sole equazioni di Navier-Stokes, e un liquido il cui regime fluido-dinamico è quello turbolento; tra le prime scelte, perciò, si è dovuto scegliere il modello che descrivesse opportunamente il regime turbolento. Uno dei metodi comunemente utilizzati nella pratica della fluido-dinamica computazionale è quello di scegliere *a priori* un modello per la turbolenza e attraverso opportuni parametri validare la scelta o confutarla.

I modelli protagonisti dello studio sono stati $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. Le soluzioni numeriche ottenute con le due simulazioni sono state analizzate sia attraverso il confronto con l'hold-up globale che i profili di hold-up locale. I valori di hold-up globale sono riportati in tabella 5.7:

Tabella 5.7, Valori di hold-up globale derivanti dai dati sperimentali e da simulazioni con modello $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ per velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e diametro di bolla di 4.5 mm

<i>Hold-up globale</i>		
Sperimentale	Modello $k - \varepsilon$	Modello $k - \omega$
0.072	0.068	0.072

Dalla sola analisi del valore di hold-up globale il modello più adatto a descrivere il sistema turbolento in esame risulta essere il $k - \omega$. Il risultato, oltre ad essere in linea con i dati sperimentali, è in accordo con le ipotesi per le quali il modello stesso è stato sviluppato ossia per geometria con una dimensione molto inferiore alle altre; nel caso in esame, infatti, il rapporto tra diametro della colonna e altezza è pari a 0.07 molto minore dell'unità.

Il secondo studio, condotto per comprovare il risultato appena descritto, concerne i profili locali di hold-up ricavati nelle stesse condizioni di altezza di liquido, $H_0 = 0.8 m$ e velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e riportato in figura 5.10, dove i valori sperimentali provengono dal lavoro di Guan *et al.* [4]

Il grafico è stato realizzato utilizzando la coordinata radiale adimensionata in modo tale da rendere di validità generale il risultato in quanto la colonna in esame presenta un diametro pari a 0.14 m mentre la colonna sulla quale sono state condotte le prove per ricavare i dati sperimentali presenta un diametro di 0.15 m; inoltre, l'aspect ratio della colonna in esame si discosta di circa il 15% dall'aspect ratio della colonna dello studio sperimentale come mostrato in tabella 5.8:

Tabella 5.8, Confronto tra la colonna simulata e quella di Guan *et al.* [4]

	<i>Colonna dello studio computazionale</i>	<i>Colonna dello studio sperimentale</i>
<i>Diametro, m</i>	0.14	0.15
<i>Aspect Ratio, -</i>	5.7	6.6

Nonostante la distanza tra i due valori di *Aspect Ratio* possa sembrare elevata, studi di letteratura dimostrano che per *Aspect Ratio* superiori a 5 i profili locali e il valore globale di hold-up non risentono più significativamente della sua influenza perciò le due colonne vengono approssimate come *geometricamente simili*.

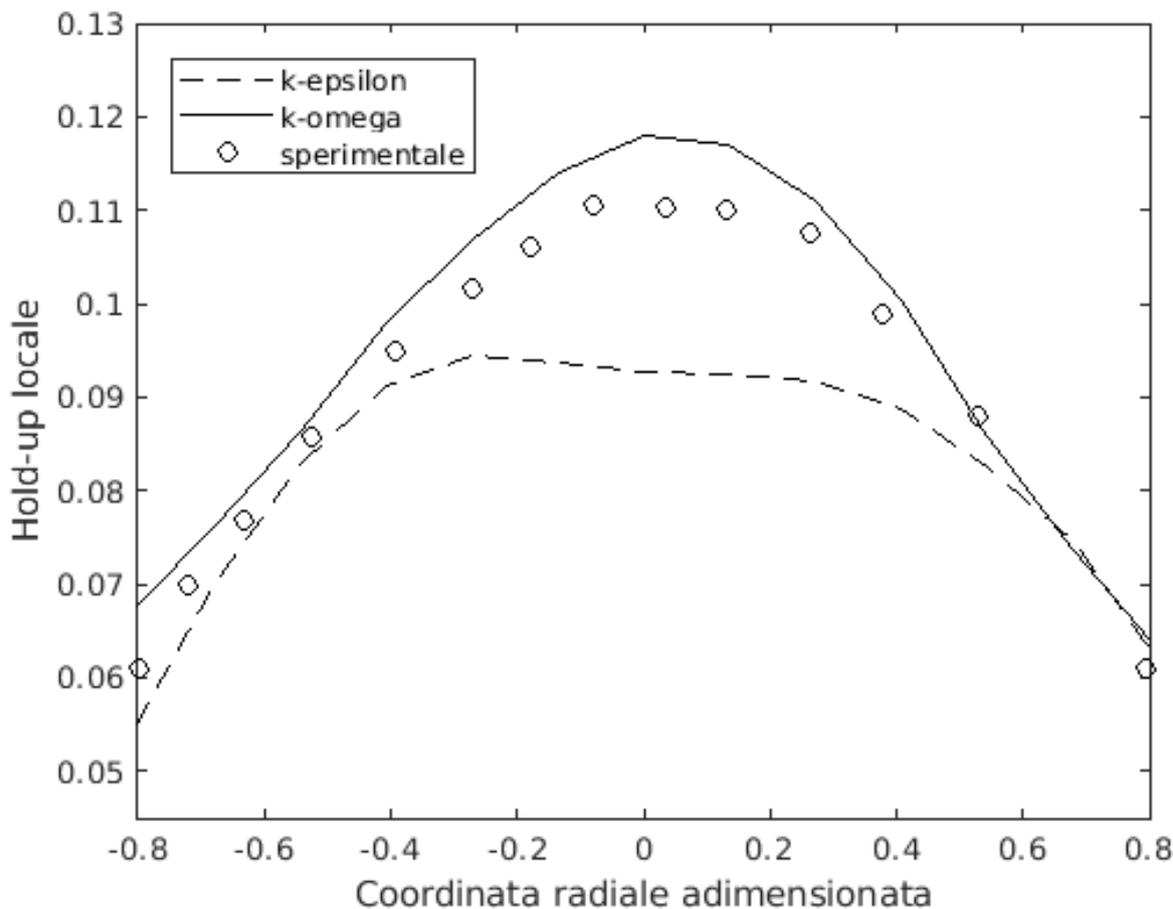


Figura 5.10. Confronto dei profili locali di hold-up dei modelli $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ simulati sulla colonna in esame e il profilo sperimentale ottenuto per *optical probe* dalla colonna sperimentale

Il profilo $k - \omega$, come mostra il grafico, è quello che meglio approssima dal punto di vista quantitativo il profilo sperimentale; la leggera lontananza dei valori numerici è del tutto giustificata dalla premessa dell'approssimazione geometrica. Infatti, una colonna con *Aspect Ratio* più alto significa una colonna iniziale di liquido più alta a parità di diametro e quindi valori del profilo di hold up leggermente inferiori. Dai risultati ottenuti risulta evidente che il modello migliore per descrivere il sistema in esame è il modello $k - \omega$ che sarà quindi il solo utilizzato per le successive simulazioni.

5.4 Risultati

In questo paragrafo saranno riportati i risultati ottenuti dal confronto tra i dati sperimentali di Guan *et al.* [4] e quelli simulati.

5.4.1 Predizione dei profili locali di hold-up

Relativamente allo studio della colonna bifasica l'indagine è stata sviluppata su due livelli:

- individuazione dei parametri computazionali che permettono di descrivere accuratamente i dati sperimentali
- determinazione degli hold-up globali e determinazione della mappa dei regimi di flusso

Per quanto concerne il primo punto, i profili sono stati confrontati con i dati sperimentali ricavati per una colonna geometricamente simile, a diversi valori di velocità superficiale; in particolare le velocità che verranno riportate nelle figure 5.11 e 5.12 sono rispettivamente di $0.02, 0.14 \frac{m}{s}$.

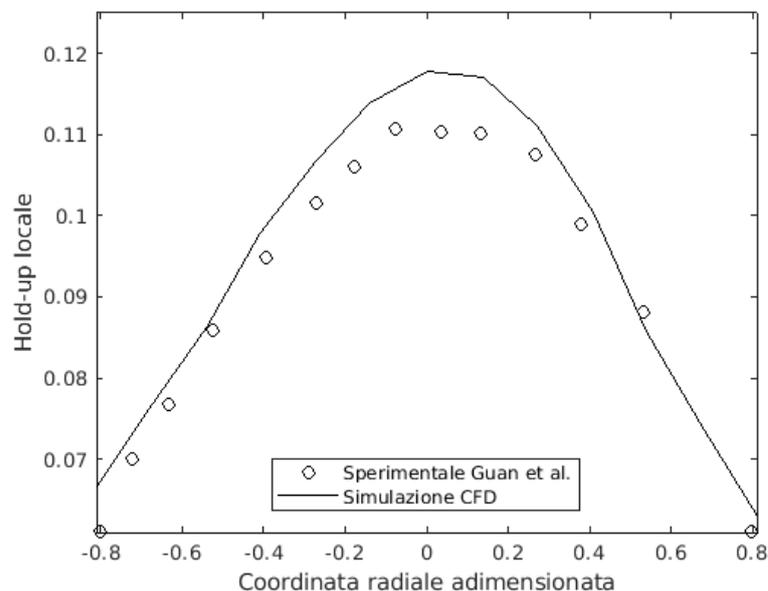


Figura 5.11, Confronto del profilo locale di hold-up alla velocità di $2 \frac{cm}{s}$ con quello sperimentale

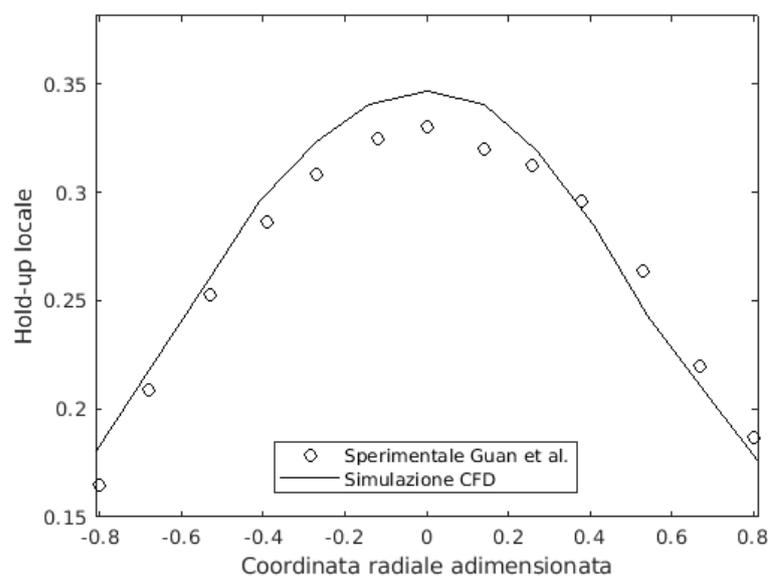


Figura 5.12, Confronto del profilo locale di hold-up alla velocità di $14 \frac{cm}{s}$ con quello sperimentale

Dai risultati ottenuti, quindi, emerge che le impostazioni scelte per il lancio della simulazione siano corrette e i profili consistenti tra loro e congruenti con quelli attesi sperimentalmente.

5.4.2 Predizione dell'hold-up globale

Come espresso nel paragrafo precedente, il secondo obiettivo durante lo studio del sistema bifasico è stato quello di mappare i regimi di flusso; in altri termini è stato necessario lanciare simulazioni, note le impostazioni discusse nel paragrafo 5.5, a diverse velocità superficiali e, tramite media spaziale, calcolare i valori numerici di hold-up globale.

I risultati delle simulazioni sono stati confrontati con le predizioni di correlazioni semi - empiriche e con dati sperimentali ottenuti dai gruppi di Guan *et al.* [4] e di Orvalho *et al.* [2]

La letteratura scientifica presenta una vasta gamma di correlazioni per la predizione del valore di hold-up note le proprietà del sistema sia in termini di liquido che di gas; è stato, tuttavia, necessario prestare opportuna attenzione alle condizioni sotto le quali tali espressioni sono state ricavate, sincerando che fossero le stesse per la colonna in esame.

A tal proposito le correlazioni idonee individuate sono state due:

- Hughmark *et al.* [52], le cui ipotesi di sviluppo sono perfettamente in linea con quelle della colonna in esame
- Kumar *et al.* [52], le cui ipotesi si discostano leggermente ma che tuttavia forniscono valori comunque più che apprezzabili se paragonati alla correlazione di Hughmark *et al.*

Saranno, quindi, riportate nel seguito le due espressioni matematiche con una breve descrizione del sistema considerato e soprattutto delle ipotesi perché le correlazioni possano ritenersi valide.

La prima proposta è la correlazione di Hughmark *et al.* reperita nell'articolo di Hikita *et al.* [52]:

$$\alpha_{glob} = \frac{1}{2 + \left(\frac{0.35}{u_{sv}}\right) \left[\left(\frac{\rho_l}{1}\right) \left(\frac{\sigma}{72}\right)\right]^{\frac{1}{3}}} \quad 5.3$$

nella quale i parametri devono essere espressi nelle seguenti unità di misura:

- u_{sv} in $cm\ s^{-1}$
- ρ_l in $g\ cm^{-3}$
- σ in $dine\ cm^{-1}$

La correlazione 5.3 è stata sviluppata per il sistema aria-acqua; è da notare, infatti, che la parentesi quadra, che contiene le proprietà del liquido, ρ_l , e la tensione superficiale, σ , è pesata sulle proprietà del sistema aria-acqua la cui densità del liquido è proprio $1\ g\ cm^{-3}$ e la tensione superficiale $72\ dine\ cm^{-1}$. Quei fattori di forma, infatti, hanno permesso di estendere la correlazione anche ad altri sistemi diversi da quello di partenza. Nella tabella 5.9 sono riportate, inoltre, le ipotesi di validità e i principali sistemi per cui la relazione 5.3 è valida:

Tabella 5.9, Limiti di validità per la correlazione di Hughmark *et al.* [52]:

<i>Limiti di validità</i>	<i>Sistemi per cui la correlazione 5.3 è stata convalidata</i>
Distributore a piatto forato $d_c > 10 \text{ cm}$ $u_{sv} \in [0.4, 45] \text{ cm s}^{-1}$ $\rho_l \in [0.78, 1.7] \text{ g cm}^{-3}$ $\mu_l \in [0.9, 15.2] \text{ cP}$ $\sigma \in [25, 76] \text{ dine cm}^{-1}$	Aria-acqua Aria-cherosene Aria-olio leggero Aria-soluzione acquosa di glicerolo Aria-soluzione acquosa di Na_2SO_3 Aria-soluzione acquosa di $ZnCl_2$

Come si nota, dunque, dalla tabella 5.9 i limiti di validità sono tutti perfettamente soddisfatti per i casi da noi investigati; nella successiva tabella sono riportati i valori numerici di hold-up globale predetti da questa relazione.

Tabella 5.10, Valori numerici di hold-up globale ricavati con la correlazione di Hughmark *et al.* per il sistema aria-acqua

<i>Velocità superficiale, $\frac{cm}{s}$</i>	<i>Hold-up globale</i>
2	0.05
4	0.09
6	0.13
8	0.16
10	0.18
12	0.2
14	0.22
16	0.24

La seconda espressione proposta è quella di Kumar *et al.* riportata di seguito:

$$\alpha_{glob} = 0.728\varphi - 0.485\varphi^2 + 0.0975\varphi^3 \quad 5.4$$

con

$$\varphi = u_{sv} \left(\frac{\rho_l^2}{\sigma \Delta \rho g} \right)^{0.25} \quad 5.5$$

nella quale i parametri devono essere espressi nelle seguenti unità di misura:

- u_{sv} in $cm \text{ s}^{-1}$
- ρ_l in $g \text{ cm}^{-3}$
- σ in $dine \text{ cm}^{-1}$
- g in $cm \text{ s}^{-2}$

Come per la correlazione di Hungmark *et al.*, nella tabella 5.11 sono riportate le ipotesi di validità e i principali sistemi per cui la relazione 5.4 è valida:

Tabella 5.11, Limiti di validità per la correlazione di Kumar *et al.* [52]

<i>Limiti di validità</i>	<i>Sistemi per cui la correlazione 5.2 è stata convalidata</i>
Distributore a piatto forato $d_c \in [5, 10] \text{ cm}$ $u_{sv} \in [0.14, 14] \text{ cms}^{-1}$ $\rho_l \in [0.79, 1.11] \text{ gcm}^{-3}$ $\mu_l \in [0.88, 11.5] \text{ cP}$ $\sigma \in [31.2, 72] \text{ dinecm}^{-1}$	Aria-acqua Aria-cherosene Aria-soluzione di glicerolo al 40%

In questo caso i limiti di validità sono tutti strettamente rispettati tranne il limite relativo al diametro della colonna che nel caso in esame è pari a 14 cm; viene, comunque, considerata una correlazione valida e, relativamente a quanto detto nel secondo capitolo, l'hold-up globale dovrà solo essere leggermente più alto di quello calcolato con la correlazione di Hughmark *et al.* a velocità superficiali più alte. Anche in questo caso viene riportata una tabella, 5.12, con i valori di hold-up globale calcolati per il sistema aria-acqua

Tabella 5.12, Valori numerici di hold-up globale ricavati con la correlazione di Kumar *et al.*

<i>Velocità superficiale, $\frac{\text{cm}}{\text{s}}$</i>	<i>Hold-up globale</i>
2	0.05
4	0.09
6	0.13
8	0.16
10	0.2
12	0.22
14	0.25
16	0.27

A valle della ricerca sono stati confrontati anche con i dati sperimentali ricavati per una colonna geometricamente simile da Guan *et al.* [4] che vengono riportati in tabella 5.13:

Tabella 5.13, Valori numerici di hold-up globale reperiti nell'articolo di Guan *et al.* [4]

<i>Velocità superficiale, $\frac{\text{cm}}{\text{s}}$</i>	<i>Hold-up globale</i>
2	0.07
4	0.12
6	0.15
8	0.17
10	0.19
12	0.2
14	0.21

Entrando nel dettaglio di questo set di dati sperimentali è importante dire che la valutazione dell'hold-up sfrutta il salto di pressione rilevato tra due punti da un trasduttore di pressione tramite la seguente relazione:

$$\alpha_{glob} = \frac{\Delta p}{\rho_l g \Delta z} \quad 5.6$$

nella quale:

- Δp è il salto di pressione misurato tra due punti
- Δz la differenza di quota tra i due punti

È stato condotto, dallo stesso autore [4], lo stesso studio utilizzando il metodo dell'*image analysis* ottenendo come valori medi circa gli stessi; il grafico dell'hold-up sperimentale viene riportato in figura 5.13 analogamente per quanto fatto per il set di dati sperimentali di Orvalho *et al.*

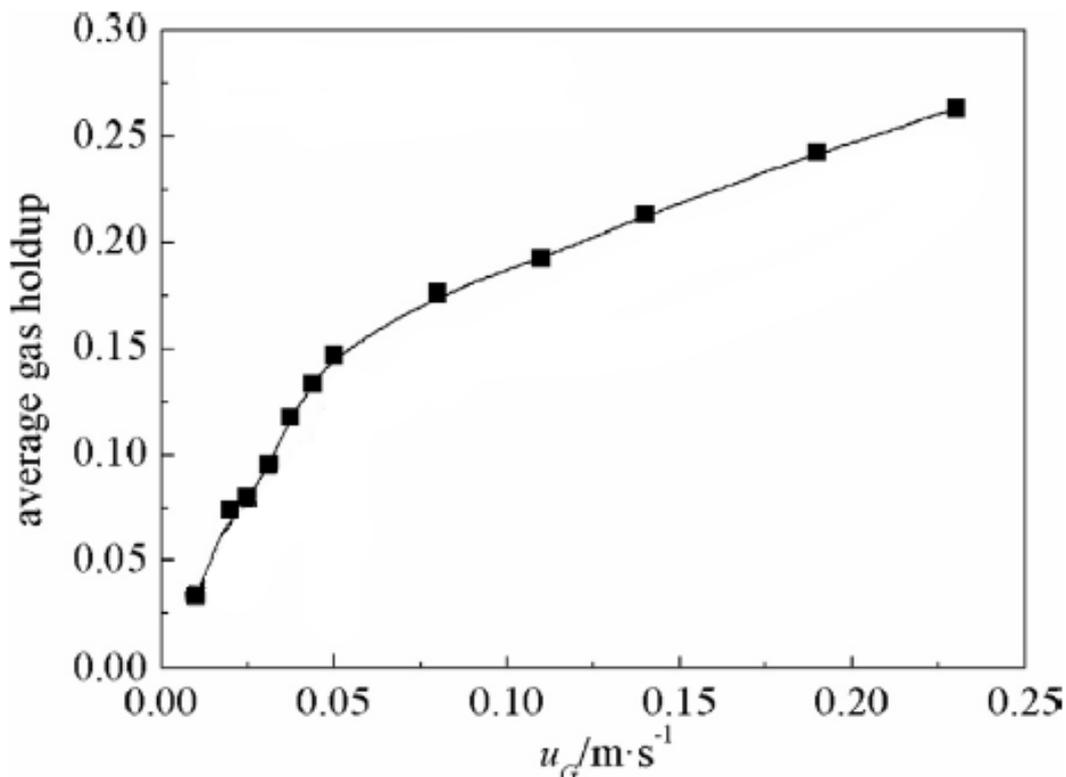


Figura 5.13, Hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas secondo l'articolo di Guan *et al.* [4]

Infine i dati sperimentali di Orvalho *et al.* [2] sono riportati in figura 5.14 e riassunti in tabella 5.14 relativamente alla colonna con altezza iniziale di liquido pari a 80 cm. Questi valori, però, creano qualche perplessità, dal momento che sono sistematicamente e significativamente più rilevanti di quelli riportati nella letteratura scientifica. Questo effetto potrebbe essere dovuto alla scarsa accuratezza del metodo sperimentale, basato sulla misura visiva dell'innalzamento dell'interfaccia, o a dettagli del sistema non riportati dagli autori.

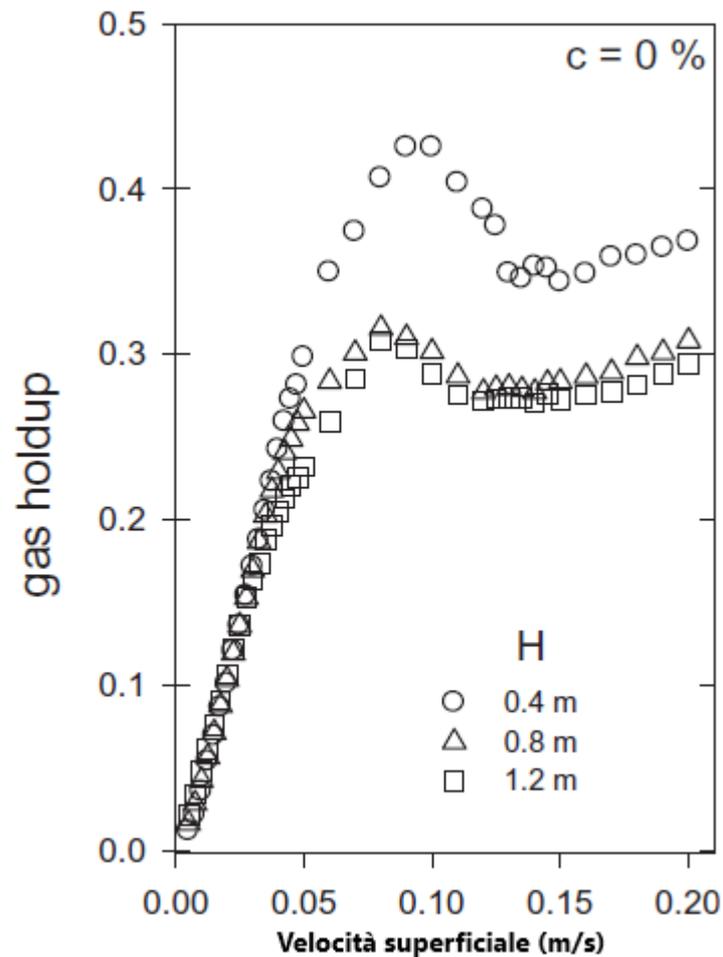


Figura 5.14, Valori di hold-up in funzione della velocità superficiale, in $\frac{m}{s}$, del gas secondo Orvalho *et al.* [2] per diverse altezze di liquido

Tabella 5.14, Valori numerici di hold-up globale reperiti nell'articolo di Orvalho *et al.* per $H_0 = 0.8$ [2]

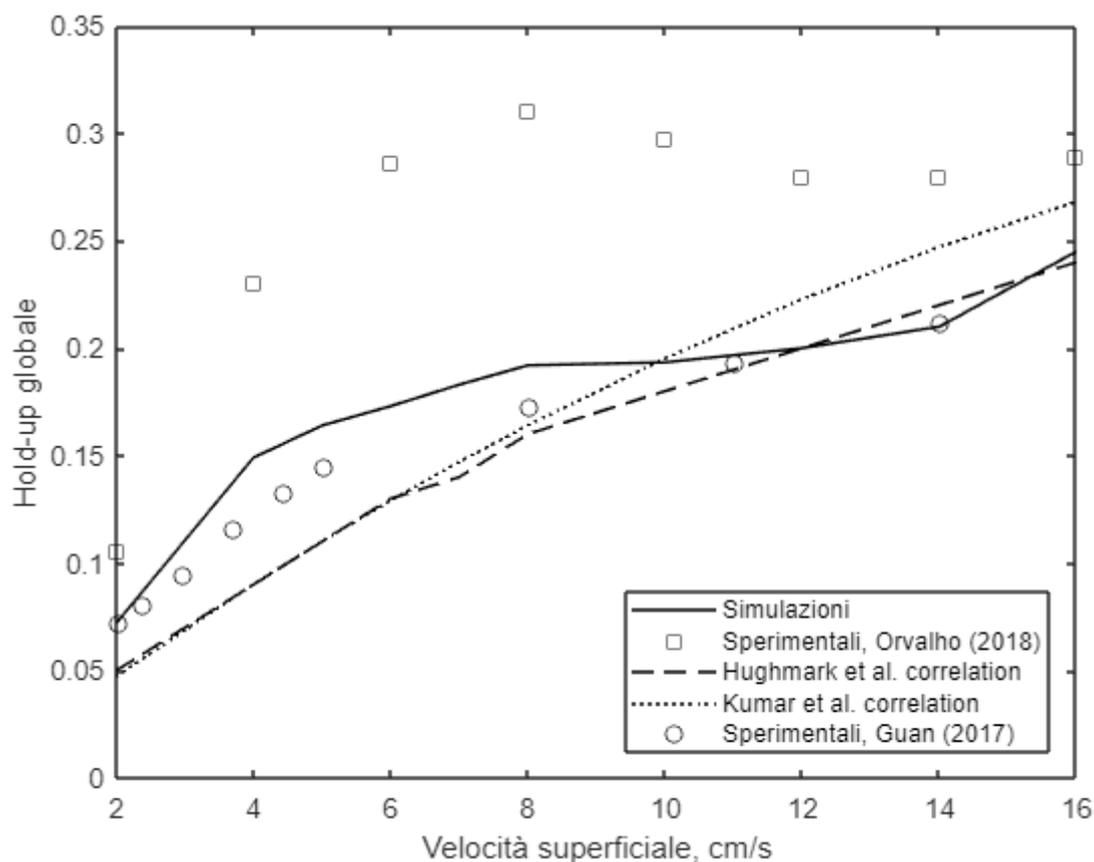
Velocità superficiale, $\frac{cm}{s}$	Hold-up globale
2	0.11
4	0.23
6	0.28
8	0.31
10	0.29
12	0.28
14	0.28
16	0.29

Si riportano in tabella 5.15, in ultimo, i valori di hold-up globale ottenuti con le simulazioni CFD:

Tabella 5.15, Valori numerici di hold-up globale ottenuti tramite simulazione CFD con OpenFOAM

Velocità superficiale, $\frac{cm}{s}$	Hold-up globale
2	0.072
4	0.149
6	0.173
8	0.192
10	0.193
12	0.220
14	0.210
16	0.245

I valori numerici, riportati per completezza di trattazione, vengono ora riportati in figura 5.15 perché sia più facile operare un confronto critico tra le cinque mappe dei regimi introdotte:

**Figura 5.15**, Confronto delle mappe costruite con dati sperimentali, simulazioni e correlazioni empiriche

Un'analisi critica dei dati posti a confronto, dunque, sottolinea con chiarezza che i dati delle simulazioni sono in linea con quelli reperiti nell'articolo di Guan *et al.* sia per quanto concerne i profili locali di hold-up che per i valori globali.

Si può, inoltre, notare che i dati sperimentali dell'articolo di Guan *et al.* e quelli delle simulazioni sono in linea con i valori ottenuti per il sistema in esame dalle correlazioni empiriche attestando la buona qualità del modello e la veridicità delle ipotesi avanzate a monte.

6 Sistema trifase

In questo capitolo sarà analizzato il comportamento fluido-dinamico della colonna a bolle slurry in cui il solido sospeso è formato da particelle di silice del diametro di $100 \mu\text{m}$; l'obiettivo è quello di studiare la variazione dei regimi di flusso che il solido sospeso induce e quantificarlo attraverso l'hold-up globale del sistema.

6.1 Indagine sperimentale

Il primo passo nello studio dell'effetto del solido sospeso sui regimi fluido-dinamici è stato un'indagine di letteratura volta sia alla comprensione dei meccanismi che governano il sistema trifase sia al reperimento di dati sperimentali da utilizzare come guida.

In prima istanza, sulla base di quanto detto per il sistema bifase, vengono introdotte le caratteristiche chimico fisiche del sistema trifase con particolare attenzione al solido.

Tabella 6. 1, Densità delle tre fasi presenti

Componenti	Densità, $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Aria	1.225
Acqua	998
Silice/vetro	2300-2500

La densità del solido è fondamentale caratterizzare lo slurry. Altra caratteristica importante del solido è la funzione di distribuzione granulometrica che indica la percentuale di particelle aventi un determinato diametro; in generale le particelle non sono mono-disperse come mostra la figura 6.1, per il solido utilizzato da Orvalho *et al.* [2]. Questo effetto è stato trascurato nelle simulazioni nella quali, invece, si è considerato il diametro medio.

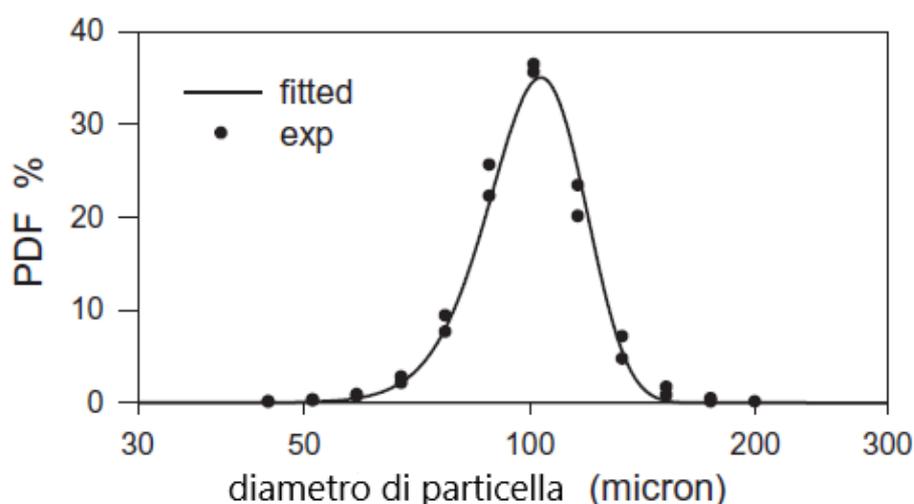


Figura 6.1, Funzione di distribuzione delle particelle di silice utilizzate dal gruppo di Orvalho *et al.* [2]

Come sarà discusso nel seguito del capitolo, infatti, la dimensione delle particelle ha un importante effetto sul comportamento fluido-dinamico del sistema perché altera le cinetiche di coalescenza e rottura. Risultano, quindi, diametri di bolla mediamente maggiori rispetto a quelli di un sistema completamente analogo ma bifase la cui conseguenza è una velocità terminale maggiore e un hold-up globale minore a parità di tutte le altre condizioni.

6.1.1 Studi sperimentali di riferimento

Il punto di partenza, come nel caso bifase, è stato lo studio sperimentale offerto da Orvalho *et al.*; in particolare, l'utilizzo dei dati sperimentali ricavati dall'articolo non è stato diretto, in quanto dimostrato nell'ultimo paragrafo del capitolo quinto essere, in generale, molto maggiori sia di altri dati sperimentali riportati in letteratura sia delle correlazioni valide per il sistema in esame, ma indiretto. È stata infatti indagata, in prima istanza, la riduzione percentuale in termini di differenza tra l'hold-up del sistema bifase e quello del sistema trifase in rapporto al valore del sistema bifase così da avere una guida sperimentale su cui basare il lavoro di simulazione.

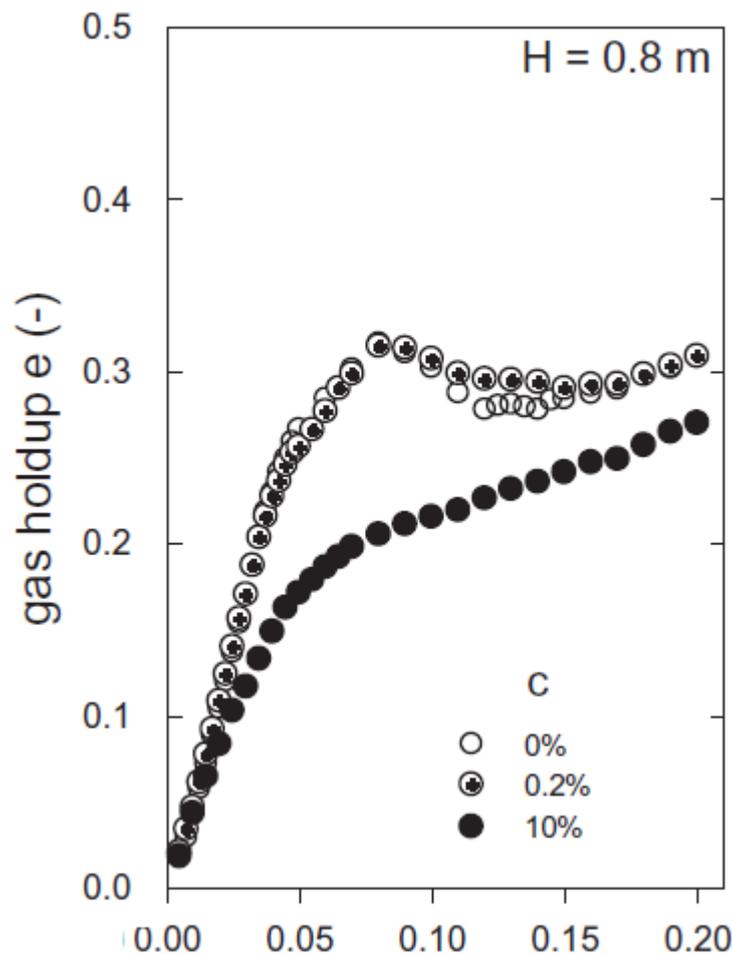


Figura 6.2, Variazione della mappa dei regimi di Orvalho *et al.* [2]

Dal punto di vista qualitativo è bene notare alcune caratteristiche che saranno alla base del lavoro di fluido-dinamica computazionale: la prima riguarda il modesto abbassamento dell'hold-up globale a basse velocità superficiali, tanto da rimanere nel complesso sulla stessa retta come mostrato in figura 6.2; il secondo aspetto riguarda la traslazione del

regime eterogeneo a velocità superficiali progressivamente più basse al crescere del tenore di solido fino a giungere alla scomparsa del regime omogeneo. Questo fenomeno è stato indagato da Ojima *et al.* [28] attraverso lo studio sperimentale dei profili locali di hold up riportato in figura 6.3 e 6.4 per una velocità superficiale di $u_{sv} = 2 \frac{cm}{s}$:

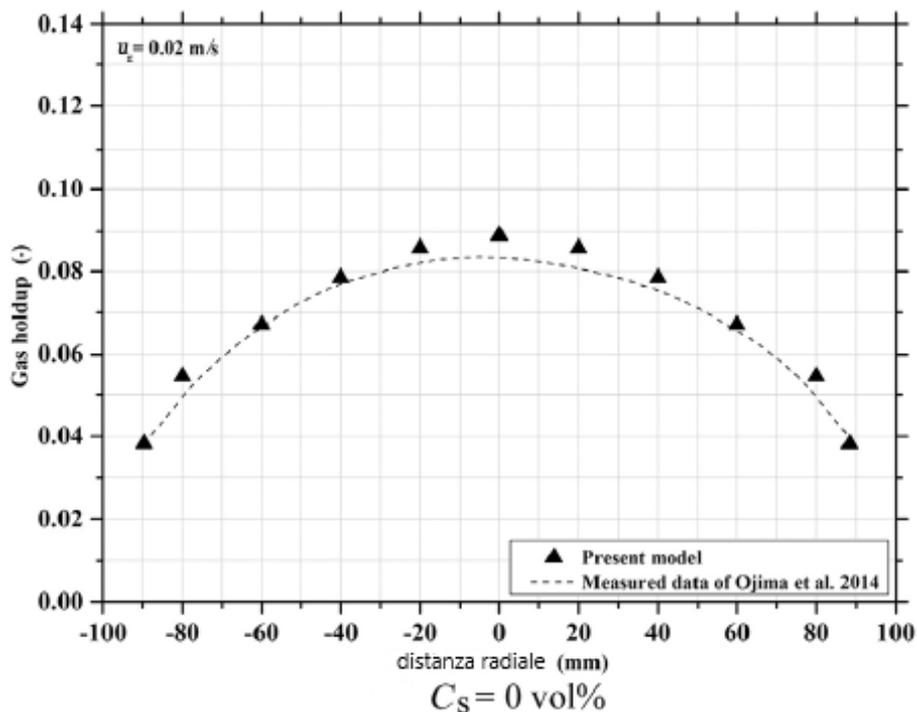


Figura 6.3, Profilo dell'hold-up locale alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e concentrazione di solido $C_s = 0$ (da Sarhan *et al.* [3])

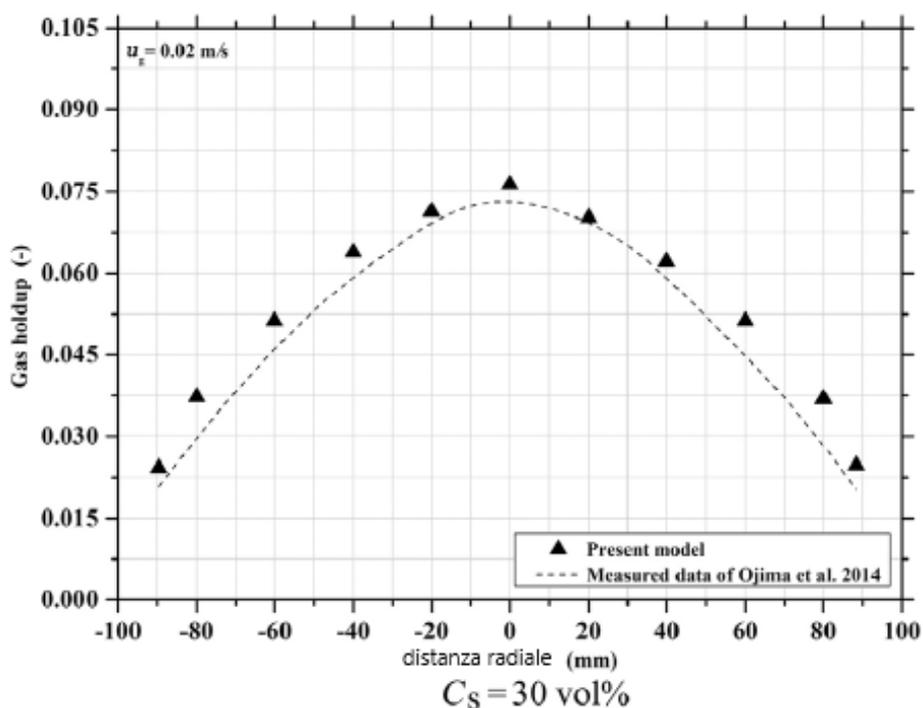


Figura 6.4, Profilo dell'hold-up locale alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e concentrazione di solido $C_s = 0.3$ (da Sarhan *et al.* [3])

È, infatti, evidente che i profili variano passando dal sistema bifase a quello trifase perché il profilo locale di hold-up del sistema trifase assume valori mediamente inferiori del sistema bifase nelle stesse condizioni; inoltre, il profilo locale del sistema bifase tende ad assumere, in una scala dimensionale più estesa, un profilo piatto tipico del regime di flusso omogeneo, mentre nel caso del sistema trifase si nota con chiarezza che il profilo tende ad assumere una forma parabolica tipica del regime di flusso eterogeneo indice del fatto che quest'ultimo tende a traslare verso valori più bassi della velocità superficiale.

L'influenza del diametro delle particelle sulla fluido-dinamica dei sistemi a bolle slurry è stata studiata da Lakhdissi *et al.* [5]

Le caratteristiche del sistema studiato sono riportate in tabella 6.2 e 6.3:

Tabella 6.2, Principali caratteristiche del sistema studiato da Lakhdissi *et al.* [5]

<i>Caratteristiche geometriche del sistema</i>	<i>Valori numerici</i>
Diametro, <i>m</i>	0.292
Altezza colonna, <i>m</i>	2.61
Altezza dello slurry iniziale, <i>m</i>	1.10

Tabella 6.3, Diametri delle particelle e concentrazione del solido sospeso studiati [5]

<i>Diametro delle particelle, μm</i>		
35	71	156
<i>Concentrazioni del solido sospeso %</i>		
1	3	5

Come mostrato in figura 6.5 e 6.6 sia il tenore di solido che il diametro delle particelle fanno diminuire l'hold-up.

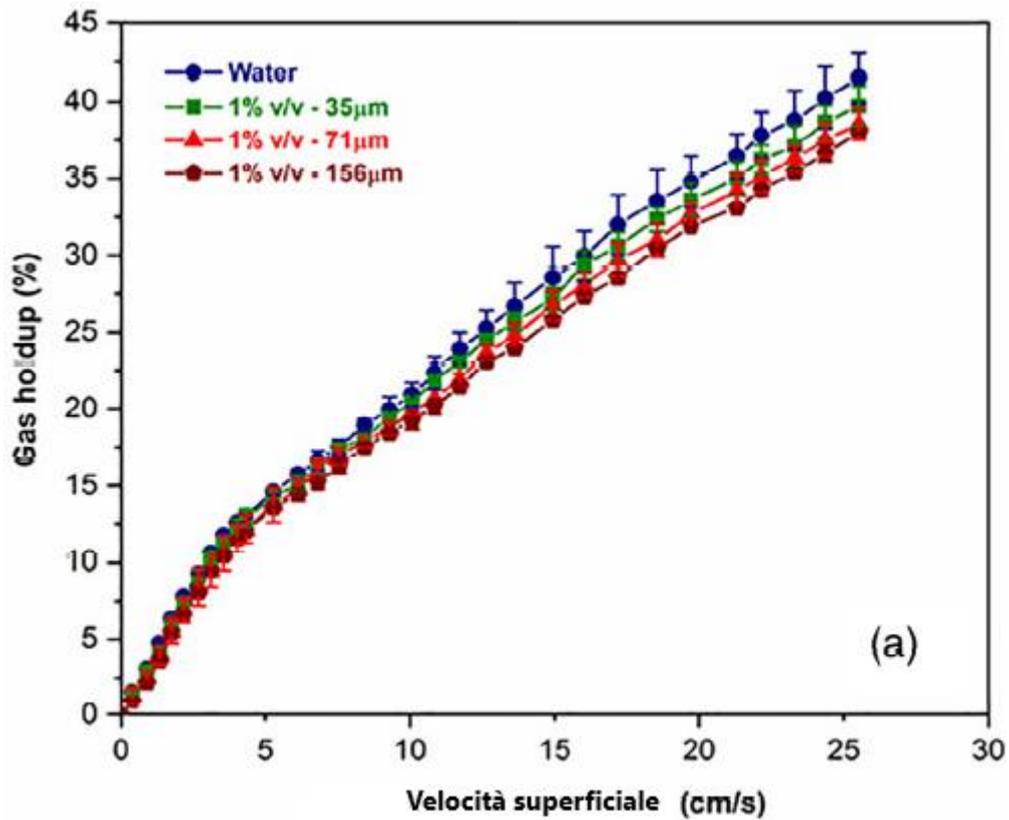


Figura 6.5, Confronto dei regimi di flusso con il sistema bifase in blu e slurry a concentrazione costante di solido sospeso ma diametro di particella crescente (da Lakhdiissi *et al.* [5])

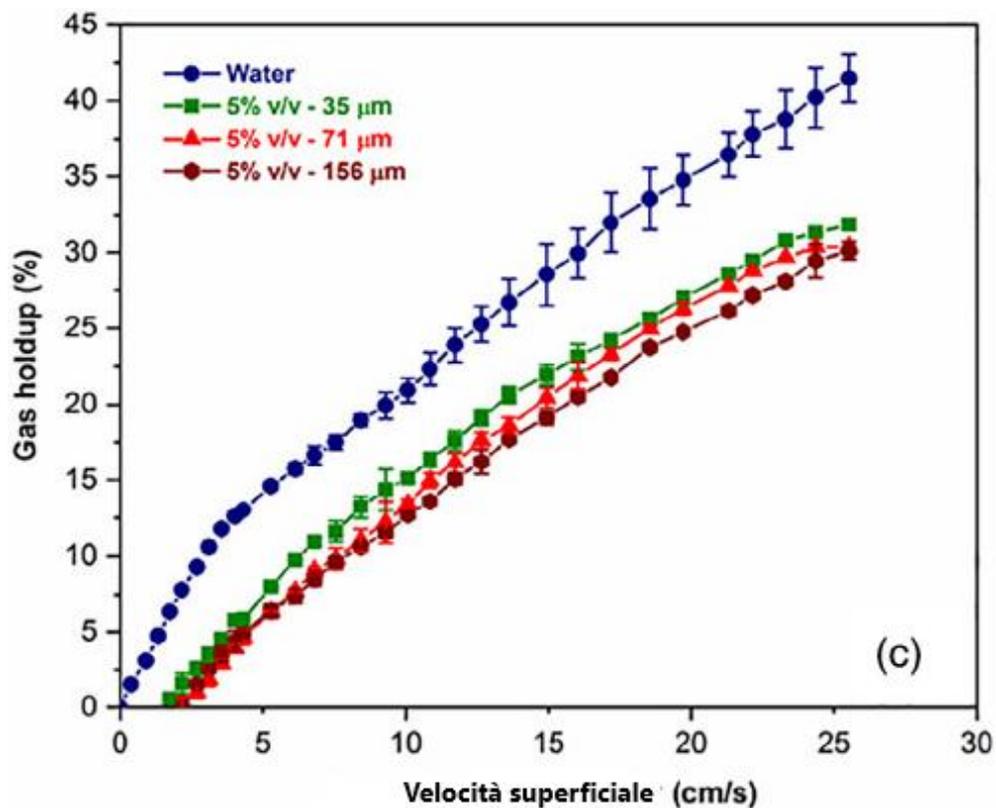


Figura 6.6, Confronto dei regimi di flusso con il sistema bifase in blu e slurry a concentrazione costante di solido sospeso ma diametro di particella crescente (da Lakhdiissi *et al.* [5])

6.1.2 Correlazioni semi-empiriche per l'hold-up

Prima di procedere con la spiegazione nel dettaglio del lavoro di fluido-dinamica computazionale è bene riportare, in maniera approfondita, le relazioni che verranno utilizzate; in particolare, in mancanza di valori sperimentali di riferimento per la geometria in esame è stato scelto di confrontare i valori numerici di hold-up globale derivanti dalle simulazioni con quelli ottenuti attraverso le correlazioni riportate nel seguito.

La prima correlazione è quella di Kito *et al.* [7]

$$\alpha_{glob} = 0.19 \left(\frac{u_{sv}^2 d_p \rho_{sl}}{\sigma} \right)^{0.11} \left(\frac{u_{sv}}{\sqrt{g d_p}} \right)^{0.22} \quad 6.1$$

La correlazione 6.1 è stata sviluppata per una colonna a bolle slurry e fornisce l'hold-up in funzione della velocità superficiale del gas e della dimensione delle particelle. Di seguito, nella tabella 6.4, sono riportati i limiti di validità entro cui la relazione 6.1 garantisce risultati consistenti e congruenti.

Tabella 6.4, Limiti di validità della correlazione di Kito *et al* [7].

<i>Limiti di validità</i>	<i>Sistemi per cui la correlazione 6.1 è stata convalidata</i>
$d_c = 10 \text{ cm}$	Aria-acqua
$u_{sv} \in [0.3, 3.5] \text{ cms}^{-1}$	Aria-etanolo
$\rho_l \in [0.797, 1.165] \text{ gcm}^{-3}$	Aria-soluzione acquosa di glicerolo 0.25
$\mu_l \in [1.01, 14.45] \text{ cP}$	g/g
$\sigma \in [22.5, 73] \text{ dine cm}^{-1}$	Aria-soluzione acquosa di glicerolo 0.65
	g/g

I limiti di validità sono, dunque, rispettati a meno del diametro e per un intervallo relativamente ristretto di velocità.

La seconda correlazione è quella di Koide *et al.* [5]:

$$\frac{\alpha_{glob}}{(1 - \alpha_{glob})^4} = \frac{0.277 \left(\frac{u_{sv} \mu_l}{\sigma} \right)^{0.918} \left(\frac{g \mu_l^4}{\sigma^3 \rho_l} \right)^{-0.252}}{1 + 4.35 \left(\frac{C_s \rho_l}{\rho_p} \right)^{0.748} \left(\frac{\rho_p - \rho_l}{\rho_p} \right)^{0.881} \left(\frac{D_c u_{sv} \rho_l}{\mu_l} \right)^{-0.168}} \quad 6.2$$

La correlazione 6.2 è un'equazione di quarto grado quindi richiede una risoluzione numerica e tra i quattro valori, se reali e distinti, dovrà essere preso quello appartenente all'intervallo compreso tra 0 e 1 perché sia fisicamente accettabile.

Anche per la correlazione di Koide *et al.* vengono riportati i limiti di validità e i principali sistemi per cui la stessa può essere applicata

Tabella 6.5, Limiti di validità della correlazione di Koide *et al* [5]

<i>Limiti di validità</i>	<i>Sistemi per cui la correlazione 6.1 è stata convalidata</i>
$d_c = [10, 30] \text{ cm}$ $u_{sv} \in [1.32, 25] \text{ cms}^{-1}$ $\rho_l \in [0.797, 1.165] \text{ gcm}^{-3}$ $\mu_l \in [1.01, 15] \text{ cP}$ $\sigma \in [22.5, 76] \text{ dine cm}^{-1}$	Aria-acqua Azoto-acqua Aria-soluzione acquosa di glicerolo Aria-soluzione acquosa di solfato di sodio

In questo caso i limiti di validità della correlazione 6.2 rispettano completamente i parametri geometrici e chimico fisici imposti dal sistema in esame.

L'ultima correlazione indagata è quella proposta da Reilly *et al.*:

$$\alpha_{glob} = 296u_{sv}^{0.44}\rho_l^{-0.98}\sigma^{-0.16}\rho_g^{0.19} + 0.009 \quad 6.3$$

Come per le precedenti espressioni, vengono anche per la 6.3 riportati i limiti di validità in tabella 6.6.

Tabella 6.6, Limiti di validità della correlazione di Reilly *et al.* [5]

<i>Limiti di validità</i>	<i>Sistemi per cui la correlazione 6.1 è stata convalidata</i>
$d_c < 30 \text{ cm}$ $u_{sv} \in [2, 20] \text{ cms}^{-1}$ $\rho_l \in [0.797, 1.165] \text{ gcm}^{-3}$ $\mu_l \in [1.01, 14.45] \text{ cP}$ $\sigma \in [22.5, 76] \text{ dine cm}^{-1}$	Aria-acqua Aria-olio Aria-tricloroetilene (TCE)

Anche in questo caso i parametri che descrivono le principali proprietà del sistema in esame cadono all'interno dei limiti di validità.

6.2 Proprietà dello slurry

Definite, quindi, le correlazioni che saranno utilizzate per il confronto quantitativo dei dati ottenuti tramite simulazioni, si può procedere attraverso una breve descrizione delle principali concentrazioni volumiche di solido indagate e delle caratteristiche dello slurry.

Lo slurry viene modellato come un fluido pseudo-omogeneo in cui le proprietà del liquido e del solido sono mediate attraverso la concentrazione in volume del solido sospeso. Il sistema trifase è descritto, quindi, come un sistema bifase formato dallo stesso gas e da un liquido di densità e viscosità aumentate. Di seguito sono riportati i tre valori di concentrazione in volume del solido sospeso e le corrispondenti proprietà di interesse dello pseudo-fluido alla concentrazione considerata.

Tabella 6.7, Proprietà chimico fisiche dello slurry funzione delle concentrazioni in volume di solido sospeso

<i>Concentrazioni in volume studiate per il sistema in esame %</i>		
5	10	20
<i>Densità dello slurry, $\frac{kg}{m^3}$</i>		
1065	1134	1270
<i>Viscosità dello slurry, cP</i>		
1.14	1.3	1.9

Si riportano per completezza le due relazioni utilizzate per il calcolo della densità e della viscosità. L'espressione della densità dello slurry è la seguente:

$$\rho_{sl} = \rho_l(1 - C_s) + \rho_s C_s \quad 6.4$$

dove C_s è la concentrazione in volume di solido e ρ_s , densità del solido, è posta pari a $2354 \frac{kg}{m^3}$.

Il calcolo della viscosità è:

$$\mu_{sl} = \mu_l \exp\left(2.5 \frac{C_s}{1 - 0.609 C_s}\right) \quad 6.5$$

6.3 Risultati

Il primo passo nello studio CFD è stato la determinazione del diametro di bolla da utilizzare; contrariamente al sistema bifase per il quale era disponibile la mappa dei regimi sperimentale con la quale confrontare i dati derivanti dalle simulazioni, il sistema trifase non ha permesso uno studio e confronto interamente sperimentali per la mancanza di dati e studi. L'approccio, dunque, come sottolineato nei paragrafi precedenti, è stato quello di configurare le impostazioni delle simulazioni in maniera tale da rispettare i vincoli quantitativi dove possibile ma soprattutto qualitativi e operare un confronto con le correlazioni di colonne identiche o comunque geometricamente simili.

6.3.1 Scelta del diametro di bolla

Per eseguire le simulazioni relative al sistema trifase sono state scelte le medesime impostazioni riportate nel capitolo 4.5 ad eccezione dei valori di densità e viscosità dello slurry, definito nel file thermophysicalProperties.water, e del diametro di bolla in phaseProperties, riportati rispettivamente nelle tabelle 6.8 e 6.10

Nel seguito si è scelto di riportare le proprietà dello slurry per una concentrazione di solido pari al 10% in volume ma quello che verrà detto per questo sistema potrà essere ripetuto in maniera analoga anche per gli altri due sistemi per i quali dovranno essere usate le proprietà riportate in tabella 6.7.

Tabella 6.8, File thermophysicalProperties.water per $C_s = 0.10$

thermophysicalProperties.water

```

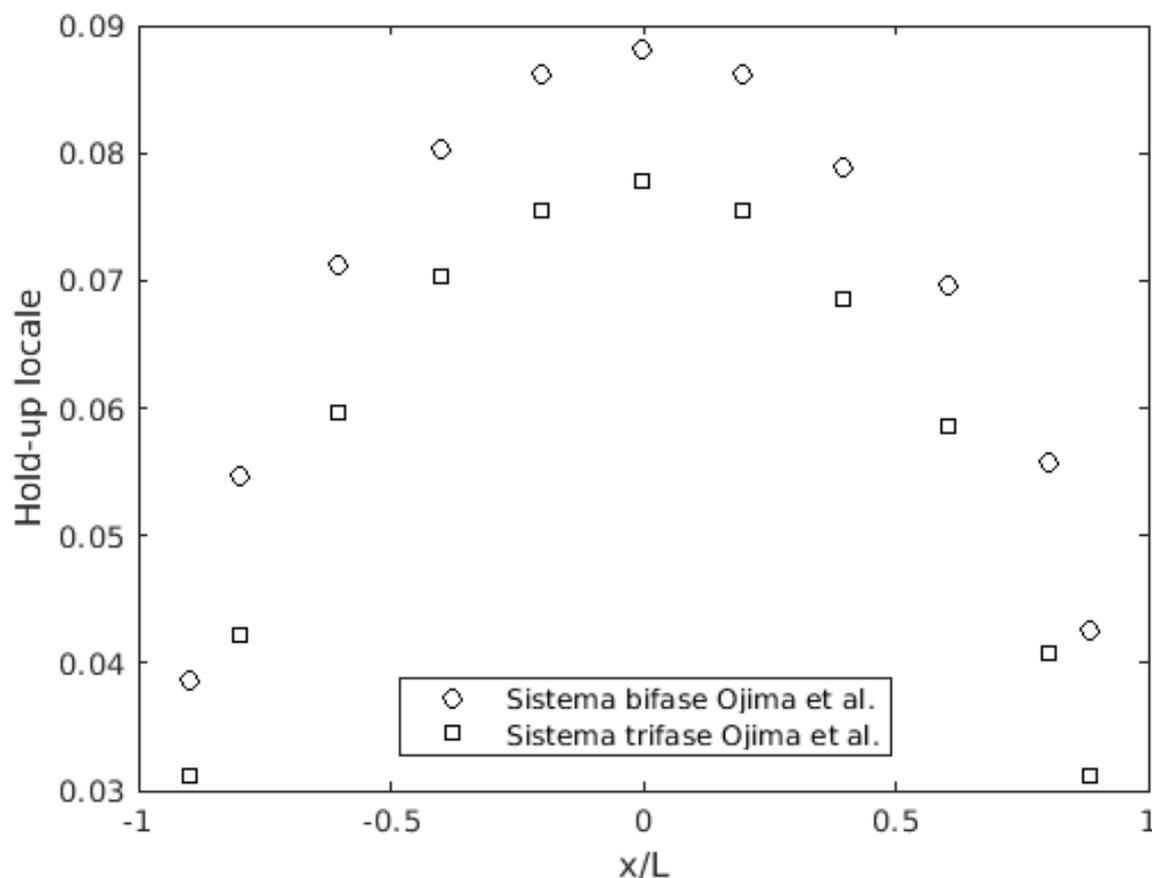
mixture
{
  specie
  {
    nMoles 1;
    molWeight 18.0;
  }
  equationOfState
  {
    R 1E10;
    rho0 1134.0;
  }
  thermodynamics
  {
    Cp 4183; // J/kg/K
    Hf 0;
  }
  transport
  {
    mu 1.300E-3; //Pa s
    Pr 7.01;
  }
}

```

In seguito, è stato necessario scegliere il valore del diametro di bolla. Per il sistema bifase, la scelta, soprattutto per le basse velocità, era vincolata alla correlazione di Geary-Rice. Per il sistema trifase, invece, l'approccio è stato diverso. Si è fatto riferimento ai dati sperimentali della colonna di Ojima *et al.* ricavati per una colonna a bolle le cui proprietà sono riportate in tabella.

Perché il confronto tra modello computazionale e sperimentale fosse quanto più veritiero possibile sono stati confrontati i profili sperimentali di hold-up sul piano di simmetria alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$, riportati in figura 6.7; quest'ultima, infatti, mostra il profilo di hold-up locale relativo al sistema bifase e il profilo dell'hold-up locale, nelle stesse condizioni operative del sistema bifase, con una concentrazione in volume di solido pari al 10%.

Figura 6.7, Diagramma dei profili locali di hold-up sul piano verticale di simmetria per i sistemi bifase e trifase con concentrazione di solido del 10% di Ojima *et al.* [28] alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$



Dai valori numerici è stata calcolata la diminuzione media del profilo di hold-up che si ha passando dal bifase al trifase secondo la relazione:

$$\frac{HU_{bi} - HU_{tr}}{HU_{bi}} \tag{6.6}$$

così da risultare uguale a 0 nel caso di assenza di abbassamento del profilo locale di hold-up essendo $HU_{bi} = HU_{tr}$; uguale ad 1 nel caso di completo appiattimento del profilo locale di hold-up essendo $HU_{tr} = 0$.

Si riportano in tabella 6.9 i valori numerici e l'abbassamento medio inteso come media numerica.

Tabella 6.9, Valori numerici dei profili locali di hold-up per i sistemi bifase e trifase con concentrazione di solido del 10% di Ojima *et al.* [28] alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$ e abbassamento medio percentuale

Coordinata adimensionata $\frac{x}{L}$	Sistema bifase	Sistema trifase	Abbassamento %
-0.90	0.039	0.031	19.6

-0.80	0.054	0.042	22.8
-0.61	0.071	0.060	16.2
-0.40	0.080	0.070	12.4
-0.2	0.086	0.076	12.3
0	0.088	0.078	11.7
0.20	0.086	0.076	12.3
0.40	0.079	0.069	13.1
0.61	0.070	0.059	16.0
0.80	0.055	0.040	26.8
0.88	0.043	0.030	26.9
<i>Abbassamento medio %</i>			
17.3			

Calcolata la variazione percentuale dell'abbassamento medio è stata, quindi, condotta un'analisi di sensitività per individuare il diametro di bolla che determinasse un abbassamento analogo con le simulazioni di CFD. Si noti che come valore di primo tentativo è stato usato il diametro di Geary-Rice alla velocità superficiale di $2 \frac{cm}{s}$. Il valore finale è risultato essere uguale a 15 mm con un abbassamento medio percentuale pari a 18.9% ritenuto accettabile rispetto al 17.3%

Cambiate le impostazioni nel file “vim *phaseProperties*” come mostrato in tabella 6.10 è stato possibile eseguire le simulazioni e valutare l'effetto del solido sospeso.

Tabella 6.10, Parametri utilizzati nel file *phaseProperties* (sistema trifase)

phaseProperties (d_{eb} costante)

```

populationBalance    off;

phases (air water);

air
{
  diameterModel constant;
  constantCoeffs
  {
    d          15E-3;
  }
  // diameterModel sauter;
  // sauterCoeffs
  // {
  //   d0        $diam_32;
  // }

  residualAlpha $resAlpha;
}

```

Nei prossimi paragrafi verrà discusso l'effetto della concentrazione di solido sui regimi di flusso e sulla loro transizione.

6.3.2 Scelta della correlazione di confronto

La prima decisione da prendere è stata relativa a quale correlazione utilizzare per confrontare i risultati del sistema trifase con diverse concentrazioni di solido sospeso. In prima istanza, si è deciso di escludere la correlazione 6.1 perché, nonostante il sistema in esame rispettasse quasi tutti i limiti di validità, il range di velocità risulta particolarmente piccolo $[0.3; 3.5 \frac{cm}{s}]$. La scelta da operare, dunque, si è spostata sulla correlazione di Koide *et al.* (6.2) o di Reilly *et al.* (6.3).

Nonostante, infatti, entrambe le correlazioni rispettino i limiti di validità si è operato un confronto relativamente al sistema bifase, visto come un sistema slurry a concentrazione nulla di solido sospeso ed è stata, in seconda istanza, calcolata la deviazione media tra i valori simulati e calcolati tramite le 6.2 e 6.3. Si riporta in figura 6.8 il confronto.

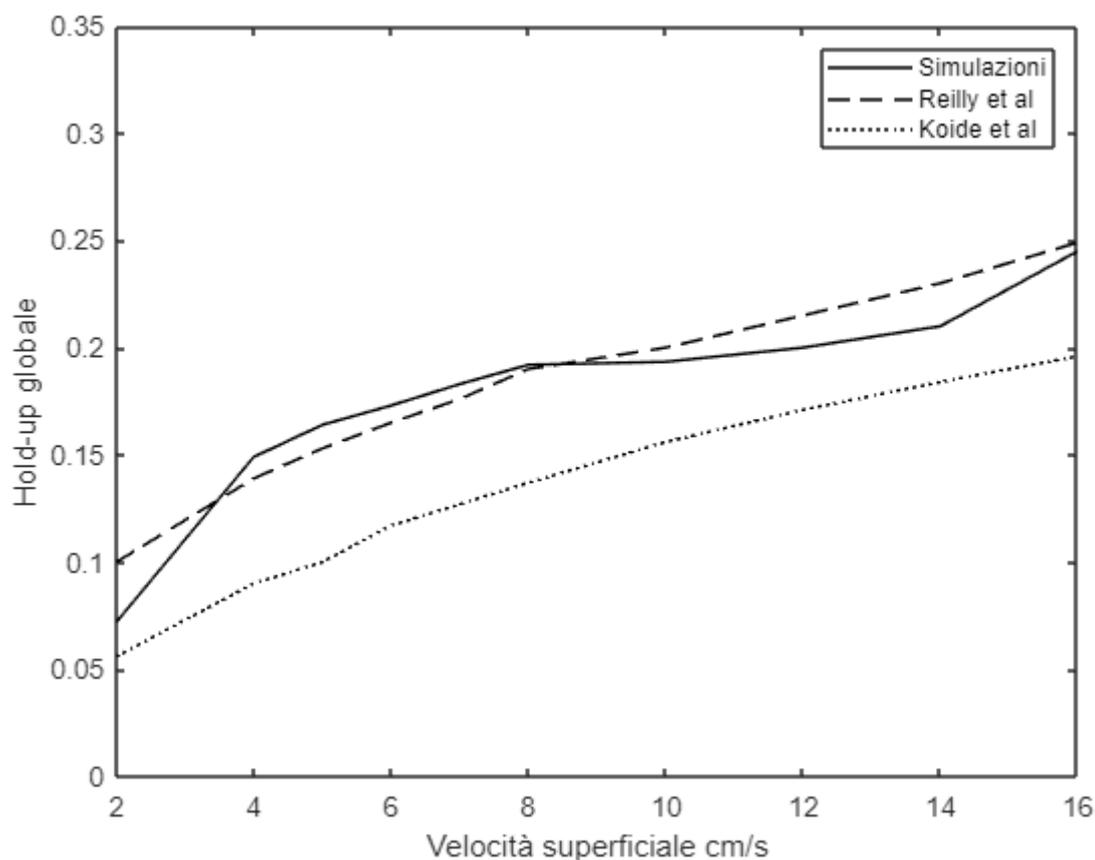


Figura 6.8. Confronto delle correlazioni di Koide *et al.* e Reilly *et al.* con il sistema bifase convalidato con i dati sperimentali

In tabella 6.11 vengono riportati i valori di hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas e l'errore medio percentuale calcolato rispetto al sistema bifase simulato.

Tabella 6.11, Valori numerici di hold-up globale ed errore medio percentuale riferito al sistema bifase

<i>Velocità superficiale,</i> $\frac{cm}{s}$	<i>Sistema bifase</i> <i>simulato</i>	<i>Koide et al.</i>	<i>Reilly et al.</i>
2	0.072	0.100	0.056
4	0.149	0.139	0.090
5	0.164	0.153	0.100
6	0.173	0.165	0.117
7	0.183	0.176	0.127
8	0.192	0.190	0.137
10	0.194	0.200	0.156
12	0.205	0.215	0.171
14	0.215	0.23	0.184
16	0.245	0.249	0.196

In tabella 6.12 è riportato, invece, l'errore medio percentuale inteso come la media dei rapporti tra la differenza in valore assoluto dell'hold-up del sistema bifase e del valore derivato dalla correlazione e l'hold-up del sistema simulato.

$$\frac{HU_{bi} - HU_{corr}}{HU_{bi}} \quad 6.7$$

Tabella 6.12, Errore medio percentuale

<i>Errore medio percentuale</i>	
<i>Koide et al.</i>	<i>Reilly et al.</i>
25.9	8.4

È, quindi, evidente che la correlazione di Reilly *et al.* descrive quantitativamente il sistema in esame. Si procede ora con lo studio dei sistemi slurry a diverse concentrazioni.

6.3.3 Sistema trifase: concentrazione di solido del 5%

Il primo caso che sarà analizzato di seguito riguarda un sistema trifase con concentrazione in volume di solido sospeso pari al 5%.

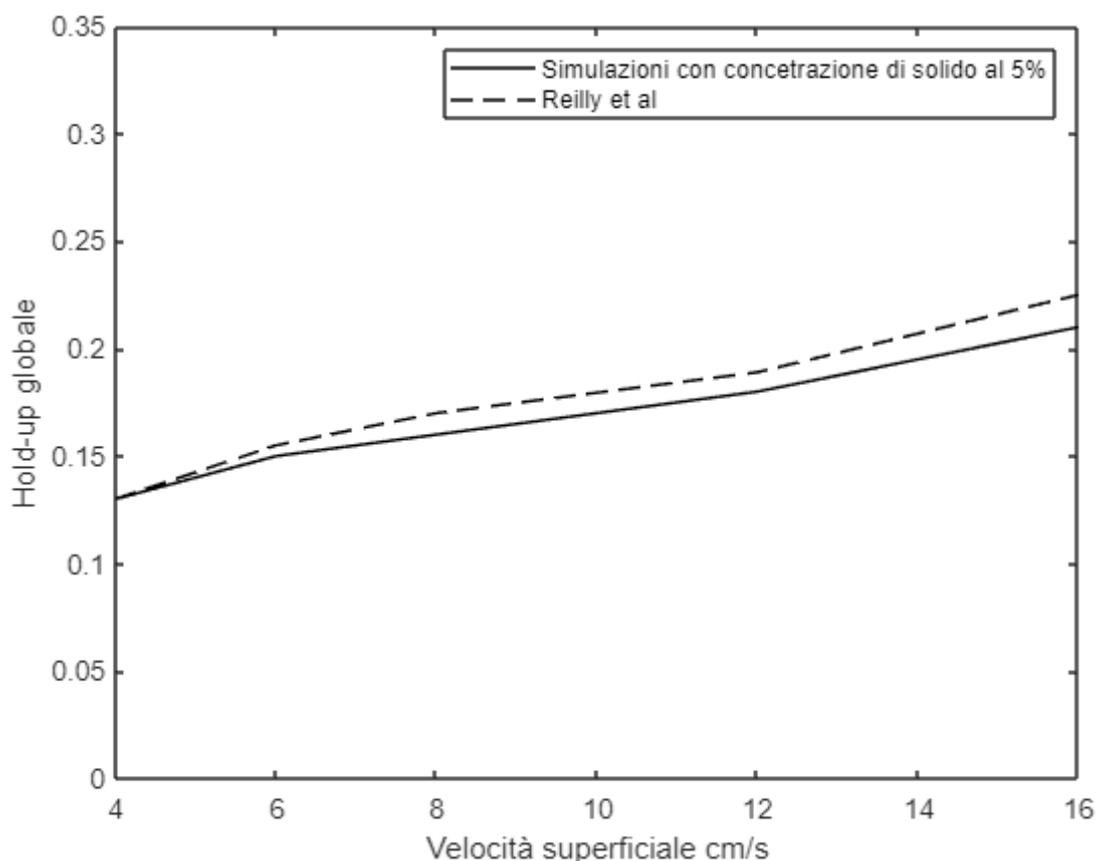


Figura 6.9, Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly *et al.*

Per rendere quantitativa la trattazione, verranno riportati per ogni sistema slurry i valori di hold-up globale confrontati con quelli ottenuti dalla correlazione di Reilly *et al.*. In tabella 6.13, in ultimo, sono riportati i valori di hold-up globale in funzione della velocità superficiale derivati da simulazioni CFD e secondo la correlazione di Reilly *et al.*

Tabella 6.13, Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 5% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly *et al.*

Velocità superficiale $\frac{cm}{s}$	Simulazioni CFD	Correlazione Reilly <i>et al.</i>
4	0.130	0.130
6	0.155	0.155
8	0.165	0.170
12	0.185	0.189
16	0.215	0.225

Anche in questo caso la correlazione di Reilly *et al.* descrive in modo accurato l'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale.

Si riportano in tabella 6.14, inoltre, i valori dell'abbassamento di hold-up relativo:

$$\frac{HU_{bi} - HU_{tri}}{HU_{bi}} \quad 6.8$$

Tabella 6.14. Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_s = 0.05$

Velocità superficiale $\frac{cm}{s}$	$\frac{HU_{bi} - HU_{tri}}{HU_{bi}} \%$
4	12.8
6	10.4
8	14.1
12	9.76
16	12.2

6.3.4 Sistema trifase: concentrazione di solido del 10%

La seconda concentrazione studiata è una concentrazione di solido pari al 10%.

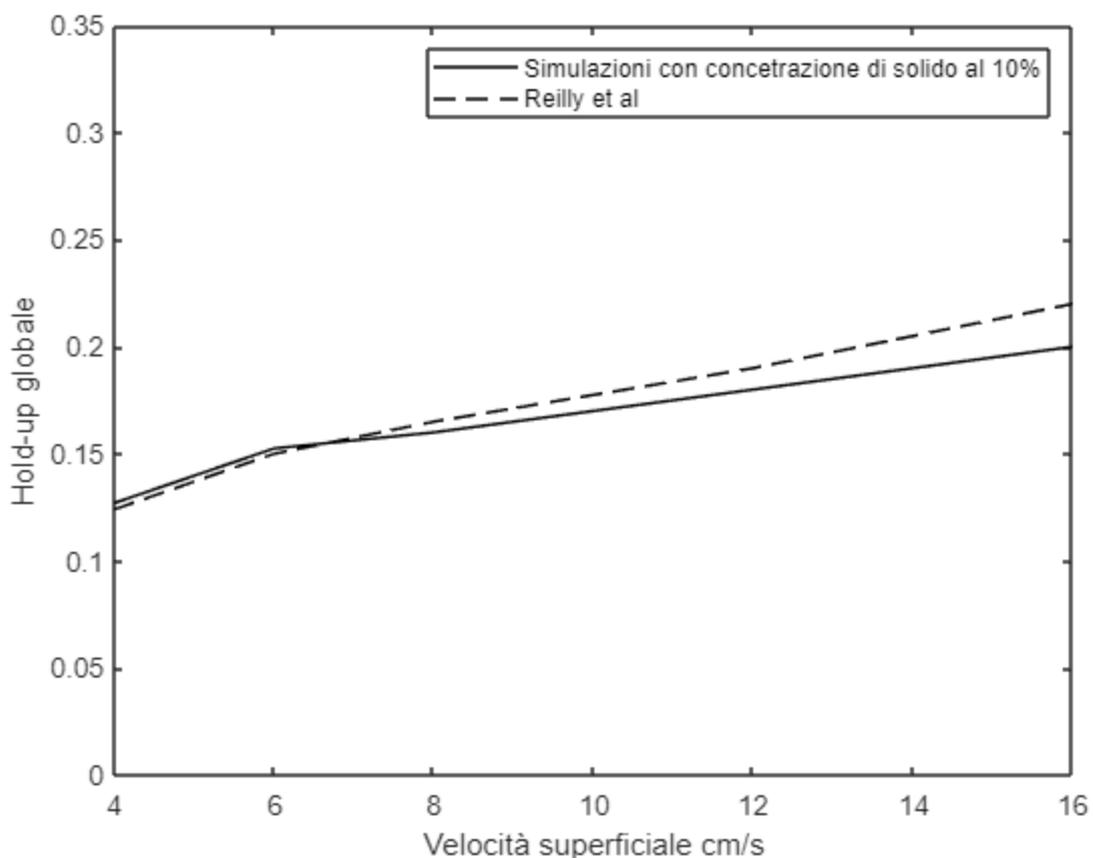


Figura 6.10. Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly *et al.*

In tabella 6.15 sono riportati i valori numerici dei due andamenti mostrati.

Tabella 6.15, Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 10% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly *et al.*

<i>Velocità superficiale</i> $\frac{cm}{s}$	<i>Simulazioni CFD</i>	<i>Correlazione Reilly et al.</i>
4	0.127	0.124
6	0.153	0.150
8	0.160	0.165
12	0.180	0.190
16	0.200	0.220

Anche in questo caso il confronto quantitativo è ben posto; si riporta, anche in questo caso, l'abbassamento relativo.

Tabella 6.16, Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_s = 0.1$

<i>Velocità superficiale</i> $\frac{cm}{s}$	$\frac{HU_{bi} - HU_{tri}}{HU_{bi}} \%$
4	14.8
6	11.6
8	16.7
12	12.2
16	18.4

6.3.5 Sistema trifase: concentrazione di solido del 20%

L'ultimo sistema slurry analizzato è un sistema con concentrazione di solido al 20% in volume il cui andamento è mostrato in figura 6.11.

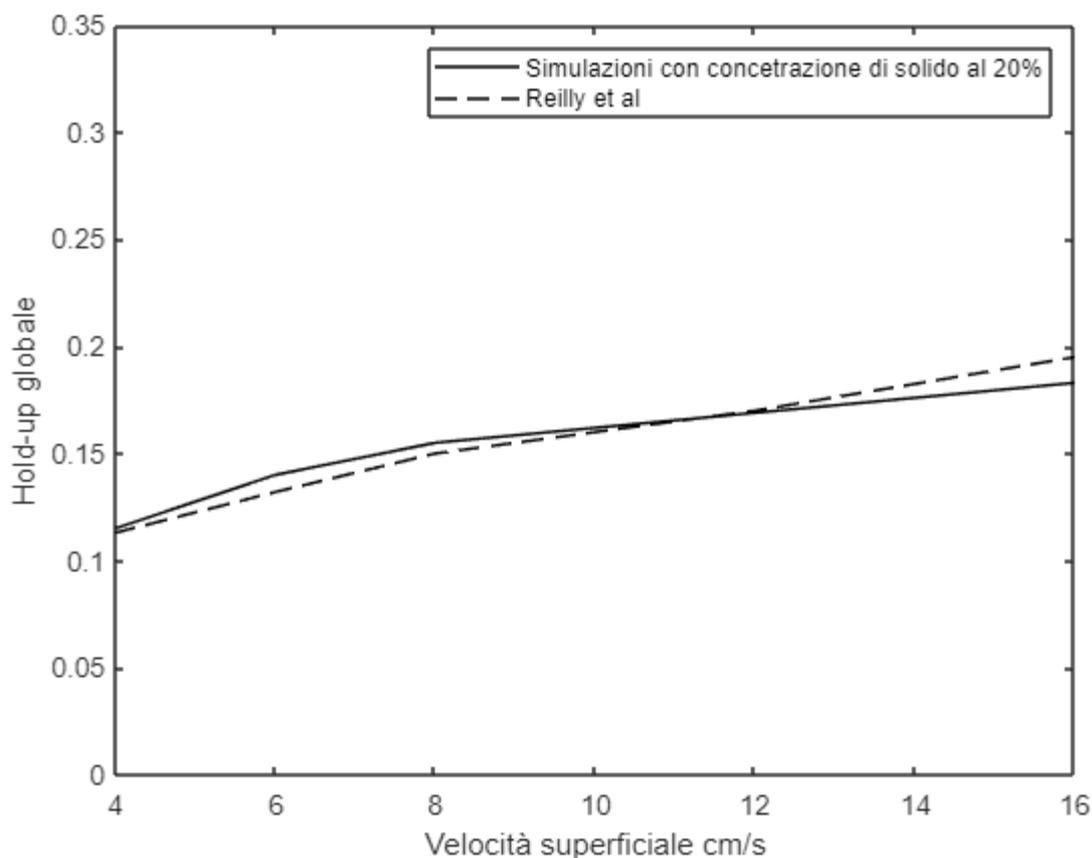


Figura 6.11, Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale tra le simulazioni CFD e la correlazione di Reilly *et al.*

In ultimo, si riportano i valori numerici per operare un confronto quantitativo in tabella 6.17.

Tabella 6.17, Confronto dei valori di hold-up globale del sistema slurry a concentrazione del 10% in volume di solido sospeso tra simulazioni CFD e correlazione di Reilly *et al.*

Velocità superficiale $\frac{cm}{s}$	Simulazioni CFD	Correlazione Reilly <i>et al.</i>
4	0.115	0.113
6	0.140	0.132
8	0.155	0.150
12	0.169	0.170
16	0.183	0.195

È, quindi, evidente che il sistema simulato e di conseguenza il modello descritto riescono a descrivere con un ottimo livello di accuratezza il sistema reale. In ultimo, si riporta l'abbassamento relativo rispetto al sistema bifase

Tabella 6.18, Abbassamento relativo dell'hold-up globale per una concentrazione di solido $C_S = 0.2$

Velocità superficiale $\frac{cm}{s}$	$\frac{HU_{bi} - HU_{tri}}{HU_{bi}} \%$
4	22.8
6	19.1
8	19.3
12	17.6
16	25.3

6.3.6 Confronto degli andamenti (correlazioni)

In questo ultimo paragrafo si discuterà l'effetto globale che il solido sospeso ha sull'andamento dell'hold-up in funzione della velocità superficiale; in particolare, per agevolare la visione d'insieme delle simulazioni eseguite viene riportato il confronto in figura 6.12.

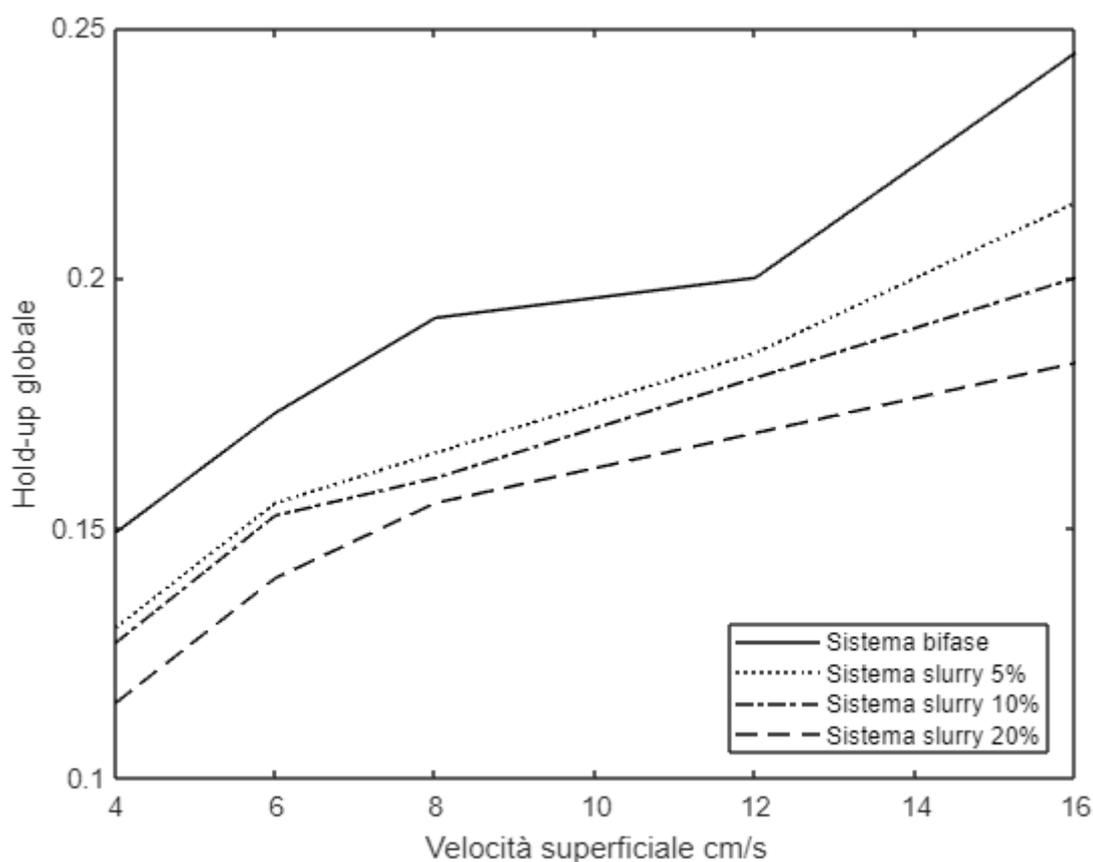


Figura 6.12, Confronto dell'andamento dell'hold-up globale in funzione delle diverse concentrazioni in volume di solido sospeso

Come descritto nei paragrafi precedenti un aumento della concentrazione in volume di solido determina una diminuzione dell'hold-up globale. In particolare, all'aumentare della concentrazione di solido varia anche la forma dell'andamento dell'hold-up globale in

funzione della velocità superficiale. È evidente, infatti, che all'aumentare del tenore di solido si passa da una forma sigmoidale, in cui si nota la presenza di due flessi, ad una quadratica in cui si nota la presenza di un unico punto di flesso.

6.3.7 Confronto degli andamenti (dati sperimentali)

In questo paragrafo si riporta il confronto con i dati sperimentali disponibili in letteratura che fanno riferimento agli studi condotti sulle colonne descritte nei paragrafi 3.1 e 3.4. Il confronto, in particolare, fa riferimento ad una concentrazione in volume di solido pari al 5%. Prima, però, di procedere con la discussione dei dati ottenuti è bene descrivere qual è il comportamento atteso. I dati sperimentali ottenuti tramite studi sulla colonna del gruppo di Orvalho *et al.* [2] ci si aspetta siano significativamente e sistematicamente più elevati di quelli ottenuti tramite simulazione CFD. Relativamente ai dati ottenuti con la colonna del gruppo di Lakhdiissi *et al.* [5], invece, è bene sottolineare che, essendo il diametro sufficientemente maggiore di quello usato per le simulazioni, ci si aspettano valori di hold-up quantitativamente inferiori. In figura 6.13 è riportato il confronto tra gli andamenti.

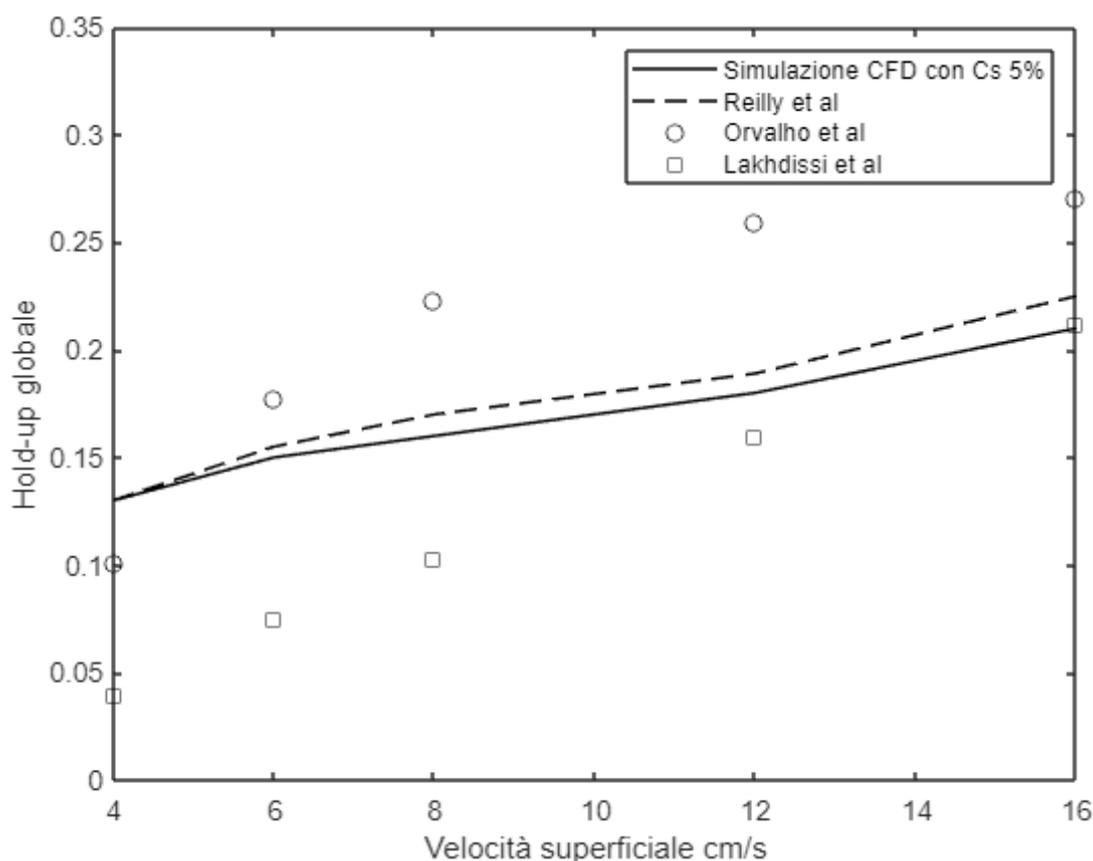


Figura 6.13, Confronto dell'andamento dell'hold-up globale dello slurry con $C_s = 0.2$ in funzione della velocità superficiale tra la simulazione CFD, la correlazione di Reilly e i dati sperimentali dei gruppi di Orvalho *et al.* [2] e Lakhdiissi *et al.* [5]

È evidente, quindi, che il quadro degli andamenti dell'hold-up globale rispetta le attese. Si fa notare, infine, che i dati sperimentali del gruppo di Lakhdiissi *et al.* [5] sono stati presi per un diametro di particelle solide compreso tra 71 e 156 μm ; l'errore è trascurabile perché i profili sono tra loro molto vicini.

6.3.8 Stabilità del sistema

Si descrive, infine, la stabilità del sistema. In particolare, saranno riportati nel seguito tre *Snapshoot* per valutare l'andamento del plume di bolle in risalita.

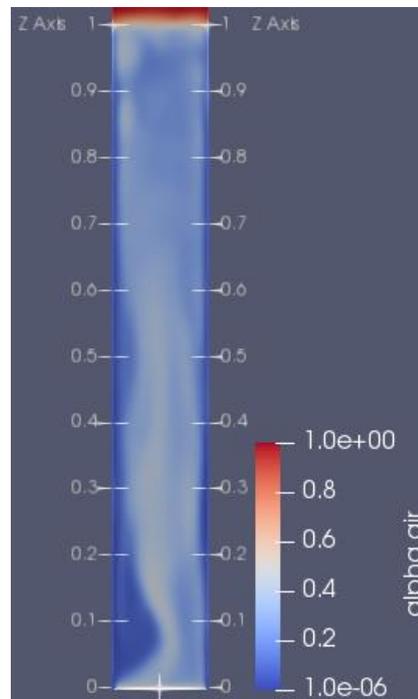


Figura 6.14, *SnapShoot* del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.05$

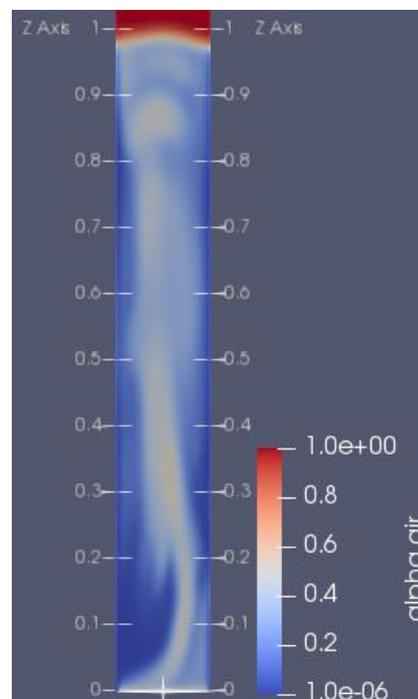


Figura 6.15, *SnapShoot* del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.1$

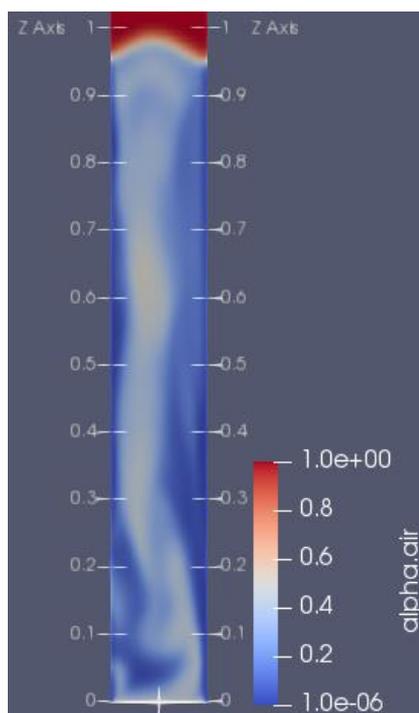


Figura 6.16, *SnapShoot* del plume. Simulazione CFD alla velocità superficiale di $16 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ e concentrazione $C_s = 0.2$

I tre *SnapShoot* mostrano che il sistema rimane stabile in virtù della risalita mediamente verticale che si osserva.

Conclusioni

Il presente lavoro si era posto l'obiettivo di modellizzare le colonne a bolle e colonne a bolle slurry; in particolare, l'oggetto principale dell'indagine è stato da un lato lo studio dei regimi fluido-dinamici e dall'altro l'effetto del solido sospeso sull'andamento dell'hold-up globale in funzione della velocità superficiale del gas.

Per quanto concerne la prima parte, lo studio si è concentrato sulla modellizzazione di colonne a bolle bifase per le quali è stato necessario individuare la mesh più opportuna per eseguire le simulazioni, le forze controllanti la risalita del *plume* di bolle e il confronto dei risultati con i dati sperimentali disponibili in letteratura per una colonna con geometria analoga. Quindi, dopo uno studio preliminare che ha portato a scegliere la griglia che minimizzasse l'errore di discretizzazione ma che garantisse, comunque, un costo computazionale relativamente basso, il percorso principale che è stato esplorato è stato l'individuazione della o delle forze controllanti, individuata, in ultima analisi, nella forza di drag. È stato, perciò, possibile eseguire simulazioni per diversi valori di velocità superficiale del gas e diagrammarne l'andamento. Il risultato finale, emerso dal confronto tra il sistema bifase simulato, i dati sperimentali ricavati utilizzando due colonne geometricamente simili a quella simulata e le correlazioni valide per il sistema in esame, è stato nettamente più prossimo ai dati sperimentali ricavati attraverso il *pressure method* piuttosto che attraverso la semplice ispezione visiva dell'innalzamento del liquido.

La seconda parte del lavoro, invece, si è concentrata sullo studio che l'aggiunta di solido ha sui regimi e come questi ultimi si modificano a seconda della concentrazione di solido sospeso.

Il limite principale affrontato nella seconda sezione è relativo all'assenza quasi totale di dati sperimentali di riferimento per un sistema geometricamente simile al sistema in esame. Infatti, in prima istanza, la ricerca si è concentrata sull'individuazione, prima, e sulla scelta, poi, della correlazione che meglio rappresentasse l'andamento dell'hold-up globale. La scelta, infatti, è ricaduta sulla correlazione tale da fornire un andamento molto prossimo al caso bifase, già convalidato perché presenti dati sperimentali di riferimento. Definiti, quindi, i parametri per eseguire le simulazioni il confronto ha mostrato chiaramente che i valori attesi e quelli simulati erano perfettamente in accordo e tanto più prossimi quanto maggiore era la concentrazione di solido sospeso attestando anche in questo caso la bontà del modello. Infatti, il confronto dei grafici a diverse concentrazioni di solido mostra che l'andamento non solo diminuisce all'aumentare della concentrazione di solido sospeso ma cambia anche forma, in accordo con la base teorica e sperimentale fornita dalla letteratura. Infatti, confrontando il sistema bifase e lo slurry con la concentrazione di solido sospeso simulata maggiore (20%) si nota che nel primo caso la forma è analiticamente simile ad una curva sigmoide con due punti di flesso, mentre nel secondo caso tende ad assumere una forma simile ad una curva quadratica che presenti, quindi, un unico punto di flesso e concavità costante. L'andamento qualitativo e quantitativo, infine, è avvalorato dal confronto con i dati sperimentali del gruppo di Lakhdissi *et al.* [5].

Per concludere, si dichiara la necessità di eseguire prove sperimentali per l'ulteriore convalida del sistema slurry il cui metodo d'indagine, in maniera concorde con quanto attestato nella prima sezione, dovrebbe essere il *pressure method*.

Appendice

A.1 Transizione dei regimi e *swarm velocity*

Uno degli aspetti di maggiore rilevanza durante lo studio sperimentale dei regimi fluidodinamici delle colonne a bolle è la modellizzazione matematica delle due transizioni. Come già accennato, l'hold-up globale è funzione della velocità superficiale del gas secondo la seguente relazione [2]:

$$\alpha_{glob} = \frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{|\mathbf{u}_{sw}|} \quad \text{A.1}$$

dove e rappresenta l'hold-up globale, \mathbf{u}_{sv} la velocità superficiale del gas e \mathbf{u}_{sw} la velocità di swarm ossia la velocità della bolla ostacolata dal moto delle bolle adiacenti.

A.1.1 Transizione dal regime omogeneo al regime di transizione

Nel regime omogeneo è possibile esprimere matematicamente la velocità di swarm attraverso la seguente formula:

$$\mathbf{u}_{sw,om} = \mathbf{u}_{t,om} \left(1 - \frac{a_D \alpha_{glob}}{1 - \alpha_{glob}} \right) \quad \text{A.2}$$

dove $\mathbf{u}_{t,om}$ rappresenta la velocità che avrebbe la bolla se fosse sola nel moto di risalita e a_D il coefficiente volumico di spostamento. Combinando la 3.1 e la 3.2 si ottiene:

$$\frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\alpha_{glob}} = \mathbf{u}_{t,om} - (\mathbf{u}_{t,om} a_D) \frac{\alpha_{glob}}{1 - \alpha_{glob}} \quad \text{A.3}$$

che è l'equazione di una retta nella variabile indipendente $\frac{\alpha_{glob}}{1 - \alpha_{glob}}$ e nella variabile dipendente $\frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\alpha_{glob}}$ [2].

Il valore critico c_1 è individuato tramite regressione lineare; in particolare, l'ultimo punto considerato appartenente al regime omogeneo è quello per cui aggiungendo un ulteriore punto il valore di R^2 scenderebbe al di sotto di 0.9 con R^2 coefficiente statistico di determinazione. Dal punto di vista matematico, quindi, possiamo fornire la seguente spiegazione: operata opportunamente la trasformazione che porta dal piano α_{glob} , $|\mathbf{u}_{sv}|$ al nuovo piano $\frac{\alpha_{glob}}{1 - \alpha_{glob}}$, $\frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\alpha_{glob}}$ i punti che giacciono sulla retta saranno i punti appartenenti al regime omogeneo. In ultimo, è importante definire anche il punto di partenza dal quale iniziare a considerare validi i punti per la regressione e l'articolo di Orvalho *et al.* suggerisce il punto SPO, *Stable Plate Operation*, per cui il regime omogeneo è completamente stabile.

In figura 3.3 viene mostrata l'individuazione del punto critico c_1 :

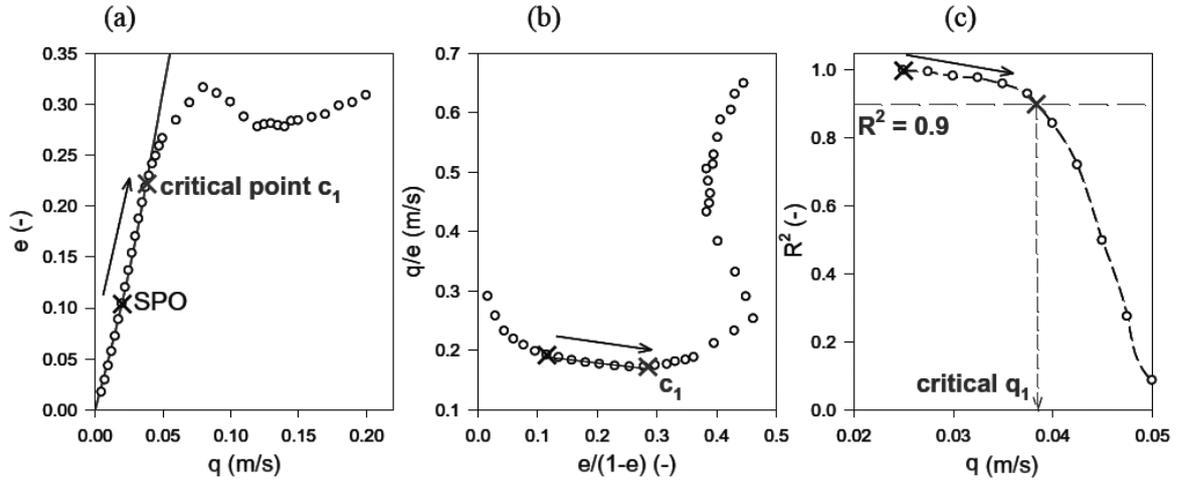


Figura A.1, Individuazione del punto critico c_1 . (a) mappa del regime nel piano $\alpha_{glob}, |u_{sv}|$ in cui è mostrato il punto critico c_1 e il punto SPO. (b) individuazione del punto c_1 nel piano $\frac{\alpha_{glob}}{1-\alpha_{glob}}, \frac{|u_{sv}|}{\alpha_{glob}}$. (c) rappresentazione grafica del metodo per la scelta del valore critico c_1 . [2]

A.1.2 Transizione dal regime di transizione al regime eterogeneo

In accordo allo studio condotto da Orvalho *et al.* nel regime a cavallo tra quello di transizione ed eterogeneo e nell'eterogeneo stesso le bolle vedono l'effetto di spinta da parte del ricircolo di liquido quindi la *swarm velocity* risulta aumentata secondo la relazione:

$$\mathbf{u}_{sw,et} = \mathbf{u}_{t,et} + C\mathbf{u}_{sv} \tag{A.4}$$

che accoppiata con la 3.1 fornisce la seguente relazione:

$$\alpha_{glob} = \frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\mathbf{u}_{t,et} + C\mathbf{u}_{sv}} \tag{A.5}$$

nelle quali il parametro C tiene in considerazione l'eterogeneità radiale nel moto di risalita delle bolle dovuta al ricircolo del liquido.

Analogamente al caso omogeneo per cui si è operata un'opportuna trasformazione per ottenere una funzione lineare anche per l'individuazione del punto di transizione c_2 si procede come per il caso precedente e si ottiene:

$$\frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\alpha_{glob}} = \mathbf{u}_{t,et} + C|\mathbf{u}_{sv}| \tag{A.6}$$

nella quale la trasformazione ha permesso un cambio dal piano di coordinate $\alpha_{glob}, |\mathbf{u}_{sv}|$ al nuovo piano di coordinate $\frac{|\mathbf{u}_{sv}|}{\alpha_{glob}}, |\mathbf{u}_{sv}|$.

In questo caso il primo punto per l'individuazione è il punto per cui il regime eterogeneo è completamente sviluppato e il punto critico c_2 è individuato seguendo la stessa regola di riduzione del coefficiente statistico di determinazione. In figura 3.3 è riportato il procedimento di individuazione.

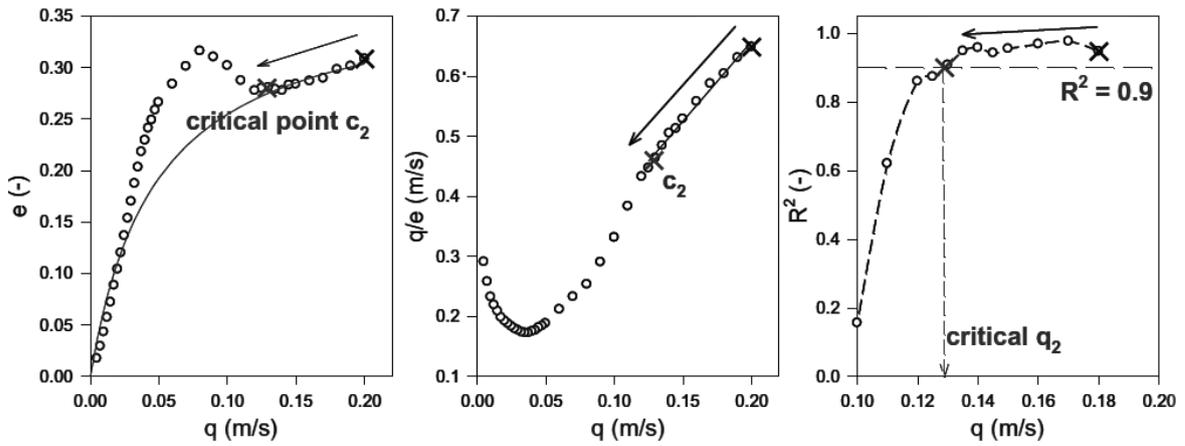


Figura A.2, Individuazione del punto critico c_2 . (a) mappa del regime nel piano $\alpha_{glob}, |u_{sv}|$ in cui è mostrato il punto critico c_2 e il punto iniziale che corrisponde al punto in cui il regime eterogeneo è completamente sviluppato. (b) individuazione del punto c_1 nel piano $\frac{|u_{sv}|}{\alpha_{glob}}, |u_{sv}|$. (c) rappresentazione grafica del metodo per la scelta del valore critico c_2 . [2]

Bibliografia

- [1] J. H. Ferziger, M. Peric e R. Street, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Stanford: Springer, 2001.
- [2] S. Orvalho, M. Hashida, M. Zadnikova, P. Stanovsky, M. C. Ruzicka, S. Sasaki e A. Tomiyama, «Flow regimes in slurry bubble column: Effect of column height and particle,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 351, pp. 799-815, 2018.
- [3] A. Sarhan, J. Naser e G. Brooks, «Effects of particle size and concentration on bubble coalescence and froth formation in a slurry bubble column,» *Particuology*, vol. 36, pp. 82-95, 2018.
- [4] X. Guan e N. Yang, «Bubble properties measurement in bubble columns: From homogeneous to heterogeneous regime,» *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 127, pp. 103-112, 2017.
- [5] E. M. Lakhdissi, I. Soleimani, C. Guy e J. Chaouki, «Simultaneous effect of particle size and solid concentration on the hydrodynamics of slurry bubble column reactors,» *AIChE Journal*, pp. 1-16, 30 September 2019.
- [6] J. Zahradnik, M. Fialova, M. Ružička, J. Drahos, F. Kaš tánek e N. Thomas, «Duality of the gas-liquid flow regimes,» *Chemical Engineering Science*, vol. 52, n. 21-22, pp. 3811-3826, 1997.
- [7] M. Kito, K. Tabei e K. Murata, «Gas and Liquid Holdups in Mobile Beds under the Countercurrent,» *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 17, n. 4, pp. 568-571, 1978.
- [8] G. Gouesbet, A. Berlemont e A. Picart, «Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions. Extensive discussion of the Tchen's theory, using a two-parameter family of Lagrangian correlation functions,» *The Physics of Fluids*, vol. 27, n. 4, p. 827, 1984.
- [9] C.-M. Tchen, «Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid,» PhD thesis, Delft University of Technology, The Netherlands, 1947.
- [10] M. Maxey e J. Riley, «Equation of motion for a small rigid sphere in a non uniform flow,» *Phys. Fluids*, vol. 26, n. 4, p. 883, 1983.
- [11] M. Ishii, *Thermo-Fluid Dynamic theory of Two Phase Flow*, Parigi: Eyrolles, 1975.
- [12] D. Drew, «Mathematical modeling of two-phase flow,» *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 15, pp. 261-291, 1983.
- [13] F. H. Harlow e A. A. A., «Numerical calculation of multiphase fluid flow,» *Journal of Computational Physics*, vol. 17, n. 1, pp. 19-52, 1975.

- [14] Jakobsen, *Chemical Reactor Modeling Multiphase reactive Flows*, Norway: Springer, 2008.
- [15] R. Krishna e J. Van Baten, «Scaling up Bubble Column Reactors with the Aid of CFD,» *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 79, n. 3, pp. 283-309, 2001.
- [16] L. Gemello, V. Cappello, F. Augier, D. Marchisio e C. Plais, «CFD-based scale-up of hydrodynamics and mixing in bubble columns,» *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 136, pp. 846-858, 2018.
- [17] T. Saito, K. Sakakibara, Y. Miyamoto e M. Yamada, «A study of surfactant effects on the liquid-phase motion around a zigzagging-ascent bubble using a recursive cross-correlation PIV,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 158, n. 1, pp. 39-50, 2010.
- [18] G. Olivieri, M. E. Russo, M. Simeone, A. Mazocchella e P. Salatino, «Effects of viscosity and relaxation time on the hydrodynamics of gas-liquid systems,» *Chemical Engineering Science*, vol. 66, n. 14, pp. 3392-3399, 2011.
- [19] S. öztürk, A. Schumpe e W. Deckwer, «Organic liquids in a bubble column: Holdups and mass transfer coefficients,» *AIChE Journal*, vol. 33, n. 9, pp. 1473-1480, 1987.
- [20] N. W. Geary e R. G. Rice, «Bubble Size Prediction for Rigid and,» *AIChE Journal*, vol. 37, n. 2, pp. 161-168, 1991.
- [21] D. JF e H. D, *Fluidized Particles*, New York: Cambridge University Press, 1963.
- [22] H. Z. Kister, W. V. Pinczewski e J. C. Fell, «Entrainment from Sieve Trays Operating in the Spray Regime,» *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 20, n. 3, pp. 528-532, 1981.
- [23] A. Marmur e E. Rubin, «Viscous effect on stagnation depth of bubbles in a vertically oscillating liquid column,» *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 54, n. 5, 1976.
- [24] R. LaNauze e I. Harris, «Gas Bubble Formation at elevated system pressures,» *Trans. Inst. Chem. Eng.*, vol. 45, pp. 337-348, 1974.
- [25] N. Kazakis, I. Papadopoulos e A. Mouza, «Bubble columns with fine pore sparger operating in the pseudo-homogeneous regime: Gas hold up prediction and a criterion for the transition to the heterogeneous regime,» *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n. 12, pp. 3092-3103, 2007.
- [26] M. Iguchi, M. Kaji e Z.-I. Morita, «Effects of pore diameter, bath surface pressure, and nozzle diameter on the bubble formation from a porous nozzle,» *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 29, pp. 1209-1218, 1998.
- [27] S. Sasaki, K. Uchida, K. Hayashi e A. Tomiyama, «Effects of particle concentration and slurry height on gas holdup in a slurry bubble column,» *Journal of chemical engineering of Japan*, pp. 824-830, 01 September 2016.
- [28] S. Ojima e S. H. K. T. A. Sasaki, «Effects of particle diameter on bubble coalescence in a slurry bubble column,» *Journal of chemical engineering of japan*, vol. 48, n. 3, pp. 181-189, 2015.

- [29] B. Giorgio, P. Brazzale, A. Fiocca e F. Inzoli, «Estimation of bubble size distributions and shapes in two-phase bubble column using image analysis and optical probes,» *Flow Measurement and Instrumentation*, vol. 52, pp. 190-207, December 2016.
- [30] K. Ellingsen e F. Risso, «On the rise of an ellipsoidal bubble in water: oscillatory paths and liquid-induced velocity,» *Journal of Fluid Mechanics*, pp. 235-268, 10 August 2001.
- [31] V. V. Ranade, Computational flow modeling for chemical reactor engineering, Pune, India: Academic Press, 2002.
- [32] L. D. Marchisio e O. R. Fox, Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems, Cambridge University Press, 2013.
- [33] M. Laakkonen, V. Alopaeus e J. Aittamaa, «Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas–liquid dispersion in agitated vessel,» *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n. 1, pp. 218-228, 2006.
- [34] A. Vaidheeswaran e T. Hibiki, «Bubble-induced turbulence modeling for vertical bubbly flows,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 115, pp. 741-752, 2017.
- [35] E. Michta, «Modeling of subcooled nucleate boiling with openfoam,» Royal Institute of Technology, Stockholm, 2011.
- [36] H. Marschall, «Towards the Numerical Simulation of Multi-Scale Two-Phase Flows,» 2011.
- [37] A. Tomiyama, I. Kataoka, I. Zun e T. Sakaguchi, «Drag Coefficients of Single Bubbles under Normal and Micro Gravity Conditions,» *JSME International Journal*, vol. 41, n. 2, pp. 472-479, 1998.
- [38] M. Simonnet, C. Gentric, E. Olmos e N. Midoux, «Experimental determination of the drag coefficient in a swarm of bubbles,» *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n. 3, pp. 585-866, 2007.
- [39] Z. CAI, Y. BAO e Z. GAO, «Hydrodynamic Behavior of a Single Bubble Rising in Viscous Liquids,» *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 18, n. 6, pp. 923-930, 2010.
- [40] J. Richardson e W. Zaki, «The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow,» *Chemical Engineering Science*, vol. 3, n. 2, pp. 65-73, 1954.
- [41] S. Antal, R. Lahey Jr e J. Flaherty, «Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow,» *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 17, n. 5, pp. 635-652, September-October 1991.
- [42] T. Frank, «Advances in Computational Fluid Dynamics (CFD) of 3-dimensional Gas-Liquid Multiphase Flows,» NAFEMS Seminar "Simulation of Complex Flows (CFD)", Niedernhausen, Germany, 2005.

- [43] S. Hosokawa, A. Tomiyama, S. Misaki e T. Hamada, Lateral Migration of Single Bubbles Due to the Presence of Wall, 2002.
- [44] A. Gosman, C. Lekakou, S. Politis e R. L. M. Issa, «Multidimensional modeling of turbulent two-phase flows in stirred vessels,» *AIChE Journal*, vol. 38, n. 12, December 1992.
- [45] M. Lopez de Bertodano, R. Lahey Jr e O. Jones, «Turbulent bubbly two-phase flow data in a triangular duct,» *Nuclear Engineering and Design*, vol. 146, n. 1-3, p. February, 1994.
- [46] A. Burns, T. Frank, I. Hamill e J.-M. Shi, The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows, 2004.
- [47] K. Fu e H. Anglart, «Implementation and validation of two-phase boiling flow models in OpenFOAM,» 06 September 2017.
- [48] M. Ruzicka, «On buoyancy in dispersion,» *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n. 8, pp. 2437-2446, 2006.
- [49] R. Blazejewski, «Apparent viscosity and settling velocity of suspensions of rigid monosized spheres in Stokes flow,» *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 39, pp. 179-185, 2012.
- [50] Y. Shuai, L. Yufei, X. Liyang, Jiaming e Wu, «Improving Initial Guess for the Iterative Solution of Linear Equation Systems in Incompressible Flow,» *Mathematics*, pp. 1-20, 13 January 2020.
- [51] J. C. Greenshields, «OpenFOAM, The OpenFOAM Foundation,» 22 July 2020. [Online]. Available: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>.
- [52] H. Hikita, S. Asai, K. Tanigawa, K. Segawa e M. Kitao, «Gas Hold-up in Bubble Columns,» *The Chemical Engineering Journal*, vol. 20, n. 1, pp. 59-67, 1980.
- [53] K. Akita e F. Yoshida, «Gas Holdup and Volumetric Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns,» *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 12, n. 1, pp. 76-80, 1973.
- [54] D. Marchisio, J. Pikturna, R. O. Fox, D. Vigil e A. A. Barresi, «Quadrature Method of Moments for Population-Balance Equations,» *AIChE Journal*, vol. 49, n. 5, pp. 1266-1276, 2004.
- [55] H. Versteeg e W. Malalasekera, An Introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method, © Pearson Education Limited 1995, 2007.