

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

**Produzione di emulsione alimentari:
studio mediante fluidodinamica
computazionale e bilanci di popolazione**



Relatori

prof. Daniele Marchisio
prof. Gianluca Boccardo
prof. Antonio Buffo

Candidato
Simone Barberi

Dicembre 2020

Indice

Elenco delle figure	iii
Elenco delle tabelle	v
1 Introduzione	1
1.1 Emulsione Alimentare – Maionese	1
1.2 Obiettivo del lavoro di tesi	3
1.3 Struttura del lavoro	3
2 Background teorico	5
2.1 Leggi fondamentali della fluidodinamica	5
2.1.1 Ipotesi	6
2.1.2 Equazione di continuità	6
2.1.3 Equazione di Navier-Stokes	7
2.1.4 Legge reologica	7
2.1.5 Condizioni fluidodinamiche e Mixing Index	8
2.2 Bilancio di popolazione	9
2.2.1 Equazione di bilancio di popolazione	10
2.2.2 Coalescenza e rottura	11
2.2.3 Metodo di quadratura dei momenti (QMOM)	14
2.3 Ottimizzazione numerica computazionale	15
2.3.1 Particle Swarm Optimization (PSO)	15
2.3.2 Covariance matrix adaptation evolution strategy (CMA-ES)	17
3 Dettagli numerici e condizioni operative	19
3.1 Metodi di discretizzazione	19
3.1.1 Discretizzazione temporale	23
3.2 OpenFOAM	24
3.2.1 Struttura simulazione OpenFOAM	25
3.2.2 Solver OpenFOAM	28
3.3 Bilancio di popolazione	30
3.4 Simulazioni effettuate	32
3.4.1 Geometria	32
3.4.2 Condizioni operative	35
3.4.3 Condizioni al contorno	35

4	Risultati	37
4.1	Geometria	37
4.1.1	Grid indipendent study	37
4.1.2	3D vs 2D	42
4.2	Aspetti fluidodinamici	46
4.2.1	Campo di moto	46
4.2.2	<i>mixingindex</i> e <i>strain rate</i>	49
4.3	D32	51
4.3.1	Rapporto di viscosità 1 (nu.disp/nu.cont)	51
4.3.2	Rapporto di viscosità 2 (nu.disp/nu.emul)	53
4.3.3	Rapporto di viscosità 3	56
4.3.4	Incertezza nei dati sperimentali	58
5	Conclusioni	61
	Acronimi	63
	Bibliografia	65
	Ringraziamenti	67

Elenco delle figure

Figura 1-1 Rappresentazione schematica della struttura dell'emulsione alimentare	1
Figura 1-2 Immagine al microscopio della maionese (Dubbelboer et al., 2016)	2
Figura 2-1 Condizioni fluidodinamiche al variare del mixing index (Vasquez Giuliano, Lorenzo, 2019)	9
Figura 2-2 Variazione del numero di capillarità critico per simple shear flow (Lemenand et al., 2013)	12
Figura 2-3 Evoluzione sull'allungamento della particella a causa del moto elongazionale (Bentley and Leal, 1986)	13
Figura 2-4 Variazione del numero di capillarità critico per flusso elongazionale (Lemenand et al., 2013)	13
Figura 2-5 Evoluzione del particle swarm tra l'iterazione iniziale e quella finale. (Pagmo, 2017)	15
Figura 2-6 Algoritmo PSO (Yousefi et al., 2013)	16
Figura 2-7 Illustrazione dell'ottimizzazione effettuata attraverso il CMA-ES (Tan et al., 2019)	17
Figura 2-8 Strategia CMA-ES per l'ottimizzazione dei parametri (Gagganapalli, 2015)	18
Figura 3-1 Rappresentazione della suddivisione del dominio di calcolo in 3D(destra) 2D(sinistra) (de la Cruz and Monsivais, 2014)	20
Figura 3-2 Schema interpolazione First Order Upwind tra due celle	Errore. Il segnalibro non è definito.
Figura 3-3 Struttura caso OpenFoam (Christopher J. Greenshields, 2020)	25
Figura 3-4 Schema del processo di produzione dell'emulsione alimentare (Dubbelboer et al., 2016).	32
Figura 3-5 Rappresentazione cone mill mixer. (IKA process, n.d.)	33
Figura 3-6 Rappresentazione sezione centrale cone mill mixer (IKA process, n.d.)	33
Figura 3-7 Sezione del cone mill mixer	34
Figura 4-1 Contour plot della velocità assoluta in una sezione longitudinale del cone mill (65% wt%, Exp1)	38
Figura 4-2 Profilo di pressione all'interno del gap per mesh 10x150 (M1E1)	39
Figura 4-3 Profilo di pressione all'interno del gap per mesh 25x360 (M1E1)	40
Figura 4-4 Numero di vortici corrispondenti al numero di celle totali	40
Figura 4-5 Contour plot strain rate mesh 10x150 nel gap	41
Figura 4-6 Contour plot strain rate mesh 25x360 nel gap	41
Figura 4-7 Geometria in tre dimensioni del cone mill mixer	42
Figura 4-8 Geometria in 2D	43
Figura 4-9 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato all'imbocco del gap.	44
Figura 4-10 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato a metà altezza del gap.	44
Figura 4-11 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato allo sbocco del gap.	44

Figura 4-12 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato all'imbocco del gap.	44
Figura 4-13 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato a metà sezione del gap.	44
Figura 4-14 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato allo sbocco del gap.	45
Figura 4-15 Confronto geometria 2D e 3D (M3E1) valutato all'imbocco del gap.	45
Figura 4-16 Confronto geometria 2D e 3D (M3E1) valutato a metà sezione del gap.	45
Figura 4-17 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato allo sbocco del gap.	45
Figura 4-18 Contour plot rappresentante le strutture vorticose presenti nella precamera e nella postcamera.	47
Figura 4-19 Profilo di velocità assiale calcolato a metà altezza del gap per maionese con concentrazione pari a 0,7 kg/kg	48
Figura 4-20 Rappresentazione dei valori di mixing index e strain rate per la maionese con frazione in peso 0,65 kg/kg	50
Figura 4-21 Numero di Capillarità critico in funzione del rapporto di viscosità in simple shear flow	53
Figura 4-22 Countour plot per M2E3 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)	55
Figura 4-23 Countour plot per M2E4 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)	55
Figura 4-24 Countour plot per M1E1 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)	56
Figura 4-25 Numero di capillarità critico per simple shear flow (rosso) e flusso elongazionale (verde)	57
Figura 4-26 Influenza dei parametri di rotor speed, volume fraction, flow rate e ampiezza del gap sul valore di d_{32}	58

Elenco delle tabelle

Tabella 3.1 Schemi numerici implementati per la risoluzione delle simulazioni CFD	26
Tabella 3.2 Principali parole chiave Time Directories	28
Tabella 3.3 Principali solver OpenFOAM e loro applicazione	29
Tabella 3.4 Variabili implementate nel modello di predizione dei dati sperimentali	31
Tabella 3.5 Condizioni operative	35
Tabella 3.6 Condizioni al contorno	36
Tabella 4.1 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,65 kg/kg (65% wt%)	38
Tabella 4.2 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,7 kg/kg (70% wt%)	39
Tabella 4.3 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,75 kg/kg (75% wt%)	39
Tabella 4.4 Numero di Reynolds massimo per le simulazioni effettuate	47
Tabella 4.5 Predizione d32 del modello per solo simple shear flow	51
Tabella 4.6 Predizione d32 del modello per solo campo elongazionale	52
Tabella 4.7 Predizione d32 del modello per simple shear flow e moto elongazionale	52
Tabella 4.8 Predizione d32 del modello per solo simple shear flow	53
Tabella 4.9 Predizione sul d32 per simple shear flow and elongational flow	54
Tabella 4.10 Predizione sul d32 per simple shear flow and elongational flow rapporto di viscosità 3	57
Tabella 4.11 Parametri implementati nel modello e risultati sperimentali	59

1 Introduzione

In questo capitolo introduttivo, verrà descritto sinteticamente lo stato dell'arte e gli aspetti fondamentali relativi al presente lavoro di tesi. Il capitolo sarà quindi suddiviso nei seguenti paragrafi:

- Emulsione alimentare - Maionese
- Obiettivi tesi
- Struttura del lavoro

1.1 Emulsione Alimentare – Maionese

L'emulsione è una miscela bifasica stabile costituita da due liquidi altrimenti immiscibili tra loro ed è un sistema rilevante nel campo alimentare e farmaceutico. Una emulsione alimentare è generalmente formata da due fasi: la fase continua o disperdente e la fase discontinua o dispersa. La fase dispersa è sottoforma di goccioline sferiche con diametro dell'ordine dei micrometri (μm), separate per mezzo della fase continua. La figura 1-1 rappresenta la struttura schematica dell'emulsione alimentare.

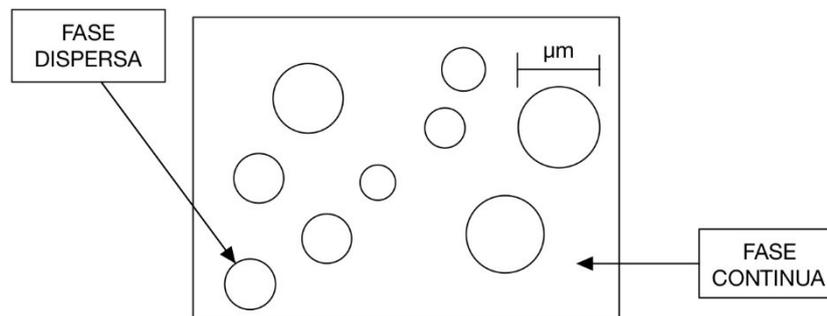


Figura 1-1 Rappresentazione schematica della struttura dell'emulsione alimentare

Esistono principalmente due tipi di emulsioni: l'emulsione diretta e l'emulsione inversa. Nell'emulsione diretta la fase disperdente è l'acqua, mentre la fase dispersa è l'olio. Nell'emulsione inversa invece si parla di dispersione della fase acquosa in olio, di cui un classico esempio è il burro.

Le emulsioni risultano essere termodinamicamente instabili. Infatti, le particelle disperse tendono a coalescere tra loro e a formare due fasi distinte. Al fine di evitare l'aggregazione tra le particelle è necessario aggiungere un agente emulsionante in grado di inserirsi nell'interfaccia liquido-liquido formando un film monomolecolare e garantire la stabilità (Amalia D'Amore, 2008).

Il processo per l'ottenimento dell'emulsione alimentare avviene principalmente attraverso l'agitazione meccanica che causa la rottura delle particelle della fase dispersa.

La maionese, l'emulsione alimentare oggetto di questo studio, è conosciuta in tutto il mondo. È stata per anni studiata e prodotta da numerose industrie, dato il crescente consumo nelle applicazioni alimentari. La maionese è un'emulsione liquido-liquido stabile in cui la fase continua è acqua e la fase dispersa è l'olio. L'agente emulsionante utilizzato per la stabilizzazione della maionese è il tuorlo d'uovo pastorizzato. Possono essere presenti, inoltre, altri ingredienti come aceto, sale e succo di limone. Un rischio molto comune nei processi di produzione della maionese è l'inversione delle fasi, nella quale si ottiene la dispersione di acqua in olio (Widerstrom, 2017). La stabilità dipende da numerosi fattori come, per esempio, la grandezza delle particelle che compongono la fase dispersa, l'agitazione, la temperatura e la differenza di densità tra le due fasi (Amalia D'Amore, 2008). In generale la concentrazione può essere espressa come frazione massica o volumetrica della parte dispersa sulla parte disperdente.

Gli ingredienti principali della maionese sono olio, tuorlo d'uovo, aceto, sale e acqua. L'olio è l'ingrediente principale e dalle sue caratteristiche dipende la qualità della maionese. Maggiore è la quantità di olio presente nell'emulsione e più pronunciato sarà il comportamento viscoelastico (Widerstrom, 2017). Il tuorlo d'uovo viene utilizzato come agente stabilizzante dato il suo alto contenuto in lipoproteine a bassa densità (LDL) e livotine. L'effetto del tuorlo d'uovo presente nella maionese è quindi di aumentare le repulsioni steriche ed elettrostatiche. L'aceto è utilizzato principalmente nel processo di produzione della maionese per conferire sapore all'alimento. La figura 1-2 mostra un'immagine al microscopio della maionese.

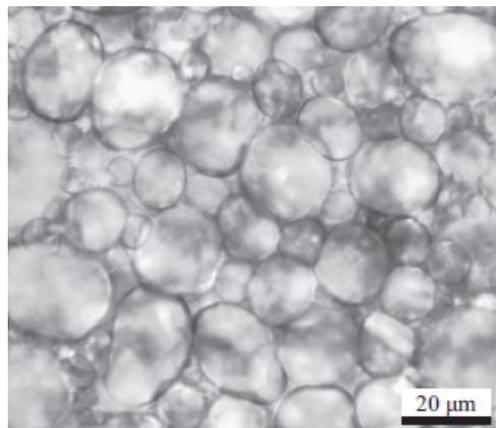


Figura 1-2 Immagine al microscopio della maionese (Dubbelboer et al., 2016)

Il processo industriale di produzione della maionese è suddiviso in due fasi. Il primo stadio consiste nella miscelazione in un grosso recipiente dei diversi ingredienti. In questa prima fase del processo di emulsificazione, l'olio viene lentamente aggiunto alla fase acquosa per formare l'emulsione (Dubbelboer et al., 2016). Nel secondo stadio, la miscela, nel quale è stato aggiunto anche l'aceto, passa attraverso un *cone mill mixer*, dove l'alta velocità tangenziale che si sviluppa nell'apparecchiatura appositamente progettata, rompe le goccioline di olio e permette il raggiungimento di una dimensione adeguata a garantirne la stabilità. La *droplet size distribution* (DSD) è la descrizione statistica della dimensione delle goccioline della fase dispersa: è un parametro molto importante perché molte proprietà dell'emulsione come la struttura, la stabilità, il gusto e il colore dipendono da esso (Williams, 2001). Poiché questa particolare distribuzione influenza profondamente le caratteristiche dell'emulsione risulta

necessario studiare in modo approfondito i fenomeni che la influenzano, come il processo di rottura e di coalescenza delle particelle.

1.2 Obiettivo tesi

L'obiettivo di questo lavoro di tesi è la simulazione del secondo step del processo di produzione della maionese. L'effetto sulle proprietà della maionese del primo step risulta trascurabile ai fini del calcolo del diametro di Sauter (Almeida-Rivera and Bongers, 2010). La modellizzazione del processo di emulsificazione è un argomento che è stato studiato in diversi articoli accademici (Maindarkar et al., 2014a) (Wieringa JA et al., 1996) (Almeida-Rivera and Bongers, 2010). In particolare, nelle conclusioni del lavoro di Almeida-Rivera risulta necessaria l'investigazione del campo di moto relativo alla geometria del *cone mill mixer* e la caratterizzazione dei vortici di Taylor sviluppati nel piccolo divario presente tra il rotore e lo statore. In questo lavoro di tesi, l'accoppiamento di Computational Fluid Dynamics (CFD) e Population Balance Model (PBM) ha portato a ricavare la dimensione caratteristica delle goccioline di olio disperse nella fase acquosa dell'emulsione alimentare, considerando anche gli aspetti relativi alla fluidodinamica.

Le simulazioni di fluidodinamica computazionale eseguite attraverso il software OpenFOAM (versione 7), sono state eseguite per la descrizione della dinamica relativa al comportamento non-newtoniano dell'emulsione. Attraverso l'utilizzo dei dati ricavati dalle simulazioni CFD è stato possibile risolvere l'equazione di bilancio di popolazione (PBE) e ricavare l'evoluzione della DSD. Per la risoluzione del PBM è stato utilizzato il metodo di quadratura dei momenti (QMOM) tenendo conto sia dei fenomeni di rottura delle particelle che dei fenomeni di coalescenza. I fenomeni di coalescenza sono stati trascurati nei precedenti lavori (Wieringa JA et al., 1996) (Almeida-Rivera and Bongers, 2010).

I risultati dell'approccio utilizzato in questo lavoro di tesi per la predizione del comportamento dell'emulsione alimentare sono stati confrontati con il lavoro sperimentale di Dubbelboer (Dubbelboer et al., 2016) (Dubbelboer, 2016).

1.3 Struttura del lavoro

Il lavoro è stato suddiviso in quattro capitoli. Il presente primo capitolo è un'introduzione generale sulle caratteristiche relative alle emulsioni alimentari e l'obiettivo del seguente lavoro di tesi. Nel capitolo secondo sono analizzati gli aspetti teorici fondamentali e le equazioni implementate per l'ottenimento dei risultati di CFD e PBM. Nel capitolo terzo vengono descritti i metodi numerici e gli strumenti utilizzati per la realizzazione del presente lavoro di tesi. Vengono anche specificati i dettagli relativi alla geometria e le condizioni iniziali utilizzate per la risoluzione del campo di moto in OpenFOAM. Il capitolo quarto presenta i principali risultati ottenuti, con particolare attenzione alla predizione dei dati sperimentali. Infine, saranno presentate le conclusioni e alcuni suggerimenti per il miglioramento del modello di predizione.

2 Background teorico

Il capitolo secondo riguarda i principi fondamentali teorici che sono alla base del presente lavoro di tesi. La conoscenza di queste nozioni teoriche è necessaria per comprendere pienamente i risultati ottenuti e presentati nel capitolo finale.

In particolare, questo capitolo verrà diviso in tre sezioni. Nella prima sezione vengono analizzate le equazioni alla base della risoluzione dei modelli fisici e gli strumenti teorici utilizzati per la caratterizzazione del campo di moto.

Nella seconda sezione si approfondiranno gli aspetti fondamentali relativi all'evoluzione della popolazione di gocce di olio disperse in acqua, trattata tramite equazioni di bilancio di popolazione; particolare attenzione verrà data ai meccanismi di rottura e coalescenza delle gocce.

Nella terza parte è proposta una panoramica degli algoritmi di ottimizzazione utilizzati per ottenere i parametri numerici presenti nel modello.

2.1 Leggi fondamentali della fluidodinamica

Per descrivere in modo appropriato il moto dei fluidi occorre conoscere le leggi fondamentali alla base dei fenomeni di trasporto. Le leggi fondamentali o equazioni di governo sono espresse in termini di equazioni differenziali alle derivate parziali e vengono risolte attraverso l'uso di algoritmi e schemi numerici come descritto nel capitolo terzo.

In questo paragrafo saranno presentate in modo sintetico le principali equazioni utilizzate per la descrizione del campo di moto di un fluido. In particolare, l'equazione di continuità (Sottoparagrafo 2.1.2) e l'equazione di Navier-Stokes (Sottoparagrafo 2.1.3). Queste descrivono le quantità rilevanti nel moto di un fluido: pressione, velocità e densità, e sono basate su leggi di conservazione. Particolare attenzione è da dedicare alle ipotesi semplificative (Sottoparagrafo 2.1.1) che hanno una duplice funzione: riducono la complessità del modello e facilitano la descrizione del sistema reale.

Il fluido analizzato in questo lavoro di tesi, come visto nell'Introduzione, è un'emulsione alimentare di olio in un liquido acquoso, che alla fine del processo diventerà maionese. La maionese presenta un comportamento non-Newtoniano, ovvero un comportamento nel quale la velocità di deformazione del fluido non dipende in maniera lineare dallo sforzo di taglio applicato. Per questo motivo è necessario utilizzare una legge reologica in grado di descrivere il comportamento non newtoniano dell'emulsione alimentare (Sottoparagrafo 2.1.4).

La conoscenza del campo di moto sviluppato all'interno della geometria influisce sui fenomeni di coalescenza e rottura che caratterizzano il bilancio di popolazione. Per questo motivo sono state analizzate le condizioni fluidodinamiche, con particolare attenzione al concetto di *mixing index* (sottoparagrafo 2.1.5).

La trattazione nei sottoparagrafi successivi è una sintesi della teoria relativa ai fenomeni di trasporto menzionati, per una maggiore e più approfondita documentazione è possibile consultare articoli e libri presenti in letteratura (Bird, 2002).

2.1.1 Ipotesi

In questo paragrafo vengono presentate le ipotesi per la risoluzione delle equazioni differenziali alle derivate parziali relative alla maionese.

Il fluido è trattato come un fluido incomprimibile, avente densità che in buona approssimazione può essere considerata costante.

Un'altra ipotesi considerata è l'ipotesi del continuo. I fluidi sono costituiti da molecole che possono collidere tra di loro, ed il loro cammino libero medio è la distanza che ogni particella percorre tra due urti successivi. Nel caso in cui il cammino libero medio molto minore rispetto allo spazio a disposizione del fluido per scorrere, il fluido viene considerato come un'entità continua. Lo spazio disponibile al moto del fluido nella geometria analizzata in questo lavoro di tesi risulta essere molto maggiore rispetto al cammino libero medio, quindi l'ipotesi del continuo può essere considerata valida.

La maionese, come menzionato, risulta essere un fluido non-Newtoniano, dove la viscosità varia al variare dello sforzo di taglio applicato. Per questo motivo è stata implementata una legge reologica ricavata da dati sperimentali che tiene conto della variazione della viscosità in relazione allo sforzo di taglio.

Un'ultima approssimazione è di trattare l'emulsione alimentare in questione, che è un sistema multifase di gocce di olio disperse in una fase continua acquosa, come un sistema monofasico. La maionese, infatti, è considerata in questa trattazione come un fluido *pseudo-single phase*.

2.1.2 Equazione di continuità

L'equazione di continuità viene ricavata attraverso un bilancio di massa su un elemento di volume fisso nello spazio. Il principio fisico sul quale si basa è infatti la conservazione della massa. (Bird, 2002)

L'equazione di continuità nella sua forma indiciale più generale risulta essere la seguente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (2.1)$$

dove ρ è la densità del liquido (kg/m^3), U_i è la componente i -esima della velocità del fluido (m/s) e t è il tempo (s).

Il primo termine dell'equazione assume il significato di tasso di aumento della massa per unità di volume. Il secondo termine, invece, è relativo alla differenza tra la massa che esce e la massa che entra nel volume di controllo. Esso, quindi, rappresenta un flusso netto provocato da meccanismi di convezione.

Nel caso di fluido incomprimibile, l'equazione si semplifica poiché la densità risulta costante. L'equazione di continuità si riduce alla seguente condizione:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

che risulta essere, nel sistema di riferimento cartesiano:

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

In quest'ultima derivazione dell'equazione di continuità è possibile notare che la variazione di velocità lungo la direzione x, la variazione di velocità lungo y e quella lungo z risultano essere bilanciate e la loro somma è pari a zero. Il vincolo quindi espresso dall'equazione di continuità per un fluido incomprimibile è relativo alla sola velocità del flusso.

2.1.3 Equazione di Navier-Stokes

L'equazione di Navier-Stokes è un'equazione differenziale alle derivate parziali non lineare. Il nome deriva dai due scienziati che ne hanno ricavato la relazione: Claude-Louis Navier e George Stokes. Essa descrive il comportamento di un fluido alla scala macroscopica. Il principio fisico dal quale si ottiene l'equazione di Navier-Stokes è il bilancio della quantità di moto per unità di massa del fluido.

L'equazione di Navier-Stokes per un fluido incomprimibile e newtoniano è la seguente:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.4)$$

dove ν è la viscosità cinematica (m^2/s), calcolata come il rapporto tra la viscosità dinamica e la densità.

L'equazione (2.4) è un caso particolare ricavato dal bilancio di quantità di moto che si presenta considerando la densità e la viscosità costanti. È importante notare i termini che compongono l'equazione. Il primo termine è il termine di accumulo, il secondo termine rappresenta il trasporto convettivo di quantità di moto, il terzo è identificativo delle forze agenti sul fluido, mentre l'ultimo termine è lo sforzo viscoso e rappresenta il trasporto molecolare/diffusivo.

2.1.4 Legge reologica

L'equazione di Navier-Stokes analizzata nel sottoparagrafo precedente presenta un valore di viscosità che è costante. La maionese però è un fluido non-Newtoniano nel quale la viscosità non può essere considerata costante. Al fine di considerare il comportamento non-Newtoniano dell'emulsione alimentare è necessario ricorrere ad una legge reologica che descriva la variazione della viscosità in relazione allo sforzo di taglio applicato.

La legge reologica implementata nell'equazione di Navier-Stokes è la seguente:

$$\frac{\eta_{emul}}{\eta_c} = \eta_r = \eta_{r,\infty} + K \dot{\gamma}^m \quad (2.5)$$

dove η_r è una misura adimensionata della viscosità, calcolata come si può notare dall'equazione (2.5) come rapporto tra la viscosità apparente dell'emulsione e la viscosità della fase continua; $\eta_{r,\infty}$ è un valore limite di viscosità calcolato per alti valori di sforzo di taglio e $\dot{\gamma}$ è la velocità di deformazione (*strain rate*). I valori di K , m , e $\eta_{r,\infty}$ sono valori che dipendono dalla concentrazione di olio e sono stati estrapolati da un adattamento di risultati sperimentali. Al fine di ricavare i parametri della curva rappresentata dall'equazione (2.5) è stato utilizzato un reometro a piastre parallele e un viscosimetro capillare. (Dubbelboer et al., 2016)

2.1.5 Condizioni fluidodinamiche e Mixing Index

Al fine di valutare il giusto meccanismo di rottura delle particelle all'interno della geometria del *cone mill mixer* è necessario conoscere le condizioni fluidodinamiche della maionese. Il tipo di moto che si sviluppa all'interno di geometrie coniche sottoposte a rotazione può essere:

- flusso di taglio semplice;
- flusso elongazionale o irrotazionale;
- flusso di pura rotazione.

Il parametro utilizzato per valutare a quale di questi tre campi di moto appartiene il flusso è il *mixing index* (MI). In particolare, il *mixing index* definisce il peso della componente elongazionale nel campo di moto ed è valutato attraverso la seguente formula (Vasquez Giuliano, Lorenzo, 2019):

$$MI = \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma} + \tilde{\omega}} \quad (2.6)$$

dove $\dot{\gamma}$ è la velocità di deformazione (*strain rate*) e $\tilde{\omega}$ rappresenta la vorticità.

Il parametro $\dot{\gamma}$ può essere calcolato conoscendo il valore del gradiente di velocità in ogni punto e più precisamente la sua componente simmetrica, il tensore D , calcolato come:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 \frac{\partial U_x}{\partial x} & \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} & \frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \\ \frac{\partial U_y}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial y} & 2 \frac{\partial U_y}{\partial y} & \frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y} \\ \frac{\partial U_z}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial z} & \frac{\partial U_z}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial z} & 2 \frac{\partial U_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Il secondo invariante del tensore D che descrive la deformabilità del fluido è calcolato come:

$$II_D = \frac{1}{2} (tr(D)^2 - tr(D^2)) \quad (2.8)$$

Dall'equazione (2.8) è possibile ricavare il parametro di *strain rate* che risulta essere proporzionale alla radice quadrata del secondo invariante del tensore **D**. Infatti:

$$\dot{\gamma} = 2\sqrt{II_D} \quad (2.9)$$

Il parametro di vorticità invece rappresenta la componente antisimmetrica del gradiente di velocità (Vasquez Giuliano, Lorenzo, 2019) . La figura 2-1 è una raffigurazione delle diverse condizioni di moto associate al parametro *mixing index*.

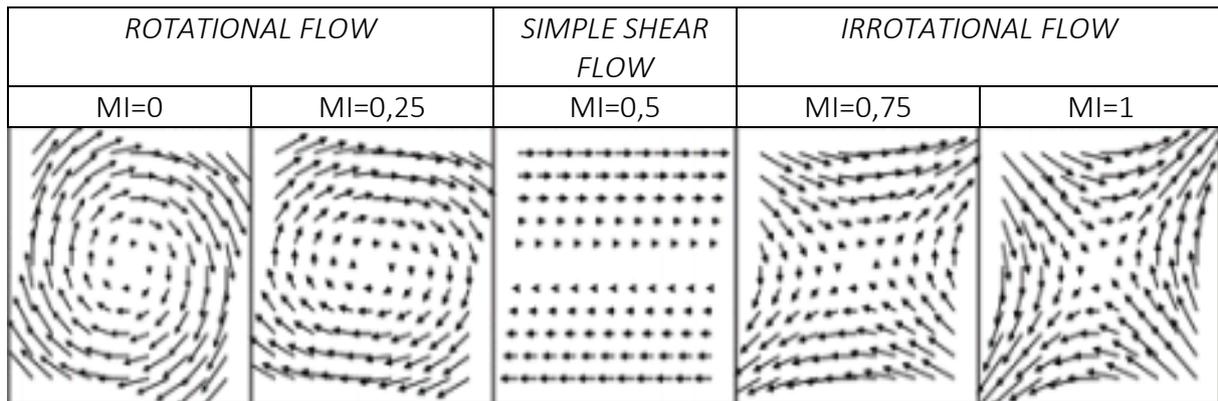


Figura 2-1 Condizioni fluidodinamiche al variare del *mixing index* (Vasquez Giuliano, Lorenzo, 2019)

2.2 Bilancio di popolazione

Per ricavare informazioni dettagliate sulla distribuzione e sulla dimensione delle particelle di olio presenti nella maionese è necessario ricorrere al Modello di Bilancio di Popolazione (PBM). La trattazione sarà quindi suddivisa in tre sezioni.

In primo luogo, viene analizzata l'equazione che governa il PBM, chiamata Equazione del Bilancio di Popolazione (PBE) che è in grado di valutare in un sistema di particelle l'evoluzione della distribuzione della dimensione delle particelle; questo avviene generalmente secondo diversi meccanismi: nucleazione, crescita molecolare, aggregazione e rottura. (Marchisio et al., 2003b). Nel caso in esame in questo lavoro verrà considerato l'effetto della coalescenza e della rottura delle gocce.

In secondo luogo, viene analizzato il meccanismo di coalescenza e rottura in un sistema di gocce. Considerando le condizioni fluidodinamiche presentate nel paragrafo 2.1.5 ed in particolare al concetto di *mixing index* è possibile valutare il giusto meccanismo di rottura delle particelle e di conseguenza attraverso l'uso del metodo di quadratura dei momenti (QMOM) risolvere il bilancio di popolazione in modo appropriato.

Infine, verrà descritto quest'ultimo metodo, che permette di risolvere il problema di chiusura utilizzando un'approssimazione di quadratura. L'utilizzo di questo metodo è necessario poiché le simulazioni fluidodinamiche risulterebbero troppo onerose in termini di risorse computazionali.

2.2.1 Equazione di bilancio di popolazione

Le emulsioni alimentari, come ad esempio la maionese, sono un sistema liquido-liquido nel quale si ha una fase continua e una fase dispersa, rappresentata in questo caso dalle gocce di olio, che possono andare incontro a fenomeni di coalescenza e rottura. L'equazione di bilancio di popolazione (PBE) viene utilizzata per descrivere la *droplet-size distribution* (DSD), ovvero la distribuzione statistica della dimensione delle particelle. Poiché molte proprietà delle emulsioni dipendono dalla DSD, come ad esempio la stabilità (e quindi la *shelf-life* nel caso di un prodotto alimentare), la struttura, il gusto e il colore, è necessario dedicare particolare attenzione a questa informazione (Williams, 2001).

Assumendo lo stato stazionario e non considerando dipendenze da spazio e tempo, l'equazione relativa al bilancio di popolazione può essere scritta nel seguente modo (Ramkrishna, 2000):

$$\nabla \cdot (U \cdot n(L)) = S(L) \quad (2.10)$$

dove $n(L)$ rappresenta la *number density function* (NDF), L è la dimensione caratteristica relativa alla dimensione delle particelle di olio disperse nell'emulsione e $S(L)$ è il termine sorgente.

La NDF come si può notare dall'equazione (2.10) dipende dalla dimensione caratteristica ed è un parametro utilizzato per esprimere la DSD (Li et al., 2017).

La dimensione caratteristica può essere espressa in diversi modi, nel caso in esame si utilizza il diametro delle particelle di olio.

Il termine $S(L)$ è il termine sorgente che può essere scritto nel seguente modo:

$$\begin{aligned} S(L) = & \frac{L^2}{2} \int_0^L \frac{a((L^3 - L'^3), L')}{(L^3 - L'^3)^2} n((L^3 - L'^3)^{1/3}) n(L') dL' \\ & - n(L) \int_0^\infty a(L, L') n(L') dL' \\ & + \int_L^\infty g(L') \beta(L|L') n(L') dL' - g(L) n(L) \end{aligned} \quad (2.11)$$

dove $a(L, L')$ è il kernel di aggregazione, $g(L)$ è il kernel di rottura e $\beta(L|L')$ rappresenta la *daughter-size distribution function*, che descrive la rottura di una particella madre, di dimensione caratteristica L , dalla quale si originano in modo simmetrico due particelle figlie di dimensione caratteristica L' uguali tra di loro.

Il termine sorgente tiene conto della rottura e coalescenza delle particelle attraverso l'uso di opportuni parametri, chiamati *Kernel*. I kernel di aggregazione possono essere di due tipi: kernel di aggregazione browniano (rilevante per le particelle di piccole dimensioni) e kernel di aggregazione turbolento (moto turbolento che produce aggregazione). L'aggregazione è causata dalla collisione di due particelle che si uniscono per formarne una nuova più grande. I kernel di rottura servono a quantificare la rottura delle particelle a causa delle forze meccaniche esterne e le forze viscosive interne. La rottura delle particelle è causata da fenomeni di stretch, elongazione e divisione delle particelle (Marchisio et al., 2003b). Le equazioni relative a questi

due parametri saranno analizzate nel sottoparagrafo relativo alla coalescenza e rottura (sottoparagrafo 2.2.2).

Il parametro $\beta(L|L')$ assume la seguente forma:

$$\beta(L|L') = 180 \left(\frac{L^2}{L'^3} \right) \left(\frac{L^3}{L'^3} \right)^2 \left(1 - \frac{L^2}{L'^3} \right)^2 \quad (2.12)$$

La *daughter-size distribution* rappresenta la distribuzione dimensionale delle particelle originate da eventi di rottura. È importante ricordare che la scelta del parametro $\beta(L|L')$ ha un impatto importante sul valore di DSD, ma ha un impatto minimo sul diametro di Sauter utilizzato per valutare la DSD in questo lavoro poiché quest'ultimo viene ottenuto dai momenti della DSD. (Buffo et al., 2013)

2.2.2 Coalescenza e rottura

Il termine sorgente presente nella PBE, descritto nel paragrafo 2.2.1, è formato da diversi fattori tra cui il kernel di aggregazione e il kernel di rottura.

Il kernel di aggregazione quantifica il tasso di aggregazione ed ha seguente forma (Maindarkar et al., 2014b):

$$C(L|L') = K_1 \frac{\pi}{6} \left(\frac{\dot{\gamma}}{1 - \phi_V} \right) (L + L'^3) \exp \left(-K_2 \lambda Ca^{2/3} \left(\frac{8\pi\sigma R_{eq}^2}{A_H} \right)^{1/3} \right) \quad (2.13)$$

Il termine relativo al kernel di rottura, invece, ha la seguente forma (Maindarkar et al., 2014b):

$$g(L) = K_3 \dot{\gamma} \exp \left(-K_4 \frac{Ca}{Ca_{crit}} \right) \quad (2.14)$$

dove K_1, K_2, K_3, K_4 sono parametri ricavabili da dati sperimentali, ϕ_V è la frazione volumetrica di olio, A_H è la costante di Hamaker, λ è il rapporto tra viscosità dell'olio e la viscosità della fase continua, R_{eq} è il raggio equivalente delle particelle di diametro tra L e L' e σ è la tensione interfacciale, che nel caso in esame si può assumere sia costante. La costante di Hamaker è un parametro che quantifica l'interazione tra due particelle.

Il raggio equivalente viene calcolato attraverso la seguente formula:

$$R_{eq} = \frac{2}{\left(\frac{2}{L} + \frac{2}{L'} \right)} \quad (2.15)$$

Un altro elemento particolare che compare nelle equazioni (2.12) e (2.13) è il numero di capillarità. Il numero di capillarità viene definito come:

$$Ca = \frac{\eta_{emul} \dot{\gamma} L}{2\sigma} \quad (2.16)$$

dove η_{emul} è la viscosità apparente dell'emulsione e $\dot{\gamma}$ è lo *strain rate*.

Il numero di capillarità è molto importante perché definisce la stabilità delle particelle. Nel momento in cui raggiunge il valore limite Ca_{crit} , chiamato numero di capillarità critico, si ha la rottura delle particelle seguendo l'equazione relativa alle particelle *daughter-size distribution function* (DSD), esaminata nel sottoparagrafo precedente.

In letteratura è possibile trovare due diversi meccanismi per la valutazione del numero di capillarità critico in base al tipo di flusso sviluppato all'interno della geometria (Lemenand et al., 2013) (Gracet, 1982) (Zhao, 2007) (Bentley and Leal, 1986). In particolare, il numero di capillarità critico dipende dal tipo di moto sviluppato nel dominio del fluido (Sottoparagrafo 2.1.5).

Nel caso di *simple shear flow* il numero di capillarità critico è stato determinato sperimentalmente, tramite la seguente relazione:

$$\log_{10}(Ca_{crit}) = -0.506 - 0.0994 \log_{10}(\lambda) + 0.124 (\log_{10}(\lambda))^2 \quad (2.17)$$

$$- \frac{0.0115}{\log_{10}(\lambda) - 0.611}$$

dove λ rappresenta il rapporto tra la viscosità cinematica della fase dispersa e la viscosità cinematica della fase continua.

La sua formulazione è il risultato di un esperimento effettuato in una geometria con due cilindri concentrici, geometria molto simile al *cone mill mixer* (Gao et al., 2016). Esistono però delle limitazioni relative all'uso di questa espressione. Infatti, essa è valida nel caso il cui $\lambda < 4$ e per flussi senza instabilità di Taylor. In questa trattazione, il rapporto tra le viscosità risulta essere leggermente superiore rispetto al valore limite, per questo motivo è stato utilizzato come λ il rapporto tra la viscosità della fase continua e la viscosità dell'emulsione. La seconda assunzione è valida per la maggior parte delle condizioni operative analizzate. La figura 2-2 mostra il grafico relativo al numero di capillarità critico.

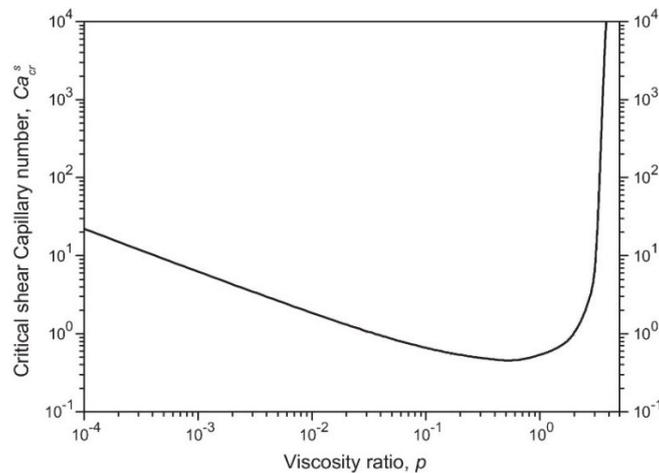


Figura 2-2 Variazione del numero di capillarità critico per *simple shear flow* (Lemenand et al., 2013)

Nel caso di flusso elongazionale la rottura avviene nel momento in cui si raggiunge in valore limite di capillarità critico a causa dell'allungamento della particella. La figura 2-3 mostra il tipo di rottura nel caso di flusso elongazionale.

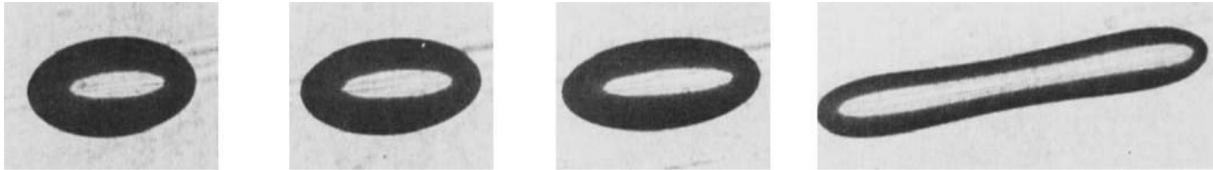


Figura 2-3 Evoluzione sull'allungamento della particella a causa del moto elongazionale (Bentley and Leal, 1986)

L'equazione relativa al numero di capillarità critico nel caso di moto elongazionale è la seguente:

$$Ca_{crit} = \frac{0,145\lambda^{-\frac{1}{6}}}{(\alpha)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.18)$$

dove α è il rapporto tra *strain rate* e vorticità e λ è il rapporto tra le viscosità relative alla fase continua e fase dispersa.

Il parametro α rappresenta il rapporto tra l'ampiezza del tensore della velocità di deformazione e quello della vorticità (Bentley and Leal, 1986). Il parametro α può assumere i seguenti valori:

- $\alpha = 1$ flusso irrotazionale
- $\alpha = 0,5$ *simple shear flow*
- $\alpha = 0$ flusso di pura rotazione

L'equazione (2.17) è verificata, infatti, solo per $\alpha > 0,2$ ovvero quando si è in campo irrotazionale. La figura 2-4 mostra l'andamento del numero di capillarità critico in funzione di λ .

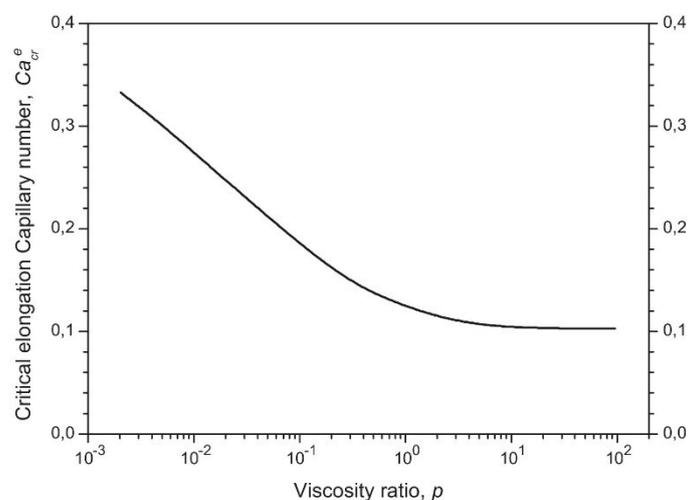


Figura 2-4 Variazione del numero di capillarità critico per flusso elongazionale (Lemenand et al., 2013)

2.2.3 Metodo di quadratura dei momenti (QMOM)

Il metodo di quadratura dei momenti (QMOM) è un sistema grazie al quale è possibile risolvere in modo numerico l'equazione di bilancio di popolazione. L'applicazione di questo metodo porta a vantaggi computazionali, sia a livello di tempo che a livello di risorse. L'approccio è quello di approssimare la distribuzione, che deve essere sotto forma di *number density function* (NDF), ad una sommatoria della funzione delta di Dirac (Marchisio et al., 2003a). È possibile quindi approssimare la funzione $n(L)$, che rappresenta la *droplet-size distribution* utilizzando la seguente espressione per i momenti:

$$M_q = \int_0^{+\infty} n(L)L^q dL \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha} L_{\alpha}^q \quad q \in 0, \dots, 2N - 1 \quad (2.19)$$

dove $n(L)$ è la DSD, L rappresenta la dimensione caratteristica, ω_{α} sono gli N pesi di quadratura e L_{α} sono le N ascisse di quadratura.

I pesi e le ascisse sono determinati con l'algoritmo prodotto-differenza (PD) dai momenti di basso ordine. Il principio sul quale si basa l'algoritmo infatti è la minimizzazione dell'errore commesso nel momento in cui si sostituisce all'integrale la funzione di approssimazione (Marchisio et al., 2003b).

Al fine di costruire con questo metodo di quadratura un'approssimazione di ordine N sono necessari $2N$ momenti (Marchisio et al., 2003a). In questa trattazione l'ordine di approssimazione è pari a 3 e sono quindi stati utilizzati 6 momenti per descrivere la funzione relativa alla distribuzione delle particelle. Questi risultano comunque sufficienti per avere una buona approssimazione e l'errore può essere considerato trascurabile. (Marchisio et al., 2003b)

Attraverso, quindi, il metodo di quadratura dei momenti (QMOM) applicato all'equazione (2.10) è possibile risolvere la seguente equazione di trasporto:

$$\nabla \cdot (U M_q) = S_q \quad (2.20)$$

dove S_q è il termine di generazione di ordine q .

Le proprietà integrali della DSD sono rappresentate dai suoi momenti., Il momento di ordine zero, M_0 , rappresenta il numero di particelle di olio per unità di volume e il momento di ordine tre, M_3 , rappresenta la frazione volumetrica di olio. Da questi viene estratto un parametro integrale per caratterizzare la DSD: il diametro medio di Sauter. Questo è rappresentato dalla seguente equazione:

$$d_{32} = \frac{M_3}{M_2} \quad (2.21)$$

che indica il rapporto del momento di ordine tre (M_3) e il momento di ordine due (M_2). È evidente notare che l'unità di misura è quella di una lunghezza [m].

2.3 Ottimizzazione numerica computazionale

L'ottimizzazione numerica è un processo matematico attraverso il quale si individua il valore di parametri variabili che portano alla soluzione di una relazione specifica, usualmente una funzione di minimizzazione (o massimizzazione). È una metodologia utilizzata in diversi campi come informatica, ingegneria, ed economia. (Gershenfeld and Gershenfeld, 1999).

Al fine di ricavare i valori ottimali di K_1, K_2, K_3, K_4 presenti nelle equazioni relative ai kernel di coalescenza e aggregazione (equazioni 2.12 e 2.13) sono stati utilizzati degli algoritmi iterativi di ottimizzazione computazionale. Il *data fitting* è un processo nel quale tramite l'implementazione di un algoritmo vengono scelti i migliori valori di un set di parametri che soddisfano un determinato criterio. Nel nostro caso la funzione da minimizzare è quella che descrive la distanza tra i risultati numerici e i dati sperimentali disponibili (e che quindi valuta la bontà del modello computazionale).

In questo capitolo verranno analizzati due diversi tipi di algoritmi di ottimizzazione numerica: PSO (Particle Swarm Optimization) e il CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy).

2.3.1 Particle Swarm Optimization (PSO)

L'intelligenza artificiale (AI) è l'abilità del computer di imparare attraverso dati e osservazioni sperimentali. Il Particle Swarm Optimization (PSO) è un algoritmo evolutivo euristico di AI utilizzato per la risoluzione di problemi matematici molto complessi (Siddique and Adeli, 2013).

Il problema viene risolto attraverso l'uso di una popolazione di soluzioni candidate che vengono iterativamente testate sulla funzione obiettivo. Ogni "particella" (cioè ogni specifico set di parametri) all'interno del *particle swarm* ha una sua posizione che rappresenta la potenziale soluzione nello spazio: è importante notare che si fa riferimento allo spazio dei parametri considerati. La particella è in grado attraverso l'uso di un algoritmo evolutivo di aggiornare la sua posizione e convergere verso la soluzione migliore relativa all'intera popolazione di particelle. La figura 2-5 mostra il comportamento di una popolazione di particelle che dopo un numero N di iterate raggiunge la posizione migliore.

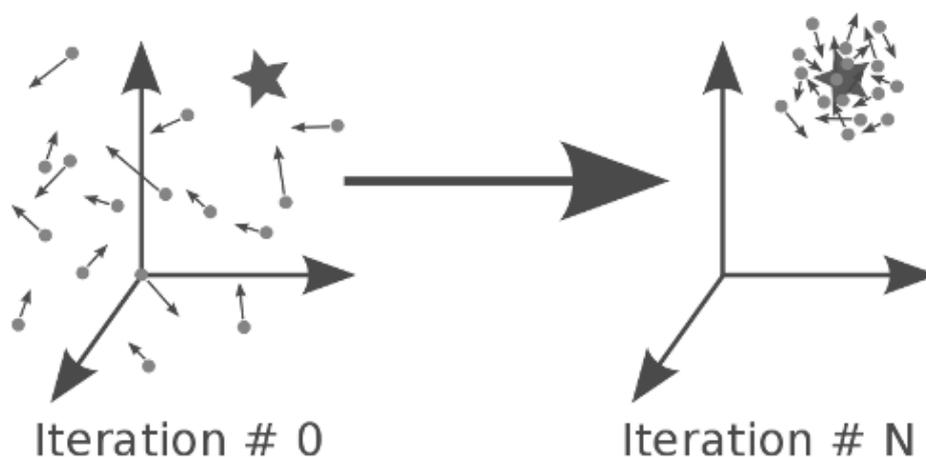


Figura 2-5 Evoluzione del particle swarm tra l'iterazione iniziale e quella finale. (Pagmo, 2017)

L'algoritmo evolutivo è un ciclo nel quale vengono inizialmente impostati in modo casuale i parametri iniziali di PSO come, ad esempio, posizione delle particelle. Successivamente viene valutata per ogni particella la soluzione ottimale ($pbest$). Attraverso un confronto per ogni particella tra la soluzione ottimale ottenuta nell'iterazione corrente rispetto alla soluzione ottenuta precedentemente, si aggiorna di conseguenza la nuova relativa a tale scelta. Infatti, se il valore ottenuto è migliore rispetto a quello precedente viene impostato come valore di $pbest$ quello relativo all'ultima iterazione, se invece il valore della nuova iterata è peggiore rispetto a quello precedente si mantiene quello salvato in precedenza. Successivamente viene identificata la particella che meglio approssima la soluzione come $gbest$ e vengono calcolati i valori della nuova posizione e velocità per ogni particella. Nel caso la soluzione non soddisfi un determinato criterio impostato nell'algoritmo si continua a processare il loop descritto precedentemente (Poli et al., 2007). La figura 2-6 mostra in modo schematico quanto descritto precedentemente.

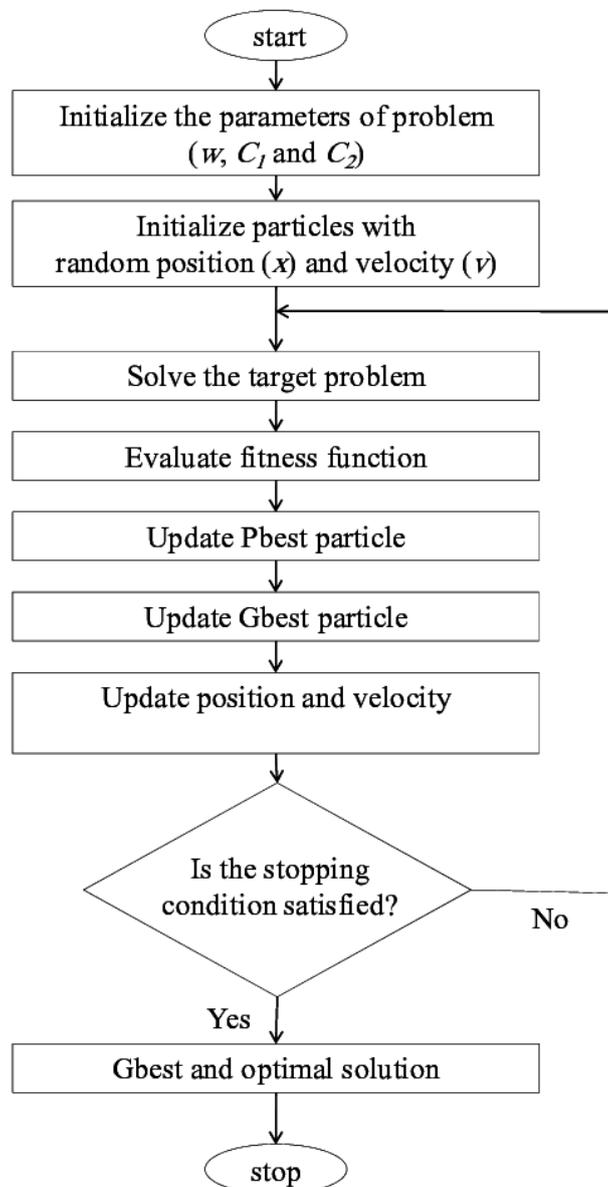


Figura 2-6 Algoritmo PSO (Yousefi et al., 2013)

2.3.2 Covariance matrix adaptation evolution strategy (CMA-ES)

Il covariance matrix adaptation evolution strategy (CMA-ES) è un processo di ottimizzazione numerica anch'esso basato su strategie evolutive. Lo scopo dell'algoritmo è la minimizzazione di una funzione attraverso un processo stocastico di ottimizzazione. Il principio su cui si basa questo algoritmo è il principio dell'evoluzione biologica, secondo cui per ogni iterazione (generazione) viene selezionato un set di parametri in modo casuale al fine di avvicinarsi sempre di più al valore ottimale. La derivazione matematica è stata omessa in questa trattazione, ma può essere trovata in letteratura (Hansen, 2006) (Hansen, 2016). La figura 2-7 mostra il processo di ottimizzazione per una distribuzione di popolazione dopo sei generazioni.

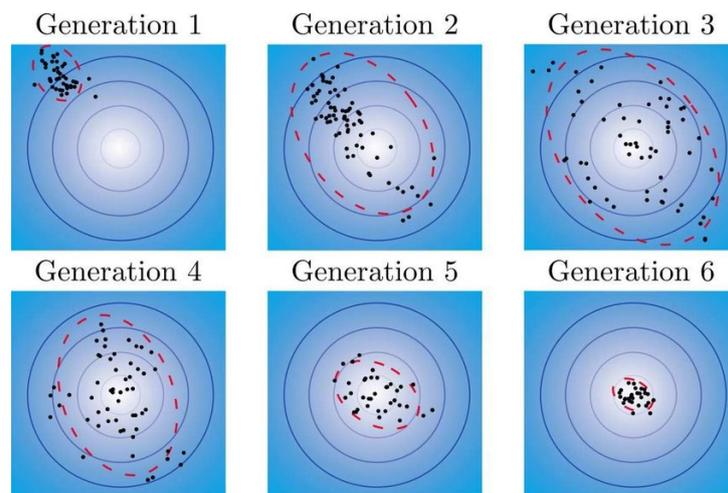


Figura 2-7 Illustrazione dell'ottimizzazione effettuata attraverso il CMA-ES (Tan et al., 2019)

L'algoritmo per l'ottimizzazione è il seguente (Hansen, 2006):

- 1 Scelta in modo casuale dei parametri relativi alla popolazione, allo *step size control* e alla matrice di covarianza.
- 2 Inizializzazione dei parametri relativi al percorso di evoluzione e impostazione della matrice di covarianza alla prima generazione uguale alla matrice identità.
- 3 Iterazioni fino al raggiungimento del criterio di ricerca nelle quali inizialmente avviene il campionamento delle soluzioni, seguito da un processo di selezione e ricombinazione ed infine si ha l'adattamento della matrice di covarianza.

La figura 2-8 mostra in modo schematico quanto descritto precedentemente.

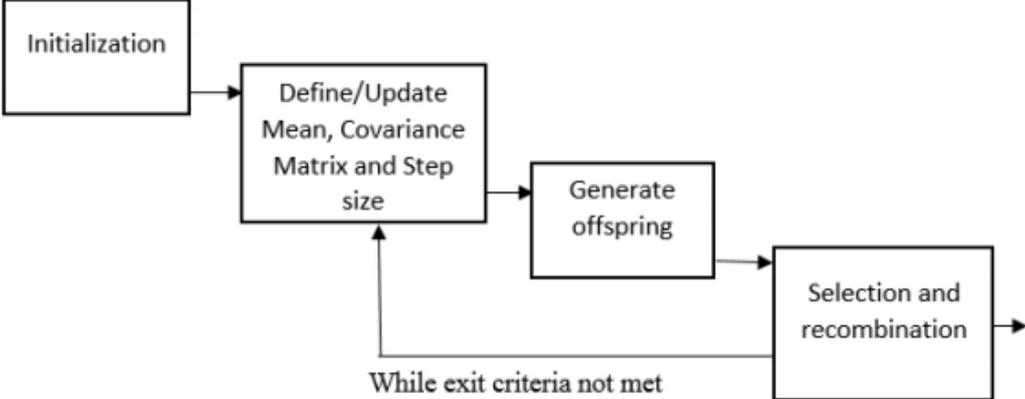


Figura 2-8 Strategia CMA-ES per l'ottimizzazione dei parametri (Gagganapalli, 2015)

3 Dettagli numerici e condizioni operative

In questo capitolo verranno esposte le procedure e gli strumenti utilizzati in questa trattazione per l'ottenimento dei risultati riportati nel capitolo quarto. Il capitolo sarà quindi suddiviso in quattro sezioni.

La prima sezione sarà dedicata ai metodi numerici utilizzati per la semplificazione delle equazioni differenziali che descrivono la fisica del problema considerato. Il metodo che il solver OpenFOAM implementa per la risoluzione delle equazioni differenziali è il metodo dei volumi finiti. Attraverso l'utilizzo di questo particolare metodo la geometria viene discretizzata e le equazioni differenziali possono essere risolte tramite tecniche di integrazione numerica (Paragrafo 3.1).

Nella seconda sezione saranno fornite informazioni dettagliate sul software di modellazione utilizzato (OpenFOAM), con particolare attenzione alla struttura del programma e agli algoritmi necessari per la risoluzione delle simulazioni di fluidodinamica computazionale relative all'emulsione alimentare (Paragrafo 3.2).

Nella terza sezione si approfondirà il concetto di bilancio di popolazione e come esso viene risolto numericamente al fine di ricavare importanti parametri relativi alla maionese. Particolare attenzione sarà dedicata ai codici (in linguaggio Python) utilizzati per l'ottenimento del diametro di Sauter e l'ottimizzazione dei kernel (Paragrafo 3.3).

Infine, verranno forniti i dati relativi all'impostazione delle simulazioni fluidodinamiche. In primo luogo, verrà analizzata la geometria e la relativa discretizzazione spaziale. In secondo luogo, si analizzeranno le condizioni al contorno utilizzate per la risoluzione delle equazioni di bilancio (Paragrafo 3.4).

3.1 Metodi di discretizzazione

Al fine di ricavare le soluzioni delle equazioni differenziali di trasporto vengono utilizzati i metodi di discretizzazione. I metodi di discretizzazione trasformano i modelli matematici continui in equazioni con elementi discreti. Le equazioni di trasporto risultano essere molto complesse e non possono essere risolte per via analitica. Discretizzando il dominio è possibile utilizzare metodi numerici iterativi, che vengono facilmente risolti dal calcolatore e forniscono i valori di proprietà desiderati.

I principali metodi numerici utilizzati nelle applicazioni di fluidodinamica computazionale sono:

- metodi ai volumi finiti,
- metodi alle differenze finite,
- metodi agli elementi finiti.

OpenFOAM utilizza per la risoluzione delle equazioni differenziali di trasporto il metodo dei volumi finiti. Questo metodo differisce dal metodo delle differenze finite e dal metodo degli elementi finiti poiché può trattare geometrie complesse ed è localmente conservativo (*Computational Fluid Dynamics for Engineers*, 2005), perché basato su bilanci tra le celle.

Nel seguito della trattazione si farà riferimento solo al suddetto metodo per la discretizzazione del volume di controllo. Le equazioni risolte dal calcolatore sono presentate nel capitolo secondo e sono principalmente l'equazione di continuità e l'equazione di Navier-Stokes.

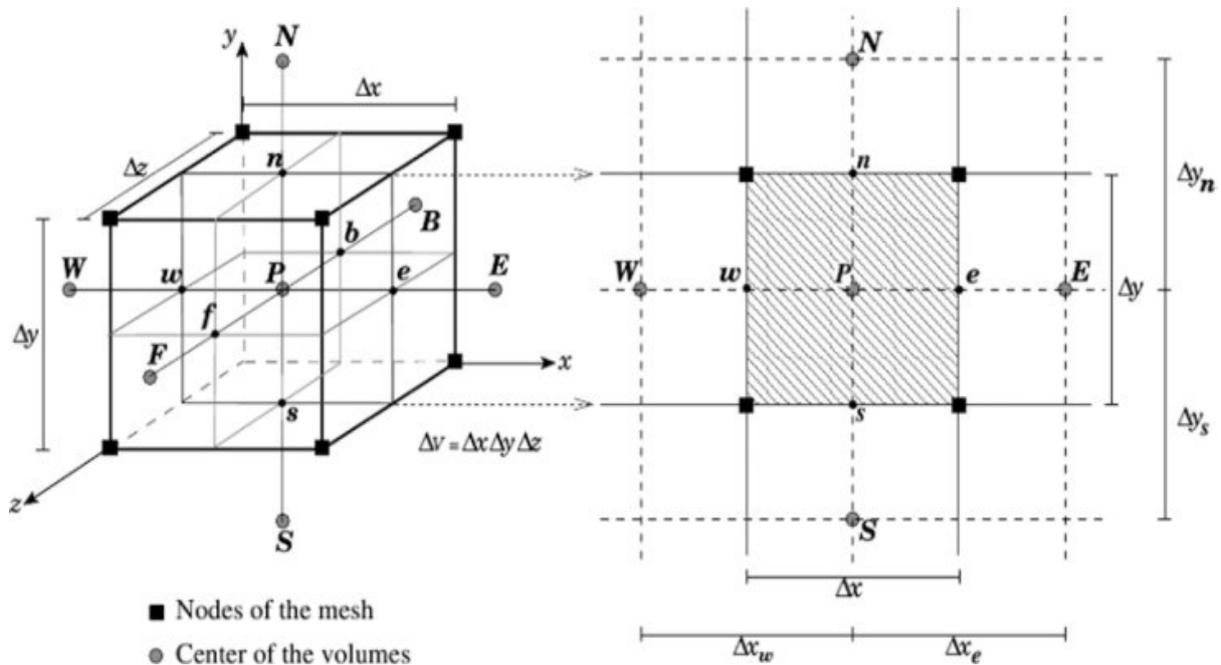


Figura 3-1 Rappresentazione della suddivisione del dominio di calcolo in 3D(destra) 2D(sinistra) (de la Cruz and Monsivais, 2014)

Nel metodo dei volumi finiti l'intero dominio viene discretizzato in celle, nel quale verranno calcolate le proprietà medie relative al fluido. Le celle devono essere non sovrapposte tra loro e ricoprire l'intero volume. Le equazioni di bilancio vengono risolte in punti discreti della geometria, chiamati nodi, posizionati all'interno della cella (Figura 3-1). Il metodo dei volumi finiti è basato su una formulazione conservativa. La proprietà all'interno della cella è considerata costante ed è calcolata attraverso la risoluzione di equazioni algebriche lineari. Queste equazioni vengono risolte in modo iterativo garantendo la conservazione della quantità scalare (*Computational Fluid Dynamics for Engineers*, 2005). Il metodo dei volumi finiti può essere utilizzato anche nel caso di griglie non strutturate.

Consideriamo una generica equazione di trasporto:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \varphi \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi) + q_\varphi \quad (3.1)$$

dove φ è una qualsiasi proprietà del fluido, ρ è la densità, t è il tempo.

In forma indiciale l'equazione (3.1) diventa:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \varphi U_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + q_\varphi \quad (3.2)$$

È possibile notare che al variare delle condizioni questa generica equazione di trasporto può rappresentare:

- l'equazione di continuità nel caso di bilancio di materia totale
($\Gamma=0, \varphi=1, q_\varphi=0$),
- l'equazione di Navier-Stokes nel caso di bilancio di quantità di moto
($\Gamma = \mu, \varphi = U_i, q_\varphi = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i}$).

L'equazione (3.2) è risolta in forma integrale in una cella del sistema raffigurato in figura 3-2. Ogni cella sarà caratterizzata da un volume V e una superficie S, attraverso il quale sarà possibile scambiare la determinata proprietà φ con il fluido circostante, attraverso i moti convettivi e diffusivi.

Riscrivendo ora l'equazione di bilancio in forma integrale per un singolo volume V di superficie S si ottiene:

$$\int_V \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int_S \rho U_j \varphi dS = - \int_S \left(-\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) dS + \int_V q_\varphi dV \quad (3.3)$$

dove il primo termine rappresenta l'accumulo della quantità trasportata, il secondo termine il flusso netto convettivo, il terzo termine il flusso netto diffusivo, e l'ultimo è il termine di generazione.

L'equazione (3.3) contiene termini integrali che devono essere approssimati per trasformare l'equazione in equazione algebrica.

Il termine convettivo può essere approssimato nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \int_S \rho U_j n \varphi dS &= \sum_f \rho [(SU_i \varphi)_f] = \\ &= -\rho [(SU_x \varphi)_w - (SU_x \varphi)_e + (SU_y \varphi)_s - (SU_y \varphi)_n \\ &+ (SU_z \varphi)_f - (SU_z \varphi)_b] \end{aligned} \quad (3.4)$$

Per quanto riguarda il termine diffusivo:

$$\begin{aligned}
 \int_S \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) n \, dS &= \sum_f S \cdot \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right)_f = \\
 &= - \left[\left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w - \left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e + \left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_s - \left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_n \right. \\
 &\quad \left. + \left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_f - \left(S \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_b \right] \tag{3.5}
 \end{aligned}$$

dove le lettere indicano l'ovest(w), l'est(e), sud(s), nord(n), front(f), back(b) della cella, come rappresentato nella Fig. 3-1.

Il termine sorgente viene riscritto attraverso un'approssimazione. Infatti, viene valutato il valore medio di q_φ , che risulta costante.

$$\int_V q_\varphi \, dV \approx \bar{q}_\varphi V \tag{3.6}$$

dove \bar{q}_φ è il valore medio del termine sorgente.

Partendo dall'equazione di trasporto originale (3.1), siamo riusciti a scrivere un'equazione risolvibile algebricamente (*Computational Fluid Dynamics for Engineers*, 2005). È necessaria l'interpolazione di questi valori che sono valutati al centro delle celle.

Vengono analizzate a questo punto della trattazione alcune metodiche per l'interpolazione dei valori delle proprietà.

- First order upwind (FOU)

Il first order upwind è un metodo di interpolazione nel quale il valore della faccia è posto uguale al valore della cella vicina. In questo caso si considera infatti che il sistema sia dominato da moti convettivi. Questa interpolazione è del primo ordine.

$$\begin{cases} \varphi_e = \varphi_P & \text{se } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \varphi_e = \varphi_E & \text{se } (\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_e < 0 \end{cases}$$

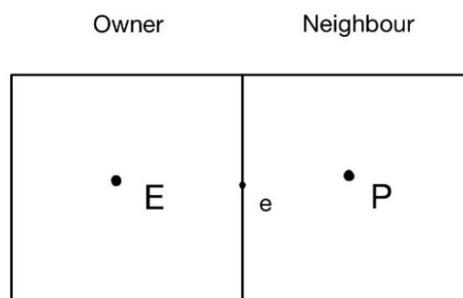


Figura 3-2 Schema interpolazione First Order Upwind tra due celle

- Central differencing scheme (CDS)

In questo caso viene fatta una media tra quello che capita nella cella ad est e quello che capita nella cella ad ovest.

$$\varphi_f = \varphi_E \lambda_E + \varphi_P (1 - \lambda_E)$$

$$\lambda_E = \frac{X_e - X_p}{X_E - X_P}$$

dove nel caso celle regolari il termine λ_E è uguale a $\frac{1}{2}$. È possibile dimostrare che il metodo CDS è un metodo in cui il flusso della proprietà al centro della faccia viene calcolato usando i primi due termini dell'espansione di Taylor. (*Computational Fluid Dynamics for Engineers*, 2005).

3.1.1 Discretizzazione temporale

Nel presente lavoro di tesi alcune simulazioni sono di tipo transitorio. In questi casi non è possibile non considerare l'evoluzione temporale delle quantità investigate e di conseguenza si deve tenere conto anche del termine di accumulo relativo all'equazione di trasporto. Una volta aver scelto il metodo di discretizzazione spaziale si procede alla scelta del metodo di discretizzazione temporale.

Il metodo utilizzato per la discretizzazione temporale per le simulazioni transitorie è il metodo di Eulero implicito che presenta la seguente forma:

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n + \left(-U \frac{\varphi_{i+1}^{n+1} - \varphi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho} \frac{\varphi_{i+1}^{n+1} - 2\varphi_i^{n+1} + \varphi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \Delta t \quad (3.7)$$

dove i rappresenta il numero dell'iterata e n l'istante di tempo. L'equazione (3.7) si trasforma poi nel seguente sistema lineare:

$$\varphi_i^n = \left(-\frac{c}{2} - d \right) \varphi_{i-1}^{n+1} + (1 + 2d) \varphi_i^{n+1} + \left(\frac{c}{2} - d \right) \varphi_{i+1}^{n+1} \quad (3.8)$$

dove alcuni termini sono stati raccolti con l'aiuto delle variabili c e d per una notazione più compatta. Di particolare interesse è il significato attribuito a queste due variabili.

Il termine c è chiamato numero di Courant ed ha la seguente espressione:

$$c = \frac{\Delta t}{\Delta x / U} \quad (3.9)$$

Il termine d , invece, rappresenta il tempo caratteristico di convezione ed ha la seguente espressione:

$$d = \frac{\Gamma \Delta t}{\rho \Delta x} \quad (3.10)$$

Questo metodo viene chiamato “Eulero all’indietro” poiché la derivata non è calcolata all’istante “ n ” ma all’istante “ $n + 1$ ”, quindi potrà essere calcolata una volta eseguito il calcolo iterativo.

L’equazione che risolve il calcolo assume la seguente forma:

$$\underline{\underline{A}} \boldsymbol{\varphi}^{n+1} = \boldsymbol{\varphi}^n \quad (3.11)$$

dove la matrice $\underline{\underline{A}}$ è:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 1 + 2d & \frac{c}{2} - d & 0 & 0 \\ -\frac{c}{2} - d & 1 + 2d & \frac{c}{2} - d & 0 \\ 0 & -\frac{c}{2} - d & 1 + 2d & \frac{c}{2} - d \\ 0 & 0 & -\frac{c}{2} - d & 1 + 2d \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

3.2 OpenFOAM

OpenFOAM (Open-source Field Operation And Manipulation) è un software di modellazione fluidodinamica *open source* (utilizzato in questo studio in ambiente GNU/Linux). Per la risoluzione delle simulazioni di fluidodinamica computazionale è stata utilizzata la versione 7 di questo software, che è scritto nel linguaggio di programmazione C++. Per l’impostazione dei parametri necessari ad eseguire la simulazione si utilizza un semplice editor di testo. La scelta di questo particolare tipo di software è dovuta alla sua flessibilità ed alla vastità di condizioni implementabili, come ad esempio la legge reologica che descrive il comportamento della maionese.

Un singolo “caso” di OpenFOAM è strutturato tramite delle semplici cartelle. Ogni cartella ha la sua specifica funzione e attraverso codici scritti in C++ è possibile fornire al solver le caratteristiche riguardanti le condizioni iniziali, la griglia, e le informazioni necessarie alla gestione della simulazione. Nel sottoparagrafo 3.2.1 sarà analizzata in dettaglio la struttura di una simulazione OpenFOAM.

Verranno infine analizzati i solver che OpenFOAM utilizza per descrivere il moto del fluido e le loro caratteristiche. In particolare, i solver utilizzati in questa tesi sono: *SRFSimpleFoam* e *SRFPimpleFoam*.

3.2.1 Struttura simulazione OpenFOAM

In questo paragrafo sarà presentata la struttura del caso analizzato in OpenFOAM, relativo all'emulsione alimentare. Il software di modellazione OpenFOAM è organizzato in cartelle: la figura 3-3 rappresenta la struttura di un caso generale. Come è possibile notare, la cartella madre è organizzata in tre principali sottocartelle: *system*, *constant* e *time directories*.

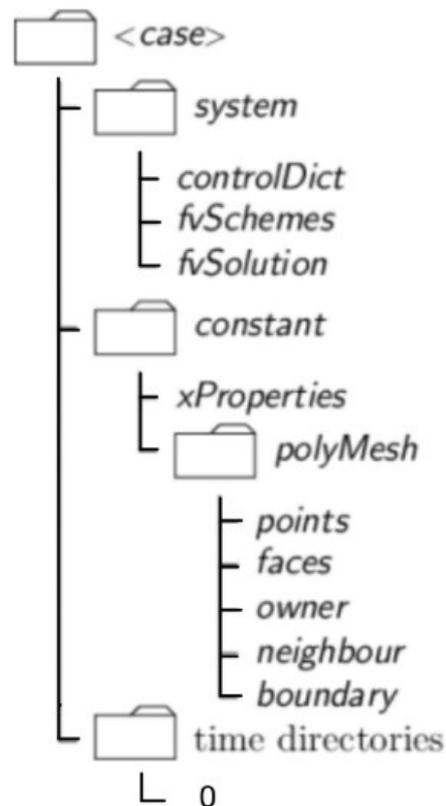


Figura 3-3 Struttura caso OpenFoam (Christopher J. Greenshields, 2020)

System:

Nella cartella *system* è possibile trovare un file di impostazione chiamato *controlDict*. Il *controlDict* è un file di testo in C++, nel quale vengono fornite al calcolatore informazioni relative al solver utilizzato, al controllo temporale della simulazione, alla scrittura dei dati in output (The OpenFOAM Foundation, 2020). È possibile anche specificare in input altri setting utili per la convergenza della simulazione.

Il file *fvSchemes* specifica invece informazioni relative agli schemi numerici utilizzati per il calcolo di derivata prima e seconda relativa al tempo, gradiente, divergenza, laplaciano e gli schemi per l'interpolazione. Di seguito viene riportata, nella tabella 3.1, l'impostazione del file *fvSchemes* per la risoluzione delle simulazioni fluidodinamiche relative all'emulsione alimentare.

Tabella 3.1 Schemi numerici implementati per la risoluzione delle simulazioni CFD

Funzione		Schema numerico
ddtSchemes	$\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial^2}{\partial t^2}$	Euler
gradSchemes	∇	Gauss linear
divSchemes	$\nabla \cdot$	Bounded linear upwind
laplacianSchemes	∇^2	Gauss linear corrected
intepolationSchemes	/	linear

La voce “Gauss Linear” specifica la discretizzazione con il metodo dei volumi finiti attraverso l’integrazione gaussiana, nel quale si ha l’interpolazione dei valori dalla faccia della cella al centro della cella successiva (The OpenFOAM Foundation, 2020).

Il file *fvSolution* serve ad impostare il solver, le tolleranze e gli algoritmi per il controllo della simulazione. Di seguito sono elencate le specifiche relative ai diversi parametri calcolati nelle simulazioni.

```

p
{
    solver          GAMG;
    tolerance       1e-06;
    relTol          0.1;
    smoother        GaussSeidel;
}

Urel
{
    solver          smoothSolver;
    smoother        symGaussSeidel;
    tolerance       1e-06;
    relTol          0.1;
}

```

Il solver GAMG (generalised geometric-algebraic multi-grid) è un solver applicabile a matrici simmetriche e asimmetriche nel quale è possibile selezionare il tempo di esecuzione (The OpenFOAM Foundation, 2020).

Vengono poi impostate le specifiche relative al fattore di sotto-rilassamento (α). α è un valore compreso tra 0 ed 1, che serve a limitare la differenza tra la soluzione ad un'iterazione e la seguente. È importante scegliere in modo ottimale questo parametro poiché un valore basso rende la simulazione stabile, ma lenta in termini di tempo di calcolo. Un valore troppo alto potrebbe, invece, portare alla divergenza della soluzione (The OpenFOAM Foundation, 2020).

Nella cartella *system* è presente anche il *blockMeshDict* relativo alla geometria di calcolo, illustrata approfonditamente nei paragrafi relativi alle simulazioni effettuate (Paragrafo 3.4).

Constant:

All'interno della cartella *constant* è presente la cartella *polyMesh* che contiene tutte le specifiche relative alla *mesh*. Inoltre, sono presenti in questo lavoro di tesi tre file che specificano le proprietà fisiche del sistema analizzato.

In *SRFProperties* viene specificato il valore di giri al minuto relativi al rotore e l'asse di riferimento per la rotazione:

```
SRFModel          rpm;

origin            (0 0 0);
axis              (0 -1 0);

rpmCoeffs
{
    rpm           $RPM;
}
```

In *transportProperties* viene specificata la legge reologica discussa nel capitolo secondo. Viene riportato a titolo d'esempio parte del suddetto file implementato in OpenFOAM. Partendo da sinistra sono rappresentati i coefficienti della legge reologica, l'unità di misura e le formule per il calcolo scritte in linguaggio C++.

```
MayoLawCoeffs
{
    nuMax    [0 2 -1 0 0 0 0] #calc "1.0e5*0.01/$emul_rho"
    nuMin    [0 2 -1 0 0 0 0] #calc "0.1*0.01/$emul_rho";
    nuInf    [0 2 -1 0 0 0 0] #calc "$nuRelInf*0.01/$emul_rho";
    K        [0 2 -1 0 0 0 0] #calc "$K*0.01/$emul_rho";
    m        [0 0 0 0 0 0 0]   $m;
}
```

L'unità di misura in OpenFOAM viene implementata attraverso un vettore composto da sette termini. In ordine i termini sono: massa (Kg), lunghezza (m), tempo(s), temperatura(K), numero di moli (mol), corrente (A), intensità luminosa (cd). Il numero rappresenta l'esponente al quale

è elevata l'unità. Per esempio, il primo termine ha come unità di misura m^2/s e rappresenta quindi una viscosità cinematica. I valori di ogni quantità, come si vede in questo esempio, sono a loro volta esprimibili come relazioni algebriche funzione di altre quantità note.

In *turbulentProperties* viene specificato il modello di turbolenza utilizzato in queste simulazioni.

Time Directories:

In questo set di cartelle, particolare importanza è da attribuire alla cartella "0". Questa cartella, infatti, contiene informazioni relative alle condizioni iniziali del fluido. Una volta che la simulazione viene lanciata, vengono create altre cartelle relative al tempo, come impostato nel *controlDict*. Queste contengono i valori a diversi tempi delle proprietà del fluido come ad esempio velocità e pressione. L'impostazione delle cartelle è raffigurata nella tabella 3.2.

Tabella 3.2 Principali parole chiave Time Directories

Parole chiave	Descrizione
<i>dimensions</i>	Unità di misura della proprietà
<i>internalField</i>	Valore della proprietà
<i>boundaryField</i>	Condizioni al contorno

È presente in questo lavoro di tesi anche una cartella chiamata *pythonScripts*, nel quale sono presenti script per impostare in modo automatico le condizioni operative delle simulazioni effettuate sulla maionese.

3.2.2 Solver OpenFOAM

In questa sezione saranno analizzati i solver che OpenFOAM utilizza per la risoluzione delle simulazioni. OpenFOAM non ha un solver generico applicabile a tutti i casi e l'utente può in base al problema da risolvere utilizzare il solver opportuno. Di seguito in tabella verranno illustrati i principali solver implementabili e la loro applicazione.

Il nome dei solver è rappresentativo dell'algoritmo di risoluzione utilizzato. In questo lavoro considerando l'ipotesi di incompressibilità, trattando l'emulsione alimentare come un fluido *pseudo single-phase* non dovendo considerare fenomeni termici, sono stati scelti come solver *simpleFoam* e *pimpleFoam*. In particolare, il solver *simpleFoam* è stato utilizzato per le simulazioni stazionarie, mentre *pimpleFoam* per le simulazioni transitorie.

Tabella 3.3 Principali solver OpenFOAM e loro applicazione

Solver	Transient	Compressible	Turbulence	Heat-transfer	Combustion	Multiphase	fvOptions
<i>simpleFoam</i>			✓				✓
<i>rhoSimpleFoam</i>		✓	✓	✓			✓
<i>pimpleFoam</i>	✓		✓				✓
<i>rhoPimpleFoam</i>	✓	✓	✓				
<i>boundaryFoam</i>	✓						
<i>chemFoam</i>	✓			✓	✓		
<i>engineFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓		✓
<i>fireFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓		✓
<i>interFoam</i>	✓		✓			✓	
<i>icoFoam</i>	✓						
<i>interFoam</i>	✓		✓			✓	

simpleFoam:

Come già accennato in precedenza il nome del solver in OpenFOAM identifica anche l'algoritmo di risoluzione utilizzato. Il solver *simpleFoam*, infatti, identifica l'algoritmo chiamato SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equation). Questo particolare algoritmo di risoluzione delle equazioni algebriche viene utilizzato per simulazioni stazionarie, dove il termine di accumulo non è considerato.

La procedura iterativa utilizzata è la seguente (The OpenFOAM Foundation, 2020):

1. Nel caso di prima iterazione $n = 0$, vengono definiti i valori iniziali per la velocità e pressione e viene calcolato il valore di portata per ogni cella tramite la velocità. Per $n > 0$ si usano i dati dell'iterazione precedente.
2. Conoscendo il campo di pressione, p^n è possibile risolvere l'equazione di bilancio di quantità di moto discretizzata in modo da ottenere il campo di moto.
3. Viene calcolata la portata per ogni cella della geometria conoscendo il campo di moto.
4. Viene risolta a questo punto l'equazione relativa alla pressione in modo da calcolare il valore correttivo per la pressione.
5. Viene aggiornato il valore di pressione considerando il fattore di sotto rilassamento.
6. Vengono aggiornati infine i valori relativi alla portata e alla velocità.

7. Vengono calcolati i residui e se non sono inferiori ad un valore impostato si procede nel calcolo iterativo.

pimpleFoam:

Per risolvere le equazioni transitorie viene utilizzato il solver *pimpleFoam* che tiene conto degli effetti del tempo. Questo particolare tipo di solver utilizza l'algoritmo di risoluzione omonimo. Questo algoritmo può essere visto come una combinazione dell'algoritmo SIMPLE, precedentemente analizzato e l'algoritmo PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators).

L'algoritmo di risoluzione PISO è il seguente (The OpenFOAM Foundation, 2020):

1. Nel caso di prima iterazione $n = 0$, vengono definiti i valori iniziali per la velocità e pressione e viene calcolato il valore di portata per ogni cella tramite la velocità. Per $n > 0$ si usano i dati dell'iterazione precedente.
2. Viene risolta l'equazione relativa al bilancio di quantità di moto in modo da ottenere il campo di moto.
3. Viene calcolata la portata per ogni cella della geometria conoscendo il campo di moto.
4. Viene risolta l'equazione relativa al campo di pressione, in questo caso non è necessario l'utilizzo del fattore di sotto rilassamento.
5. Vengono poi aggiornati i valori relativi alla portata e alla velocità.
6. Si ripete l'iterazione dallo step numero 3 per il numero di volte indicato in input.
7. Viene aumentato il time step e si riparte dallo step numero 1.

Una volta quindi ricavati i valori corretti per la velocità, la portata e la pressione attraverso l'algoritmo SIMPLE, questi vengono processati in loop dall'algoritmo PISO per un numero di volte impostato nella simulazione. L'algoritmo PIMPLE deve il nome dalla combinazione di SIMPLE e PISO.

In questo lavoro di tesi è stato utilizzato, come già esposto precedentemente, l'algoritmo *pimpleFoam* al posto di *pisoFoam* per la risoluzione delle simulazioni transitorie. Questo algoritmo, infatti, risulta essere più stabile ed è possibile impostare un numero di Courant massimo che assicuri la convergenza.

3.3 Bilancio di popolazione

La caratterizzazione del campo di moto sviluppato all'interno del *cone mill mixer* è stata eseguita attraverso l'uso di simulazioni di fluidodinamica computazionale, come descritto nei paragrafi precedenti. La risoluzione del modello di bilancio di popolazione (PBM), data l'alto costo computazionale dovuto all'alto numero di celle in cui è discretizzato il dominio, è stata invece realizzata tramite simulazioni semplificate zero-dimensionali. Questo approccio ha ridotto in maniera considerevole i tempi di calcolo.

Nelle simulazioni in zero dimensioni viene trascurato il termine convettivo dell'equazione del bilancio di popolazione (PBE), viene cioè persa l'informazione relativa alla variazione nello spazio della popolazione delle gocce.

Tabella 3.4 Variabili implementate nel modello di predizione dei dati sperimentali

Tipo di variabile	Simbolo	Valore	Unità di misura
Variabili di integrazione			
Tempo finale di integrazione	t_{out}	1	[-]
Nodi di quadratura	N	3	[-]
Numero dei momenti	$2N$	6	[-]
Variabili fisiche			
Viscosità della fase continua	μ_{cont}	0,01	Pa s
Viscosità della fase dispersa	μ_{disp}	0,05	Pa s
Densità della fase continua	ρ_{cont}	998,2	Kg/ m ³
Densità della fase dispersa	ρ_{disp}	917	Kg/ m ³
Parametri PBM			
	K1	0,1699	[-]
	K2	0,0403	[-]
	K3	0,0011	[-]
	K4	0,1842	[-]

Il primo passo per la risoluzione del PBE è stato l'estrazione dei parametri di *strain rate*, *mixing index* dalle simulazioni effettuate su OpenFOAM. Successivamente il metodo di quadratura dei momenti (QMOM) è stato implementato in uno script di Python al fine di ricavare il diametro delle particelle di olio disperse nell'emulsione e confrontare i risultati con i dati sperimentali presenti nel lavoro di Dubbelboer (Dubbelboer et al., 2016).

Lo script di Python è suddiviso in diverse parti. La prima parte consiste nella definizione delle variabili comuni a tutti gli esperimenti. Nella tabella (3.5) vengono mostrati i valori delle variabili implementate nel codice Python per la risoluzione del PBM.

Successivamente, attraverso l'utilizzo di un altro codice, vengono definiti i metodi per la caratterizzazione delle variabili relative ad ogni singolo esperimento (frazione in peso, portata in ingresso, larghezza del gap, rapporto di viscosità, ecc) e vengono calcolati i momenti relativi alle condizioni iniziali.

Infine, viene applicato il QMOM come descritto nel capitolo secondo. Viene quindi calcolato il diametro di Sauter come il rapporto tra il momento di ordine tre e il momento di ordine due al tempo di integrazione finale per tutte e quindici le simulazioni. I risultati relativi al d_{32} sono analizzati nel capitolo quarto.

3.4 Simulazioni effettuate

In questa sezione verranno descritte le condizioni operative utilizzate per la risoluzione delle simulazioni di fluidodinamica computazionale.

In particolare, questa sezione verrà suddivisa in tre sottoparagrafi. In primo luogo, verrà descritto il processo di produzione dell'emulsione alimentare, con particolare attenzione alla geometria e alla sua discretizzazione per creare la mesh computazionale (Sottoparagrafo 3.4.1). In secondo luogo, saranno analizzate le condizioni operative e le condizioni al contorno che permettono di definire il problema (Sottoparagrafi 3.4.2 – 3.4.3).

3.4.1 Geometria

Il processo di produzione dell'emulsione alimentare è suddiviso in due step. Nel primo step si ha una miscelazione iniziale nel quale i principali ingredienti vengono introdotti all'interno di un mixer. In questo step viene aggiunta alla fase acquosa e ai tuorli d'uovo la fase dispersa, ovvero l'olio di semi di soia. Nel secondo step, nel quale si ha una seconda miscelazione, viene formata l'emulsione. In particolare, nel *cone mill mixer* a causa degli elevati sforzi di taglio le goccioline di olio presenti nella fase dispersa subiscono un processo di rottura che è necessario per garantire la stabilità dell'emulsione (Marcato Agnese, 2019). Infatti, dalla dimensione delle goccioline della fase dispersa dipendono molte caratteristiche dell'emulsione come la struttura, il gusto e il colore (Dubbelboer et al., 2016). La figura 3-4 mostra in forma grafica quanto descritto precedentemente riguardo il processo di produzione dell'emulsione alimentare.

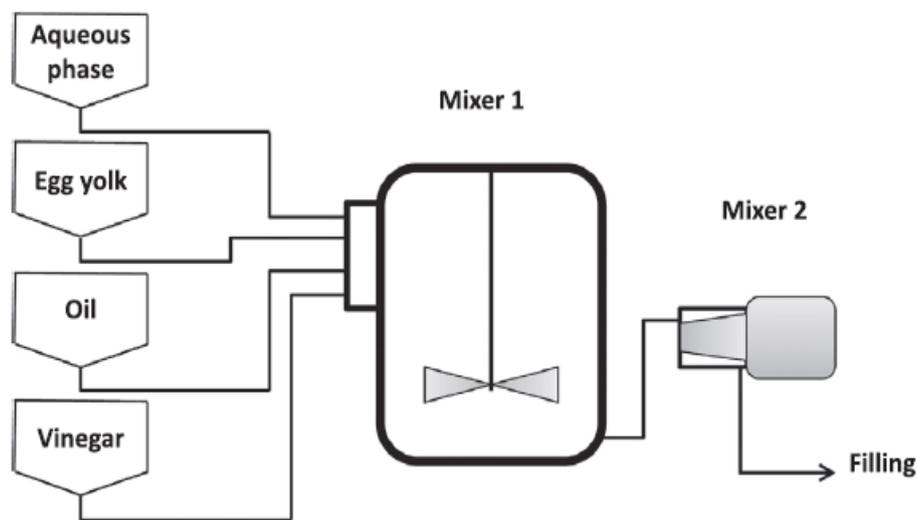


Figura 3-4 Schema del processo di produzione dell'emulsione alimentare (Dubbelboer et al., 2016).

In questo lavoro di tesi, il secondo step di produzione della maionese viene simulato attraverso l'uso di OpenFOAM. Il lavoro prende come riferimento i dati sperimentali presenti nel lavoro di Dubbelboer (Dubbelboer et al., 2016) (Dubbelboer, 2016). Lo scopo principale di questa trattazione è predire in modo accurato, attraverso l'uso delle simulazioni CFD accoppiate al

bilancio di popolazione, i risultati relativi alla dimensione delle particelle nella fase dispersa presenti nel lavoro sperimentale citato precedentemente.

La geometria utilizzata per la descrizione del *cone mill mixer* è stata ricavata, dopo alcune semplificazioni, da catalogo IKA (IKA process, n.d.), che rappresenta l'unità utilizzata negli studi sperimentali. La figura 3-5 rappresenta lo strumento utilizzato per la riproduzione del secondo step del processo di produzione della maionese.



Figura 3-5 Rappresentazione cone mill mixer. (IKA process, n.d.)

In OpenFOAM è stata riprodotta la geometria in figura attraverso l'uso della utility *blockMesh*. La struttura della geometria è formata da un rotore che gira in senso orario e da uno statore non in movimento. La distanza tra la parte esterna del rotore e la parte interna del rotore, in questa trattazione verrà chiamato *gap*. È importante notare che la reale geometria utilizzata per i dati sperimentali differisce da quella implementata in OpenFOAM, poiché in questa trattazione non si è tenuto conto delle alette sulla superficie esterna del rotore (Figura 3-6).



Figura 3-6 Rappresentazione sezione centrale cone mill mixer (IKA process, n.d.)

Il dominio del fluido può essere suddiviso in tre diverse regioni: la precamera, il *gap* e la postcamera. Il *gap* è la parte dove principalmente hanno luogo i fenomeni di rottura, ma è necessario, per descrivere in modo appropriato il comportamento del fluido, considerare anche la zona prima (precamera) e dopo del *gap* (postcamera).

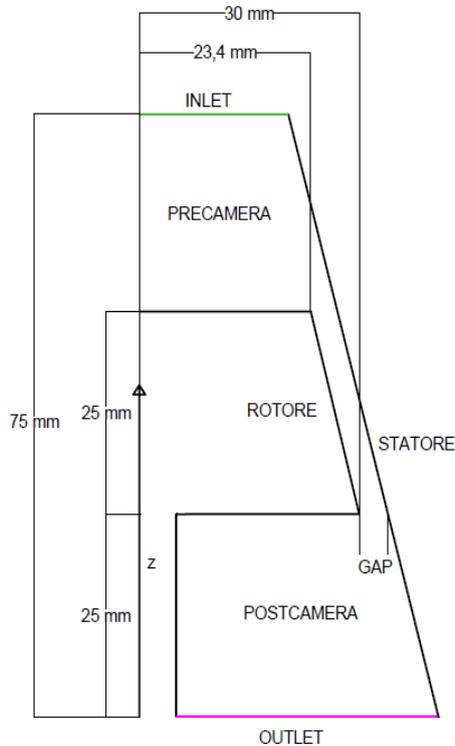


Figura 3-7 Sezione del cone mill mixer

Data l'assialsimmetria rispetto all'asse Z del *cone mill mixer* è stata considerata solo una sezione di ampiezza di 2° della geometria troncoconica. Il dominio è stato quindi discretizzato in 1800000 celle, in accordo con lo studio sull'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo utilizzata, presentata nel capitolo dei risultati.

Le celle non sono tutte della stessa grandezza. Infatti, per riuscire a descrivere in modo corretto i fenomeni vicino alla precamera e postcamera, si è scelto di utilizzare un *grading* particolare:

```
simpleGrading
(
    // x-direction expansion ratio
    (0.2 0.3 4) // 20% x-dir, 30% cells, expansion = 4
    (0.6 0.4 1) // 60% x-dir, 40% cells, expansion = 1
    (0.2 0.3 0.25) // 20% x-dir, 30% cells, expansion = 0.25
)
(
    // y-direction expansion ratio
    (0.2 0.3 4) // 20% y-dir, 30% cells, expansion = 4
    (0.6 0.4 1) // 60% y-dir, 40% cells, expansion = 1
    (0.2 0.3 0.25) // 20% y-dir, 30% cells, expansion = 0.25
)
1
) // z-direction expansion ratio
```

Questa script descrive una strategia di meshing in cui si individuano tre zone successive in direzione assiale: nella prima vicina all'ingresso si ha una griglia piu' fitta con celle la cui dimensione va ad aumentare fino alla dimensione costante della seconda zona (meno fitta) ed infine gradualmente a diminuire per avere celle di dimensione minore vicino all'uscita. Per ogni parte viene definito un numero di celle rispetto al totale con una particolare estensione.

3.4.2 Condizioni operative

L'emulsione alimentare è un sistema multifase composto da una fase continua e una fase dispersa. È importante sottolineare a questo punto della trattazione che la maionese è trattata come un fluido *pseudo single-phase* nel quale è stata implementata le legge reologica presentata nel capitolo secondo. Il lavoro di Dubbelboer (Dubbelboer et al., 2016) dà le informazioni di base per la realizzazione delle simulazioni fluidodinamiche. Al fine di descrivere il comportamento della maionese in diverse condizioni operative sono stati eseguiti un totale di quindici esperimenti con diverse concentrazioni di maionese (0.65, 0.7, 0.75 kg/kg).

La tabella 3-6 mostra le differenti condizioni operative, applicate a ciascuno dei tre diversi tipi di maionese.

Tabella 3.5 Condizioni operative

Experiment no.	Gap [m]	Rotor speed [rpm]	Flow rate [kg/h]
1	0,000624	6039	31
2	0,000208	6784	15
3	0,000624	3170	64
4	0,000624	6039	15
5	0,000208	3170	48

Per ogni esperimento vengono variate le condizioni relative al *gap*, la velocità di rotazione del rotore e la portata massica di emulsione in entrata.

Nel capitolo dei risultati le differenti condizioni operative, per semplicità di trattazione, verranno rappresentate attraverso il tipo di maionese e l'esperimento corrispondente. Ad esempio, riferendoci alla maionese con concentrazione 0,65 kg/kg e all'esperimento numero 3, si parlerà di M1E3.

3.4.3 Condizioni al contorno

Le condizioni al contorno sono impostate in input nella cartella 0 della simulazione corrispondente. Per ogni lato della geometria è stata impostata una condizione iniziale relativa alla pressione e alla velocità. La tabella 3.7 rappresenta le condizioni al contorno utilizzate per tutte le simulazioni effettuate. Per la velocità in ingresso è stato impostato il valore calcolato attraverso la portata massica in entrata.

Per quanto riguarda invece la pressione il valore fissato in outlet è zero (si noti che, utilizzando solver per la soluzione di moto di fluidi incomprimibili, questo è un valore di pressione di riferimento, e non assoluto).

Tabella 3.6 Condizioni al contorno

Variabile	Inlet	Outlet	Rotore	Statore
Velocità	Profilo costante	Gradiente nullo	Velocità di rotazione del rotore	No-slip
Pressione	Gradiente nullo	Valore costante	Gradiente nullo	Gradiente nullo

4 Risultati

Nel seguente capitolo sono presentati dettagliatamente i principali risultati ottenuti in questo lavoro di tesi.

Nella prima parte verrà illustrata la procedura utilizzata per la scelta della geometria. In primo luogo, si parlerà studio di *grid independence*, lo studio effettuato sulla *mesh* interna alla geometria al fine di ricavare l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo utilizzata. In secondo luogo, si avrà un confronto tra la geometria in tre dimensioni e la geometria in due dimensioni (Paragrafo 4.1).

La seconda parte sarà relativa allo studio del campo di moto sviluppato all'interno della geometria, con particolare attenzione ai valori di *strain rate* e *mixing index*.

La terza parte sarà relativa ai risultati del bilancio di popolazione, considerando le diverse condizioni applicate per la determinazione del diametro delle particelle di olio disperse all'interno della fase continua.

4.1 Geometria

Il primo passo per descrivere in modo appropriato la fluidodinamica relativa ad una simulazione è la scelta della giusta geometria o dominio fisico. È importante, oltre a riprodurre fedelmente il sistema reale, cercare ove possibile di semplificare la simulazione in termini di costo computazionale.

Nei paragrafi successivi vengono analizzate due tipi di semplificazioni della geometria. Nel paragrafo 4.1.1, si parlerà del *grid independence study* per ricavare il numero di celle ottimali nel quale viene discretizzato il volume occupato dal fluido. Nel paragrafo 4.1.2 ci sarà un confronto dettagliato sul profilo di velocità sviluppato nella geometria in due dimensioni e in tre dimensioni. La geometria in due dimensioni risulta avere lo stesso comportamento della geometria in tre dimensioni. Questo risultato porta ad una semplificazione importante.

4.1.1 Grid independence study

Le simulazioni fluidodinamiche sono state effettuate per quindici esperimenti diversi. La maggior parte degli esperimenti analizzati in questa trattazione presenta un comportamento fluidodinamicamente stabile. Due esperimenti differiscono da questa tendenza poiché si ha formazione di vortici di Taylor all'interno del *gap*. Nella figura 4-1 è riportato un esempio relativo al profilo di velocità assoluta (in modulo), nel quale è possibile osservare i vortici di Taylor sviluppati all'interno del *gap*.

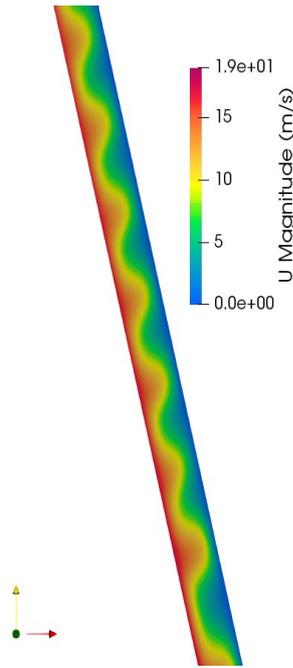


Figura 4-1 Contour plot della velocità assoluta in una sezione longitudinale del cone mill (65% wt%, Exp1)

Il flusso di Taylor-Couette è un particolare tipo di flusso che si sviluppa tra due cilindri concentrici in rotazione. Il numero di Taylor corrispondente viene calcolato attraverso la seguente espressione:

$$Ta = \frac{\Omega^2 R_m (R_2 - R_1)^3}{\nu^2} \quad (4.1)$$

dove Ω è la velocità angolare del rotore [rad/s], R_m è il raggio medio calcolato come media tra il raggio esterno del rotore R_1 e il raggio interno dello statore R_2 e ν è la viscosità cinematica [m^2/s].

Le tabelle 4.1, 4.2, 4.3 mostrano i valori del numero di Taylor calcolato per i quindici esperimenti esaminati in questa trattazione. È possibile evincere che due esperimenti (evidenziati in tabella) presentano un numero di Taylor superiore al valore critico.

$$Ta_{crit} = 1700 \quad (4.2)$$

I vortici di Taylor sono delle strutture vorticose che si sviluppano quando $Ta \geq Ta_{crit}$. (Li et al., 2010, 2014; Noui-Mehidi et al., 2005).

Tabella 4.1 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,65 kg/kg (65% wt%)

Experiment n.	Gap [m]	ν [m^2/s]	Ω [rad/s]	Ta [-]
1	0,000624	3,01E-005	632,40	2864,7
2	0,000208	2,11E-005	710,42	272,4
3	0,000624	3,66E-005	331,96	532,5
4	0,000624	3,00E-005	632,40	2875,1
5	0,000208	2,58E-005	331,96	39,9

Tabella 4.2 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,7 kg/kg (70% wt%)

Experiment n.	Gap [m]	v [m^2/s]	Ω [rad/s]	Ta [-]
1	0,000624	8,46E-005	632,40	362,9
2	0,000208	7,25E-005	710,42	23,1
3	0,000624	9,62E-005	331,96	77,3
4	0,000624	8,46E-005	632,40	362,9
5	0,000208	7,88E-005	331,96	4,3

Tabella 4.3 Numero di Taylor per frazione in massa di olio uguale a 0,75 kg/kg (75% wt%)

Experiment n.	Gap [m]	v [m^2/s]	Ω [rad/s]	Ta [-]
1	0,000624	1,41E-004	632,40	130,3
2	0,000208	1,15E-004	710,42	9,1
3	0,000624	1,67E-004	331,96	25,6
4	0,000624	1,41E-004	632,40	130,3
5	0,000208	1,29E-004	331,96	1,6

I vortici che si sviluppano all'interno del gap sono strutture difficilmente apprezzabili con una griglia di calcolo lasca. Per questo motivo gli esperimenti dove appaiono i vortici di Taylor, essendo quelli piu' numericamente delicati, sono stati utilizzati per il *grid independence study*. Sono stati condotti esperimenti su sei differenti discretizzazioni spaziali, al fine di ricavare l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo. I parametri utilizzati per lo studio sono la pressione (P) e lo *strain rate* ($\dot{\gamma}$).

Pressione:

Si è osservato che il profilo di pressione all'interno del *gap*, valutato attraverso la funzione *Plot Over Line* di *Paraview*, potesse dare informazioni dettagliate sul numero di vortici. Il numero di vortici, infatti, equivale al numero di periodi di oscillazione del profilo di pressione; viceversa in assenza di vortici il profilo assiale di pressione nel *gap* appare lineare

A titolo di esempio, sono mostrati in figura i risultati relativi al grafico della pressione nel gap per due diverse configurazioni della griglia. La figura 4-2 è relativa al valore di pressione utilizzando la *mesh* con 10 celle in direzione radiale e 150 celle in direzione assiale, mentre la figura 4-3 è relativa alla griglia di calcolo con 25 celle in direzione radiale e 360 in direzione assiale.

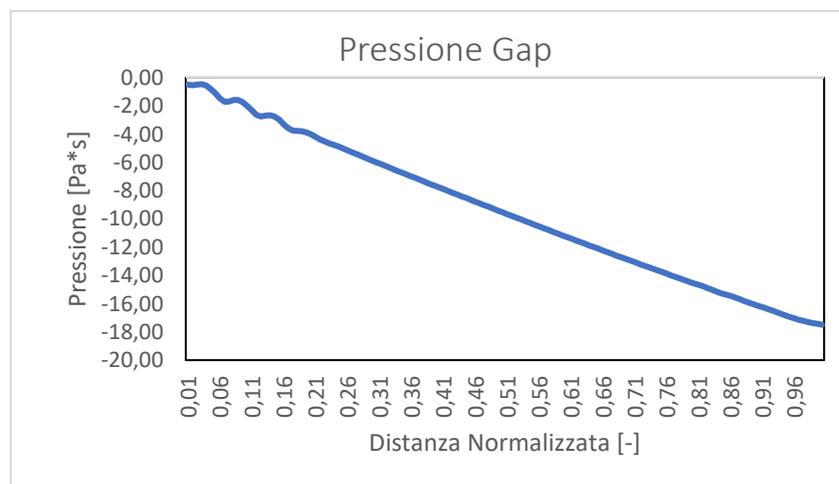


Figura 4-2 Profilo di pressione all'interno del gap per mesh 10x150 (M1E1)

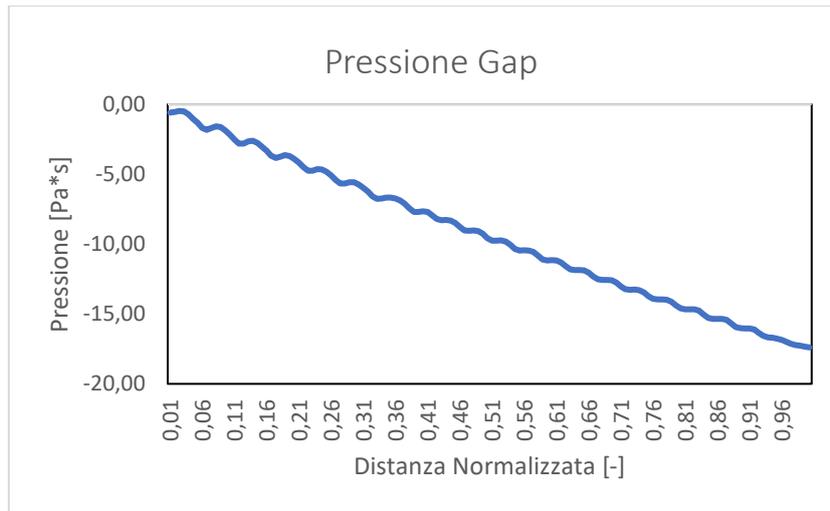


Figura 4-3 Profilo di pressione all'interno del gap per mesh 25x360 (M1E1)

Le immagini mostrano chiaramente che nel primo caso si osserva la formazione di tre vortici nella zona inferiore del gap, mentre nella seconda configurazione il numero di vortici interessa tutta la sezione del gap. I vortici relativi alla seconda configurazione sono ventuno.

La tabella 4.4 e la figura 4-4 riassumono i risultati relativi al numero di vortici di Taylor calcolati nella sezione del gap attraverso l'uso del profilo di pressione per le sei casistiche analizzate.

Tabella 4.4 Confronto numero di vortici

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
Numero di celle in direzione radiale	10	15	20	25	30	35
Numero di celle in direzione assiale	150	220	285	360	430	500
Numero di celle totali	1500	3300	5700	9000	12900	17500
NUMERO VORTICI	3	16	19	21	21	21

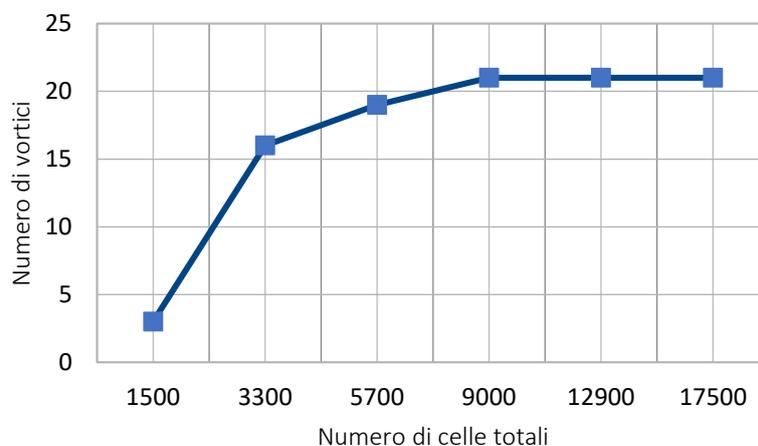


Figura 4-4 Numero di vortici corrispondenti al numero di celle totali

Strain Rate:

Il secondo parametro analizzato per il *grid independence study* è lo *strain rate*. Il confronto è stato eseguito per gli stessi sei casi di cui sei è' analizzato il profilo di pressione. Nelle figure 4-5 e 4-6 è possibile osservare come anche il profilo relativo allo *strain rate* non viene determinato correttamente nel caso di griglia lasca.

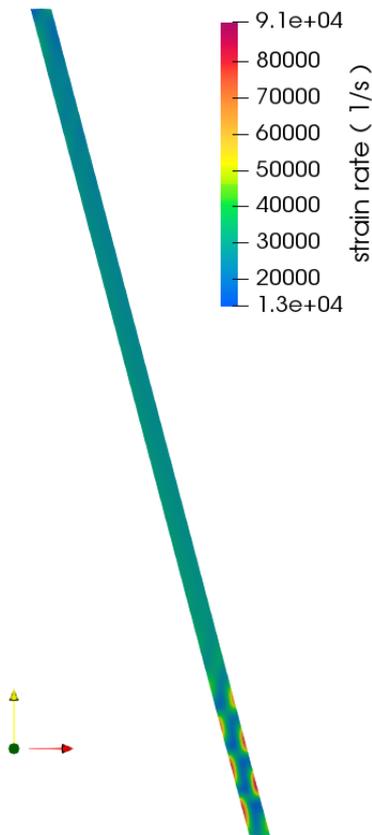


Figura 4-5 Contour plot strain rate mesh 10x150 nel gap

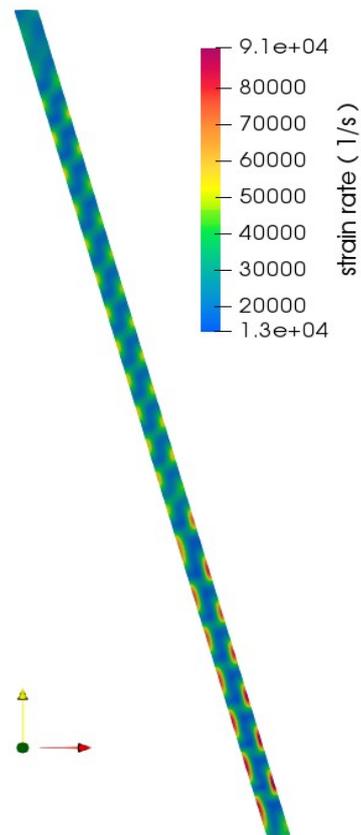


Figura 4-6 Contour plot strain rate mesh 25x360 nel gap

Non potendo confrontare valore per valore i dati di *strain rate* per ogni cella della geometria si è deciso di utilizzare un valore medio. Il valore medio di *strain rate* è stato calcolato come media volumetrica rispetto a tutte le celle che compongono la geometria del gap. I diversi risultati sono stati confrontati attraverso errore relativo di *strain rate* medio volumico.

L'errore relativo è calcolato attraverso la seguente formula:

$$\text{Errore relativo} = \frac{\text{valore max} - \text{valore min}}{\text{valore max}} \quad (4.3)$$

La tabella 4.4 riporta i valori di errore relativo per le sei differenti discretizzazioni della sezione del gap. I primi tre casi non risultano quindi adatti per la descrizione del campo di moto in termini di *strain rate*, poiché presentano un errore relativo superiore al 1%.

Tabella 4.5 Errore relativo strain rate volumetrico per i sei casi analizzati

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
Numero di celle in direzione radiale	10	15	20	25	30	35
Numero di celle in direzione assiale	150	220	285	360	430	500
Strain rate medio volumetrico (1/s)	28991,2	29733,1	30339,3	30540,1	30605,8	30758,2
Errore relativo	5,74%	3,33%	1,36%	0,71%	0,50%	0,00%

È evidente notare sia dal confronto relativo al profilo di pressione che dal confronto sull'errore relativo dello *strain rate* medio volumetrico, che l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo è data dal caso numero quattro, nel quale si hanno 25 celle lungo la direzione radiale e 360 celle lungo la direzione assiale. Questa configurazione è stata quindi utilizzata per tutte le simulazioni effettuate.

4.1.2 3D vs 2D

Dopo aver effettuato lo studio sul numero di celle all'interno della zona compresa tra la parte esterna del rotore e la parte interna dello statore, sono state analizzate due diverse configurazioni per descrivere l'intera geometria del *cone mill mixer*.



Figura 4-7 Geometria in tre dimensioni del cone mill mixer; indicati come blocchi di colore grigio le zone di fluido del dominio computazionale.

Considerando come dominio computazionale la sola sezione del gap tra rotore e statore, infatti, non descrive in modo corretto i fenomeni di rottura e coalescenza delle particelle di olio presenti nell'emulsione alimentare, perché si trascurerebbe la sezione di imbocco e sbocco di questo gap. Per questo motivo è stato necessario simulare anche la parte della pre-camera e della post-camera. La prima configurazione analizzata è una geometria in tre dimensioni. La figura 4-7 mostra la sezione longitudinale della geometria in tre dimensioni.

Lo scopo di questa analisi è di semplificare la descrizione della geometria del sistema reale. La geometria in tre dimensioni capace di caratterizzare in modo corretto il campo di moto (cioè a valle di uno studio di *grid independence*) presenta un numero di celle pari a 3050000, quindi le simulazioni nella geometria in tre dimensioni risultano molto onerose. Per questo motivo si è deciso di semplificare la trattazione attraverso l'utilizzo di una sezione di 2° in due dimensioni della geometria (Figura 4-8), risultando in una definizione assialsimmetrica del sistema completo del *cone mill mixer*.



Figura 4-8 Geometria in 2D

Al fine di valutare se la semplificazione fosse adeguata è stato fatto un confronto tra i profili di velocità assiale per le due geometrie.

A titolo di esempio viene mostrato nelle seguenti figure il confronto tra i profili di velocità valutato per tre esperimenti, nei quali si hanno tre comportamenti fluidodinamici differenti (Paragrafo 4.2). Il profilo di velocità è stato valutato attraverso la funzione *Plot Over Line* di *Paraview*.

Confronto profili di velocità relativi a maionese con frazione in peso 0,75 kg/kg, esperimento numero 4:

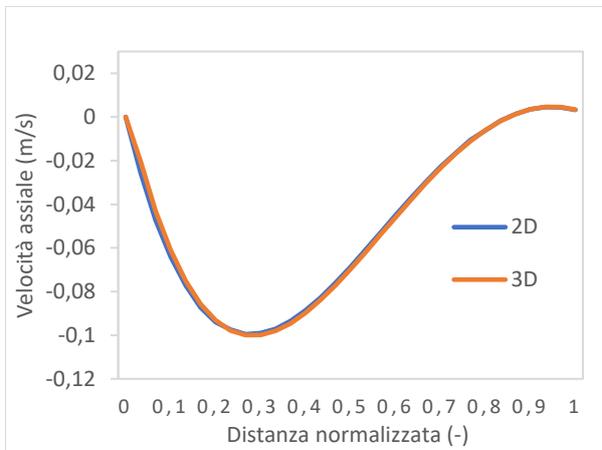


Figura 4-9 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato all'imbocco del gap.

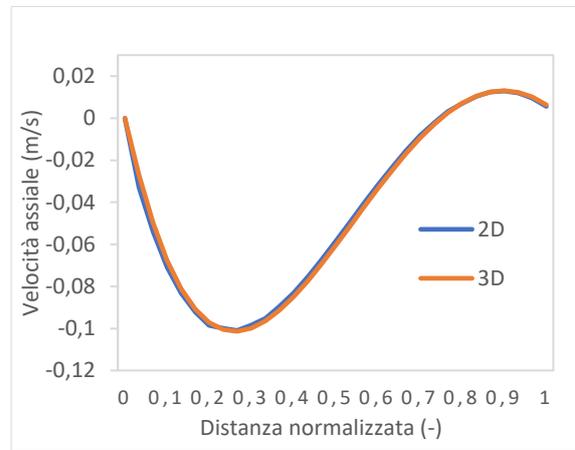


Figura 4-10 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato a metà altezza del gap.

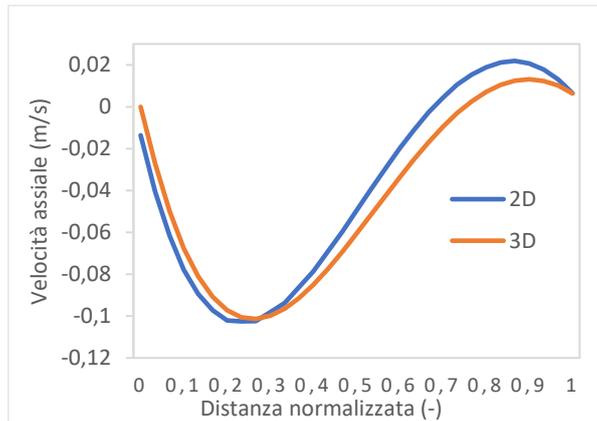


Figura 4-11 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato allo sbocco del gap.

Confronto profili di velocità lungo il gap relativi a maionese con frazione in peso uguale a 0,75 kg/kg, esperimento numero 3:

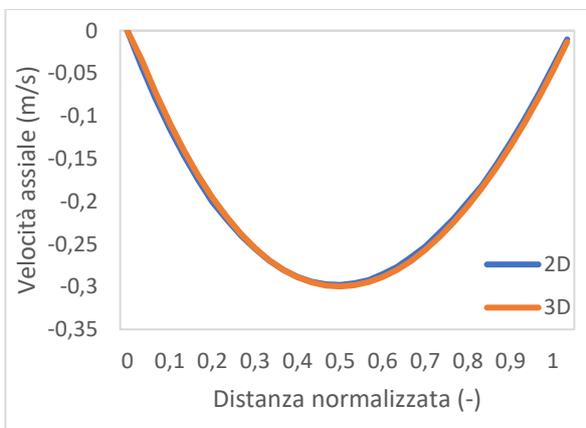


Figura 4-12 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato all'imbocco del gap.

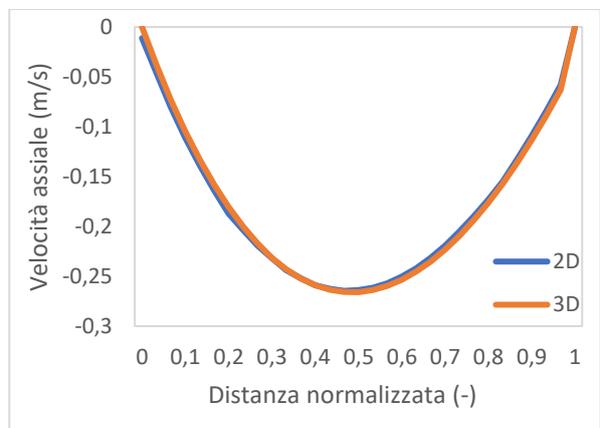


Figura 4-13 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato a metà sezione del gap.

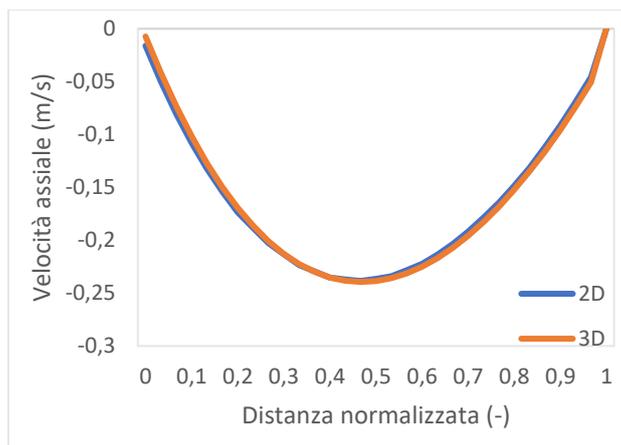


Figura 4-14 Confronto geometria 2D e 3D (M3E3) valutato allo sbocco del gap.

Profili di velocità relativi a maionese con frazione in peso uguale 0,70kg/kg, esperimento numero 1:

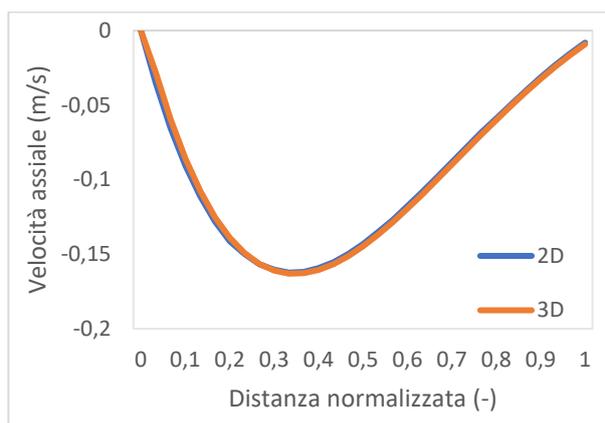


Figura 4-15 Confronto geometria 2D e 3D (M3E1) valutato all'imbocco del gap.

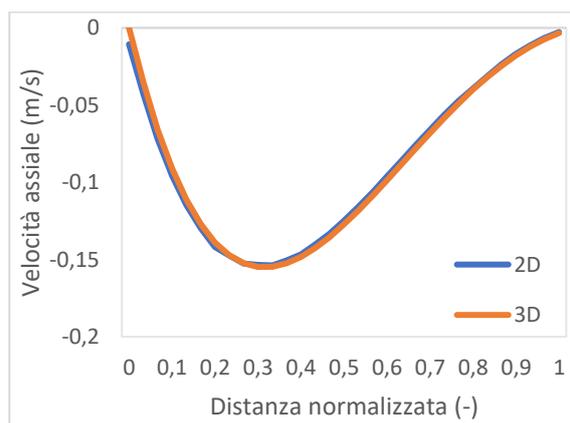


Figura 4-16 Confronto geometria 2D e 3D (M3E1) valutato a metà sezione del gap.

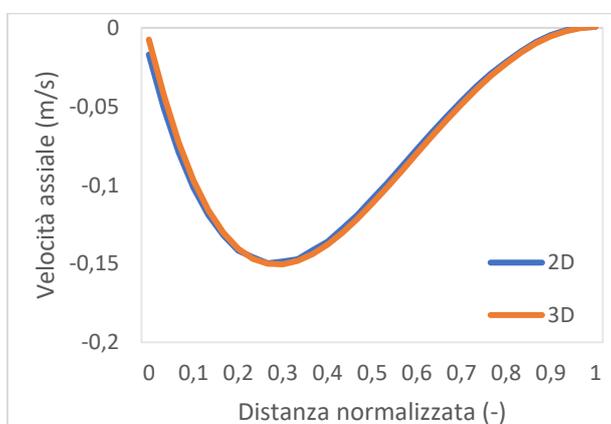


Figura 4-17 Confronto geometria 2D e 3D (M3E4) valutato allo sbocco del gap.

Il profilo di velocità all'interno del *gap* viene descritto in modo appropriato dalle simulazioni effettuate su una sezione della geometria intera in tre dimensioni. L'ipotesi di assialsimmetria è verificata per tutte le condizioni analizzate. Dati gli evidenti vantaggi computazionali, sia in termini di tempo di calcolo che in termini di quantità di memoria utilizzata, la geometria in due dimensioni è stata scelta ed implementata per risolvere il campo di moto relativo al sistema reale della maionese.

4.2 Aspetti fluidodinamici

In questo paragrafo saranno analizzati gli aspetti relativi alle simulazioni di fluidodinamica computazionale effettuate con OpenFOAM.

Il paragrafo sarà quindi suddiviso in due sezioni. La prima sezione è relativa al campo di moto sviluppato nella geometria (Sottoparagrafo 4.2.1). Nella seconda sezione si ha un'analisi dei valori di *mixing index* e *strain rate*, indispensabili per la soluzione del bilancio di popolazione (Sottoparagrafo 4.2.2).

4.2.1 Campo di moto

Tramite l'utilizzo dell'utility *SurfaceLic* di ParaView (che implementa un metodo di visualizzazione basato sulla convoluzione di integrali di linea) per la geometria in due dimensioni è possibile notare la formazione di un vortice nella pre-camera e un vortice nella post-camera. La causa di questi vortici è da attribuire alla particolare geometria del *cone mill mixer*. In particolare, il restringimento improvviso della geometria all'imbocco del *gap* e l'allargamento all'uscita del *gap*, provocano la formazione di vortici molto simili in tutte le simulazioni effettuate. Per questo motivo per lo studio del campo di moto è stata analizzata solo la sezione relativa al *gap*. Nella figura 4.18 vengono mostrate le strutture vorticosi descritte precedentemente.

Al fine di interpretare in modo corretto il comportamento della maionese all'interno del *gap* è necessario calcolare il numero di Reynolds. La formula utilizzata è la seguente:

$$Re = \frac{\Omega R_{max} gap}{\bar{\nu}_{emul}} \quad (4.4)$$

dove Ω è la velocità angolare [rad/s], R_{max} è il raggio massimo [m] e $\bar{\nu}_{emul}$ è la viscosità cinematica media volumica [m^2/s].

Nell'equazione 4.4, poiché il valore del numero di Reynolds può variare a seconda del raggio, viene utilizzato il valore di R_{max} , che rappresenta il raggio massimo nella parte inferiore del *gap*. Può quindi essere considerato questo valore massimo di Reynolds ed è confrontato con il valore di Re_{crit} , uguale a 132, al fine di riconoscere i casi con instabilità.

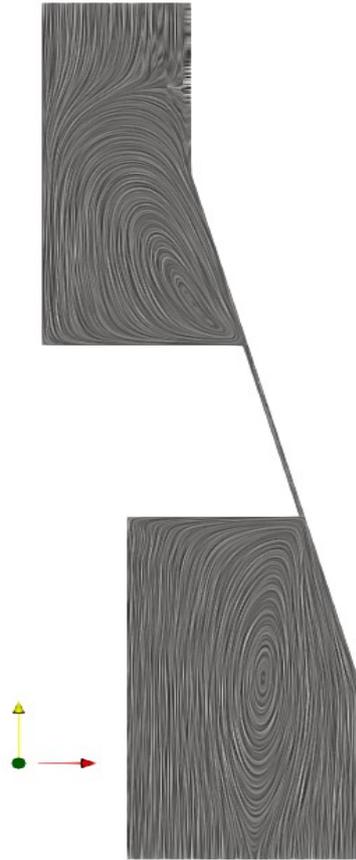


Figura 4-18 Contour plot rappresentante le strutture vorticose presenti nella precamera e nella postcamera.

La tabella 4.6 mostra i valori di Reynolds per le quindici condizioni operative.

Tabella 4.4 Numero di Reynolds massimo per le simulazioni effettuate

Experiment n.	Maionese 1 (0,65 kg/kg)	Maionese 2 (0,7 kg/kg)	Maionese 3 (0,75 kg/kg)
1	393,4	140,0	83,9
2	210,1	61,2	38,5
3	169,6	64,6	37,2
4	394,1	140,0	83,9
5	80,4	26,3	16,1

Il profilo di velocità assiale è quello che meglio descrive il campo di moto sviluppato all' interno del gap al fine di comparare condizioni operative differenti. La figura 4-19 mostra i diversi profili di velocità assiale per la maionese con frazione in peso intermedia (0,7 kg/kg), nel quale è possibile osservare che quando il valore di Re è superiore al valore di Re_{crit} si ha un comportamento instabile.

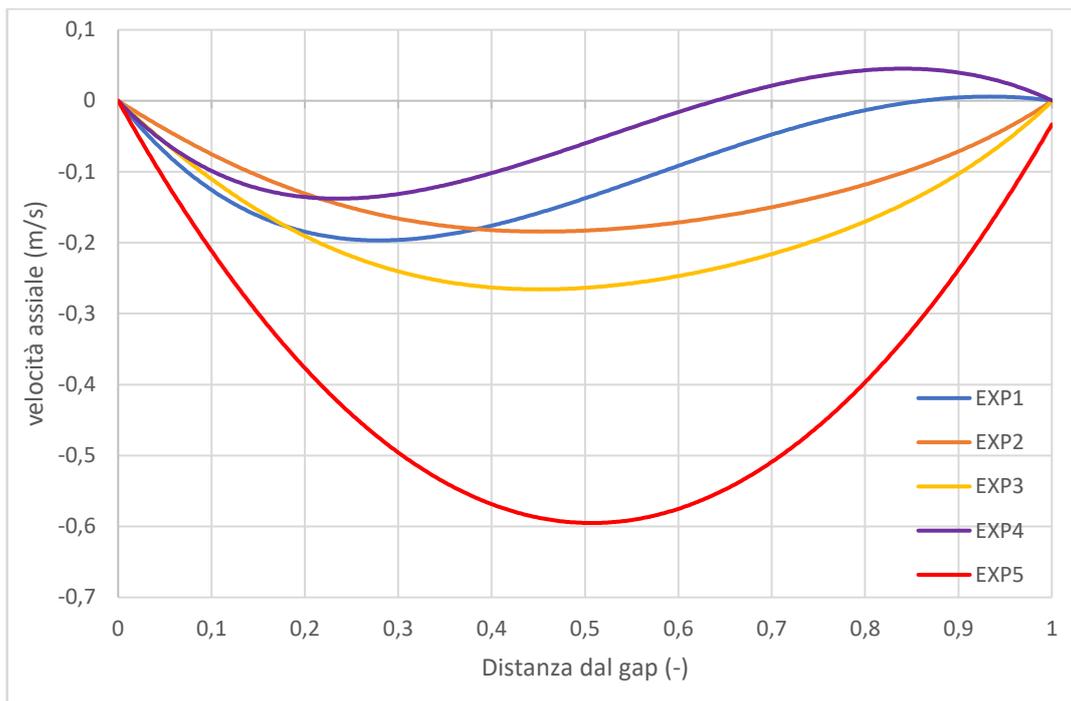


Figura 4-19 Profilo di velocità assiale calcolato a metà altezza del gap per maionese con concentrazione pari a 0,7 kg/kg

Il campo di moto sviluppato nella sezione relativa al gap presenta un comportamento diverso a seconda delle condizioni operative implementate. È possibile suddividere le simulazioni effettuate in tre diversi gruppi a seconda del regime fluidodinamico riscontrato:

- Simulazioni transitorie con formazione di vortici.

Nelle simulazioni effettuate, come già visto nel precedente sottoparagrafo, gli esperimenti n° 1 e 4, relativi alla maionese con frazione in peso minore (0,65 kg/kg), presentano un comportamento instabile che porta alla formazione di più vortici di Taylor all'interno del gap (Figura 4-1).

- Simulazioni stazionarie con *backflow*.

Gli esperimenti n° 1 e 4, relativi alla maionese con frazione in peso intermedia (0,7 kg/kg) e l'esperimento n° 4 effettuato sulla maionese con frazione in peso maggiore (0,75 kg/kg) presentano un comportamento definito in questa trattazione con la parola *backflow*. In questi esperimenti, è possibile notare che nelle vicinanze del rotore la velocità assiale ha un andamento verso il basso, mentre in prossimità dello statore verso l'alto. Questo particolare andamento suggerisce la presenza di un grande vortice lungo tutta la sezione del gap.

- Simulazioni stazionarie con profilo parabolico.

Il resto delle simulazioni effettuate presenta un profilo parabolico di velocità assiale nel quale non si osservano instabilità.

4.2.2 *Mixing index e strain rate*

La caratterizzazione degli aspetti fluidodinamici prosegue in questo sottoparagrafo con l'analisi dei valori di *strain rate* e *mixing index*. A questo punto della trattazione, risulta necessario ribadire che sia la scelta della geometria completa, che la seguente analisi sui valori di *strain rate* e *mixing index* è stata effettuata al fine di descrivere in modo corretto i meccanismi di rottura e coalescenza delle particelle di olio presenti nell'emulsione alimentare.

Per tutti gli esperimenti sono stati estratti dalle simulazioni CFD i valori relativi al volume delle celle, allo *strain rate* e al *mixing index*. Un file che raccoglie queste informazioni (*data.dat*) viene compilato automaticamente come post-processing, implementando nel file *controlDict* di OpenFOAM un codice in C++ in grado di estrarre per ogni cella del dominio del fluido i rispettivi valori di *mixing index*, *strain rate* e volume. Attraverso il file *data.dat* con un codice in Python è stato possibile raffigurare in modo compatto le informazioni relative a questi parametri. Nella figura 4-20 sono raffigurati in ascissa i valori di *strain rate*, in ordinata i valori di *mixing index* e i diversi colori rappresentano la frazione volumica del dominio computazionale che è rappresentata dai corrispondenti valori di *strain rate* e *mixing index*.

La velocità di rotazione del rotore influisce significativamente sui valori di *strain rate*. All'interno del gap, i valori di velocità di deformazione sono nettamente maggiori rispetto alla precamera e postcamera. Tra i diversi esperimenti, quelli che presentano velocità di rotazione maggiore hanno dei valori maggiori di *strain rate*. I valori di *mixing index* sono anch'essi influenzati dalla velocità di rotazione e dallo *strain rate*. L'ampiezza della sezione relativa al gap influenza i valori delle due proprietà analizzate nel seguente sottoparagrafo. Infatti, se il gap è più piccolo i valori di *strain rate* sono maggiori. La portata massica in entrata influenza invece il tempo di residenza. Maggiore è la portata e maggiore sarà il tempo di residenza.

Incrociando i dati dei contour plot di *mixing index* e *strain rate* è stato possibile contraddistinguere le diverse zone presenti nella figura 4-20. In particolare, negli esperimenti n° 1, 2 e 4 si può osservare un picco per quanto riguarda il valore di *mixing index* a valori di *shear rate* bassi, che rappresenta la sezione di ingresso del fluido. Il picco non è osservabile negli esperimenti n°3 e 5 a causa della minore velocità di rotazione. La coda nella parte inferiore del grafico che presenta valori di *mixing index* bassi è relativa alla precamera, nella quale il moto risulta essere principalmente di pura rotazione. I valori alti di *strain rate* rappresentano invece il gap, dove si ha principalmente *simple shear flow*.

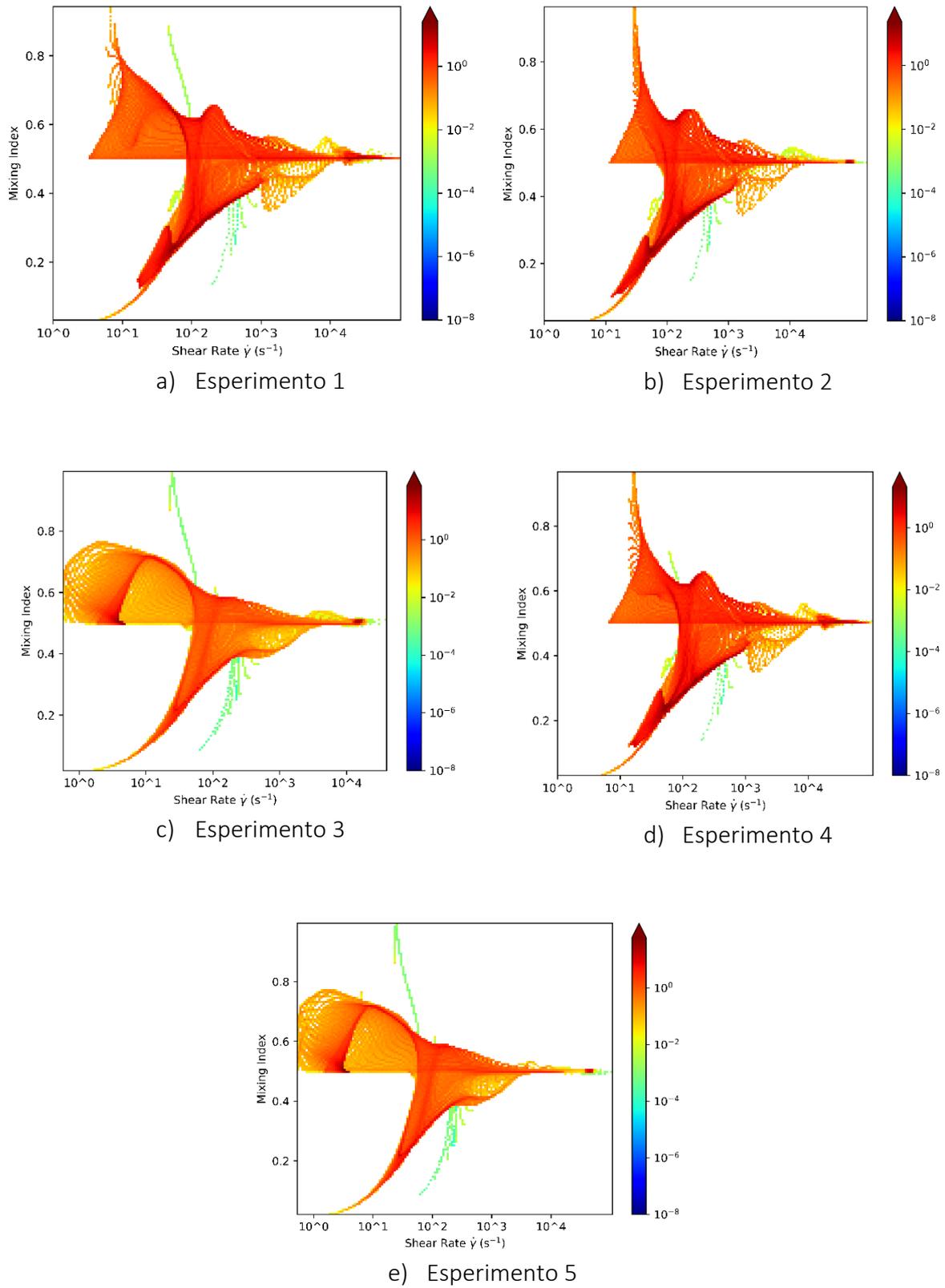


Figura 4-20 Rappresentazione dei valori di mixing index e strain rate per la maionese con frazione in peso 0,65 kg/kg

4.3 D32

Attraverso i parametri estratti dalle simulazioni fluidodinamiche è stato possibile ricavare i dati relativi al diametro di Sauter. La risoluzione del bilancio di popolazione è stata effettuata attraverso l'uso del metodo di quadratura dei momenti (QMOM) per diverse condizioni. Questa prima analisi è servita per capire quanto le diverse condizioni fluidodinamiche (pura rotazione, simple shear flow, elongazionale) influissero sul diametro di Sauter. La correttezza del modello di predizione è stata valutata attraverso il confronto con i dati sperimentali presenti nel lavoro di Dubbelboer (Dubbelboer et al., 2016). In particolare, è stato effettuato il confronto attraverso il calcolo dell'errore relativo per ogni esperimento tra il valore dato dal modello e il valore sperimentale.

La maionese analizzata in questo lavoro di tesi presenta un valore di rapporto di viscosità tra la fase dispersa e la fase continua, che non rientra nel range accettabile per la descrizione della rottura delle gocce tramite l'equazione (2.1). Per questo motivo, sono state effettuate diverse prove con diversi valori di rapporto di viscosità (λ).

4.3.1 Rapporto di viscosità 1 (nu.disp/nu.cont)

Non considerando inizialmente la condizione imposta sull'equazione relativa al numero di capillarità critico, il bilancio di popolazione è stato implementato con il rapporto di viscosità tra la fase dispersa e la fase continua. Le seguenti tabelle mostrano i risultati relativi al diametro di Sauter prima per le condizioni di *simple shear flow*, poi considerando l'effetto di *elongational flow*, e poi per la combinazione delle due.

Tabella 4.5 Predizione d32 del modello per solo simple shear flow

	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
Exp	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	7,226	0,003	6,587	4,513	0,315	4,647	2,866	0,383
2	8,787	7,111	0,191	5,844	4,246	0,273	4,815	2,698	0,440
3	12,364	9,176	0,258	7,713	5,252	0,319	6,063	3,427	0,435
4	22,867	7,475	0,673	15,176	4,571	0,699	10,179	2,881	0,717
5	31,531	8,706	0,724	26,990	5,020	0,814	17,066	3,417	0,800

Tabella 4.6 Predizione d32 del modello per solo campo elongazionale

	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
Exp	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	49,071	5,810	6,587	29,250	3,441	4,647	18,043	2,883
2	8,787	44,688	4,086	5,844	27,810	3,759	4,815	20,132	3,181
3	12,364	82,346	5,660	7,713	33,714	3,371	6,063	19,173	2,162
4	22,867	46,650	1,040	15,176	31,512	1,076	10,179	20,242	0,989
5	31,531	80,296	1,547	26,990	34,396	0,274	17,066	19,575	0,147

Tabella 4.7 Predizione d32 del modello per simple shear flow e moto elongazionale

	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
Exp	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	7,246	0,006	6,587	4,517	0,314	4,647	2,868	0,383
2	8,787	7,133	0,188	5,844	4,252	0,272	4,815	2,700	0,439
3	12,364	9,186	0,257	7,713	5,258	0,318	6,063	3,430	0,434
4	22,867	7,499	0,672	15,176	4,575	0,699	10,179	2,883	0,717
5	31,531	8,719	0,723	26,990	5,025	0,814	17,066	3,420	0,800

Dall'analisi di questi risultati risulta evidente che i fenomeni di rottura nel caso di flusso elongazionale influiscono poco sul calcolo del diametro di Sauter.

I risultati ottenuti con questo rapporto di viscosità riportano dei valori di errore relativo accettabili per i primi tre esperimenti, mentre si ottengono errori con valore superiore al 60% per gli esperimenti n° 4 e 5.

Come introdotto precedente, la maionese analizzata in questa trattazione presenta un valore di viscosità superiore al limite imposto dalla relazione sul numero di capillarità critico. In prossimità del valore limite si nota una singolarità nella funzione (Figura 4-21).

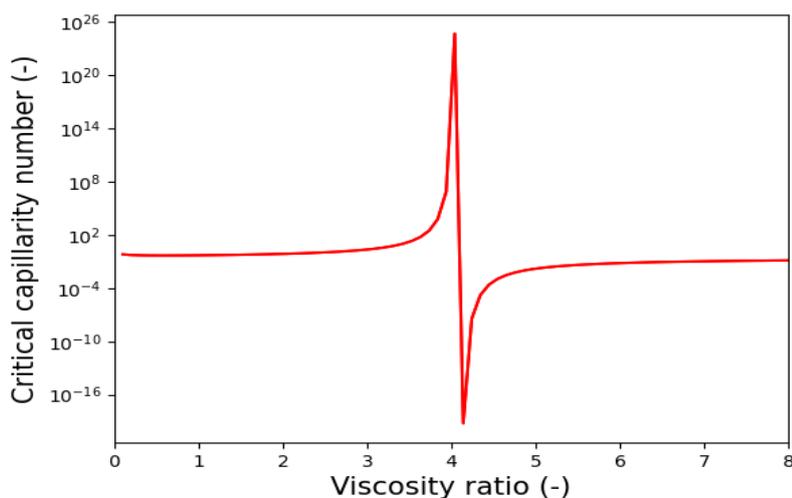


Figura 4-21 Numero di Capillarità critico in funzione del rapporto di viscosità in simple shear flow

Data l'impossibilità di utilizzare per la relazione del numero di capillarità critico nel caso di *simple shear flow* il rapporto di viscosità canonico, nei successivi sottoparagrafi si utilizza un rapporto di viscosità non costante e uguale a viscosità della fase dispersa su viscosità dell'emulsione.

4.3.2 Rapporto di viscosità 2 (nu.disp/nu.emul)

Nelle tabelle presentate in seguito vengono mostrati i risultati relativi al diametro d32, nel quale è stato implementato nel codice il rapporto di viscosità calcolato come rapporto tra la viscosità della fase dispersa e la viscosità dell'emulsione; come in precedenza, prima per il caso di solo *shear flow*, e poi considerando l'effetto combinato di *shear flow* e *elongational flow*.

Tabella 4.8 Predizione d32 del modello per solo simple shear flow

Exp	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	24,969	2,4650	6,587	22,714	2,4483	4,647	20,668	3,4476
2	8,787	24,465	1,7842	5,844	20,712	2,5441	4,815	18,909	2,9271
3	12,364	34,311	1,7751	7,713	28,726	2,7244	6,063	27,649	3,5603
4	22,867	26,02	0,1379	15,176	23,001	0,5156	10,179	20,816	1,0450
5	31,531	32,288	0,0240	26,990	26,781	0,0077	17,066	27,646	0,6199

Tabella 4.9 Predizione sul d32 per simple shear flow and elongational flow

Exp	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	24,958	2,464	6,587	22,766	2,456	4,647	20,659	3,446
2	8,787	24,641	1,804	5,844	20,704	2,543	4,815	18,903	2,926
3	12,364	34,304	1,775	7,713	28,712	2,723	6,063	27,633	3,558
4	22,867	26,007	0,137	15,176	22,994	0,515	10,179	20,808	1,044
5	31,531	32,281	0,024	26,990	26,769	0,008	17,066	27,630	0,619

L'andamento risulta in questo caso opposto rispetto al precedente e gli esperimenti n° 4 e 5 vengono descritti in modo migliore rispetto ai primi tre. Anche in questo caso l'influenza del moto elongazionale è trascurabile ai fini del calcolo del diametro di Sauter.

Questa conclusione è conseguita in uno studio ulteriore per capire in quale posizione della geometria le gocce si rompono. Lo studio è stato effettuato con il filtro di *Paraview* chiamato *Calculator*. Per ogni condizione fluidodinamica esaminata nel sottoparagrafo 4.3.1 è stato estratto un *contour plot* per identificare le zone nel quale le gocce si rompono, sia in campo di *simple shear flow* che in campo elongazionale. Le figure 4-21, 4-22, e 4-23 mostrano quindi il valore del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico, raggiungendo la rottura delle gocce dove questo rapporto supera l'unità'. Per interpretare in modo corretto il grafico è stato aggiunto il *countour plot* relativo al *mixing index*. In questo modo è stato possibile evidenziare a quale situazione fluidodinamica corrispondano le porzioni di geometria nelle quali il numero di capillarità critico è maggiore rispetto al numero di capillarità.

Il numero di capillarità (Equazione 2.15) è direttamente proporzionale al diametro delle particelle (L). Dopo numerose prove è stato scelto come valore iniziale da inserire all'interno dell'equazione 2.15, per il confronto con il numero di capillarità critico, il valore presente nell'area di premixing. Per valori più piccoli, infatti, la rottura delle gocce non era apprezzabile in modo significativo.

La figura (4-22) mostra il *countour plot* del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per l'esperimento n° 3 relativo alla maionese con frazione in massa uguale a 0,7 kg/kg. Per una migliore leggibilità dei *contour plot* è stato impostato come limite del rapporto il valore 3.

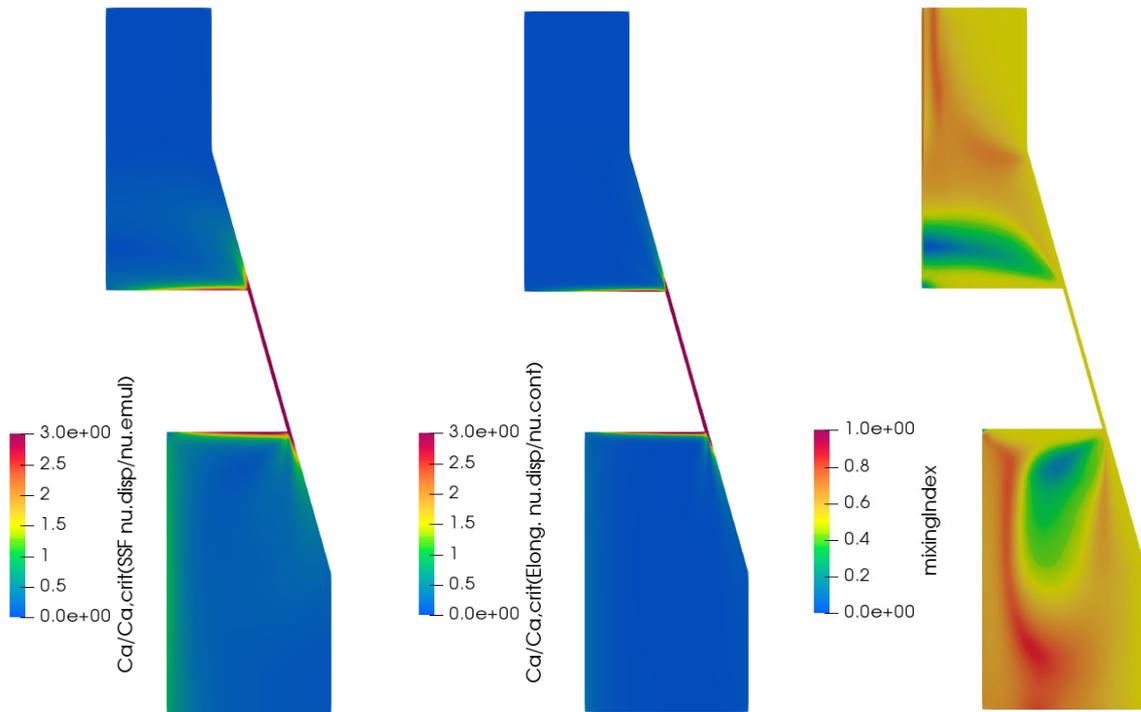


Figura 4-22 Countour plot per M2E3 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)

La figura (4-23) mostra il countour plot del rapporto tra i numeri di capillarità per l'esperimento n° 4 della maionese con frazione in massa uguale a 0,7 kg/kg, nel quale il campo di moto all'interno del gap è caratterizzato da *backflow*.

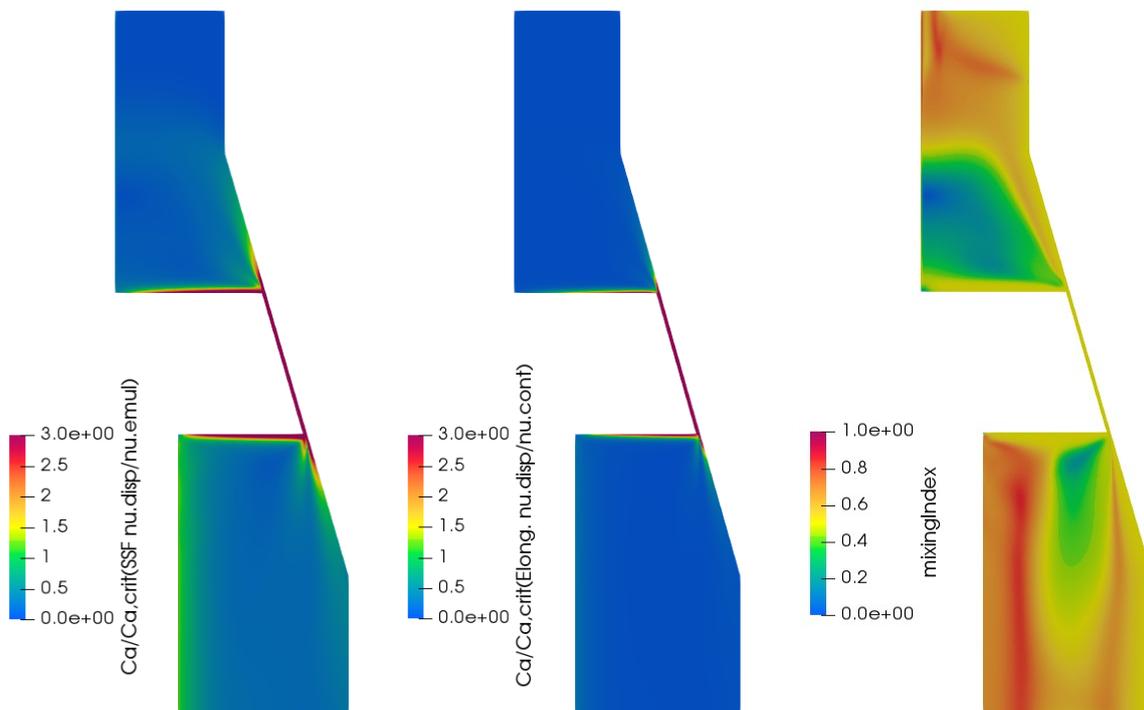


Figura 4-23 Countour plot per M2E4 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)

Infine, la figura (4-24) è rappresentativa dell'esperimento nel quale si hanno i vortici all'interno del gap. In particolare, viene raffigurato il countour plot dell'esperimento n° 1 della maionese con concentrazione minore.

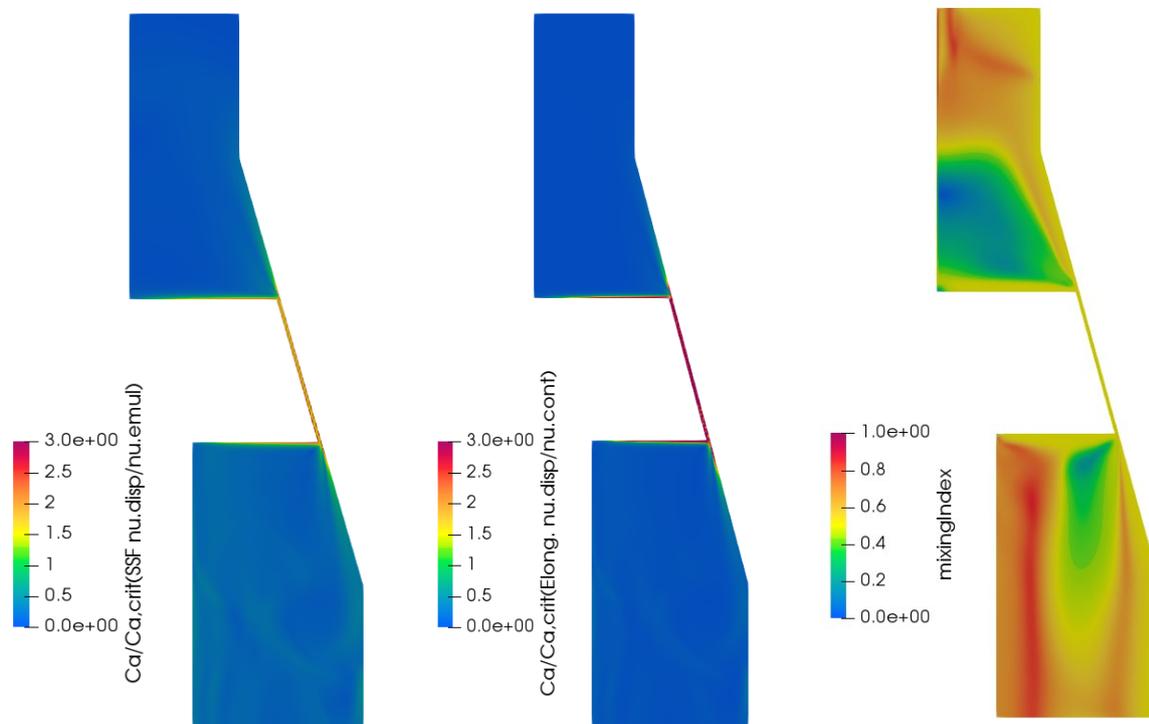


Figura 4-24 Countour plot per M1E1 del rapporto tra il numero di capillarità e il numero di capillarità critico per simple shear flow (sinistra), flusso elongazionale (centrale). Mixing index (destra)

La rottura delle gocce avviene principalmente all'interno del gap per tutte e tre le condizioni esaminate. Nella precamera e nella post camera solo le zone prossime al rotore sono rilevanti per la rottura. Infatti, il valore del rapporto tra Ca e Ca_{crit} è maggiore di uno all'interno nel gap, sia nel caso di moto elongazionale che di *simple shear flow*. Attraverso un confronto con il grafico relativo al *mixing index* è possibile notare che all'interno del gap il moto è caratterizzato da *simple shear flow*. Questo spiega perché non si apprezza la rottura per meccanismi elongazionali nei dati relativi al diametro di Sauter presentati precedentemente.

4.3.3 Rapporto di viscosità 3

Data l'impossibilità di utilizzare il valore corretto di rapporto di viscosità (viscosità della fase dispersa/viscosità della fase continua) nel caso di *simple shear flow*, per l'ottenimento del diametro d_{32} sono stati applicati due diversi tipi di *viscosity ratio* a seconda del tipo di moto sviluppato. La tabella 4-10 mostra i risultati del diametro di Sauter, ottenuti attraverso il metodo di quadratura dei momenti (QMOM), implementando come rapporto di viscosità nel caso di moto elongazionale il rapporto tra la viscosità della fase dispersa e la viscosità della fase continua, mentre nel caso di *simple shear flow* il rapporto presenta a denominatore la viscosità dell'emulsione.

La figura (4-25) mostra l'andamento del numero di capillarità critico nel caso di flusso elongazionale e l'andamento del numero di capillarità critico nel caso di *simple shear flow*.

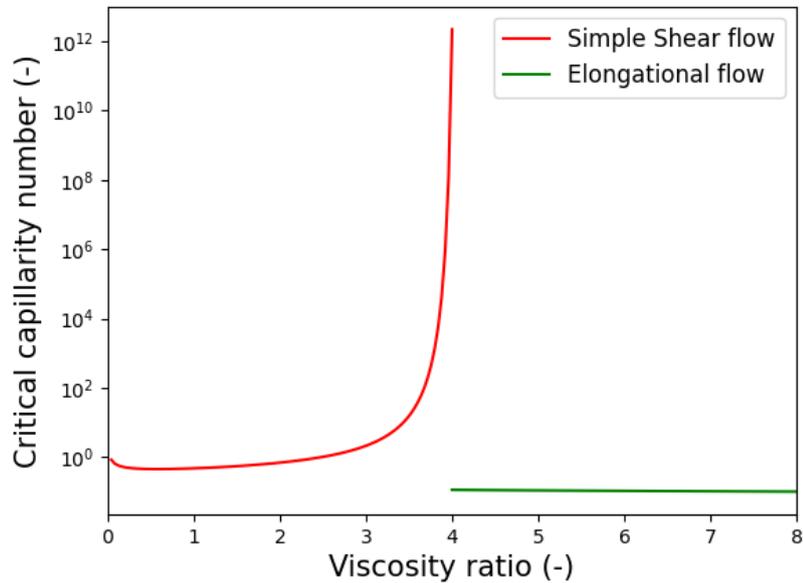


Figura 4-25 Numero di capillarità critico per simple shear flow (rosso) e flusso elongazionale (verde)

Tabella 4.10 Predizione sul d32 per simple shear flow and elongational flow rapporto di viscosità 3

Exp	Maionese 1 (0,65 kg/kg)			Maionese 2 (0,7 kg/kg)			Maionese 3 (0,75 kg/kg)		
	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore	Exp.data (μm)	Model (μm)	Errore
1	7,206	9,53	0,323	6,587	5,18	0,214	4,647	3,18	0,316
2	8,787	9,25	0,053	5,844	4,78	0,182	4,815	2,95	0,387
3	12,364	11,99	0,030	7,713	6,13	0,205	6,063	3,83	0,368
4	22,867	9,77	0,573	15,176	5,23	0,655	10,179	3,19	0,687
5	31,531	11,18	0,645	26,990	5,69	0,789	17,066	3,82	0,776

Il modello descrive in modo appropriato i fenomeni di rottura e coalescenza delle gocce di olio presenti nell'emulsione alimentare. Anche in questo caso, gli errori relativi sugli esperimenti n° 4 e 5 risultano avere un valore molto alto. È necessaria quindi un'ottimizzazione sui parametri K_1, K_2, K_3, K_4 presenti nell'equazione del kernel di rottura e del kernel di aggregazione (Equazione 2.12/2.13)

4.3.4 Incertezza nei dati sperimentali

I dati sperimentali utilizzati per il confronto con i valori del modello, presentati nei sottoparagrafi precedenti, sono stati forniti dal lavoro di un team di ricerca di Unilever. Il modello presentato per la predizione del diametro delle gocce di olio disperse nell'emulsione fallisce per alcuni esperimenti. In particolare, per quanto riguarda gli esperimenti n° 4 e 5 tutti i modelli proposti presentano errori relativi molto alti.

Esaminando diversi articoli accademici, tra cui principalmente il lavoro di Maindarkar (Maindarkar et al., 2014b), è stato possibile investigare ogni singolo effetto (velocità del rotore, frazione volumetrica, portata in entrata, grandezza del gap) separatamente.

La velocità del rotore ha un grosso impatto sul valore di diametro di Sauter ed influisce sul valore di *strain rate*. Aumentando la velocità del rotore, il valore del diametro delle gocce di olio disperse nell'emulsione sarà minore. Viceversa, se la velocità del rotore diminuisce si avranno delle gocce di olio di maggiore dimensione (Maindarkar et al., 2014b).

Anche la frazione volumetrica dell'emulsione alimentare influenza la dimensione delle gocce. Infatti, se la frazione volumetrica è maggiore si manifestano maggiori collisioni che producono gocce di dimensioni minori (Maindarkar et al., 2014b).

La portata in entrata influenza il tempo di residenza all'interno della geometria del *cone mill mixer*, che di conseguenza influenza la rottura delle gocce di olio. La relazione tra la portata in ingresso e il diametro di Sauter risulta quindi essere proporzionale. Maggiore è il *flow rate* maggiore sarà la dimensione delle gocce di olio (Maindarkar et al., 2014b).

La dimensione del gap influenza i valori di *strain rate*. Con larghezza del gap maggiore, il valore di *strain rate* sarà minore e i fenomeni di rottura saranno limitati, portando a maggiori dimensioni delle gocce di olio disperse nella fase continua.

La figura 4-26 mostra quando descritto precedentemente in modo sintetico: la lettura di questo schema mostra ad esempio, come detto in precedenza, che all'aumentare della velocità del rotore la dimensione finale delle gocce sia minore (gocce piccole) e viceversa per velocità minori del rotore la loro dimensione finale sia più grande (gocce grandi).

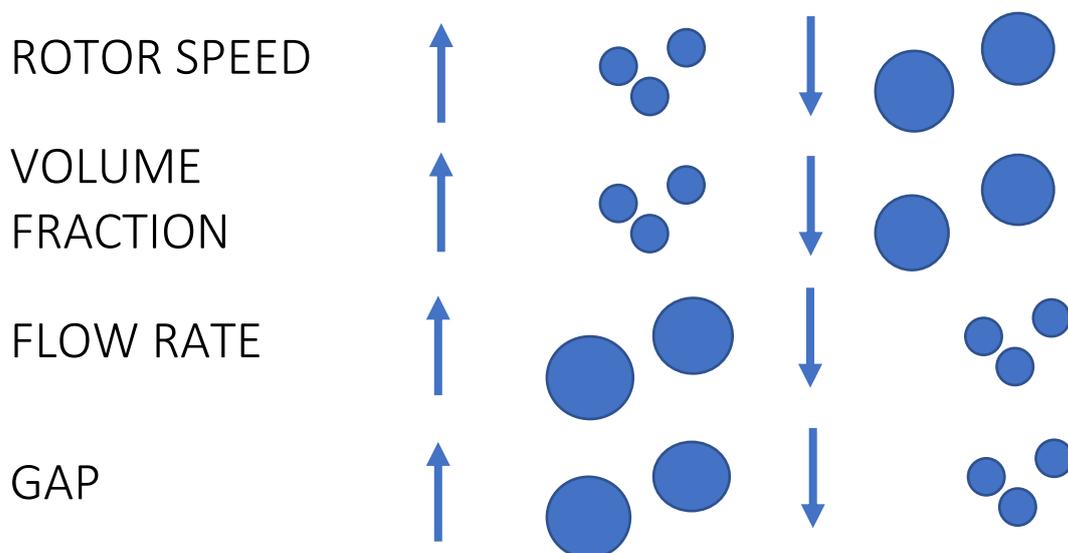


Figura 4-26 Influenza dei parametri di rotor speed, volume fraction, flow rate e ampiezza del gap sul valore di d₃₂

Dagli esperimenti è possibile notare che aumentando la frazione volumetrica della maionese, quindi passando dalla maionese 1 alla maionese 3, il valore del diametro di Sauter sia sperimentale che del modello diminuisce, confermando quanto precedentemente indicato dall'articolo di Maindarkar.

Viene quindi analizzata ai fini di questa trattazione solo la maionese con frazione in peso della fase dispersa sulla fase continua uguale a 0.65 kg/kg. La seguente trattazione è valida per tutti i tipi di maionese esaminati in questo lavoro di tesi. La tabella 4.11 mostra le condizioni operative implementate per ogni esperimento e i dati sperimentali sul diametro di Sauter.

Tabella 4.11 Parametri implementati nel modello e risultati sperimentali

Experiment. no.	Rotor speed (rpm)	Gap (mm)	Flow rate (Kg/h)	D32 exp. data Maionese 1 (μm)
1	6039	0,624	31	7,206
2	6784	0,208	15	8,787
3	3170	0,624	64	12,364
4	6039	0,624	15	22,867
5	3170	0,208	48	31,531

Tramite un confronto tra la tabella 4.11 e la figura 4-25 è possibile notare delle incertezze relative ai dati sperimentali.

Gli esperimenti n° 1 e 4 presentano lo stesso valore di velocità del rotore, lo stesso valore di ampiezza del gap, ma la portata entrante nell'esperimento n°1 è maggiore rispetto alla portata entrante nell'esperimento n° 4. Portata entrante maggiore, secondo quanto esposto precedentemente, dovrebbe portare a goccioline di dimensione maggiore. La dimensione delle gocce di olio, però, è maggiore nell'esperimento n°4 rispetto all'esperimento n°1. Il lettore potrebbe sicuramente attribuire questa incoerenza al campo di moto sviluppato all'interno del gap, ma tutti e due gli esperimenti presentano lo stesso comportamento, nel quale si verificano vortici di Taylor.

Gli esperimenti n° 3 e 5 hanno la stessa velocità del rotore, ma differente ampiezza del gap e portata in entrata. Sia l'ampiezza del gap che la portata in entrata sono minori nell'esperimento n° 5 rispetto all'esperimento n° 3. L'esperimento n° 3 dovrebbe quindi avere il valore di diametro di Sauter maggiore rispetto all'esperimento n° 5, ma così non è.

Gli esperimenti n°2 e 4 hanno la stessa portata in entrata, ma differente velocità del rotore e ampiezza del gap. La velocità del rotore è lievemente maggiore nell'esperimento n° 2. L'ampiezza del gap è minore nell'esperimento n° 2. La dimensione delle gocce della fase dispersa dovrebbe avere un valore minore nell'esperimento n°2 rispetto all'esperimento n°4.

In ultima analisi, viene effettuato il confronto tra l'esperimento n°1 e l'esperimento n° 2. La velocità del rotore è maggiore nell'esperimento n° 2. L'ampiezza del gap e la portata in entrata è maggiore per l'esperimento n° 1 rispetto all'esperimento n° 2. Il diametro d_{32} dovrebbe quindi avere una dimensione minore nell'esperimento n°2 rispetto all'esperimento n°1. In questo confronto, però, si sviluppano all'interno della geometria due campi di moto differenti che potrebbero influire sul valore del diametro di Sauter.

Il modello CFD, per la predizione del diametro d_{32} delle goccioline di olio disperse nella fase continua dell'emulsione alimentare, presentato in questo lavoro di tesi, non presenta queste incoerenze e segue invece le evidenze sperimentali riportate da Maindarkar, ottenendo così una validazione indiretta.

Il motivo di queste contraddizioni potrebbe essere ricondotto ad un'incertezza sui dati sperimentali o ad un'analisi non completa, che non considera alcuni aspetti relativi al campo di moto.

5 Conclusioni

L'utilizzo di simulazioni di fluidodinamica computazionale, eseguite attraverso il software di modellazione OpenFOAM, fornisce risultati sul campo di moto sviluppato all'interno del *cone mill mixer*. In accordo con i precedenti lavori sulla descrizione del comportamento di emulsioni alimentari in apparecchiature dedicate al processo di emulsificazione, al variare delle condizioni si osservano comportamenti fluidodinamici differenti. In particolare, si osserva la presenza di instabilità e conseguente formazione di vortici di Taylor in condizioni operative nel quale il numero di Taylor supera il valore critico. L'accoppiamento dei risultati di fluidodinamica computazione con la soluzione di equazioni di bilancio di popolazione ha portato a risultati relativi al diametro delle gocce della fase dispersa che in alcuni casi sono in accordo con i dati sperimentali. Il modello sviluppato in questo lavoro di tesi, a differenza dei precedenti lavori, oltre alla considerazione delle differenti tipologie di moto (*elongazionale, simple shear flow*) considera sia i fenomeni di rottura che i fenomeni di coalescenza. La rottura delle gocce in campo elongazionale non influisce in maniera considerevole sul valore finale del diametro di Sauter. La rottura delle gocce di olio è influenzata dal campo di moto, dalla velocità di rotazione del rotore, dalla concentrazione, dalla portata in entrata e dall'ampiezza del gap. In particolare:

- se la velocità di rotazione del rotore aumenta si ha un aumento del valore locale di *strain rate*, che provoca una rottura maggiore delle gocce della fase dispersa;
- se la concentrazione della fase dispersa aumenta si ottengono gocce di dimensione minore;
- se la portata in entrata diminuisce si ha una diminuzione del tempo di permanenza dell'emulsione alimentare all'interno della geometria del *cone mill mixer*, che causa di conseguenza una minore rottura delle gocce di olio nella fase dispersa;
- se l'ampiezza del gap diminuisce, il valore di *strain rate* locale aumenta causando una maggiore rottura delle gocce.

Il prossimo step nello studio del processo di produzione di emulsioni alimentari sarà l'ottimizzazione dei parametri che compaiono nelle equazioni relative ai Kernel di rottura e coalescenza. Per procedere con questa analisi sarà necessario, però, risolvere il problema relativo all'incertezza dei valori sperimentali.

Acronimi

LDL	Lipoproteine a bassa densità
DSD	Droplet size distribution
CFD	Computational fluid dynamics
PBM	Population Balance Method
PBE	Population Balance Equation
QMOM	Quadrature Method Of Moment
MI	Mixing Index
NDF	Number Density Function
PSO	Particle swarm optimization
CMA-ES	Covariance matrix adaptation evolution strategy
FOU	First Order Upwind
CDS	Central differencing scheme
GAMG	Geometric agglomerated Algebraic MultiGrid
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
PISO	Pressure-Implicit with Splitting of Operators

Bibliografia

- Almeida-Rivera, C., Bongers, P., 2010. Modelling and experimental validation of emulsification processes in continuous rotor–stator units. *Computers & Chemical Engineering* 34, 592–597. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.01.017>
- Amalia D'Amore, 2008. Sviluppo di una nuova maionese funzionale ricca in acidi grassi omega 3 e 6: Caratterizzazione strumentale e sensoriale. Università degli studi di Napoli Federico II, Napoli.
- Bentley, B.J., Leal, L.G., 1986. An experimental investigation of drop deformation and breakup in steady, two-dimensional linear flows. *J. Fluid Mech.* 167, 241. <https://doi.org/10.1017/S0022112086002811>
- Bird, R.B., 2002. Transport phenomena. *Applied Mechanics Reviews* 55, R1–R4. <https://doi.org/10.1115/1.1424298>
- Buffo, A., Marchisio, D.L., Vanni, M., Renze, P., 2013. Simulation of polydisperse multiphase systems using population balances and example application to bubbly flows. *Chemical Engineering Research and Design* 91, 1859–1875. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.06.021>
- Computational Fluid Dynamics for Engineers, 2005. . Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/3-540-27717-X>
- Dubbelboer, A., 2016. Towards optimization of emulsified consumer products : modeling and optimization of sensory and physicochemical aspects. (Doctor of Philosophy). Department of Chemical Engineering and Chemistry, Eindhoven.
- Dubbelboer, A., Janssen, J.J.M., Hoogland, H., Zondervan, E., Meuldijk, J., 2016. Pilot-scale production process for high internal phase emulsions: Experimentation and modeling. *Chemical Engineering Science* 148, 32–43. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.03.014>
- Gao, Z., Li, D., Buffo, A., Podgórska, W., Marchisio, D.L., 2016. Simulation of droplet breakage in turbulent liquid–liquid dispersions with CFD-PBM: Comparison of breakage kernels. *Chemical Engineering Science* 142, 277–288. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.11.040>
- Gershenfeld, N.A., Gershenfeld, N., 1999. The nature of mathematical modeling. Cambridge university press.
- Grace†, H.P., 1982. DISPERSION PHENOMENA IN HIGH VISCOSITY IMMISCIBLE FLUID SYSTEMS AND APPLICATION OF STATIC MIXERS AS DISPERSION DEVICES IN SUCH SYSTEMS. *Chemical Engineering Communications* 14, 225–277. <https://doi.org/10.1080/00986448208911047>
- Hansen, N., 2016. The CMA evolution strategy: A tutorial. arXiv preprint arXiv:1604.00772.
- Hansen, N., 2006. The CMA evolution strategy: a comparing review, in: *Towards a New Evolutionary Computation*. Springer, pp. 75–102.
- IKA process, n.d. Ika mixing and processing technology.
- Lemenand, T., Dupont, P., Valle, D.D., Peerhossaini, H., 2013. Comparative efficiency of shear, elongation and turbulent droplet breakup mechanisms: Review and application. *Chemical Engineering Research and Design* 91, 2587–2600. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.03.017>
- Li, D., Gao, Z., Buffo, A., Podgórska, W., Marchisio, D.L., 2017. Droplet breakage and coalescence in liquid–liquid dispersions: Comparison of different kernels with EQMOM and QMOM. *AIChE J.* 63, 2293–2311. <https://doi.org/10.1002/aic.15557>

- Li, Q., Wen, P., Xu, L., 2010. Transition to Taylor Vortex Flow Between Rotating Conical Cylinders. *J Hydrodyn* 22, 241–245. [https://doi.org/10.1016/S1001-6058\(09\)60050-0](https://doi.org/10.1016/S1001-6058(09)60050-0)
- Li, X., Zhang, J., Xu, L., 2014. A numerical investigation of the flow between rotating conical cylinders of two different configurations. *J Hydrodyn* 26, 431–435. [https://doi.org/10.1016/S1001-6058\(14\)60049-4](https://doi.org/10.1016/S1001-6058(14)60049-4)
- Maindarkar, S., Dubbelboer, A., Meuldijk, J., Hoogland, H., Henson, M., 2014a. Prediction of emulsion drop size distributions in colloid mills. *Chemical Engineering Science* 118, 114–125. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.07.032>
- Maindarkar, S., Dubbelboer, A., Meuldijk, J., Hoogland, H., Henson, M., 2014b. Prediction of emulsion drop size distributions in colloid mills. *Chemical Engineering Science* 118, 114–125. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.07.032>
- Marcato Agnese, 2019. Accoppiamento di CFD e MachineLearning: due casi studio nell'ingegneria di processo. Politecnico di Torino, Torino.
- Marchisio, D.L., Piktorna, J.T., Fox, R.O., Vigil, R.D., Barresi, A.A., 2003a. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE J.* 49, 1266–1276. <https://doi.org/10.1002/aic.690490517>
- Marchisio, D.L., Vigil, R.D., Fox, R.O., 2003b. Quadrature method of moments for aggregation–breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science* 258, 322–334. [https://doi.org/10.1016/S0021-9797\(02\)00054-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9797(02)00054-1)
- Noui-Mehidi, M.N., Ohmura, N., Kataoka, K., 2005. Dynamics of the helical flow between rotating conical cylinders. *Journal of Fluids and Structures* 20, 331–344. <https://doi.org/10.1016/j.jfluidstructs.2004.12.001>
- Poli, R., Kennedy, J., Blackwell, T., 2007. Particle swarm optimization: An overview. *Swarm Intell* 1, 33–57. <https://doi.org/10.1007/s11721-007-0002-0>
- Ramkrishna, D., 2000. Population balances: theory and applications to particulate systems in engineering. Academic Press, San Diego, CA.
- Siddique, N.H., Adeli, H., 2013. Computational intelligence: synergies of fuzzy logic, neural networks, and evolutionary computing. John Wiley & Sons Inc, Chichester, West Sussex, United Kingdom.
- The OpenFOAM Foundation, 2020. OpenFOAM v8: User Guide.
- Vasquez Giuliano, Lorenzo, 2019. Sviluppo di farmaci innovativi per la rimozione di ostruzioni arteriose: modellazione fluidodinamica del processo di attivazione. Politecnico di Torino, Torino.
- Widerstrom, E., 2017. Quality and catastrophic phase inversion. Lund University.
- Wieringa JA, Vandieren F, Janssen JJ, Agterof WG, 1996. Droplet Breakup Mechanisms During Emulsification in Colloid Mills at High Dispersed Phase Volume Fraction. *Chem. Eng. Res. Des.* 74, 554–562.
- Williams, P.A., 2001. Food Emulsions: Principles, Practice, and Techniques. *International Journal of Food Science & Technology* 36, 223–224. <https://doi.org/10.1046/j.1365-2621.2001.00459.x>
- Zhao, X., 2007. Drop breakup in dilute Newtonian emulsions in simple shear flow: New drop breakup mechanisms. *Journal of Rheology* 51, 367–392. <https://doi.org/10.1122/1.2714641>

Ringraziamenti

In questo giorno ho finalmente raggiunto il mio primo, importante traguardo. Mi auguro per il mio futuro di conseguire molti altri, migliorando me stesso sia dal punto di vista umano che intellettuale.

Giunto al termine della scrittura, sento di dover ringraziare tutti coloro che mi hanno sostenuto durante questi due anni. In particolare, mia madre e mio padre, pilastri della mia vita. Un ringraziamento speciale a mia sorella e mio fratello, che mi hanno insegnato a non mollare mai, anche quando si è sul punto di dire basta. A loro e tutta la mia famiglia dedico questa tesi.

Ringrazio Arianna per essermi stata sempre vicina e aver condiviso molti aspetti del mio percorso. Per le risate, gli aiuti e tutti i momenti belli passati insieme.

Ringrazio i miei compagni di corso, Alberto, Andrea, Beatrice, Giovanni, Emanuele, Michela e Julian con cui ho condiviso tutte le lezioni e gli esami.

Ringrazio tutti i miei amici, per i momenti di svago e le occasioni di festa passate insieme. Non sarebbe stato lo stesso senza di voi.

Ringrazio i professori Daniele Marchisio, Gianluca Boccardo e Antonio Buffo che mi hanno dato la possibilità di svolgere il mio progetto di tesi in un ambiente formale, ma sereno. Insegnandomi ad affrontare il mondo del lavoro nel migliore dei modi.

Infine, ringrazio Marco Ferrari, per avermi seguito passo dopo passo nella realizzazione del mio progetto di laurea. Grazie della disponibilità e dell'entusiasmo.