

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

Simulazioni di sistemi micellari con fluidodinamica computazionale



Relatori

Prof. Gianluca Boccardo
Prof. Antonio Buffo
Prof. Daniele Marchisio

Candidato

Ambra Massei

Ottobre, 2021

Indice

Introduzione	10
I Nozioni teoriche di fluidodinamica	11
1 Caratteristiche degli agitatori	12
1.1 Meccanismi di miscelazione	12
1.2 Diverse tipologie di agitatori	14
1.3 Regimi di flusso dei diversi agitatori	16
1.4 Definizione di parametri utili per lo studio della miscelazione	19
2 Dinamica dei fluidi	23
2.1 Definizione dello sforzo di taglio e del gradiente di velocità	23
2.2 Reologia dei fluidi e definizione della viscosità	25
2.3 Equazione di continuità e di Navier-Stokes	27
2.4 Modellazione della turbolenza	28
2.5 Modellazione vicino alle pareti	31
2.5.1 Funzioni alla parete	32
2.5.2 Modelli di turbolenza a basso numero di Reynolds	32
3 Fluidi complessi	34
3.1 Miscele di Pluronic e acqua	34
4 Modellizzazione del sistema e metodi di risoluzione	38
4.1 Metodo dei volumi finiti	38
4.2 Metodi di discretizzazione spaziale	40
4.3 Metodi di discretizzazione temporale	44
4.3.1 Metodi di risoluzione SIMPLE e PIMPLE	47
4.4 Fattori di sotto-rilassamento	48
4.5 Modello di Bird-Carreau per la descrizione della viscosità	48
4.6 Modellazione della geometria della girante	49
4.6.1 Modello "Rotating Frame"	49
4.6.2 Modello "Multiple Reference Frame"	49
4.6.3 Modello "Sliding Mesh"	50
5 Strumenti computazionali	51
5.1 OpenFOAM	51
5.2 Struttura dei file in OpenFOAM	52
5.3 Generazione della mesh	53

5.3.1	Principio di funzionamento dell'utility blockMesh	54
5.3.2	Principio di funzionamento dell'utility snappyHexMesh	55
II	Metodologia e risultati	59
6	Sistemi geometrici e dettagli computazionali	60
6.1	Analisi di reattori agitati con fondo pseudo-ellittico in regime laminare e turbolento	60
6.2	Analisi di reattori agitati con fondo piatto in regime laminare e turbolento	66
6.3	Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic	69
6.3.1	Analisi della cavità	69
6.3.2	Analisi del reattore 2D	69
6.4	Analisi dei dati sperimentali dell'Università di Bologna	70
7	Presentazione e discussione dei risultati	73
7.1	Analisi dei reattori agitati con fondo pseudo-ellittico in regime laminare e turbolento	73
7.2	Analisi dei reattori agitati con fondo piatto in regime laminare e turbolento	77
7.3	Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic nella cavità	80
7.4	Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic nel reattore bidimensionale	85
7.5	Analisi dei dati sperimentali dell'Università di Bologna	92
	Bibliografia	98
	Conclusioni	98
	Appendice A	98

Elenco delle figure

1.1	Cascata di energia cinetica dalle grandi alle piccole scale [4]	13
1.2	Cascata dell'energia cinetica turbolenta in una scala logaritmica [4]	14
1.3	Agitatori assiali [10]	15
1.4	Agitatori radiali [10]	15
1.5	Agitatori hydrofoil [10]	16
1.6	Agitatori ad alto taglio [10]	16
1.7	Geometria con fondo a) rettangolare e b) bombato [13]	17
1.8	Campi di velocità con diverse giranti [13]	17
1.9	a) Campo di flusso in recipiente con deflettori verticali; b) Modello di flusso con agitatore sfalsato dal centro [24]	18
1.10	Forma della cavità di miscelazione per fluidi pseudoplastici [24]	19
1.11	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds [24]	20
1.12	Curva della concentrazione di tracciante in funzione del tempo [24]	22
2.1	Curve di flusso per fluidi Newtoniani e non-Newtoniani [9]	26
2.2	Curva di flusso tipica di un fluido pseudoplastico [9]	26
2.3	Rappresentazione dell'assottigliamento dei filetti fluidi [24]	29
2.4	Rappresentazione del flusso estensionale sui filetti fluidi [24]	29
2.5	Andamento della velocità in funzione del tempo	30
2.6	Strati limite nella regione interna in regime turbolento [4]	32
2.7	Applicazione delle funzioni alla parete alle simulazioni CFD [4]	32
3.1	Formula della molecola di Pluronic	35
3.2	Griglia del Pluronic	35
3.3	Microstrutture generate dalle macromolecole di Pluronic	36
3.4	Diagramma di fase per il Pluronic L64	37
4.1	Le facce di un volume di controllo	39
4.2	Suddivisione del dominio monodimensionale evidenziando celle e facce	41
4.3	Aggiornamento dei campi di pressione e velocità dal passo temporale n al successivo n+1	48
4.4	Serbatoio di miscelazione con approccio MRF [8]	49
5.1	Struttura generale del software OpenFOAM	51
5.2	Struttura di un case directory	52
5.3	Elementi tipici di una mesh 2D o 3D	53
5.4	Griglia tridimensionale strutturata	54
5.5	Definizione di un blocco	55
5.6	Schema di una mesh generata con il comando snappyHexMesh	55

5.7	Generazione della mesh di background tramite il comando blockMesh . . .	56
5.8	Divisione delle celle in base alle caratteristiche del bordo nel processo di meshing	56
5.9	Suddivisione delle celle per superficie nel processo di meshing	56
5.10	Rimozione delle celle nel processo di meshing	57
5.11	Raffinamento di celle specifiche processo di meshing	57
5.12	Processo di surface snapping	58
5.13	Aggiunta di strati aggiuntivi nel processo di meshing	58
6.1	Fondo pseudo-ellittico del reattore agitato esaminato con relativa nomenclatura	60
6.2	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratta da [12]	61
6.3	Struttura della function "forces" riportata nella controlDict	64
6.4	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds per diversi diametri dell'agitatore estratta da [27].	65
6.5	Schema e dimensioni del recipiente agitato investigato estratto da [27]. . .	66
6.6	Definizione delle patch cicliche	68
6.7	Definizione del file mirrorMeshDict	68
6.8	Struttura della function "DegreeOfSegregation" riportata nella controlDict	70
7.1	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh A	74
7.2	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh B	75
7.3	Contour plots del campo di velocità estratti da Paraview al variare nel numero di Reynolds: a) $Re=9.87$, b) $Re=2.79$, c) $Re=750.47$, d) $Re=2829.1$	76
7.4	Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh B in regime laminare	77
7.5	Curva nel numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh C	79
7.6	Contour plot della concentrazione al variare della velocità della parete con $C_0 = 0.25$	80
7.7	Contour plot della concentrazione al variare della velocità della parete con $C_0 = 0.45$	81
7.8	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.25, 0.35 e 0.45 nella cavità	82
7.9	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nella cavità	83
7.10	Andamento del coefficiente di variazione nel tempo per un valore di concentrazione di Pluronic pari a 0.85 nella cavità	84
7.11	Contour plots della concentrazione al variare del tempo di simulazione fino a raggiungere la completa miscelazione delle due fasi per $C=0.25$	86
7.12	Contour plots della concentrazione al variare del tempo di simulazione fino a raggiungere la completa miscelazione delle due fasi per $C=0.55$	87
7.13	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.25, 0.35 e 0.45 nel reattore a tre velocità differenti	88

7.14	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nel reattore	89
7.15	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per un valore di concentrazione di Pluronic pari a 0.85 nel reattore per due tempi simulati differenti	90
7.16	Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nel reattore per un tempo di simulazione maggiore	91
7.17	Andamento del numero di potenza al variare della velocità di rotazione nel caso di Pluronic puro	93
7.18	Andamento del numero di potenza al variare della velocità di rotazione nel caso di 50 % di Pluronic	95
7.19	Andamento del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds approssimando il fluido come Newtoniano	95
7.20	Andamento della velocità di taglio effettiva al variare della velocità di rotazione della girante	97

Elenco delle tabelle

6.1	Proprietà fisiche dell'acqua	60
6.2	Dati sperimentali disponibili in letteratura per un reattore agitato dotato di turbina Rushton a sei pale	62
6.3	Dati ottenuti dalle simulazioni CFD di Jaszczur et al. estratti da [12]	62
6.4	Dati del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da Fig. 6.4.	65
6.5	Dati sperimentali della correlazione di Rushton et al. del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da [25].	67
6.6	Dati sperimentali della correlazione di Scargiali et al. del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da [26].	67
6.7	Valori numerici dei coefficienti del modello di Bird-Carreau	70
6.8	Valori sperimentali della viscosità per una temperatura pari a 25°C	71
6.9	Dati sperimentali nel caso di Pluronic puro	72
6.10	Dati sperimentali nel caso di 50 % di Pluronic	72
7.1	Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh A al variare della velocità di rotazione N	73
7.2	Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh A	74
7.3	Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh B al variare della velocità di rotazione N	75
7.4	Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh B	75
7.5	Valori dell'errore relativo calcolati sul numero di potenza tra i dati ottenuti con le simulazioni tramite OpenFOAM e quelli disponibili in letteratura	76
7.6	Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh C al variare della velocità di rotazione N	78
7.7	Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh C	78
7.8	Valori numerici degli errori relativi per le due casistiche analizzate	79
7.9	Valori numerici ricavati per i tempi di miscelazione al variare della concentrazione di Pluronic e della velocità angolare di rotazione dell'agitatore	85
7.10	Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti al variare della velocità di rotazione N con il sistema studiato dall'Università di Bologna nel caso di Pluronic puro	92
7.11	Valori numerici del numero di potenza ottenuto al variare della velocità di rotazione in rpm nel caso di Pluronic puro	92
7.12	Valori numerici calcolati per l'errore relativo percentuale nel caso di Pluronic puro	93

7.13	Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti al variare della velocità di rotazione N con il sistema studiato dall'Università di Bologna nel caso di 50 % di Pluronic	94
7.14	Valori numerici del numero di potenza ottenuto al variare della velocità di rotazione in rpm nel caso di 50 % di Pluronic	94
7.15	Valori numerici ottenuti per il numero di Reynolds apparente e la viscosità apparente al variare della velocità di rotazione N	96
7.16	Parametri reologici per il modello Bird-Carreau nel caso di 100 % Pluronic	96
7.17	Valori della velocità di taglio effettiva sfruttando il modello di Bird-Carreau	97

Introduzione

Il seguente lavoro di tesi ha come obiettivo lo studio della miscelazione di fluidi semplici e strutturati in reattori agitati con differenti geometrie attraverso l'utilizzo della fluidodinamica computazionale (CFD). Quest'ultimo è emerso negli anni '80 come uno strumento significativo per lo studio della fluidodinamica sia nella ricerca che nella pratica grazie al rapido sviluppo tecnologico. Per effettuare le simulazioni è stato utilizzato OpenFOAM, un software open-source.

Il processo di miscelazione gioca un ruolo essenziale nei processi industriali. La sua efficacia dipende dalla temperatura, dalla viscosità e densità dei fluidi, dal tipo di agitatore e dalla forma della girante. I serbatoi agitati vengono ampiamente utilizzati nell'industria di processo per miscelare liquidi, favorire il trasferimento di massa o di calore, per mantenere in sospensione le particelle solide o per disperdere una fase gassosa. Nel seguente lavoro di tesi è stata analizzata l'influenza del numero di Reynolds sul consumo energetico di serbatoi agitati senza deflettori. Questi offrono vantaggi significativi in una serie di applicazioni. Questo è il caso dei cristallizzatori, dove essi favorirebbero l'attrito tra le particelle, o dei processi di precipitazione, dove darebbero problemi di incrostazione. Nel campo alimentare e farmaceutico andrebbero ad influenzare la pulizia dei recipienti. Sono vantaggiosi anche nel caso di cellule sensibili al taglio, dove lo spargimento di aria porterebbe alla morte cellulare. Nonostante il crescente interesse industriale, però, sono disponibili poche informazioni sulle loro caratteristiche e sui relativi criteri di scale-up. Indipendentemente dal processo industriale, l'obiettivo principale è quello di trovare il metodo di miscelazione più efficiente e che consuma la minor quantità di energia possibile.

Sono stati analizzati sia fluidi semplici e Newtoniani, come l'acqua, sia fluidi con una reologia complessa e non-Newtoniani, ossia una miscela di acqua e Pluronic L64 a diverse percentuali. Si parla quindi di fluidi strutturati. Grazie alla particolarità delle loro proprietà reologiche, trovano applicazione in parecchi campi, dall'industria alimentare, cosmetica e farmaceutica. Essi, infatti, hanno un comportamento intermedio tra un liquido ed un solido convenzionale.

Il lavoro di tesi è suddiviso in due parti. La prima parte propone una introduzione ai concetti fondamentali su cui si basa il lavoro. Nel primo capitolo si descrivono le principali tipologie di agitatori ed i meccanismi di miscelazione che avvengono nei serbatoi agitati. Inoltre, si definiscono i parametri necessari per uno studio accurato e per lo scale-up dei reattori. Nel secondo capitolo si fornisce una descrizione delle grandezze fisiche fondamentali per la comprensione della dinamica dei fluidi. Viene analizzata particolarmente la reologia dei fluidi ed i diversi comportamenti che essi seguono in base al modello reologico che viene definito. Nel terzo capitolo vengono spiegate le caratteristiche e le applicazioni principali dei fluidi strutturati con particolare attenzione ai copolimeri anfifilici a blocchi in presenza del solvente acqua. Nel quarto capitolo si descrivono le tecniche utilizzate per risolvere le equazioni di governo. Inoltre, viene illustrato come modellare la geometria

della girante. Il quinto capitolo introduce l'architettura ed il funzionamento del software OpenFOAM. Nella seconda parte si riportano i sistemi geometrici investigati ed i relativi risultati ottenuti. Il sesto capitolo riporta i sistemi geometrici investigati ed i dettagli computazionali impostati per effettuare la simulazione. Infine, nel settimo capitolo sono illustrati i risultati ottenuti sul consumo di potenza dei reattori con fondo piatto e fondo pseudo-ellittico e della geometria tridimensionale corrispondente ai dati sperimentali forniti da un gruppo di ricerca dell'Universita' di Bologna. Inoltre, si riportano i risultati sul tempo di miscelazione in un classico sistema "lid-driven cavity" e in un modello bidimensionale di un reattore.

Parte I

Nozioni teoriche di fluidodinamica

Capitolo 1

Caratteristiche degli agitatori

La miscelazione dei fluidi è una delle operazioni fondamentali nei processi dell'industria chimica. Essa viene garantita grazie all'utilizzo di reattori agitati, cioè recipienti cilindrici contenenti un agitatore. Quest'ultimo ha lo scopo di ridurre o eliminare, per quanto possibile, le disuniformità spaziali, ossia i gradienti di concentrazione, temperatura o quantità di moto, per avvicinare le prestazioni del reattore a quelle di progetto. Tanto meno è efficace la miscelazione, tanto più le prestazioni del reattore reale si allontanano da quelle di un reattore ideale. La miscelazione è un fenomeno utile per la sospensione di solidi in un liquido, la dissoluzione di due liquidi immiscibili, la dispersione di una fase gassosa in un liquido, per favorire il degassaggio di un gas intrappolato in un solido, per promuovere fenomeni di mass-transfer tra due fasi o all'interno di una singola fase, per formare un'emulsione o per favorire lo scambio di calore tra i fluidi e le pareti di uno scambiatore di calore.

1.1 Meccanismi di miscelazione

La miscelazione può essere descritta come la combinazione di tre processi fisici: distribuzione, dispersione e diffusione. La *distribuzione*, viene anche chiamata macro-miscelazione, ed è responsabile del trasporto delle particelle in tutte le regioni del reattore. Questo fenomeno può essere relativamente lento, in particolare in reattori grandi dove i percorsi di circolazione risultano abbastanza lunghi. Il fluido, durante questo processo, ritorna sempre al punto di partenza ed è per questo che si parla di circolazione. Un parametro utile per tale descrizione è il tempo di circolazione, cioè il tempo necessario che una particella di fluido impiega per partire da un punto del campo di velocità e tornare allo stesso punto. Il tempo di circolazione ha una distribuzione di tipo statistico-probabilistico, per cui bisogna valutare un valore medio e lo scarto quadratico medio, ovvero l'ampiezza della distribuzione. Quest'ultima indica quanto il valore medio è rappresentativo del sistema analizzato. Le circolazioni del fluido dipendono dalla forma e dal tipo di agitatore, dalla potenza immessa nel liquido attraverso lo stesso e dai rapporti geometrici tra reattore/agitatore. In prossimità dell'agitatore le velocità sono molto elevate. Man mano che il fluido si trasferisce attraverso i loop di circolazione, la sua velocità diminuisce fino a raggiungere un minimo nel punto più lontano dalla zona di agitazione. Successivamente, ritorna in basso e riaccelera.

La miscelazione è un macro-fenomeno che concerne il trasporto di quantità di moto in regime turbolento. Risulta, quindi, necessario introdurre la *teoria isotropica della turbolenza di Kolmogorov*. Secondo quest'ultimo la turbolenza è costituita da un numero elevato

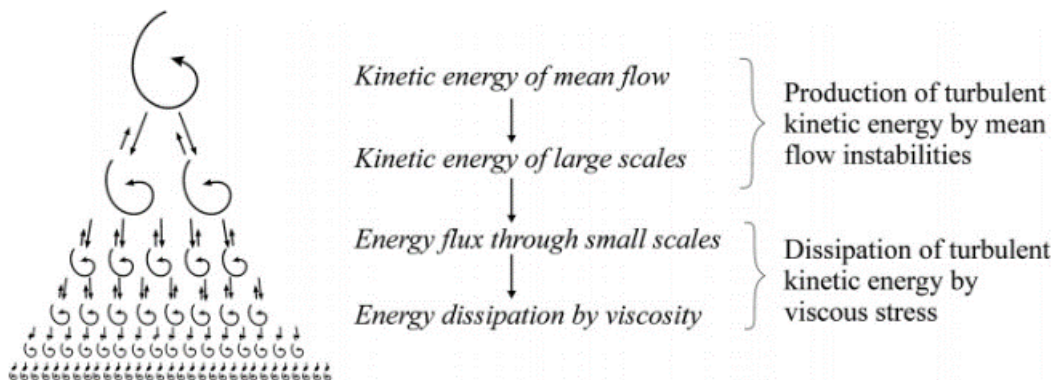


Fig. 1.1: Cascata di energia cinetica dalle grandi alle piccole scale [4]

di molecole che, in virtù del fatto che acquisiscono energia cinetica, e quindi quantità di moto, formano nuove entità di scala spaziale superiore. Il sistema, in condizioni statiche, è costituito da molecole, cioè entità microscopiche che si muovono in modo caotico nell'intorno di una posizione fissa. Quando viene indotta una forza si introduce una quantità di moto che va a sommarsi a quella esistente e distorce il movimento caotico delle molecole, tale da spostarsi lungo la direzione d'applicazione della forza. Aumentando l'entità della forza, secondo Kolmogorov, gli effetti dispersivi dell'aumento di velocità non seguono più un'unica direzione, ma iniziano a spostarsi in altre direzioni. Questo comporta l'aggregazione di molecole che si muovono in direzioni diverse tra loro e chiamate *eddy*. L'energia cinetica introdotta nel fluido attraverso l'agitatore si distribuisce nello stesso proprio mediante gli eddies. Questi, a seguito di urti, si trasformano in eddies sempre più piccoli. Quando diventano talmente piccoli da non avere più sufficiente energia per sostenere un moto rotazionale, rimangono fermi e dissipano la loro energia cinetica sotto forma di calore, vibrando in posizioni fisse. Questo processo è detto di *dispersione* ed è responsabile del rapido trasferimento di materia, oltre che di energia, all'interno del reattore. Oltre la dimensione di Kolmogorov, ossia al confine tra lo strato viscoso e quello inerziale, il trasferimento di proprietà avviene per fenomeni *diffusivi*.

Come si osserva in Fig.1.1, si ha un flusso di energia cinetica dalle scale più grandi a quelle più piccole, dove l'energia cinetica turbolenta viene dissipata in calore grazie all'azione viscosa dovuta alla viscosità cinematica. I flussi turbolenti richiedono un approvvigionamento continuo di energia perché la turbolenza è intrinsecamente dissipativa. In un reattore agitato l'energia viene fornita proprio dalla girante.

Nel 1941 Kolmogorov dichiarò tre importanti ipotesi che sono di fondamentale importanza per la comprensione della turbolenza:

1. "A numeri di Re sufficientemente elevati, le più piccole scale del moto, $l < l_0$, sono statisticamente isotropiche." [4] Ciò significa che a piccole scale, non importa l'orientamento dei vortici e sono, quindi, indipendenti dalla geometria.
2. "In ogni flusso turbolento a numeri di Re sufficientemente elevati, la forma statistica delle più piccole scale ($l < l_{EI}$), è universale e dipende unicamente dalla viscosità cinematica, ν e dalla velocità di dissipazione, ε ." [4] In questa fase i processi dominanti sono il trasferimento di energia su piccole scale e la sua dissipazione.

3. "In ogni flusso turbolento a numeri di Re sufficientemente elevati, la statistica di moto della scala l compresa tra η ed l_0 ha una forma universale univocamente determinata da ε e che non dipende dalla viscosità".[4] All'interno dell'intervallo $l < l_{EI}$ i tempi sono piccoli rispetto ai tempi per i vortici di grandi dimensioni. Ciò significa che i piccoli vortici possono adattarsi rapidamente per mantenere un equilibrio dinamico con la velocità di trasferimento di energia imposta dai vortici di grandi dimensioni. Poiché le statistiche dei movimenti su piccola scala sono universali, questo intervallo $l < l_{EI}$ viene spesso definito intervallo di equilibrio universale.

La scala di Kolmogorov, η , che caratterizza la dimensione degli eddy turbolenti più piccoli, ossia la scala di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta, è data da:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.1)$$

Questo, però, è un modello teorico. Per avere un'idea quantitativa bisogna introdurre delle grandezze misurabili che verifichino le ipotesi di Kolmogorov. In Fig.1.2 si possono osservare tre differenti zone. Nella zona *energy containing range* si trovano i vortici più grandi contenenti la massima parte dell'energia. Questi interagiscono con il flusso medio ed estraggono energia da esso. Nella zona *inerziale* l'energia cinetica turbolenta non viene né prodotta né dissipata. Nella regione *dissipativa*, come detto in precedenza, l'energia cinetica turbolenta viene dissipata in calore. Le ultime due regioni fanno parte di una zona ancora più grande, detta universale. Qui i vortici sono isotropi e non hanno dipendenza da come viene generata la turbolenza o da come sono fatti i vortici più grandi.[4]

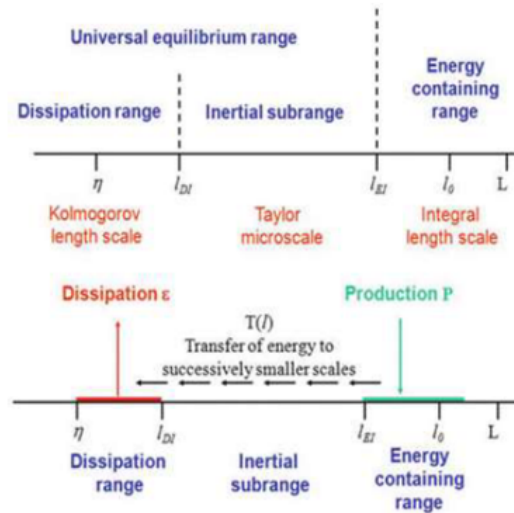


Fig. 1.2: Cascata dell'energia cinetica turbolenta in una scala logaritmica [4]

1.2 Diverse tipologie di agitatori

A seconda della miscelazione e della turbolenza richiesta, è possibile utilizzare una grande varietà di giranti nelle applicazioni che coinvolgono i serbatoi agitati. Le giranti possono essere suddivise in quattro categorie: assiali, radiali, hydrofoil ed agitatori ad alto sforzo di taglio.

L'energia meccanica introdotta nel sistema, sottoforma di quantità di moto, genera una velocità. La velocità del fluido in ogni punto del reattore presenta tre componenti che determinano il movimento macroscopico del liquido: radiale, longitudinale e tangenziale. La velocità radiale agisce in direzione perpendicolare all'asse dell'agitatore e viene impressa ad una particella di fluido non infinitesimale. Essa viene spinta radialmente dalla posizione in cui si trova verso la periferia, ossia la parete del reattore. La velocità longitudinale agisce in maniera parallela all'asse dell'agitatore e quella tangenziale in modo tangenziale all'asse dell'agitatore. Le tre componenti vengono generate contemporaneamente per qualsiasi tipo di agitatore; la loro percentuale relativa dipende dalla forma dell'agitatore stesso.

Gli agitatori a flusso assiale sono utilizzati principalmente per la sospensione o incorporazione di solidi, per lo scambio di calore o per l'introduzione di una fase gassosa. In Fig.1.3 si riportano le tipologie principali.

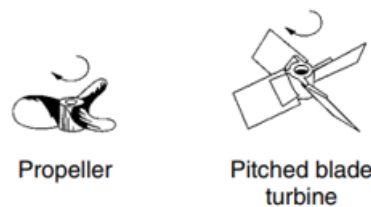


Fig. 1.3: Agitatori assiali [10]

L'elica marina viene spesso utilizzata come miscelatore ad entrata laterale in vasche grandi e ad entrata dall'alto in vasche piccole, con dimensioni inferiori a 5 ft. La turbina a pale inclinate è costituita da un fulcro centrale su cui sono saldate un numero pari di pale inclinate con un qualsiasi angolo compreso tra 10° - 90° dall'orizzontale; l'angolo più comune è 45° . Spesso viene considerata come una girante a flusso misto in quanto il flusso viene generato sia in direzione assiale che in quella radiale.

Gli agitatori a flusso radiale vengono utilizzati per fluidi con una viscosità medio/bassa. Essi forniscono una turbolenza più elevata, sfruttando un pompaggio inferiore, rispetto agli agitatori assiali. Il flusso viene scaricato radialmente verso la parete del serbatoio e, grazie ai deflettori, si divide formando due anelli di circolazione sopra e sotto la girante. Gli agitatori radiali sono caratterizzati o da un disco (turbina Rushton) o da pale piatte o curve (turbina backswept) o possono essere aperte (*Flate Blade Turbine* o FBT), come si osserva in Fig.1.4.

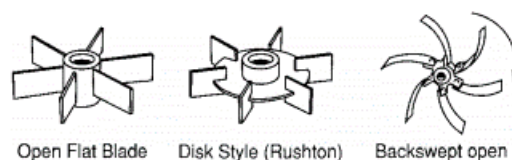


Fig. 1.4: Agitatori radiali [10]

Nel caso di giranti senza disco il pompaggio non avviene propriamente in direzione radiale; nel caso di giranti a disco, invece, si ottiene uno schema di flusso più uniforme e si ha un assorbimento di potenza maggiore. Il disco agisce da deflettore sulla girante ed impedisce al fluido di risalire lungo l'albero dell'agitatore. L'agitatore radiale più utilizzato nelle

operazioni di miscelazione e nei casi studio, che verranno descritti in seguito, è la turbina Rushton. Essa è caratterizzata da sei pale verticali montate sul disco. Le dimensioni standard sono costituite da una lunghezza e larghezza delle pale rispettivamente pari a $\frac{d}{4}$ e $\frac{d}{5}$. Inoltre, i diametri del disco sono pari a 0.66 e 0.75D, dove D è il diametro del reattore.

Gli agitatori di tipo hydrofoil vengono sfruttati in operazioni in cui è desiderato un forte flusso assiale ed un basso sforzo di taglio. Sono caratterizzati da tre o quattro pale rastremate e bombate, come si osserva in Fig.1.5. Nella punta l'angolo della pala è inferiore rispetto al fulcro centrale producendo una velocità uniforme su tutta l'area di scarico. Questa forma della pala genera un numero di potenza inferiore rispetto ad una turbina a pale inclinate.

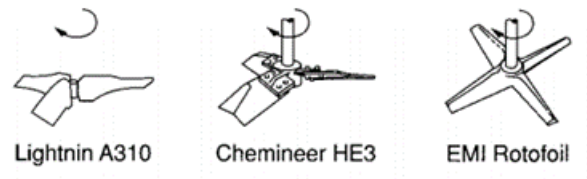


Fig. 1.5: Agitatori hydrofoil [10]

Gli agitatori ad alto taglio vengono sfruttati quando si hanno più fasi poiché funzionano ad alte velocità. Essendo caratterizzate da un basso pompaggio, vengono spesso accoppiate alle giranti a flusso assiale per garantire una distribuzione omogenea ed un alto sforzo di taglio. In Fig.1.6 si osservano le principali tipologie.

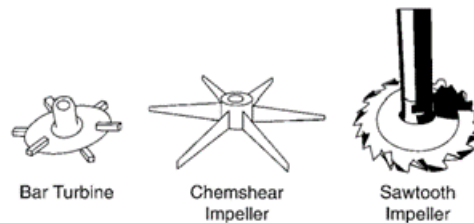


Fig. 1.6: Agitatori ad alto taglio [10]

La turbina a barre è caratterizzata da barre a sezione quadrata saldate su un disco. L'agitatore Chemshear ha delle pale coniche e genera degli sforzi di taglio medi. Per garantire una turbolenza adeguata e degli sforzi di taglio molto alti si sfrutta la girante a dente di sega. Essa è caratterizzata da un disco, sulla cui circonferenza vengono saldate delle seghettature.[10]

1.3 Regimi di flusso dei diversi agitatori

Per studiare i campi di moto generati dalle diverse giranti risulta necessario introdurre alcune dimensioni essenziali per i reattori agitati sia nel caso di una geometria con fondo piatto, sia nel caso di un fondo bombato, come si osserva in Fig.1.7 È utile conoscere i campi di velocità generati dagli agitatori in un reattore per stabilire se vi sono regioni stagnanti all'interno o se eventuali particelle presenti sono mantenute in sospensione. Inoltre,

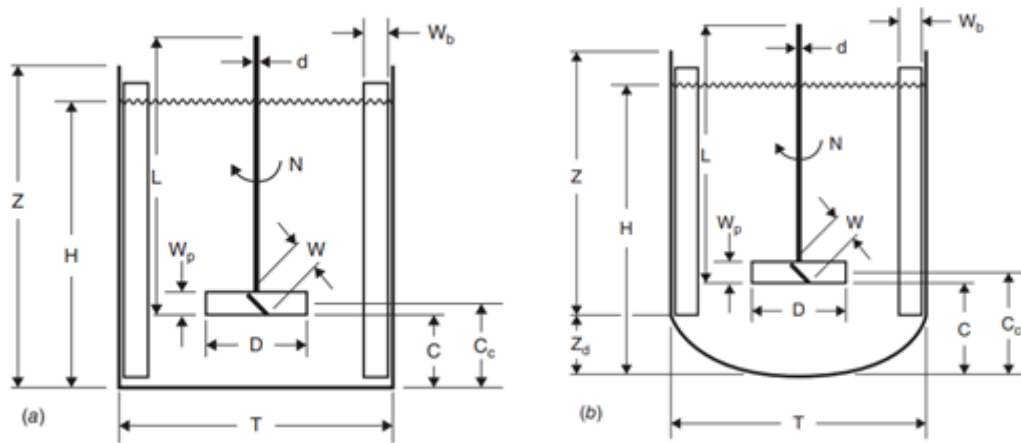


Fig. 1.7: Geometria con fondo a) rettangolare e b) bombato [13]

l'efficienza di miscelazione è influenzata dai modelli di flusso nel serbatoio e dipende dalla geometria della girante. Infatti, le differenze che si osservano nei diversi campi di velocità si ripercuotono in un diverso valore dello sforzo di taglio e di dissipazione dell'energia nel reattore.[13] In base al tipo di agitatore, al suo diametro e alla viscosità del liquido si generano diversi campi di velocità, come si osserva in Fig.1.8.

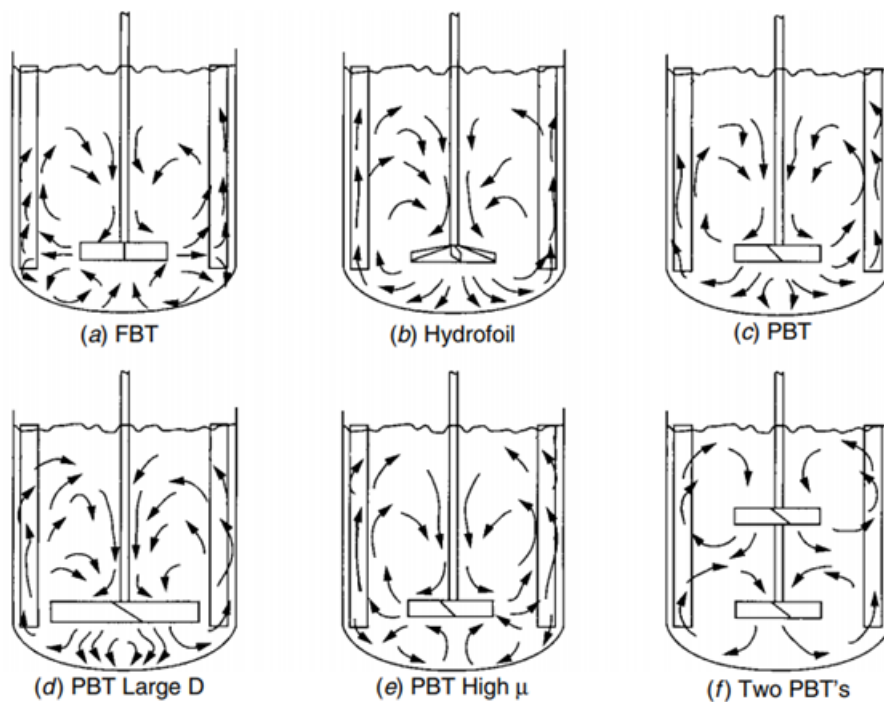


Fig. 1.8: Campi di velocità con diverse giranti [13]

Le giranti a flusso assiale, come si osserva in Fig.1.8b e Fig.1.8c, generano un campo di velocità in tutto il volume del serbatoio in un unico anello di circolazione. Le giranti a flusso radiale, come si osserva in Fig.1.8a, producono due anelli di circolazione, uno sotto ed uno sopra la girante. La miscelazione avviene anche tra i due cicli, ma meno intensamente che all'interno di ciascun ciclo. Come è stato già detto in precedenza, il diametro della girante e la viscosità del liquido influenzano il campo di velocità. In particolare, all'aumentare di entrambi i parametri il campo di velocità si avvicina sempre di più a

quello generato da un agitatore radiale, come si osserva in Fig.1.8d e Fig.1.8e. Anche l'utilizzo di giranti multiple può influenzare il campo di moto. Queste vengono utilizzate quando il rapporto tra la profondità del liquido ed il diametro del serbatoio è maggiore di 1 e generano più cicli di circolazione, come si osserva in Fig.1.8f in cui vengono utilizzate due giranti a pale inclinate.[10]

Quando le giranti assiali sono montate centralmente e non ci sono deflettori nel serbatoio, vi è tendenza alla formazione di un vortice, in quanto il liquido viene attratto al centro, ed il grado di miscelazione si riduce. Senza deflettori, infatti, la componente tangenziale della velocità non è bilanciata e quindi, si crea un vortice che spinge il liquido verso la parte superiore del serbatoio lungo le pareti. Per ovviare a queste difficoltà solitamente si montano dei deflettori sulle pareti del serbatoio, come si osserva in Fig.1.9a, oppure si monta l'agitatore non al centro, come si osserva in Fig.1.9b. I deflettori hanno la capacità di deviare la componente tangenziale della velocità e contribuiscono ad evitare la vorticosità promuovendo una corretta miscelazione. È importante osservare che la larghezza dei deflettori non deve essere troppo elevata per evitare di ridurre l'efficienza di miscelazione. Quando la viscosità del liquido aumenta, la tendenza alla formazione di vortici diminuisce e quindi diminuisce anche la necessità di installare deflettori nei serbatoi.

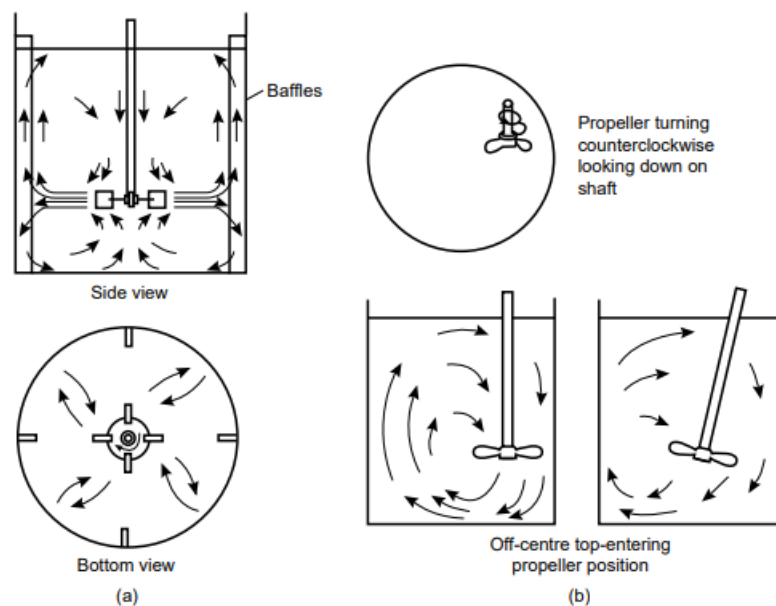


Fig. 1.9: a) Campo di flusso in recipiente con deflettori verticali; b) Modello di flusso con agitatore sfalsato dal centro [24]

Le eliche e le turbine sono i principali tipi di giranti utilizzati per i liquidi newtoniani e pseudoplastici a bassa viscosità. Generalmente, gli sforzi di taglio sono più alti in prossimità della girante e diminuiscono verso le pareti del recipiente. Per un fluido pseudoplastico, in cui la viscosità diminuisce all'aumentare dello sforzo di taglio, la viscosità apparente sarà più bassa nella regione della girante e sarà maggiore vicino alle pareti. Qui, quindi, il movimento del fluido diminuisce. Per i fluidi dilatanti, invece, si osserva esattamente il comportamento opposto. [17]

In Fig.1.10 si osserva che il diametro della regione ben miscelata D_c corrisponde al diametro della girante (D) per bassi numeri di Reynolds, ma copre un volume crescente di liquido all'aumentare del Re o della velocità di agitazione. Grazie agli studi di Nagata et al. [17] si può correlare il campo di moto al consumo di potenza. In particolare, essi hanno

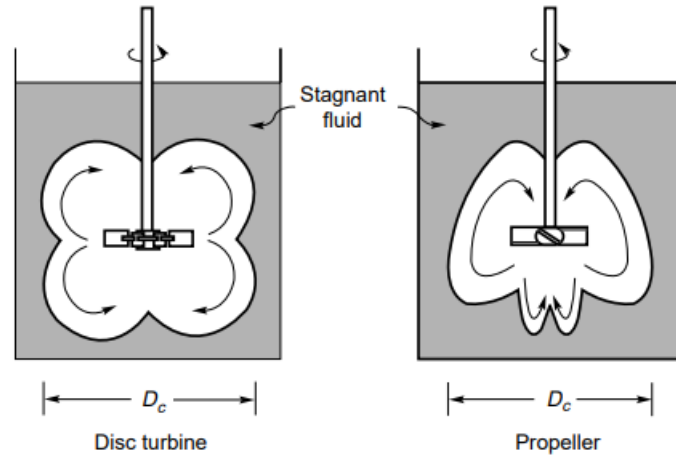


Fig. 1.10: Forma della cavità di miscelazione per fluidi pseudoplastici [24]

osservato un ciclo del consumo di energia che può essere spiegato come segue. Inizialmente, è necessaria un'energia elevata a causa dell'alta viscosità della struttura semi-solida. Quando viene superata la tensione di snervamento il materiale inizia a comportarsi come un fluido e quindi il consumo di energia diminuisce. La struttura viene, però, ristabilita riformando le zone semi-solide e quindi il ciclo si ripete. [24]

1.4 Definizione di parametri utili per lo studio della miscelazione

Uno dei problemi principali nelle operazioni di miscelazione è quello dello scale-up, ossia condurre esperimenti su piccola scala per ottimizzare l'uso di attrezzature esistenti su larga scala. Per ottenere dei campi di velocità uguali tra le due scale, è necessario mantenere la similitudine geometrica, cinematica e dinamica. Risulta conveniente mettere in relazione la potenza utilizzata dall'agitatore con la disposizione geometrica e meccanica dello stesso. Il criterio di somiglianza tra i due sistemi risulta dall'uguaglianza di diversi numeri adimensionali.

Nel caso di fluidi newtoniani, in assenza di trasferimento di calore e materia, essi sono definiti come:

$$Re = \frac{\rho D^2 N}{\mu} \quad (1.2)$$

$$Fr = \frac{DN^2}{g} \quad (1.3)$$

Il numero di Reynolds è definito come rapporto tra i fenomeni inerziali e quelli viscosi; il numero di Froude è il rapporto tra i fenomeni inerziali e quelli gravitazionali. Nel caso, invece, di presenza di trasferimento di calore e materia bisogna aggiungere i numeri di Nusselt, Sherwood, Prandtl, Schmidt e Grashof. Nel caso di fluidi non-Newtoniani nasce il problema di quale viscosità utilizzare per ricavare il numero di Reynolds. In questo caso risulta necessario introdurre un ulteriore parametro adimensionale, ossia il numero di Bingham, che tiene conto degli effetti dovuti alla non newtonianità. Quindi, per assicurare completa somiglianza tra due sistemi, tutti i numeri adimensionali pertinenti devono essere uguali.

Il parametro più importante nella progettazione dei reattori agitati è il **consumo di potenza**. È conveniente distinguere il caso di sistemi a bassa e ad alta viscosità separatamente in quanto i campi di velocità sono fortemente differenti tra loro.[24]

Fluidi a bassa viscosità

Si considera un reattore agitato di diametro T in cui è contenuto un liquido Newtoniano di viscosità μ e densità ρ che viene agitato da una girante di diametro D che ruota ad una velocità di rotazione N (espressa in giri per unità di tempo). La potenza assorbita dal liquido P dipende dalle variabili indipendenti e viene espressa come:

$$P = f(\mu, \rho, D, D_T, N, g, geometria) \quad (1.4)$$

P è la potenza della girante, cioè l'energia dissipata nel liquido per unità di tempo. Chiamamente, la potenza elettrica richiesta per azionare il motore sarà maggiore a causa delle perdite di trasmissione. Tramite un'analisi dimensionale, per una data geometria ed uno specifico agitatore, è possibile scrivere che:

$$\frac{P}{\rho N^3 D^5} = f(Re, Fr, geometria) \quad (1.5)$$

Il primo membro viene chiamato numero di potenza P_0 . I rapporti geometrici sono specifici alla configurazione agitatore/serbatoio. Per sistemi geometricamente simili, questi rapporti vengono considerati costanti e si ottiene $P_0 = f(Re, Fr)$. Il numero di Froude è importante solo nel caso di presenza di vortici. Come detto in precedenza, i serbatoi sono spesso dotati di *baffle* per evitare la loro presenza. Quindi, nel caso di fluidi Newtoniani a bassa viscosità, il numero di potenza è solo funzione del numero di Reynolds e della geometria. È possibile diagrammare il numero di potenza in funzione del numero di Reynolds per diverse tipologie di agitatori, come si osserva in Fig.1.11.

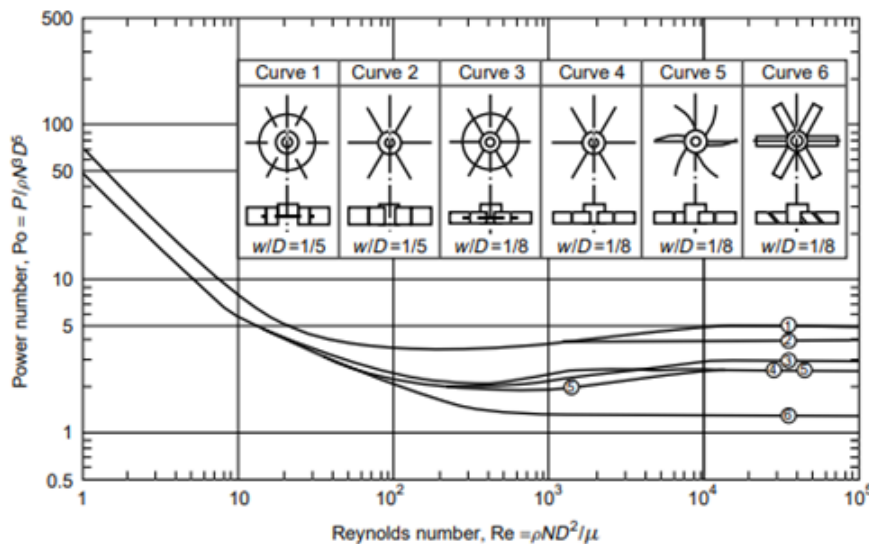


Fig. 1.11: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds [24]

Il grafico è doppio logaritmico ed è possibile distinguere tre differenti zone: per $Re < 10$ si ha un flusso laminare e la pendenza della curva di potenza è pari a -1. Questo indica che P_0 è inversamente proporzionale a Re . Quindi, il prodotto tra P_0 e Re , in regime laminare,

è costante. Nel caso di $Re > 10^4$ si ha un flusso turbolento ed il numero di potenza rimane costante e risulta essere indipendente dal numero di Reynolds. Tra le due si ha la zona di transizione in cui le forze viscosi e quelle inerziali sono dello stesso ordine di grandezza. In questa regione non esiste una relazione matematica semplice e P_0 varia poco con il numero di Reynolds.[24]

Fluidi ad elevata viscosità

Nei liquidi Newtoniani a bassa viscosità la girante, ruotando, è in grado di trasferire quantità di moto attraverso un volume grande di fluido. Nei liquidi altamente viscosi, invece, l'agitazione influenza soltanto il fluido presente nelle vicinanze dell'agitatore. Nell'industria chimica la maggior parte dei fluidi altamente viscosi esibiscono un comportamento non-Newtoniano.[24] Metzner e Otto [1957] hanno stabilito la seguente relazione, valida per i fluidi pseudoplastici, tra la velocità di taglio media e la velocità di rotazione dell'agitatore:

$$\dot{\gamma}_{avg} = k_s N \quad (1.6)$$

Dove k_s è funzione del tipo di agitatore e della configurazione del serbatoio. Il suo valore viene calcolato sperimentalmente come segue:

1. Si determina P_0 per un dato valore di N .
2. Si calcola il corrispondente valore di Re a partire dalla curva di potenza appropriata per un liquido newtoniano.
3. Dal valore di Re si ricava il valore della viscosità apparente.
4. Si ottiene il valore corrispondente della velocità di taglio sfruttando un modello appropriato, come la legge di potenza, oppure sfruttando una curva di flusso ottenuta da un esperimento viscosimetrico.
5. Si calcola il valore di k_s , sfruttando l'equazione 1.6, per la configurazione in esame.

Questo metodo è in grado di predire il numero di potenza con un'accuratezza del 25-30 %.[16]

Un altro parametro significativo è il **tempo di miscelazione**. Esso viene misurato come l'intervallo di tempo tra l'introduzione del tracciante e quello in cui si raggiunge il grado richiesto di miscelazione o uniformità nel sistema, il quale corrisponde alla concentrazione di equilibrio del tracciante C_∞ , come si osserva in Fig.1.12. In altre parole, esso viene definito come il tempo necessario per avere una deviazione della composizione di circa 95-99 % dal valore di equilibrio. Risulta utile, quindi, definire la varianza della concentrazione come:

$$\sigma^2 = \frac{1}{p-1} \sum_{i=0}^{i=p} (C_i - C_\infty)^2 \quad (1.7)$$

Dove C_i è la concentrazione del tracciante al tempo t registrata dal detector i -esimo e p è un indice. Per una data configurazione geometrica il tempo di miscelazione dipenderà dal processo e dalle variabili operative come segue:

$$t_m = f(\rho, \mu, N, D, g, geometria) \quad (1.8)$$

Usando l'analisi dimensionale è possibile scrivere:

$$Nt_m = \theta_m = f(Re, Fr, geometria) \quad (1.9)$$

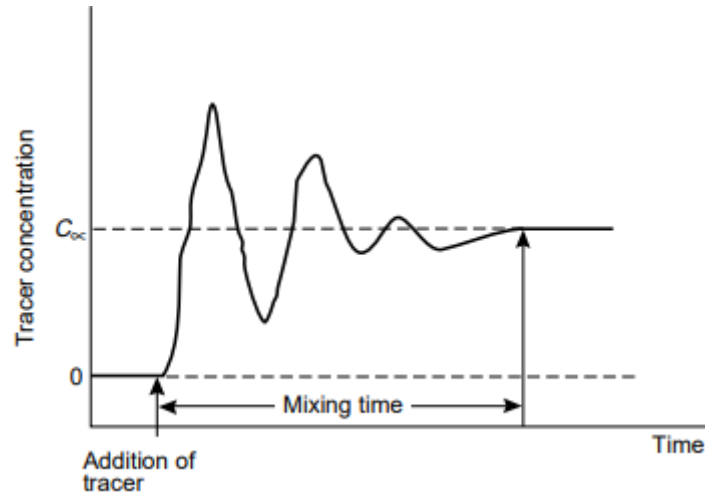


Fig. 1.12: Curva della concentrazione di tracciante in funzione del tempo [24]

Per sistemi geometrici simili e trascurando il numero di Froude si può dire che $\theta_m = f(Re)$. La relazione funzionale tra i due parametri dipende fortemente dalla geometria dell'agitatore e dai campi di flusso prodotti.[24]

L'ultimo parametro significativo utilizzato è il **coefficiente di variazione**, noto anche come intensità di miscelazione. Esso è una misura del grado di omogeneità raggiunto all'interno del sistema tra due fasi che vengono ad essere miscelate. È dato dal rapporto tra la deviazione standard, σ , e la media, M , di una data proprietà (ad esempio la concentrazione).

$$CoV = \frac{\sigma}{M} * 100 \quad (1.10)$$

Nei processi tipici di miscelazione, due fasi vengono considerate ben miscelate con un coefficiente di variazione pari a circa il 5 %. Infatti, più è piccolo il suo valore e migliore sarà la miscelazione ottenuta. Il coefficiente di variazione, inoltre, non dipende dalla quantità che deve essere miscelata.[11]

Capitolo 2

Dinamica dei fluidi

In questa sezione verranno descritte le grandezze fisiche fondamentali per la comprensione dei fenomeni di miscelazione che avvengono nei fluidi.

2.1 Definizione dello sforzo di taglio e del gradiente di velocità

Si considera un volume di controllo chiuso, cioè definito da una superficie S orientabile. È conveniente introdurre le equazioni di bilancio per la descrizione delle variabili estensive, come la quantità di moto. Si denota la generica variabile estensiva con G . Si denota la proprietà estensiva per unità di massa con \hat{G} . Nel caso in esame $G = m\underline{v}$, dove il trattino in basso indica che la velocità è un vettore. Per indicare, invece, la presenza di un tensore si utilizzerà un doppio trattino in basso. L'equazione generica di bilancio locale è data da:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\hat{G}) + \nabla \cdot (\rho\hat{G}\underline{v}) + \nabla J_G = \dot{g}_G \quad (2.1)$$

Nel caso in esame $\hat{G} = \underline{v}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\underline{v}) + \nabla \cdot (\rho\underline{v}\underline{v}) + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} = \dot{g}_G \quad (2.2)$$

Il primo termine rappresenta l'*accumulo*, cioè la velocità con cui la proprietà analizzata si accumula nel volume considerato. Il secondo termine è il *flusso convettivo*, cioè la velocità con cui il fluido attraversa la superficie a causa del suo movimento. Questo termine è diverso da zero solo se il fluido ha una velocità media. Il terzo termine è il *flusso viscoso*, causato dalla presenza di un gradiente della proprietà di riferimento. E' causato dal moto caotico delle molecole, le quali interagiscono tra loro urtandosi, cioè scambiandosi delle forze. Al secondo membro si osserva il termine di *generazione* che comprende tutte le forze che agiscono sul fluido. Quest'ultimo può essere riscritto come:

$$\dot{g}_G = \rho g - \nabla P \quad (2.3)$$

Esso comprende le forze di gravità e le forze di pressione per unità di volume. Queste ultime agiscono in direzione perpendicolare alla superficie esposta.

Le forze viscosi τ_{ij} , invece, non sono nè parallele, nè perpendicolari alla superficie, ma formano un certo angolo con essa. Ognuna di queste forze è caratterizzata da tre componenti. E' possibile esprimere questo termine in notazione indiciale o vettoriale. Secondo

la notazione indiciale si ottiene:

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa \right) \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \quad (2.4)$$

Il primo indice rappresenta la direzione lungo la quale viene trasportata la proprietà; il secondo indice rappresenta la componente che viene trasportata.

Secondo la notazione vettoriale si ottiene:

$$\underline{\underline{\tau}} = -\mu(\nabla \underline{v} + (\nabla \underline{v})^t) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa \right) (\nabla \cdot \underline{v}) \underline{\underline{\delta}} \quad (2.5)$$

Si ottiene il *tensore degli sforzi* che rappresenta il modo in cui il fluido viene trasportato per interazione delle molecole. A livello matematico è un tensore del secondo ordine, cioè una matrice. Il termine $\nabla \underline{v}$ è il tensore del gradiente di velocità e $(\nabla \underline{v})^t$ è il suo trasposto. Il prodotto non è scalare, ma diadico; quindi, anche questi termini sono matematicamente dei tensori. E' possibile esplicitare il prodotto diadico come:

$$\nabla \underline{v} = \nabla \otimes \underline{v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_z}{\partial x} \\ \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_z}{\partial y} \\ \frac{\partial v_x}{\partial z} & \frac{\partial v_y}{\partial z} & \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Il termine $\nabla \cdot \underline{v}$ è la divergenza del vettore velocità e viene spesso chiamato *dilatazione*. Esso rappresenta la capacità di espansione o compressione del fluido. Nell'Eq.2.5 si osservano due coefficienti di proporzionalità:

- La viscosità dinamica μ , ossia la resistenza opposta dalla deformazione trasversale;
- La viscosità dilatazionale κ , la resistenza opposta dalla dilatazione. Se il fluido è un gas $\kappa = 0$; se è un liquido si sfrutta l'incompressibilità per cui $\nabla \cdot \underline{v} = 0$ e quindi il secondo termine viene solitamente trascurato.

Il simbolo $\underline{\underline{\delta}}$ è il delta di Kronecker. Esso vale 1 nel caso in cui $i=j$ e 0 in tutti gli altri casi. Rappresenta, in altre parole, la matrice identità. In generale, è possibile riscrivere il tensore come:

$$\underline{\underline{\tau}} = -2\mu \underline{\underline{S}} + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa \right) (\nabla \cdot \underline{v}) \underline{\underline{\delta}} \quad (2.7)$$

Il termine $\underline{\underline{S}}$ è chiamato "strain rate" e rappresenta la deformazione del fluido a causa del suo moto. Il fluido, infatti, non è capace di opporsi agli sforzi e questo causa una velocità di deformazione. Esso viene dato da $\frac{1}{2}[\nabla \underline{v} + (\nabla \underline{v})^t]$. E' possibile definire anche la velocità di deformazione, $\underline{\underline{\Omega}}$, data da $\frac{1}{2}[\nabla \underline{v} - (\nabla \underline{v})^t]$. Essa indica la velocità di rotazione del fluido. Questo termine non compare nell'equazione di bilancio in quanto non causa sforzi nel fluido.

Per comprendere al meglio il significato fisico dello sforzo di taglio si considera una superficie su cui agisce una forza. Questa può essere scomposta in una componente normale σ , che agisce lungo la direzione normale alla superficie, ed una componente tangenziale τ , che agisce lungo la direzione tangenziale alla stessa. Il tensore degli sforzi può essere riscritto come:

$$\underline{\underline{\tau}} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Si tratta di una matrice simmetrica, cioè $\tau_{ij} = \tau_{ji}$ quando $i \neq j$. Le componenti in cui $i=j$ sono le componenti normali e possono essere riscritte come $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. In questo modo si ottengono soltanto sei termini incogniti:

$$\underline{\underline{\tau}} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Risulta utile riportare, come esempio applicativo, il caso di due piastre parallele per visualizzare meglio il concetto. La piastra superiore è ferma; la piastra inferiore si muove con una velocità costante v lungo l'asse x . Il legame tra il gradiente di velocità e lo sforzo di taglio viene descritto da un'equazione costitutiva, che dipende dalla natura del fluido, ossia la legge di Newton:

$$\tau_{xy} = -\mu \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (2.10)$$

L'unità di misura dello sforzo di taglio è [Pa]. In questo caso la componente x del flusso di quantità di moto viene trasportata lungo la direzione y positiva. Il fluido a contatto con la piastra in movimento acquisisce quantità di moto ed inizia a muoversi, trasportando la suddetta proprietà da una regione a più alta velocità ad una a velocità inferiore. Ne consegue che il *gradiente di velocità* può essere visto come una forza spingente per il trasporto di quantità di moto. Il segno negativo è dovuto al fatto che la forza viene esercitata dal fluido che si trova a valori di y inferiori sul fluido che si trova a valori di y maggiori. [5]

2.2 Reologia dei fluidi e definizione della viscosità

Per caratterizzare la dinamica dei fluidi nei reattori agitati risulta necessario introdurre il concetto di *reologia* dei fluidi. Le grandezze fisiche che vengono coinvolte sono la densità ρ , data dal rapporto tra la massa ed il volume del fluido, e la viscosità dinamica μ . Quest'ultima viene correlata alla viscosità cinematica ν attraverso la densità:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (2.11)$$

L'unità di misura di μ è data da $[Pa \cdot s]$; quella di ν è pari a $[m^2 \cdot s^{-1}]$. La relazione tra lo sforzo di taglio ed il gradiente di velocità può variare in modo significativo tra fluidi differenti sulla base di come le molecole si dispongono quando vengono esposte alle sollecitazioni. Il grafico che si ottiene diagrammando lo sforzo di taglio in funzione della velocità di taglio viene chiamato *curva di flusso*, in cui la pendenza della curva dipende proprio dalla viscosità. In Fig.2.1 si osservano le principali tipologie. [9]

I fluidi più semplici sono quelli Newtoniani, ossia quei fluidi che obbediscono alla legge di Newton. In questo caso la viscosità è costante e non dipende dalla velocità di taglio, ma unicamente dalla pressione e dalla temperatura. La viscosità non varia con il tempo di esposizione al taglio e lo sforzo si annulla quando cessa la perturbazione. Tutti i fluidi che non obbediscono alla legge di Newton, invece, vengono chiamati non-Newtoniani. In questo caso la viscosità dipende dalla velocità di deformazione e viene chiamata *viscosità apparente*, $\mu_a = \frac{\tau}{\dot{\gamma}}$. I fluidi non-Newtoniani vengono suddivisi in tre differenti classi: i fluidi indipendenti dal tempo, i fluidi dipendenti dal tempo ed i fluidi viscoelastici.[9]

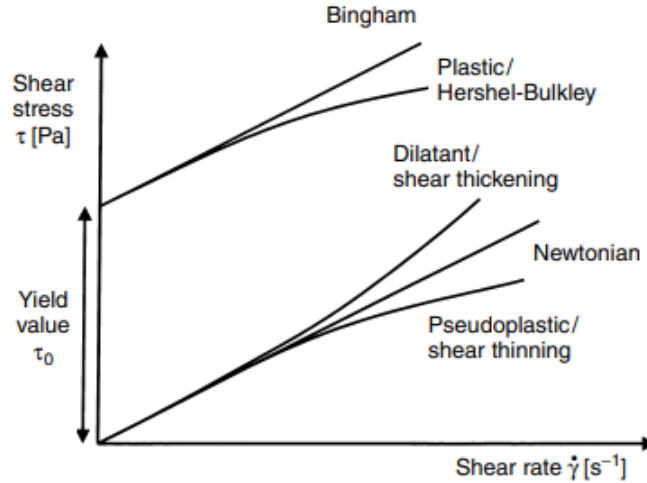


Fig. 2.1: Curve di flusso per fluidi Newtoniani e non-Newtoniani [9]

Fluidi indipendenti dal tempo

È una categoria di fluidi in cui lo sforzo di taglio, in ogni punto, dipende esclusivamente dalla velocità di taglio istantanea nello stesso punto. I fluidi *pseudoplastici* costituiscono la maggioranza in questa classe. È il caso caratteristico dei polimeri lineari. Quando viene applicato un gradiente di velocità, il liquido oppone uno sforzo ma, poiché le molecole sono molto lunghe, esse si riarrangiano allineandosi al campo di moto. La curva di flusso tipica per questa categoria è mostrata in Fig.2.2.

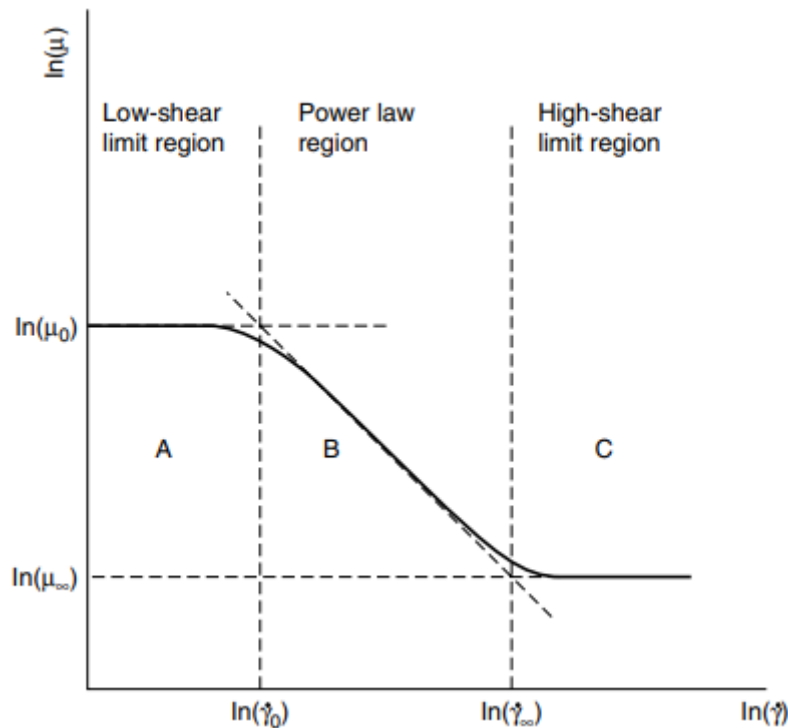


Fig. 2.2: Curva di flusso tipica di un fluido pseudoplastico [9]

La peculiarità della curva è nel suo assumere valori costanti per valori di velocità di taglio molto bassi e molto alti, zone in cui la viscosità è costante e rispettivamente pari a μ_0 e

μ_∞ . Nella zona intermedia, invece, la viscosità diminuisce all'aumentare della velocità di taglio, cioè la resistenza opposta dal fluido diminuisce. Un'altra categoria di fluidi è quella dei *dilatanti*, i quali mostrano un comportamento opposto. È il caso caratteristico dei polimeri ramificati. Infatti, aumentando la velocità di taglio, le catene laterali oppongono una maggiore resistenza e la pendenza nel grafico aumenta. In altre parole, la viscosità aumenta all'aumentare dello sforzo di taglio applicato.

La legge più utilizzata per descrivere il comportamento di questi fluidi è il modello di potenza di Oswald de Waele:

$$\tau = k_s \cdot \dot{\gamma}^n \quad (2.12)$$

Dove n è una variabile adimensionale che indica il comportamento del flusso e k_s è l'indice di consistenza in $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{n-2}]$. La viscosità diventa:

$$\mu_a = k_s \cdot \dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.13)$$

Per i fluidi pseudoplastici si ha $0 < n < 1$; per i fluidi dilatanti si ha $n > 1$ e per i fluidi newtoniani $n = 1$.

L'ultima categoria di fluidi che appartiene a questa classe è quella dei fluidi *plastici* in cui, per avere un flusso, deve essere superato un valore di soglia per lo sforzo di taglio pari a τ_0 . In questa categoria si distinguono i fluidi di Bingham dai fluidi viscoplastici. Per descrivere il comportamento di questi fluidi si sfrutta il modello di Herschel-Bulkley:

$$\tau = \tau_0 + k_s \dot{\gamma}^n \quad (2.14)$$

Dall'Eq.2.14 è possibile ricavare la viscosità:

$$\mu = \frac{\tau_0 + k_s \dot{\gamma}^n}{\dot{\gamma}} \quad (2.15)$$

Fluidi dipendenti dal tempo

È una categoria di fluidi in cui lo sforzo di taglio, e quindi la viscosità, aumenta o diminuisce con il tempo di esposizione allo sforzo di taglio stesso. Un esempio sono i fluidi tissotropici, i quali diminuiscono in modo graduale la loro viscosità quando viene applicato lo sforzo di taglio. Una volta che la sollecitazione viene rimossa, si osserva un ritorno graduale alla situazione precedente.[9]

Fluidi viscoelastici

Sono dei fluidi che presentano sia il comportamento di un solido elastico, sia quello di un fluido viscoso. Infatti, quando la sollecitazione di taglio viene rimossa, presentano un recupero elastico parziale.[9]

2.3 Equazione di continuità e di Navier-Stokes

Per ricavare l'equazione di continuità si considera come proprietà estensiva la massa. Di conseguenza $G = m$ e $\hat{G} = 1$. Sostituendo nell'Eq.2.1 si ottiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0 \quad (2.16)$$

Esplicitando la derivata del prodotto si ottiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{v} \nabla \rho = -\rho (\nabla \cdot \underline{v}) = 0 \quad (2.17)$$

Introducendo il concetto di derivata sostanziale, $\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \underline{v}\nabla\rho$, è possibile scrivere:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \underline{v}) \quad (2.18)$$

Nel caso di gas ideali la densità è costante e si ottiene l'equazione di continuità:

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (2.19)$$

Questo indica una correlazione tra le velocità nelle tre direzioni nello spazio. In coordinate cartesiane risulta:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.20)$$

Il significato fisico della stessa implica che l'aumento di velocità in una direzione deve essere compensato da una variazione di velocità in un'altra direzione. Per ricavare l'equazione di Navier-Stokes risulta necessario effettuare due *ipotesi semplificative*:

1. Si considera un fluido incomprimibile, cioè la variazione di densità con la pressione è costante.
2. Si considera un fluido newtoniano, cioè la viscosità dinamica non dipende dallo stato di moto del fluido, cioè da $\nabla \cdot \underline{v}$.

A partire dal bilancio di quantità di moto è possibile ricavare l'equazione di Navier-Stokes in coordinate indiciali:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} + g_i \quad (2.21)$$

E' stata ottenuta un'equazione differenziale alle derivate parziali (PDE).[5]

2.4 Modellazione della turbolenza

La maggior parte delle applicazioni nell'industria chimica hanno a che fare con flussi turbolenti e non laminari. La transizione tra i due regimi viene valutata grazie al numero di Reynolds:

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (2.22)$$

Il numero di Reynolds è dato dal rapporto tra le forze inerziali e quelle viscosi. In regime laminare, quindi per numeri di Reynolds molto bassi, le forze viscosi prevalgono ed i filetti di fluido si muovono in modo parallelo. All'aumentare del numero di Reynolds, prevalgono sempre di più le forze inerziali e si entra nel regime turbolento. Qui i filetti di fluido hanno un movimento casuale e caotico.

La miscelazione può avvenire sia in regime laminare che in regime turbolento. In regime laminare, i filetti di fluido vicino alla girante, dove si hanno elevati gradienti di velocità, si deformano e si allungano diventando sempre più sottili ogni volta che si trovano vicino all'agitatore. Questo processo si osserva in Fig.2.3. Tutto ciò è spesso associato ad un flusso estensionale, conseguenza dell'aumento di velocità lungo la direzione del flusso. Nei fluidi incomprimibili il volume rimane costante, quindi i filetti di fluidi devono assottigliarsi, come si osserva in Fig.2.4.

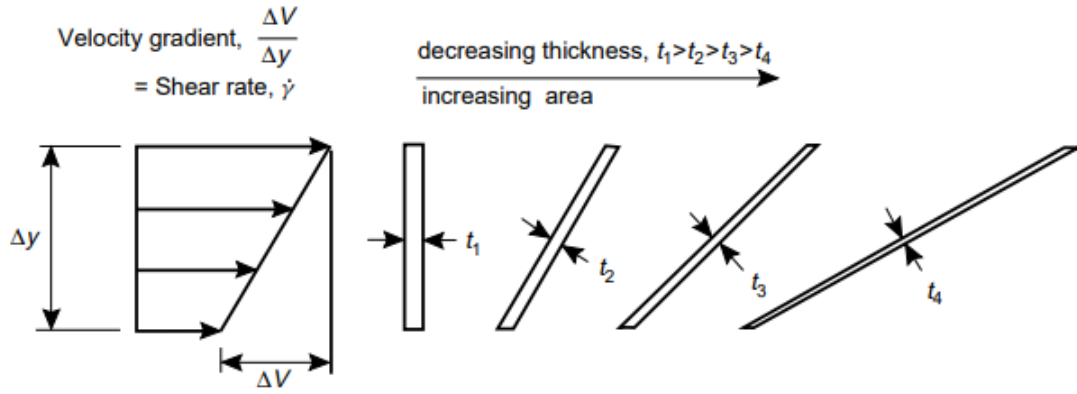


Fig. 2.3: Rappresentazione dell'assottigliamento dei filetti fluidi [24]

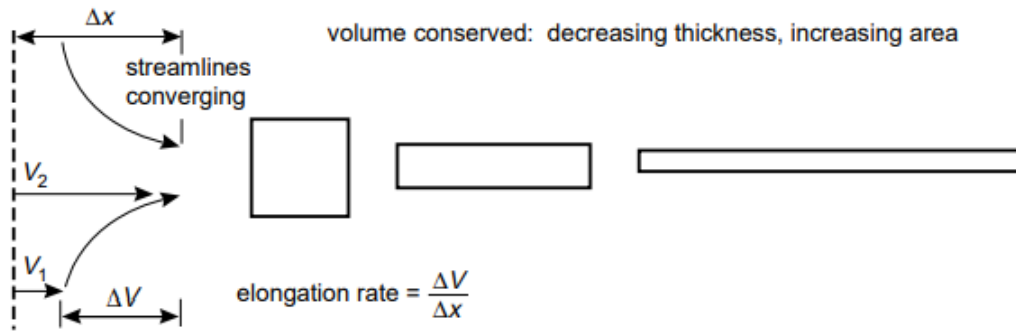


Fig. 2.4: Rappresentazione del flusso estensionale sui filetti fluidi [24]

I due meccanismi, agendo simultaneamente, originano degli sforzi di taglio nel fluido. Questo provoca una riduzione delle dimensioni degli elementi di fluido, con conseguente aumento dell'area specifica, ottenendo così il grado di miscelazione desiderato. [24]

In regime turbolento, le forze inerziali sono molto elevate e sono sufficienti per far circolare il liquido in tutto il recipiente. Ovviamente, vicino alla girante si avrà un grado di turbolenza maggiore. Il meccanismo di miscelazione è stato descritto ampiamente nella Sez. 1.1. Il flusso turbolento è intrinsecamente complesso e difficile da descrivere in modo accurato poiché non è possibile conoscere in modo esatto le condizioni al contorno e quelle iniziali. La velocità non ha un valore costante nel tempo e viene descritta grazie alla decomposizione di Reynolds. Infatti, lungo ogni direzione x, y e z , viene scritta come somma tra una velocità media, che verrà indicata con un trattino in alto, ed una velocità fluttuante, che verrà indicata con un'apice:

$$v_i = \overline{v_i} + v'_i \quad (2.23)$$

È difficile risolvere le equazioni di Navier-Stokes in regime turbolento. Per fare ciò si applica la media secondo Reynolds all'Eq.2.21 e, considerando che, per definizione la media di una grandezza fluttuante è nulla, si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{v}) = -\nabla \overline{p} - [\nabla \cdot \rho \overline{v \underline{v}}] - [\nabla \cdot (\overline{\underline{v}} + \overline{\underline{v}^t})] + \rho \underline{g} \quad (2.24)$$

Rispetto al moto laminare si osserva che il vettore velocità è stato sostituito dalla media e si ha un termine di trasporto turbolento aggiuntivo.

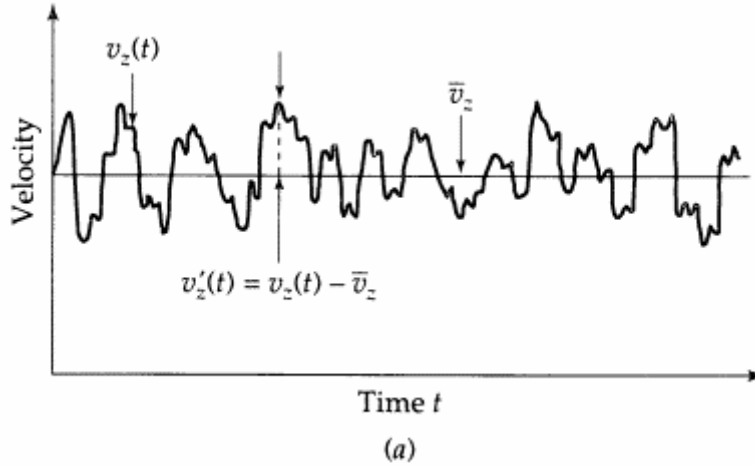


Fig. 2.5: Andamento della velocità in funzione del tempo

Questo viene chiamato tensore degli sforzi turbolenti ed è definito come:

$$\underline{\underline{\tau}}^t = \overline{\rho v' v'} \quad (2.25)$$

La traccia del tensore genera l'energia cinetica turbolenta $k = \frac{1}{2} \overline{v'^2}$. Questo termine è incognito e nasce il problema delle *ipotesi di chiusura*. Si possono utilizzare delle correlazioni empiriche, come le approssimazioni di Boussinesq in Eq. 2.26. L'approssimazione di Boussinesq si basa sul presupposto che i componenti del tensore di stress di Reynolds sono proporzionali ai gradienti di velocità medi. Essa propone che il trasporto della quantità di moto mediante turbolenza sia un processo diffusivo e che le sollecitazioni di Reynolds possano essere modellate usando una *viscosità turbolenta*, analoga alla viscosità molecolare.

$$\frac{\tau_{ij}}{\rho} = -\overline{v'_i v'_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (2.26)$$

Il fluido viene interpretato come uno pseudo-fluido con una viscosità effettiva maggiore rispetto al caso laminare. L'approssimazione di Boussinesq presuppone che i vortici si comportino come molecole e che la turbolenza sia isotropa.[5]

La modellazione turbolenta è vista come l'insieme di equazioni necessarie per determinare la viscosità vorticoso. Uno dei modelli più noti è il modello $k-\varepsilon$, il quale è stato utilizzato per svolgere le simulazioni successive. È un modello a due equazioni, cioè descrive la turbolenza sfruttando due variabili, ovvero l'energia cinetica turbolenta k ed il tasso di dissipazione dell'energia ε . Le due equazioni aggiuntive sono le seguenti.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = -\bar{v}_i \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \nu \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{\bar{v}_i \bar{v}_i \bar{v}_j}{2} - \frac{\bar{v}_j \bar{p}}{\rho} \right) \quad (2.27)$$

Si osserva un termine di accumulo, un termine convettivo dovuto alla velocità media del flusso, un termine legato alla produzione di k ed uno alla sua dissipazione a causa degli stress viscosi. La produzione dell'energia cinetica turbolenta è legata agli eddy più grandi che estraggono l'energia dal flusso medio; la dissipazione consiste nella trasformazione dell'energia cinetica turbolenta in calore. Poi si ha un termine di diffusione molecolare, un termine di trasporto turbolento dovuto alle fluttuazioni di velocità ed uno dovuto alle fluttuazioni di pressione.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \nu_t \frac{\varepsilon}{k} \left[\left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} \right] - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (2.28)$$

Si osserva un termine di accumulo, un termine convettivo dovuto alla velocità media del flusso, un termine legato alla produzione di ε ed uno alla sua dissipazione ed, in ultimo, un termine diffusivo.[4] La costante di tempo per la turbolenza è data da:

$$\tau = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.29)$$

Tramite un'analisi dimensionale la viscosità turbolenta risulta pari a:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.30)$$

2.5 Modellazione vicino alle pareti

I flussi di interesse sono sempre delimitati da pareti solide. Ludwig Prandtl fu il primo a capire che il valore delle forze inerziali e viscosi cambiava passando da uno strato vicino alla parete a una regione lontana da essa. Ad esempio, il modello della turbolenza $k-\varepsilon$ non è valido vicino alla parete a causa della dominanza degli effetti viscosi e della rapida variazione delle variabili in gioco. Per risolvere il problema vengono solitamente seguiti due approcci. Nel primo caso si introducono le *funzioni alla parete* per ottenere le condizioni al contorno per le componenti di velocità media e le quantità turbolente nel primo punto della griglia lontano dalla parete e non si risolvono le equazioni di governo nella regione vicino alla parete stessa. Nel secondo caso si effettuano delle modifiche ai modelli turbolenti per risolvere anche la regione influenzata fortemente dalla viscosità. [4] La condizione di "no-slip" è quella che si verifica in corrispondenza di una superficie solida in cui la velocità relativa tra il fluido e la parete stessa è nulla. Ciò avviene perché le molecole, muovendosi, urtano contro la parete e trasferiscono ad essa la loro quantità di moto. Le molecole che rimbalzano nel flusso, così, rallentano il fluido che si trova vicino alla parete creando una zona che viene chiamata strato limite. Ad alti numeri di Reynolds si genera lo strato limite turbolento che contribuisce ad una maggiore efficacia nel trasporto delle proprietà grazie alla presenza dei vortici. Lo strato limite turbolento viene suddiviso in una regione esterna ed una interna. A sua volta la regione interna può essere suddivisa in quattro strati differenti, come mostrato in Fig.2.6. Lo strato viscoso corrisponde ad un flusso laminare caratterizzato da un basso valore di velocità. Qui il trasporto delle proprietà è guidato dalla viscosità molecolare. Segue una zona cuscinetto, cioè una zona di transizione dal flusso laminare a turbolento. Allontanandosi dalla parete il flusso diventa turbolento e risente sempre meno della sua presenza. Qui diventano dominanti gli sforzi turbolenti. Si definisce la *velocità di attrito alla parete* u^* come:

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.31)$$

Dove τ_w è lo sforzo alla parete ricavato imponendo la condizione al contorno di no-slip. Questo consente di definire una scala di lunghezza caratteristica per la parete data da:

$$l^* = \frac{\nu}{u^*} \quad (2.32)$$

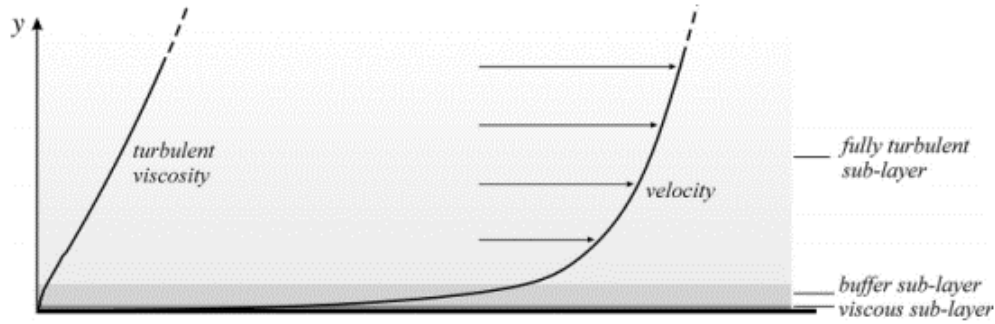


Fig. 2.6: Strati limite nella regione interna in regime turbolento [4]

2.5.1 Funzioni alla parete

Risolvere le equazioni di governo nelle zone vicino alla parete richiederebbe un elevato sforzo computazionale per le movitazioni di cui sopra. Risulta, quindi, vantaggioso utilizzare le funzioni alla parete, ossia delle regole empiriche basate su leggi logaritmiche. L'idea di base dell'approccio delle funzioni di parete è di applicare condizioni al contorno ad una certa distanza dalla parete in modo da non risolvere il modello di turbolenza vicino ad essa. Le funzioni di parete permettono di effettuare i calcoli con il primo punto della griglia, P, nella regione in cui la funzione di parete è valida, piuttosto che sulla parete stessa, come mostrato nella Fig.2.7. Si definiscono le condizioni al contorno in W, che rappresenta la parete, ed in P che rappresenta il primo punto della griglia computazionale. Così, è possibile calcolare le variazioni rapide delle variabili di flusso che si verificano all'interno della regione vicina alla parete senza risolvere la regione viscosa vicino alla parete.[4]

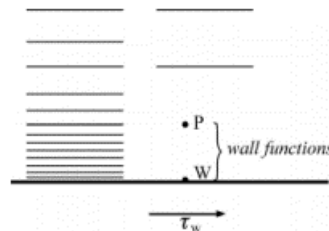


Fig. 2.7: Applicazione delle funzioni alla parete alle simulazioni CFD [4]

2.5.2 Modelli di turbolenza a basso numero di Reynolds

I modelli a basso numero di Reynolds sono validi anche nella regioni viscosi vicino alle pareti. Tipicamente si introducono dei fattori di smorzamento per i termini sorgente nell'equazione di trasporto per ε e nell'espressione per la viscosità turbolenta. È importante sottolineare che questi modelli sono applicabili per flussi completamente turbolenti, quindi con un numero di Reynolds globale elevato. Il termine "basso numero di Reynolds" infatti deriva dal numero di Reynolds locale. L'equazione di trasporto per k rimane la

stessa definita nel modello k- ε . L'equazione di trasporto di ε diventa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial t} + \overline{v_j} \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} f_1 \nu_t \frac{\varepsilon^*}{k} \left[\left(\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{v_j}}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} \right] \\ - C_{2\varepsilon} f_2 \frac{\varepsilon^{*2}}{k} + E \end{aligned} \quad (2.33)$$

La viscosità turbolenta è calcolata come:

$$\nu_t = f_\mu C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.34)$$

La velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta è data da:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon^* \quad (2.35)$$

Le due quantità E ed ε_0 dipendono dal modello. Le uniche differenze rispetto al modello k- ε , come detto in precedenza, sono i fattori di smorzamento f_1 , f_2 ed f_μ .

Capitolo 3

Fluidi complessi

I fluidi complessi o strutturati vengono utilizzati in ambito industriale per molte applicazioni. Sono caratterizzati da prodotti che vengono utilizzati quotidianamente: sciroppo, sapone liquido per i piatti, albume d'uovo, glicerina, vernici, dentrificio e ketchup. Esse differiscono tra loro per la viscosità e per la risposta che oppongono allo sforzo applicato. Ad esempio, lo sciroppo ed il sapone per i piatti hanno la stessa consistenza, ma presentano un comportamento differente. Quando si asciugano, lo sciroppo diventa appiccicoso ed il sapone no. Questa lista di sostanze non è facilmente classificabile a livello scientifico. Apparentemente potrebbero essere denominate come liquidi, dato che scorrono sotto l'applicazione di uno sforzo di taglio.[29] In realtà, essi esibiscono un comportamento intermedio tra i solidi e i liquidi convenzionali, in quanto sono in grado di scorrere come farebbe un liquido quando sono sottoposti a sforzi di taglio superiori a un certo valore critico, mantenendo comunque inalterata la forma di un solido cristallino quando sono sottoposti a sforzi di taglio inferiori al valore critico. Per queste ragioni, i fluidi di cui sopra vengono chiamati fluidi complessi o strutturati.[14] Le loro proprietà insolite sono dovute a grandi strutture poliatomiche, le cui dimensioni sono ampiamente maggiori di quelle di una molecola d'acqua. Essi manifestano una varietà di risposte meccaniche e possono esibire varie forme di auto-aggregazione. Ad oggi, è possibile studiare la microscopia di questi fluidi grazie al microscopio elettronico o allo scattering dinamico. Tutti i fluidi elencati sopra, a livello atomico, sono molto simili ai fluidi semplici. La maggior parte sono caratterizzati da legami covalenti tra atomi di carbonio, idrogeno ed ossigeno. Per comprendere le differenze dai fluidi semplici e discutere le proprietà di un fluido strutturato bisogna tenere a mente che all'interno si hanno delle strutture indefinitamente grandi. Si denotano due proprietà: tenacia e flessibilità. La prima implica che la catena polimerica non collassa su sé stessa, ma diffonde occupando un volume più grande. Così accade che alcune catene condividono lo stesso volume esercitando delle forze reciproche. La seconda proprietà implica che le catene polimeriche non esistono in un'unica configurazione, ma possono esplorare un insieme di configurazioni. Particolare attenzione verrà data ai copolimeri a blocchi, cioè due o più polimeri immiscibili legati in una catena lineare. [29]

3.1 Miscele di Pluronic e acqua

La BASF sono stati i primi produttori dei polissammi, commercialmente noti come Pluronic. Si tratta di copolimeri a blocchi caratterizzati da tre parti: un blocco centrale idrofobico di poli(propilene-ossido), o PPO, e due blocchi laterali idrofilici di poli(etilene-

ossido), o PEO, come si osserva in Fig.3.1.

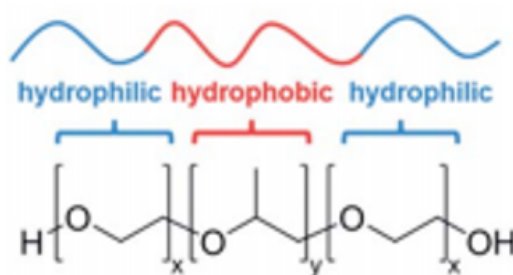


Fig. 3.1: Formula della molecola di Pluronic

Le proprietà fisiche e chimiche dei copolimeri Pluronic possono essere modulate variando il rapporto di massa molare tra i blocchi PEO e PPO (da 1:9 ad 8:2).[23] Sfruttando questi polimeri si ottengono dei prodotti con proprietà anfifiliche che possono essere utilizzati in vari ambiti: dalla lubrificazione, alla formulazione di cosmetici fino all'industria farmaceutica. In quest'ultimo campo vengono utilizzati per favorire la solubilizzazione dei farmaci e per garantire il rilascio controllato dello stesso.

In Fig.3.2 si osserva la griglia del Pluronic.

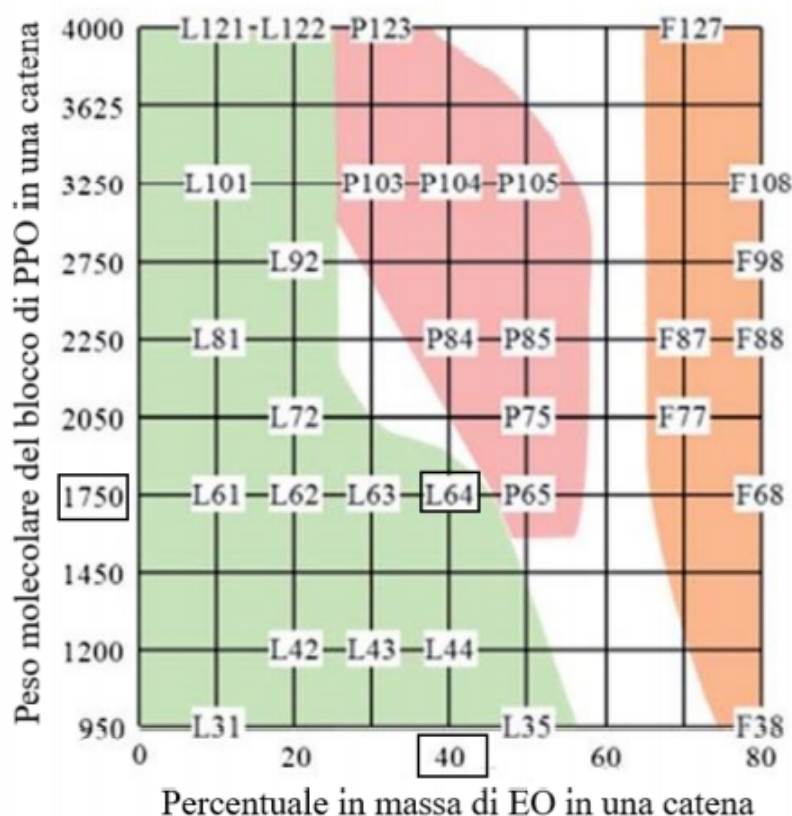


Fig. 3.2: Griglia del Pluronic

La tipologia di Pluronic viene identificata da un codice alfanumerico caratterizzato da una lettera e due numeri. La lettera identifica lo stato fisico di aggregazione. In particolare, L sta per liquido, P sta per pasta ed F sta per fiocco. Il primo numero moltiplicato per 300 genera il peso molecolare del blocco di PPO ed il secondo numero moltiplicato per 10

indica la percentuale in massa di PEO all'interno della molecola. Per la lettura del grafico è opportuno indicare che muovendosi lungo le linee verticali (verso l'alto) aumenta il peso molecolare di PPO; muovendosi lungo le linee orizzontali (verso destra) si ha un aumento del rapporto PPO/PEO. Ad esempio, L64 indica un Pluronic allo stato liquido con un peso molecolare di 1750 g/mol di PPO e contenente il 40 % in massa di etilen-ossido.[2] Grazie alla loro natura anfifilica, le macromolecole di Pluronic si dispongono secondo un orientamento preferenziale in presenza di un solvente selettivo verso uno dei due blocchi.[3] A seconda della temperatura, della concentrazione e del rapporto PPO/PEO, le macromolecole sono in grado di aggregarsi spontaneamente in soluzione acquosa formando microstrutture differenti. Le micelle presentano un nucleo formato dal PPO idrofobo ed una corona esterna formata dalle unità di PEO idrofile.[1] La formazione delle micelle è governata da fattori energetici ed entropici: l'aggregazione avviene spontaneamente per minimizzare il contatto tra la parete idrofobica del polimero e l'ambiente idrofilo rappresentato dal solvente. Il fenomeno è accompagnato, quindi, da una diminuzione dell'energia libera.[2] Risulta necessario definire due parametri critici per studiare il fenomeno di aggregazione: la *concentrazione micellare critica*, o CMC, e la *temperatura micellare critica*, o CMT. Essi sono rispettivamente la soglia di concentrazione/temperatura al di sopra della quale si verifica la formazione di micelle.

La forma e la dimensione delle microstrutture dipendono principalmente dal rapporto PPO/PEO. Esse sono riportate in Fig.3.3.

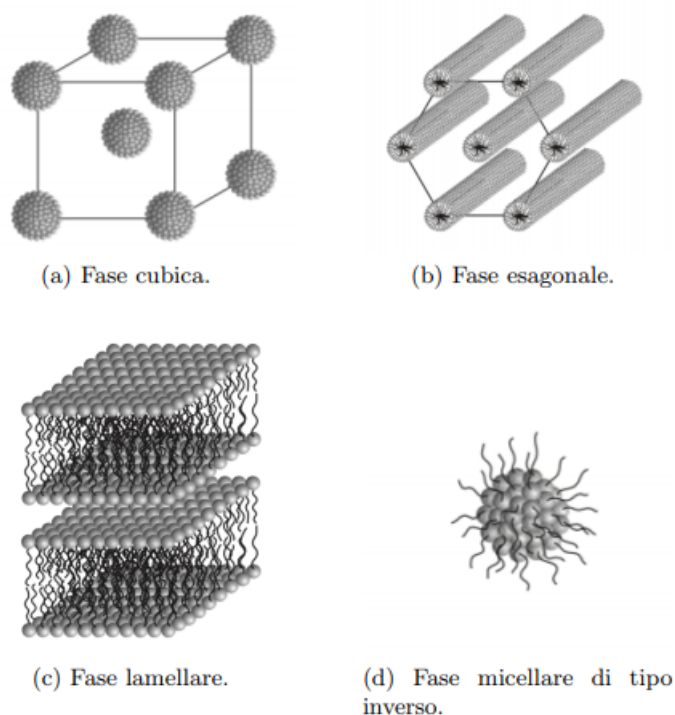


Fig. 3.3: Microstrutture generate dalle macromolecole di Pluronic

La componente chiave è rappresentata dalle catene di PPO: infatti, la CMC e la CMT diminuiscono fortemente con lunghezza delle stesse. Ne consegue che la formazione delle micelle si manifesta maggiormente con una quantità inferiore di PPO.[1] Aumentando la concentrazione del copolimero nel solvente, si formano delle fasi liquide cristalline, note anche come *strutture liotropiche*. Man mano che aumenta la densità delle micelle in soluzione, i blocchi idrofili interagiscono tra loro generando strutture cristalline cubiche

ordinate. Queste sono caratterizzate da una cella elementare cubica a corpo centrato (CCC) o cubica a facce centrate (CFC), in cui ciascun vertice è rappresentato da una micella sferica intrappolata dalle corone micellari adiacenti. In caso di prevalenza di gruppi idrofili le micelle si presentano come sferiche; al contrario assumono una forma sferoidale o asimmetrica.[7] Queste micelle sferoidali, a valori di concentrazione intermedi, si possono allungare assumendo una forma cilindrica. Le micelle cilindriche, quando si trovano vicine tra loro, interagiscono tramite le parti idrofile formando un reticolo cristallino con celle di forma esagonale. Per valori di concentrazione più elevati, le micelle cilindriche si accrescono sempre più in dimensione dando luogo alla formazione di una fase lamellare, ossia strati sottili impilati di molecole di copolimero alternati a strati di solvente acquoso. Infine, si possono originare anche le micelle inverse. Questo avviene per concentrazioni molto elevate di copolimero, cioè quando il solvente costituisce la fase dispersa all'interno della matrice polimerica. [22]

I diagrammi di fase risultano utili per comprendere il comportamento dei diversi tipi di Pluronic in soluzione. Essi riportano la concentrazione di copolimero sull'asse delle ascisse e la temperatura sull'asse delle ordinate. Si riporta il diagramma di fase in Fig.3.4 per il Pluronic L64, che sarà oggetto di studio di questo lavoro di tesi. Si osservano le diverse fasi: L_1 è la fase micellare, H è la fase esagonale, L_α è la fase lamellare ed L_2 è la fase micellare di tipo inverso. [22]

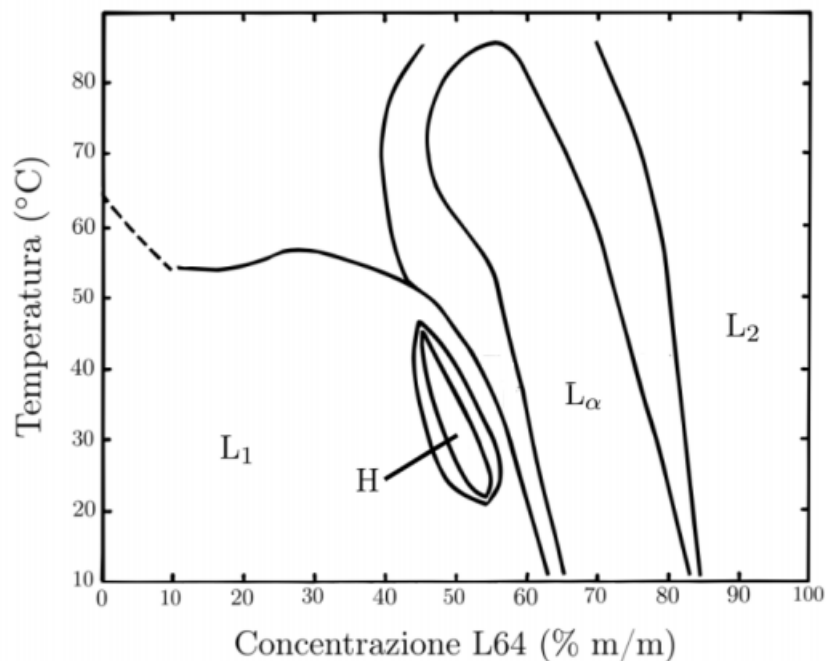


Fig. 3.4: Diagramma di fase per il Pluronic L64

Capitolo 4

Modellizzazione del sistema e metodi di risoluzione

In questa sezione verranno analizzati i dettagli numerici relativi alle simulazioni effettuate. È stato utilizzato il software OpenFOAM versione 8 [18], basato sul linguaggio di programmazione C++ con cui è stato implementato il metodo dei volumi finiti per risolvere le equazioni di trasporto.

4.1 Metodo dei volumi finiti

Il principio alla base del metodo dei volumi finiti è la conservazione locale, cioè il flusso della proprietà che passa tra due celle adiacenti è lo stesso. Il metodo dei volumi finiti prevede la divisione del dominio computazionale in piccoli volumi di controllo, detti *celle* (ognuna circondata dalle sue facce), le quali formano la griglia (*mesh*) di calcolo. Il metodo richiede una soluzione numerica, introducendo così degli errori. È importante controllare l'ordine di grandezza di quest'ultimo, dopo aver ottenuto la soluzione, per garantire la sua accuratezza. In particolare, è noto che l'errore diminuisce al diminuire della dimensione delle celle. D'altra parte, però, ridurre troppo la dimensione delle celle impatta sullo sforzo computazionale richiesto ed allunga i tempi della simulazione. Bisogna quindi trovare un compromesso tra i due aspetti. [4]

L'equazione generica di trasporto di una proprietà viene scritta in notazione indiciale come:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \frac{\partial (v_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad (4.1)$$

Si ha il termine di accumulo, il termine convettivo, il termine diffusivo ed un termine sorgente. La proprietà che viene trasportata è indicata con ϕ . Si ottiene un'equazione differenziale alle derivate parziali che viene riscritta per ogni cella in modo da ottenere un insieme di equazioni algebriche lineari, le quali verranno risolte in modo iterativo. Si considera un volume di controllo Ω con le relative facce, come si osserva in Fig.4.1, dove U, V e W sono le velocità in direzione x,y e z; n,s,e,w,t,b si riferiscono alle facce e rispettivamente indicano nord, sud, est, ovest, top e bottom.

Dopo aver effettuato la discretizzazione del dominio, si effettua il bilancio integrale ad ogni singolo volume di controllo:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} \rho \frac{\partial (\mathbf{v}_j \phi)}{\partial x_j} dV = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dV + \int_{\Omega} S_\phi dV \quad (4.2)$$

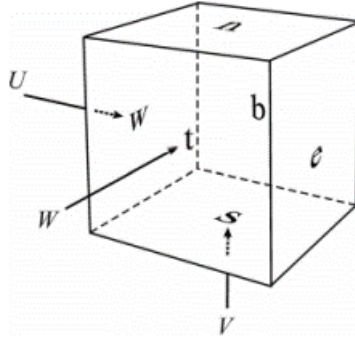


Fig. 4.1: Le facce di un volume di controllo

Si applica il teorema di Gauss al termine convettivo e diffusivo per trasformare l'integrale di volume in uno di superficie:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_A \rho \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n} \phi dA = \int_A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \mathbf{n} dA + \int_{\Omega} S_{\phi} dV \quad (4.3)$$

Dove \mathbf{n} è il vettore normale che esce dalla superficie A. Per risolvere il problema è necessario ricondursi ad una forma algebrica sfruttando delle approssimazioni. Il termine di accumulo può essere trascurato in quanto si considera un problema allo stato stazionario. L'integrale di superficie del termine convettivo viene approssimato come segue:

$$\int_A \rho \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n} \phi dA = -\rho[(AU\phi)_w - (AU\phi)_e + (AV\phi)_s - (AV\phi)_n + (AW\phi)_b - (AW\phi)_f] \quad (4.4)$$

Il segno negativo è indice del fatto che $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$, cioè la velocità è in verso opposto al sistema di riferimento scelto.

La stessa approssimazione può essere effettuata per il termine diffusivo:

$$\int_A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \mathbf{n} dA = - \left[\left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e + \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n + \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b - \left(A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_f \right] \quad (4.5)$$

Il termine sorgente tiene conto della generazione o dissipazione della proprietà ϕ , come ad esempio la forza di gravità o di pressione. Questo termine può essere semplicemente approssimato al valore medio nella cella come:

$$\int_{\Omega} S_{\phi} dV = \overline{S_{\phi}} V \quad (4.6)$$

Il risultato del processo di discretizzazione è un insieme finito di equazioni algebriche accoppiate che devono essere risolte simultaneamente in ogni cella del dominio. A causa della non linearità delle equazioni che governano il flusso del fluido e i processi correlati, è necessaria una procedura di soluzione iterativa. Due metodi sono comunemente usati. Un approccio di *soluzione segregata* è quello in cui viene risolta una variabile alla volta nel dominio computazionale. Così, la componente x della velocità è risolta sull'intero dominio, poi la componente y e così via. Un'iterazione della soluzione è completa solo dopo che

ogni variabile è stata risolta in questo modo. Un approccio di *soluzione accoppiata*, d'altra parte, è quello in cui tutte le variabili, o come minimo l'equazione di bilancio di quantità di moto e l'equazione di continuità, sono risolte simultaneamente in una singola cella prima che il solutore si sposti alla cella successiva, dove la procedura viene ripetuta. L'approccio della soluzione segregata è popolare per i flussi incomprimibili con fisica complessa, tipici delle applicazioni di miscelazione. Tipicamente, la soluzione di una singola equazione nel solutore segregato viene eseguita su un sottoinsieme di celle, usando un solutore di equazioni lineari Gauss-Seidel.[8]

Indipendentemente dal metodo utilizzato, tuttavia, le equazioni devono essere risolte più e più volte fino a quando l'errore collettivo è ridotto a un valore inferiore a un valore minimo prestabilito. A questo punto, la soluzione è considerata arrivata a convergenza, e i risultati sono più significativi. Se la forma algebrica di un'equazione di conservazione, in ogni volume di controllo, potesse essere risolta esattamente, sarebbe scritta come:

$$A_P \phi_P - \sum_{i, neighbors} A_i \phi_i = 0 \quad (4.7)$$

Questa uguaglianza non sarà mai verificata in modo esatto perché la soluzione dell'equazione, ad ogni passo, è basata su delle approssimazioni. Di conseguenza, è opportuno definire l'errore o il *residuo*.

$$A_P \phi_P - \sum_{i, neighbors} A_i \phi_i = R_P \quad (4.8)$$

Il residuo totale è la somma dei residui su tutte le celle del dominio computazionale:

$$\sum_{P, celle} R_P = R \quad (4.9)$$

Spesso, i criteri di convergenza sfruttano delle condizioni prestabilite per i residui. Ad esempio, un criterio che viene spesso utilizzato è che il residuo totale normalizzato per l'equazione della pressione sia al di sotto di 10^{-3} . Oppure, in alternativa, che la somma di tutti i residui normalizzati scenda al di sotto di 10^{-4} . Quando la condizione di convergenza viene raggiunta la soluzione non si modificherà più.[8]

4.2 Metodi di discretizzazione spaziale

Il problema sta nel fatto che il valore della proprietà è noto al centro della cella e non al centro della faccia. Questo comporta un'interpolazione dei valori di ϕ , \mathbf{v}_j e Γ sulle facce delle celle. I metodi di discretizzazione spaziale risultano necessari per ricavare i valori della proprietà ϕ e del suo gradiente al centro delle facce partendo dai valori noti di ϕ al centro delle celle.

Metodo alle differenze centrate o CDS

Per semplicità si considera un problema monodimensionale, come si osserva in Fig.4.2.

Trascurando il termine di accumulo e di generazione ed integrando l'Eq.4.1 sul volume di controllo si ottiene:

$$\int_w^e \rho \frac{d(U\phi)}{dx} dx = \int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dx \quad (4.10)$$

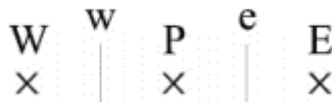


Fig. 4.2: Suddivisione del dominio monodimensionale evidenziando celle e facce

Sfruttando le approssimazioni precedenti si ottiene la forma algebrica:

$$[(\rho U \phi)_e - (\rho U \phi_w)] = \left[\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right] \quad (4.11)$$

Per ricavare i valori al centro delle facce si sfrutta un'interpolazione lineare dalle celle vicine.

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (4.12)$$

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (4.13)$$

Per stimare i gradienti della proprietà al centro della faccia si utilizza il rapporto incrementale, cioè l'espansione di Taylor al primo ordine.

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W} \quad (4.14)$$

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (4.15)$$

Sostituendo si ottiene:

$$\left[\left(\rho U \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \right) - \left(\rho U \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \right) \right] = \left[\left(\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \right) - \left(\Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W} \right) \right] \quad (4.16)$$

Questa equazione deve essere risolta per ogni cella. Ogni equazione conterrà tre termini incogniti, cioè ϕ_W , ϕ_P e ϕ_E . Raccogliendo questi tre termini si ottiene:

$$\underbrace{\left(\frac{\Gamma}{x_E - x_P} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \right)}_B \phi_P + \underbrace{\left(\frac{\rho U}{2} - \frac{\Gamma}{x_E - x_P} \right)}_C \phi_E + \underbrace{\left(-\frac{\rho U}{2} - \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \right)}_A \phi_W = 0 \quad (4.17)$$

Il primo termine evidenziato viene indicato con B; il secondo con C e l'ultimo con A. Se la griglia è regolare si ha che $x_E - x_P = x_P - x_W = \Delta x$:

$$A\phi_{i-1} + B\phi_i + C\phi_{i+1} = 0 \quad (4.18)$$

L'indice i serve per contare le celle. Si ottiene una matrice tridiagonale, ma sono necessarie due condizioni al contorno. Per far ciò si definiscono due celle fantasma, ossia al di fuori del dominio di calcolo, alla stessa distanza che intercorre tra due celle reali. Considerando un dominio fatto da N celle, esse vengono denotate con ϕ_0 e ϕ_{N+1} ; mentre, i valori limite sono chiamati con ϕ_A e ϕ_B . Utilizzando l'interpolazione lineare si ottiene:

$$\phi_A = \frac{\phi_0 + \phi_1}{2} \quad (4.19)$$

$$\phi_B = \frac{\phi_N + \phi_{N+1}}{2} \quad (4.20)$$

L'insieme di equazioni può essere risolto sfruttando i metodi diretti o iterativi, come Gauss-Seidel. Ricavando ϕ_P si ottiene:

$$\phi_P = \frac{a_W \phi_W + a_E \phi_E}{a_P} \quad (4.21)$$

Dove:

$$a_E = \left(-\frac{\rho U}{2} + \frac{\Gamma}{x_E - x_P} \right) \quad (4.22)$$

$$a_W = \left(\frac{\rho U}{2} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \right) \quad (4.23)$$

$$a_P = \left(\frac{\Gamma}{x_E - x_P} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \right) \quad (4.24)$$

I coefficienti a_E , a_W ed a_P affermano come si trasporta la proprietà da una cella all'altra. Un valore negativo di questi non ha un significato fisico, ma può essere raggiunto nel caso di forte convezione. In questo caso si avrebbe un'instabilità e si otterrebbero dei valori di ϕ privi di significato.

Per comprendere la stabilità del metodo si introduce il numero di Peclet di cella dato da:

$$Pe_c = \frac{\rho U \Delta x}{\Gamma} \quad (4.25)$$

Lo schema funziona e genera una soluzione convergente solo se $Pe_c < 2$. Un metodo di discretizzazione dovrebbe rispettare la proprietà di trasporto, ossia dovrebbe essere in grado di sentire in quale direzione viene trasportata la proprietà. Questo non accade per lo schema CDS. Infatti, nel caso di forte convezione, bisognerebbe utilizzare dei valori di Δx troppo piccoli per ottenere un $Pe_c < 2$. Per questo motivo vengono introdotti i metodi di discretizzazione up-wind. [4]

Metodi di discretizzazione up-wind

In questi schemi i valori facciali dipendono esclusivamente dalle celle più a monte. Nel caso del metodo **First-order upwind** (FOU) si sfrutta il principio che il valore della faccia tra due celle è uguale a quello della cella a monte più vicina, cioè:

$$\phi_w = \phi_W \quad (4.26)$$

$$\phi_e = \phi_P \quad (4.27)$$

Le Eq. 4.26 e 4.27 sono valide nel caso in cui si abbia a che fare con velocità positive. Il bilancio, in questo caso particolare, può essere riscritto come:

$$[(\rho U \phi_P) - (\rho U \phi_W)] = \left[\left(\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \right) - \left(\Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W} \right) \right] \quad (4.28)$$

I coefficienti sono pari a:

$$a_E = \frac{\Gamma}{x_E - x_P} \quad (4.29)$$

$$a_W = \frac{\Gamma}{x_P - x_W} + \rho U \quad (4.30)$$

$$a_P = \rho U + \frac{\Gamma}{x_E - x_P} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \quad (4.31)$$

Essendo i coefficienti sempre positivi, il metodo viene considerato sempre limitato e stabile. Per comprendere l'ordine del metodo si valuta la serie di Taylor al centro della faccia e:

$$\phi(x_e) = \phi(x_p) + \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_P (x_e - x_p) \quad (4.32)$$

Nel caso di griglia regolare si ottiene:

$$\phi_e = \phi_P + \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_P \left(\frac{\Delta x}{2} \right) \quad (4.33)$$

Il metodo è del primo ordine in quanto l'errore di discretizzazione è direttamente proporzionale alla dimensione della cella. Ciò significa che dimezzando Δx dimezza anche l'errore. Moltiplicando per ρU si definisce la *diffusione numerica* come:

$$\Gamma_e = \frac{\rho U_e \Delta x}{2} \quad (4.34)$$

Per migliorare l'accuratezza della soluzione è conveniente utilizzare dei metodi del secondo ordine. Il metodo **Second-Order upwind** (SOU) predice i valori delle facce sfruttando le informazioni delle due celle più a monte. In particolare, esso assume che il gradiente tra la cella attuale e quella ad est sia uguale a quello tra la cella attuale e quella ad ovest. A livello matematico è possibile scrivere che:

$$\frac{\phi_e - \phi_P}{x_e - x_P} = \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W} \quad (4.35)$$

Dall'Eq. 4.35 si può ricavare ϕ_e :

$$\phi_e = \frac{(\phi_P - \phi_W)(x_e - x_P)}{x_P - x_W} + \phi_P \quad (4.36)$$

Spesso il FOU si utilizza per avere una prima soluzione grossolana, la quale verrà poi raffinata da un metodo di ordine superiore. [4]

Metodi ibridi

A volte si sfruttano degli schemi ibridi che sono in grado di unire le proprietà positive dei metodi del primo e del secondo ordine. In particolare, sfruttano la stabilità del FOU e l'accuratezza del CDS. Per raggiungere un'accuratezza maggiore si può utilizzare lo schema **QUICK** (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*). Esso combina i punti di forza degli schemi upwind e di quello a differenze centrate. In particolare, utilizza l'interpolazione quadratica a tre punti per stimare i valori nelle facce. Per le facce ovest ed est si ha rispettivamente:

$$\phi_w = \frac{6}{8}\phi_W + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{WW} \quad (4.37)$$

$$\phi_e = \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_{EW} \quad (4.38)$$

Effettuando l'espansione di Taylor di ϕ sulla faccia est si ottiene:

$$\phi_E = \phi_e + \left(\frac{\Delta x}{2} \right)_e \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e + \frac{(\Delta x/2)^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_e + O[(\Delta x)^3] \quad (4.39)$$

$$\phi_P = \phi_e - \left(\frac{\Delta x}{2}\right)_e \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_e + \frac{(\Delta x/2)^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_e + O[(\Delta x)^3] \quad (4.40)$$

$$\phi_P = \phi_e - (1.5\Delta x)_e \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_e + \frac{(1.5\Delta x)^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_e + O[(\Delta x)^3] \quad (4.41)$$

Sostituendo le Eq. 4.39, 4.40 e 4.41 nelle Eq. 4.37 e 4.38 si ottiene:

$$\phi_e = \phi_e^{QUICK} + O[(\Delta x)^3] \quad (4.42)$$

Come si osserva, l'errore numerico è proporzionale a Δx^3 . Ne consegue che il metodo è del terzo ordine ed avrà una precisione maggiore.[4]

4.3 Metodi di discretizzazione temporale

Nella maggioranza dei problemi CFD il flusso studiato è turbolento e questo implica una dipendenza dal tempo. La procedura per risolvere i problemi transitori è la stessa utilizzata nel caso dei problemi stazionari. L'equazione di trasporto generica viene integrata nel volume di controllo, quindi rispetto allo spazio, ed anche rispetto al tempo.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(\int_t^{t+\Delta t} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dt \right) dV + \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{\Omega} \rho \frac{\partial (U_j \phi)}{\partial x_j} dV \right] dt = \\ & = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dV \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{\Omega} S_{\phi} dV \right) dt \end{aligned} \quad (4.43)$$

Si considera un caso monodimensionale, come indicato in Fig.4.2. In questo caso si avrà $dV=dx$. Per semplicità si trascura la convezione ed il termine sorgente. Di conseguenza, l'equazione di trasporto si riduce a:

$$\int_w^e \left(\int_t^{t+\Delta t} \rho \frac{d\phi}{dt} dt \right) dx = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dx \right] dt \quad (4.44)$$

Il termine diffusivo viene modificato utilizzando le approssimazioni dello schema a differenze centrate:

$$\int_w^e \left(\int_t^{t+\Delta t} \rho \frac{d\phi}{dt} dt \right) dx = \int_t^{t+\Delta t} \left(\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) dt \quad (4.45)$$

Per procedere con l'integrazione temporale è necessario uno schema di discretizzazione temporale appropriato. Per stimare la derivata temporale al tempo "*presente*" si possono usare sia tempi "*precedenti*", sia tempi "*successivi*".

$$\rho[\phi_P(t + \Delta t) - \phi_P(t)]\Delta x = \int_t^{t+\Delta t} \left(\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) dt \quad (4.46)$$

L'integrale a secondo membro viene valutato ad ogni passo temporale. Bisogna considerare che ϕ cambia nel tempo: esso può essere pari a $\phi(t)$, a $\phi(t + \Delta t)$ o può essere una media pesata tra i due. Per questo motivo risulta utile definire il *fattore di peso* θ :

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi dt = [\theta \phi(t + \Delta t) + (1 - \theta) \phi(t)] \Delta t \quad (4.47)$$

Si parla di discretizzazione esplicita nel caso in cui $\theta = 0$ e viene utilizzato solo il vecchio valore di ϕ per risolvere l'equazione; si parla, invece, di discretizzazione implicita nel caso in cui $\theta = 1$ e viene utilizzato solo il nuovo valore di ϕ per risolvere l'equazione. Ovviamente, θ può anche essere compreso tra 0 ed 1, come nel caso dello schema di Crank-Nicolson. Sostituendo l'equazione 4.47 nella 4.46 si ottiene:

$$\rho[\phi_P - \phi_P^0]\Delta x = \left[\theta \left(\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + (1 - \theta) \left(\Gamma_e \frac{\phi_E^0 - \phi_P^0}{\Delta x} - \Gamma_w \frac{\phi_P^0 - \phi_W^0}{\Delta x} \right) \right] dt \quad (4.48)$$

Raccogliendo i termini si ottiene:

$$\begin{aligned} & \left[\rho \frac{\Delta x}{\Delta t} + \theta \left(\frac{\Gamma_e}{\Delta x} + \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \right) \right] \phi_P \\ &= \frac{\Gamma_e}{\Delta x} [\theta \phi_E + (1 - \theta) \phi_E^0] + \frac{\Gamma_w}{\Delta x} [\theta \phi_W + (1 - \theta) \phi_W^0] \\ &+ \left[\rho \frac{\Delta x}{\Delta t} - (1 - \theta) \frac{\Gamma_e}{\Delta x} - (1 - \theta) \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \right] \phi_P^0 \end{aligned} \quad (4.49)$$

In termini di coefficienti:

$$\begin{aligned} a_P \phi_P &= a_W [\theta \phi_W + (1 - \theta) \phi_W^0] + a_E [\theta \phi_E + (1 - \theta) \phi_E^0] \\ &+ [a_P^0 - (1 - \theta) a_W - (1 - \theta) a_E] \phi_P^0 \end{aligned} \quad (4.50)$$

Dove:

$$a_P = \theta(a_W + a_E) + a_P^0 \quad (4.51)$$

$$a_P^0 = \rho \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.52)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad (4.53)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \quad (4.54)$$

L'equazione ricavata 4.50 deve essere soddisfatta in ogni step temporale. Quando si ottiene una soluzione convergente, si va avanti di un passo temporale e si ripetono le sub-iterazioni finchè non viene raggiunto il tempo impostato.[4]

Metodo di Eulero esplicito

Si ottiene quando $\theta = 0$. L'equazione 4.50 diventa:

$$\phi_P = \frac{a_W \phi_W^0 + a_E \phi_E^0 + (a_P^0 - a_W - a_E) \phi_P^0}{a_P} \quad (4.55)$$

I coefficienti risultano essere pari a:

$$a_P = a_P^0 = \rho \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.56)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad (4.57)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \quad (4.58)$$

Per avere uno schema di discretizzazione limitato lo step temporale deve essere scelto in modo che $a_P^0 - a_W - a_E > 0$. Questo implica:

$$\Delta t < \frac{\rho(\Delta x)^2}{\Gamma_e + \Gamma_w} \quad (4.59)$$

Metodo di Eulero implicito

Si ottiene quando $\theta = 1$. L'equazione 4.50 diventa:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_P^0 \phi_P^0 \quad (4.60)$$

I coefficienti risultano essere pari a:

$$a_P = a_W + a_E + a_P^0 \quad (4.61)$$

$$a_P^0 = \rho \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.62)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad (4.63)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \quad (4.64)$$

I coefficienti sono sempre positivi e quindi questo schema è incondizionatamente stabile. Il valore dello step temporale, in questo caso, è determinato dal numero ottimale di iterazioni possibili in ogni passo.

Metodo di Crank-Nicolson

Si ottiene quando $\theta = 0.5$. L'equazione 4.50 diventa:

$$a_P \phi_P = a_W \left[\frac{1}{2} \phi_W + \frac{1}{2} \phi_W^0 \right] + a_E \left[\frac{1}{2} \phi_E + \frac{1}{2} \phi_E^0 \right] + \left[a_P^0 - \frac{1}{2} a_W - \frac{1}{2} a_E \right] \phi_P^0 \quad (4.65)$$

I coefficienti sono pari a:

$$a_P = \frac{1}{2} (a_W + a_E) + a_P^0 \quad (4.66)$$

$$a_P^0 = \rho \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.67)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad (4.68)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \quad (4.69)$$

Per avere una soluzione convergente bisogna soddisfare:

$$\Delta t < \frac{\rho(\Delta x)^2}{\Gamma} \quad (4.70)$$

Per concludere è possibile affermare che i metodi di discretizzazione esplicita ed implicita sono del primo ordine, in quanto:

$$\begin{aligned} \phi &= \phi^{ex} + O(\Delta t) \\ \phi &= \phi^{im} + O(\Delta t) \end{aligned} \quad (4.71)$$

Il metodo di Crank-Nicolson, invece, è un metodo del secondo ordine:

$$\phi = \phi^{C-N} + O[(\Delta t)^2] \quad (4.72)$$

Come affermato in precedenza, il metodo esplicito è condizionatamente stabile e ciò implica che bisogna rispettare un vincolo nella scelta del passo temporale. Se il vincolo non è

rispettato, la soluzione diverge. Nel metodo di Crank-Nicolson il vincolo è meno restrittivo e differisce di un fattore 2. Viceversa, il metodo implicito è incondizionatamente stabile. Questo è un grande vantaggio ed è il motivo principale per cui, nella maggior parte dei codici CFD commerciali, è utilizzato come metodo predefinito per la discretizzazione del tempo.[4]

Il passo temporale viene determinato dal *numero di Courant* (CFL). Poiché il passo temporale è determinato dai flussi in ogni cella e la regola generale è che il passo temporale deve essere più breve del tempo necessario per il trasporto oltre la cella, si può scrivere che:

$$\Delta t < CFL_{min} \left(\frac{\rho(\Delta x^2)}{\Gamma}, \frac{\Delta x}{U} \right) \quad (4.73)$$

4.3.1 Metodi di risoluzione SIMPLE e PIMPLE

Risulta necessario risolvere simultaneamente l'equazione di continuità e quella di Navier-Stokes per risolvere il campo di moto e di pressione di un fluido. Questo non è immediato dal momento che non è presente un'equazione che permetta di ricavare esplicitamente la pressione. Infatti, nel caso di un fluido incomprimibile l'equazione di continuità non può essere utilizzata in maniera diretta. Per questo motivo risulta vantaggioso sfruttare dei metodi iterativi, come l'algoritmo SIMPLE o PIMPLE. Il SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) necessita di un'ipotesi iniziale per il campo di pressione. Si tratta di un problema che viene chiamato *pressure-velocity coupling* e viene riassunto nei seguenti step:

1. Avendo un'ipotesi iniziale sul campo di pressione, si risolve l'equazione di bilancio di quantità di moto per ottenere il campo di moto.
2. Il campo di moto ottenuto viene utilizzato per risolvere l'equazione di Poisson, da cui si ottiene un nuovo campo di pressione. L'equazione di Poisson viene ricavata applicando l'operatore divergenza all'equazione di Navier-Stokes e sostituendo l'equazione di continuità.

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x_i \partial x_i} = - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\rho U_i U_j) \quad (4.74)$$

3. Si confronta il campo di pressione ipotizzato al passo 1 con quello ricavato al passo 2. Nel caso in cui non sia stata raggiunta la convergenza si rifà la procedura utilizzando il nuovo campo di pressione come ipotesi iniziale.

Il metodo SIMPLE è utilizzato per risolvere i problemi allo stato stazionario.[4] Nel caso di problemi transitori risulta più opportuno sfruttare il metodo PIMPLE, dato dall'unione tra il SIMPLE ed il PISO. Nel metodo PIMPLE si distinguono due loop differenti: uno interno ed uno esterno. L'inserimento di *correttori esterni* consente il looping dell'intero sistema di equazioni all'interno del passo temporale, cioè rappresenta il numero di volte in cui l'algoritmo risolve le equazioni di pressione e quantità di moto in ogni step. In Fig.4.3 è mostrato il funzionamento dell'algoritmo PIMPLE. Con l'avanzare del passo temporale, vengono risolte una serie di equazioni lineari per la pressione, sfruttando come ipotesi iniziale del sistema la soluzione del correttore precedente. Nell'algoritmo PIMPLE, il predittore-correttore porterà i campi di pressione e velocità p^n e U^n a convergere alle soluzioni finali p^{n+1} e U^{n+1} . Tuttavia, è facile per il correttore correggere eccessivamente

i campi in modo tale che la storia della convergenza dei campi su ogni cella può essere oscillatoria. In questo caso, bisogna procedere con un nuovo valore ipotetico iniziale.[30]

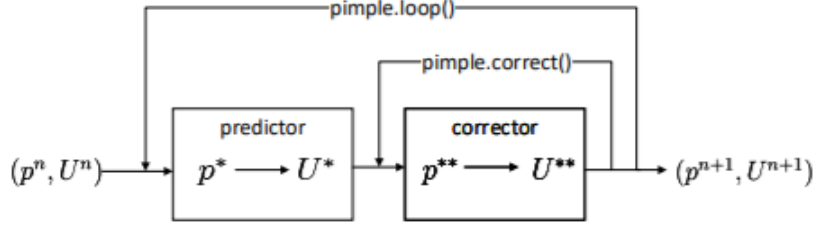


Fig. 4.3: Aggiornamento dei campi di pressione e velocità dal passo temporale n al successivo $n+1$

4.4 Fattori di sotto-rilassamento

Nelle equazioni di bilancio possono comparire dei termini non lineari. Per evitare la divergenza dovuta a questa non linearità si sfruttano i fattori di sotto-rilassamento. Il fattore di sotto-rilassamento α è definito come:

$$\phi_{new} = \alpha \phi_{solver} + (1 - \alpha) \phi_{old} \quad (4.75)$$

Dove ϕ_{new} è il nuovo valore nella cella, ϕ_{solver} è il valore della soluzione dell'ultima iterazione e ϕ_{old} è il valore precedente nella cella, utilizzato per calcolare ϕ_{solver} . Il valore α è spesso compreso tra 0 ed 1.[4] Ogni equazione di trasporto o di pressione ha il suo fattore di sotto-rilassamento corrispondente. Un valore troppo basso di esso dà tempi di calcolo immotivatamente lunghi. Un valore troppo grande può dare una soluzione divergente. Quindi, la scelta dei valori ottimali è di grande importanza pratica. Questi fattori rendono il processo di convergenza più stabile, ma più lento. Man mano che la soluzione converge, i fattori di sotto-rilassamento dovrebbero essere gradualmente aumentati per assicurare una convergenza che sia rapida e stabile in ogni momento.[8]

4.5 Modello di Bird-Carreau per la descrizione della viscosità

Il modello di Bird-Carreau utilizza la seguente legge non lineare per esprimere la relazione tra viscosità e sforzo di taglio subito da un fluido:

$$\nu = \nu_{\infty} + (\nu_0 - \nu_{\infty}) [1 + (k\dot{\gamma})^{\alpha}]^{\frac{n-1}{\alpha}} \quad (4.76)$$

La costante α è un coefficiente che usualmente viene posta uguale a 2. È un modello a quattro parametri valido per l'intera gamma di velocità di taglio. Per i casi in cui ci sono variazioni significative dal modello della legge di potenza, cioè velocità di taglio molto alte o molto basse, diventa essenziale incorporare i valori di viscosità a taglio nullo ν_0 e a taglio infinito ν_{∞} . In particolare, k è il tempo in secondi in cui il comportamento lineare cambia in una legge di potenza; n è l'indice di flusso.[28]

4.6 Modellazione della geometria della girante

Per modellare esattamente la geometria della girante è necessario eseguire una simulazione tridimensionale. In questa sezione verranno illustrati i metodi in grado di catturare il movimento di una girante rotante all'interno di un serbatoio fisso.

4.6.1 Modello "Rotating Frame"

Il modello risolve le equazioni di bilancio della quantità di moto per l'intero dominio in un *frame* rotante includendo la forza di Coriolis. Si denota con Ω la velocità angolare del frame, la quale coincide con quella della girante. Il serbatoio, tuttavia, ruota in direzione opposta e quindi si deve avere una condizione limite per Ω . E' un modello allo stato stazionario che non è in grado di descrivere dei serbatoi contenenti deflettori. Di conseguenza, risulta utile solo per serbatoi senza deflettori, con pareti lisce e geometricamente equivalenti ad una perfetta superficie di rivoluzione.[8]

4.6.2 Modello "Multiple Reference Frame"

Per modellare serbatoi agitati con deflettori o interni complessi si sfrutta l'approccio MRF. In questo caso, un *frame rotante* è utilizzato per modellare la regione contenente i componenti rotanti, come la girante, ed un *frame stazionario* per le regioni stazionarie, come le pareti o i deflettori. In Fig.4.4 viene mostrato un serbatoio di miscelazione cilindrico con un limite MRF che circonda la girante.

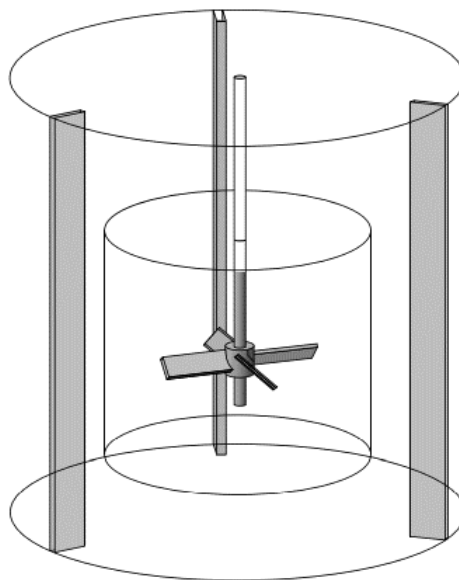


Fig. 4.4: Serbatoio di miscelazione con approccio MRF [8]

Le equazioni di bilancio della quantità di moto, all'interno del frame rotante, vengono risolte nel riquadro che circonda la girante; quelle all'esterno, invece, vengono risolte nel frame stazionario. Man mano che la soluzione progredisce, si ha un flusso di informazioni all'interfaccia del riquadro MRF. Durante i calcoli la girante è statica, cioè non si muove. Viceversa, la soluzione del campo di flusso nel frame rotante che circonda la girante impartisce la rotazione della stessa nella regione stazionaria.[8]

4.6.3 Modello "Sliding Mesh"

Questo modello viene considerato transitorio, in quanto la griglia che circonda i componenti rotanti si muove fisicamente con il progredire della soluzione. La velocità relativa tra la velocità della griglia mobile e quella della girante è zero. Questo vale anche per la velocità del serbatoio, dei deflettori e degli altri elementi interni alla mesh. Questo modello è il più realistico e quindi genera una soluzione più accurata nel tempo in quanto la griglia che circonda la girante si muove in maniera discreta e non continua. Dopo ogni movimento, si risolvono iterativamente le equazioni di conservazione fino a raggiungere la convergenza. Successivamente si ha un nuovo movimento della griglia e si ripete la procedura. Si ha un flusso di informazioni, durante i calcoli, all'interfaccia tra le regioni rotanti e quelle stazionarie. Durante la rotazione, però, le celle non sempre sono allineate esattamente. Questo flusso aggiuntivo di informazioni rende, usualmente, gli approcci di questo tipo più computazionalmente costosi rispetto all'uso di un metodo MRF.[8]

Capitolo 5

Strumenti computazionali

In questa sezione verrà esposta una breve descrizione del principio di funzionamento e dell'architettura dello strumento computazionale utilizzato. I risultati ottenuti saranno analizzati nei capitoli successivi.

5.1 OpenFOAM

Per lo studio simulato dei reattori agitati è stato utilizzato il programma OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*). Esso sfrutta delle librerie scritte in linguaggio di programmazione C++. OpenFOAM viene fornito con 250 applicazioni che rientrano in due categorie:

- *solvers* in grado di risolvere le equazioni differenziali alle derivate parziali alla base dei problemi di meccanica dei fluidi o del continuo;
- *utilities*, utili per la manipolazione dei dati e l'esecuzione dei compiti.

La struttura generale di OpenFOAM viene riportata in Fig.5.1.

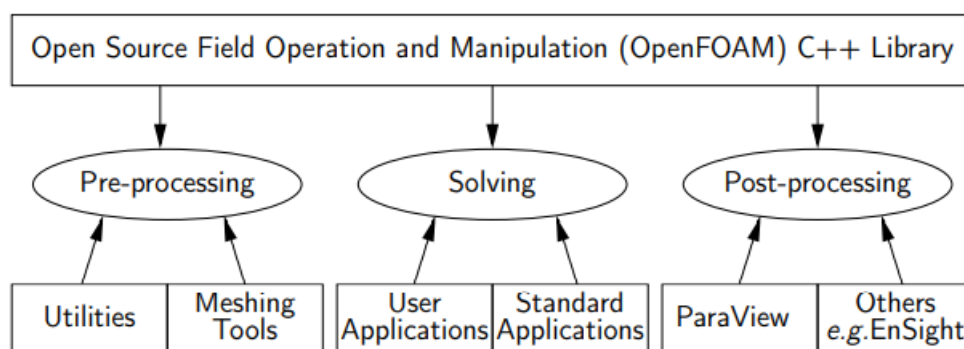


Fig. 5.1: Struttura generale del software OpenFOAM

Il primo ambiente di simulazione è quello del *pre-processing* in cui bisogna impostare tutte le proprietà chimico-fisiche del sistema in esame e generare la *mesh*. Successivamente viene lanciata la simulazione e si procede con il *processing* per ottenere i risultati. Infine, poiché OpenFOAM non è munito di interfaccia grafica, risulta necessario parlare di un ambiente di *post-processing*, che nel caso in esame è Paraview. In questo modo è possibile visualizzare, ad esempio, i campi di moto e di pressione.[19]

5.2 Struttura dei file in OpenFOAM

Ad ogni simulazione viene dato un nome, il quale diventa il nome di una *directory* in cui sono memorizzati tutti i file e le sotto-directory. In Fig.5.2 si osserva la struttura di un *case directory*.

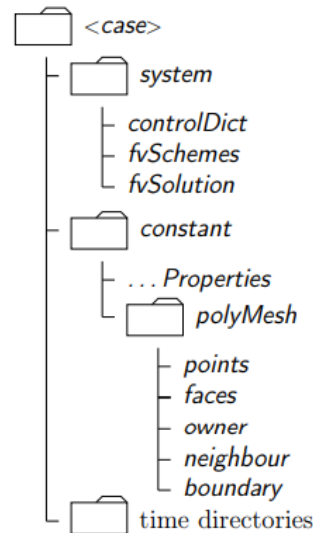


Fig. 5.2: Struttura di un case directory

La directory **constant** contiene la descrizione della mesh all'interno di una sottocartella, denominata *polyMesh*. All'interno di file come *transportProperties*, *turbulenceProperties* o *MRFProperties* vengono, inoltre, definite le proprietà fisiche del sistema studiato, quali viscosità o diffusività, il regime di flusso e la modellazione della girante.

La directory **system** contiene l'impostazione dei parametri necessari per ottenere la soluzione. Essa contiene, almeno, tre file principali:

- *controlDict* contiene i parametri di controllo, come il tempo di inizio e fine simulazione, il passo temporale, il solver utilizzato ed il numero di Courant massimo consentito. Inoltre, è possibile anche inserire eventuali *functions* per il calcolo di parametri di output.
- *fvSchemes* contiene gli schemi di discretizzazione spaziale e temporale utilizzati per le varie grandezze fisiche che compaiono nelle equazioni di bilancio.
- *fvSolution* contiene i solutori dei sistemi di equazioni lineari discretizzate, le tolleranze ed i fattori di sotto-rilassamento.

Nelle simulazioni impostate sono stati necessari altri file, quali:

- *blockMeshDict* contiene i parametri necessari per creare mesh parametriche con gradazioni e bordi curvi. Per generare mesh tridimensionali contenenti esaedri divisi da superfici geometriche triangolari o tri-superfici, in formato STL, si utilizza un'altra utility, il cui funzionamento è regolato dalle informazioni contenute nel file *snappyHexMeshDict*.
- *decomposeParDict* contiene i parametri necessari per la suddivisione della griglia di calcolo in partizioni, o sottodomini. Questo risulta utile per svolgere i calcoli in parallelo, cioè sfruttando due o più processori che lavorano simultaneamente.

- *createPatchDict* contiene i parametri necessari per la creazione di patch a partire da facce confinanti selezionate.
- *setFieldsDict* serve per impostare dei valori specifici su un insieme selezionato di celle/facce nel dominio. Ad esempio, risulta utile per definire una condizione iniziale non uniforme per la variabile concentrazione.
- *surfaceFeaturesDict* identifica le caratteristiche in una geometria di superficie e le scrive su file, in base ai parametri di controllo specificati.

Le **time directories** invece, presenti in numero pari al numero di istanti o iterazioni salvate su disco, contengono i file individuali con i valori iniziali e le condizioni al contorno per campi particolari, quali velocità, concentrazione e pressione. Infatti, tutti i campi in OpenFOAM devono essere inizializzati. Poiché, solitamente, le simulazioni vengono iniziate al tempo $t=0$, le condizioni iniziali sono memorizzate in una directory denominata con **0**. [20]

5.3 Generazione della mesh

La griglia di calcolo, chiamata anche mesh, viene utilizzata per suddividere il dominio computazionale in un insieme di sottodomini discreti o celle di calcolo. Essa può contenere elementi di forme e dimensioni differenti, come tetraedri, prismi o esaedri, come si osserva in Fig.5.3.

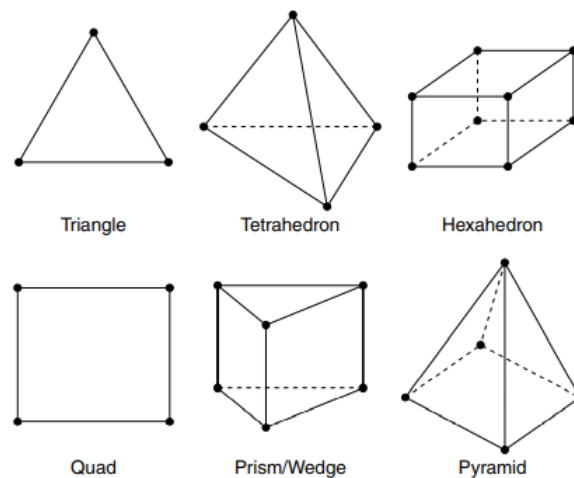


Fig. 5.3: Elementi tipici di una mesh 2D o 3D

Le griglie possono essere strutturate o non strutturate. Quelle strutturate sono sempre esaedriche e sono tali che ogni elemento ha un'unica direzione nello spazio I,J,K. Questi ultimi sono degli indici utilizzati per numerare gli elementi in ciascuna delle tre direzioni di calcolo e non sono necessariamente allineate con le direzioni delle coordinate x,y e z. In Fig.5.4 viene mostrato un esempio di griglia tridimensionale strutturata. Le griglie non strutturate, invece, non seguono questa regola di indirizzamento. Durante ogni esecuzione, OpenFOAM controlla che la mesh soddisfi un insieme abbastanza rigoroso di vincoli di validità per garantire l'ottenimento di una soluzione accurata. [8]

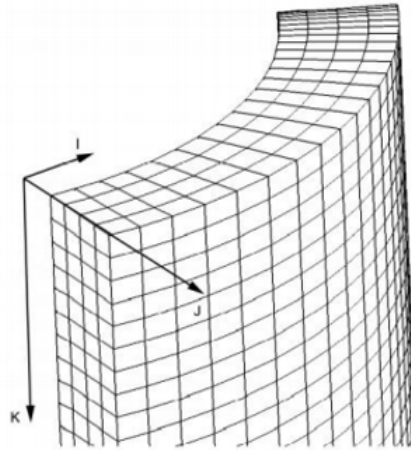


Fig. 5.4: Griglia tridimensionale strutturata

Una mesh è caratterizzata dalle seguenti grandezze:

- **Punti:** ogni punto viene indicato da un vettore e da un'etichetta, la quale rappresenta la sua posizione nell'elenco a partire da zero. Come vincolo, due punti diversi non possono appartenere ad una stessa posizione e tutti i punti devono appartenere ad almeno una faccia.
- **Facce:** una faccia è una lista ordinata di punti. L'ordinamento delle etichette dei punti in una faccia deve essere tale per cui due punti vicini siano collegati da un bordo. La direzione del vettore normale alla faccia è definita dalla regola della mano destra. Le facce *interne* collegano al massimo due celle; le facce *esterne*, invece, coincidono con il confine del dominio.
- **Celle:** una cella contiene una lista di facce in ordine arbitrario. Le celle devono essere *contigue*, cioè devono coprire completamente il dominio computazionale e non devono mai sovrapporsi; *convesse* e *chiuse*.
- **Confine:** un confine è una lista di patch, ad ognuna delle quali è associata una condizione al contorno.[21]

5.3.1 Principio di funzionamento dell'utility blockMesh

L'utility *blockMesh* è in grado di creare mesh parametriche cartesiane o eventualmente con bordi curvi a partire dal file *blockMeshDict* situato nella directory system. Il comando "blockMesh" è in grado di scrivere i dati della mesh in punti, facce e celle nella stessa directory. Il principio alla base è quello di decomporre la geometria del dominio in un insieme di uno o più blocchi tridimensionali esaedrici. I bordi dei blocchi possono essere linee rette, archi o spline. La mesh viene specificata come un certo numero di celle in ogni direzione del blocco. Ognuno di essi è definito da otto vertici, come si osserva in Fig.5.5. Ogni blocco è caratterizzato da un sistema di coordinate locali x_1 , x_2 ed x_3 che deve essere destro. Ogni faccia del blocco è definita da una lista di quattro vertici. L'ordine in cui i vertici sono dati deve essere tale che, guardando dall'interno del blocco ed iniziando da un vertice qualsiasi, la faccia deve essere percorsa in senso orario per definire gli altri vertici.[21]

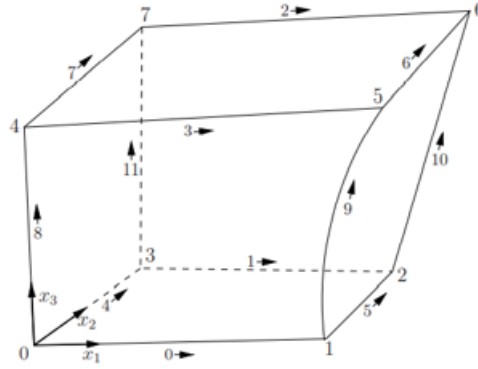
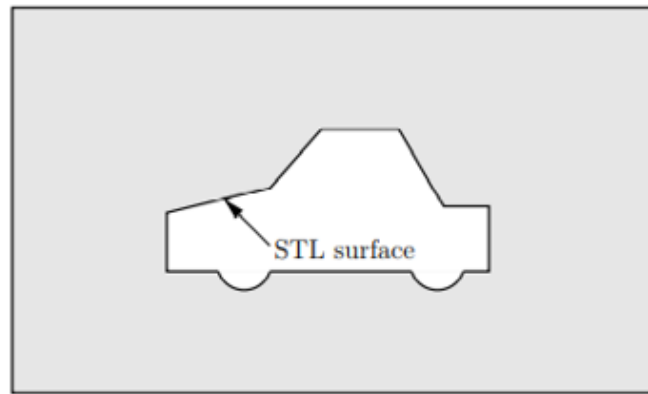


Fig. 5.5: Definizione di un blocco

5.3.2 Principio di funzionamento dell'utility snappyHexMesh

L'utility `snappyHexMesh` genera mesh tridimensionali contenenti esaedri (hex) ed esaedri divisi (split-hex) da superfici geometriche triangolari o tri-superfici, in formato STL (stereolithography). La mesh approssimativamente si conforma alla superficie raffinando iterativamente una mesh di partenza, detta mesh di background, creata con `blockMesh`.

Fig. 5.6: Schema di una mesh generata con il comando `snappyHexMesh`

L'obiettivo è raffinare la mesh attorno alla superficie STL, come mostrato in Fig.5.6. Nel caso simulato, ad esempio, si utilizza per raffinare la mesh nella regione intorno alla girante. Prima di lanciare il comando `snappyHexMesh` risulta necessario avere la mesh di background, generata con il comando `blockMesh` (Fig.5.7), ed una sottocartella denominata *triSurface* che contiene i file con estensione STL.

La mesh di tipo background deve essere soddisfare dei vincoli, quali essere composta esclusivamente da esagoni ed avere almeno un'intersezione del bordo di una cella con la tri-superficie. Inoltre, il rapporto d'aspetto delle celle, ossia il rapporto tra i bordi più lunghi e quelli più corti, deve essere approssimativamente 1 per evitare di avere una convergenza della procedura di *snapping* troppo lenta. La procedura di *snapping* vera e propria inizia con la divisione delle celle, effettuata secondo le specifiche fornite nel sottodizionario *castellatedMeshControls*, come mostrato in Fig.5.8.

Il processo di divisione inizia con la selezione delle celle che hanno le caratteristiche di bordo specificate in precedenza all'interno del dominio. In questa fase va specificato il *livello* di raffinamento all'interno di una *features* che contiene un file di estensione ".eMesh". Esso viene estratto dal file tri-surface usando l'utilità *surfaceFeatures*.

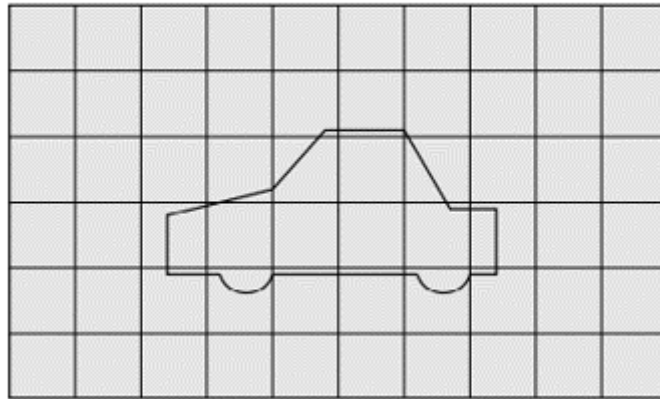


Fig. 5.7: Generazione della mesh di background tramite il comando `blockMesh`

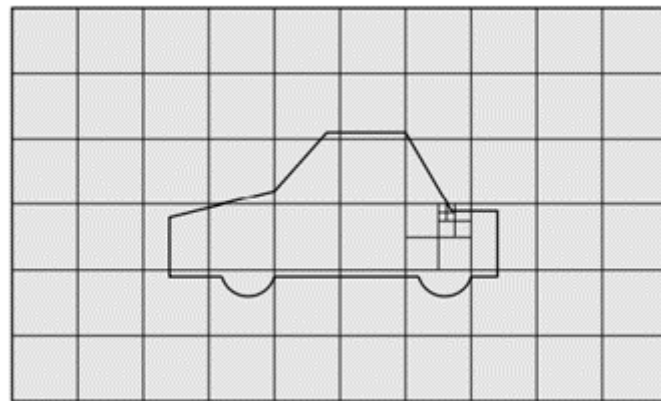


Fig. 5.8: Divisione delle celle in base alle caratteristiche del bordo nel processo di meshing

Dopo il raffinamento delle caratteristiche, le celle vengono selezionate per la suddivisione in regioni delle superfici specificate, come si illustrato nella Fig.5.9.

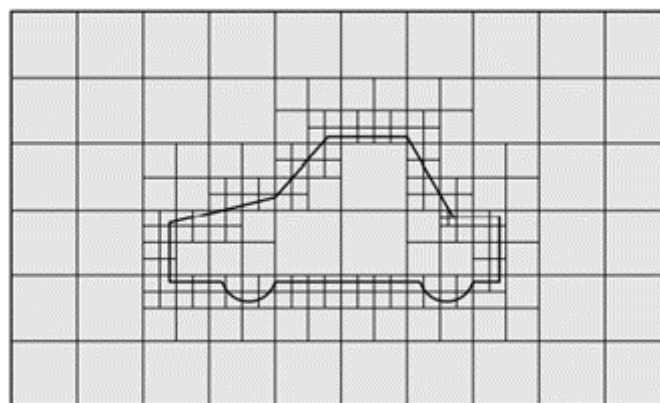


Fig. 5.9: Suddivisione delle celle per superficie nel processo di meshing

In questa fase vengono specificati un livello minimo e massimo di raffinamento. Il primo è applicato generalmente su tutta la superficie; il secondo solo alle celle le cui intersezioni formano un angolo superiore a quello specificato nella voce `resolveFeatureAngle`. Il

processo di perfezionamento può essere applicato ad una o più regioni specifiche della superficie STL. Una volta che il processo di suddivisione è completato, si procede con la rimozione delle celle. Risulta necessario che una o più regioni siano racchiuse interamente da una superficie di delimitazione all'interno del dominio. Le celle vengono trattenute se, approssimativamente, il 50 % o più del loro volume si trova all'interno della regione. Le celle rimanenti vengono rimosse di conseguenza, come illustrato nella Fig.5.10.

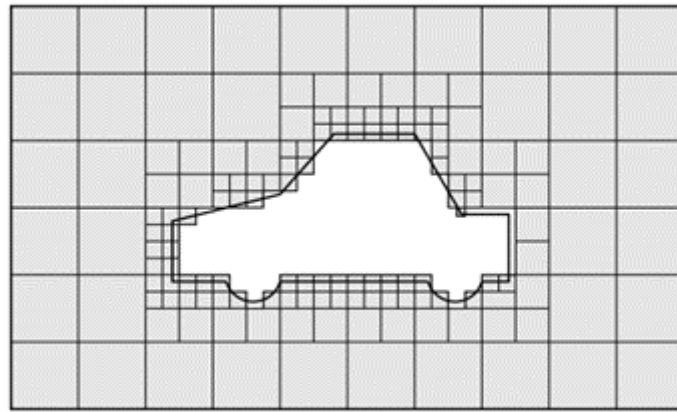


Fig. 5.10: Rimozione delle celle nel processo di meshing

Quelle celle che giacciono all'interno di una o più regioni di volume specificate possono essere ulteriormente suddivise, come illustrato in Fig.5.11, da una regione rettangolare mostrata da un'ombreggiatura scura. Il raffinamento può avvenire in una regione interna, esterna o ad una data distanza dalla superficie considerata.

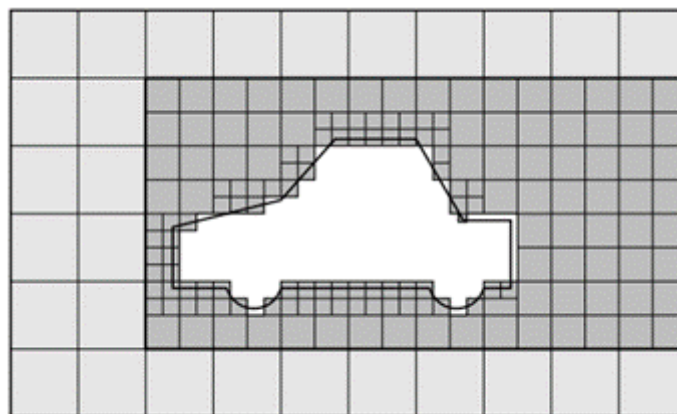


Fig. 5.11: Raffinamento di celle specifiche processo di meshing

Segue il processo di *snapping surface* mostrato in Fig.5.12. Esso genera lo spostamento dei punti dei vertici delle celle sulla geometria della superficie per rimuovere le estremità frastagliate. La mesh prodotta dal processo di snapping potrebbe contenere delle celle irregolari sui contorni della superficie STL. Per questo motivo si utilizza una fase opzionale che introduce ulteriori strati di celle esaedriche allineate alla superficie di confine, come illustrato dalle celle scure ombreggiate in Fig.5.13. [21]

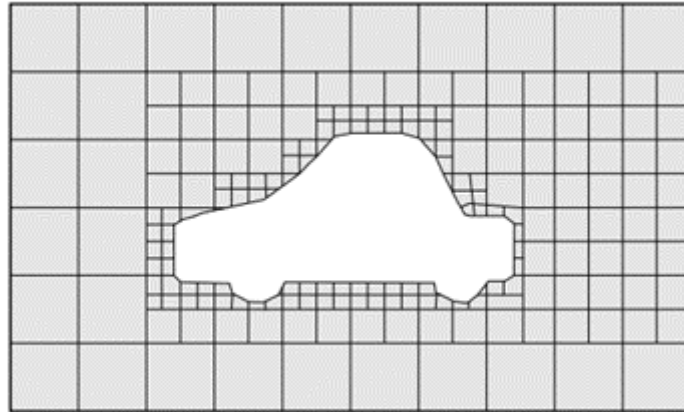


Fig. 5.12: Processo di surface snapping

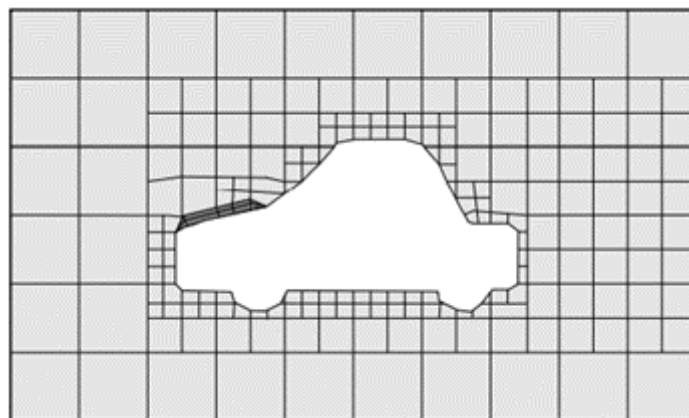


Fig. 5.13: Aggiunta di strati aggiuntivi nel processo di meshing

Parte II

Metodologia e risultati

Capitolo 6

Sistemi geometrici e dettagli computazionali

In questo capitolo si riportano i dettagli computazionali e le condizioni operative relative alla simulazione di sola acqua e e alla simulazione di un fluido complesso, ossia la miscela composta da acqua e Pluronic. Sono stati investigati diversi sistemi geometrici per i reattori agitati e la girante considerata è sempre la turbina Rushton.

6.1 Analisi di reattori agitati con fondo pseudo-ellittico in regime laminare e turbolento

In prima analisi è stato considerato un reattore agitato con fondo semi-ellittico sfruttando come fluido operativo l'acqua, le cui proprietà sono indicate in Tab. 6.1.

$\rho \left[\frac{kg}{m^3}\right]$	1000
$\mu [Pa \cdot s]$	$1 \cdot 10^{-6}$

Tabella 6.1: Proprietà fisiche dell'acqua

Il reattore agitato in esame è dotato di una turbina Rushton a sei pale, non presenta deflettori ed è dotato di un fondo pseudo-ellittico, come mostrato in Fig.6.1.

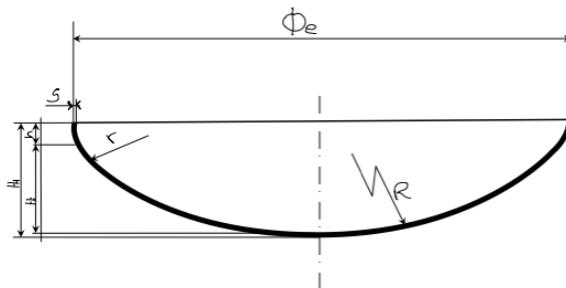


Fig. 6.1: Fondo pseudo-ellittico del reattore agitato esaminato con relativa nomenclatura

Si indica con T il diametro del reattore, con D il diametro dell'agitatore e con C la *clearance*. Inoltre, si indica con Φ_e il diametro esterno del fondo semi-ellittico, con H_t l'altezza totale del fondo e con H_i l'altezza della parte semi-ellittica. Il diametro T è pari a 230 mm ed il rapporto $\frac{D}{T} = \frac{1}{3}$. L'agitatore è posizionato a metà dell'altezza della parte cilindrica (H), pari a 202.2 mm. Di conseguenza, il rapporto $\frac{C}{T} = \frac{1}{2}$. Le misure per il fondo semi-ellittico sono state calcolate secondo le formule riportate in [6]. Nel caso in esame lo spessore S è pari a 5 mm. Di conseguenza, il diametro esterno sarà pari a $\Phi_e = 240$ mm. Inoltre, si avrà $H_i = \frac{T}{4} = 57.5$ mm ed $H_t = H_i + h + S = 62.5$ mm, approssimando $h=0$. I due raggi, R ed r , sono pari rispettivamente a 208 mm e 39.7 mm.

In generale, è importante valutare l'indipendenza delle soluzioni dalla griglia numerica, al fine di minimizzare gli errori dovuti alla discretizzazione delle equazioni di governo. Questo si ottiene simulando il sistema nelle stesse condizioni operative con un numero crescente di celle. Da un certo numero in poi, le soluzioni non cambieranno significativamente, raggiungendo un plateau. Così, si determina il numero ottimale di celle che costituiscono il dominio di calcolo. Nel seguente lavoro sono state analizzate due mesh con un numero differente di celle, rispettivamente pari a $4.41856 \cdot 10^5$ e $6.3 \cdot 10^5$. I risultati relativi a ciascuna delle due mesh verranno presentati nel Cap. 7. Per semplicità la prima mesh, più grossolana, verrà indicata con A; la seconda mesh, più raffinata, con B. Per validare i dati ottenuti con le simulazioni numeriche sono stati sfruttati i dati sperimentali disponibili in letteratura per la turbina Rushton a sei pale, estratti da [12] e riportati in Tab. 6.2. Questi sono stati ricavati per un reattore agitato, con fondo piatto, di diametro pari a 27 cm, pari all'altezza H , dotato di una girante montata centralmente con un rapporto $\frac{C}{T} = \frac{1}{2}$. I dati ottenuti sono stati anche confrontati con le simulazioni CFD effettuate da Jaszczur et al. riportati in Tab. 6.3. ed estrapolati dalla Fig.6.2.

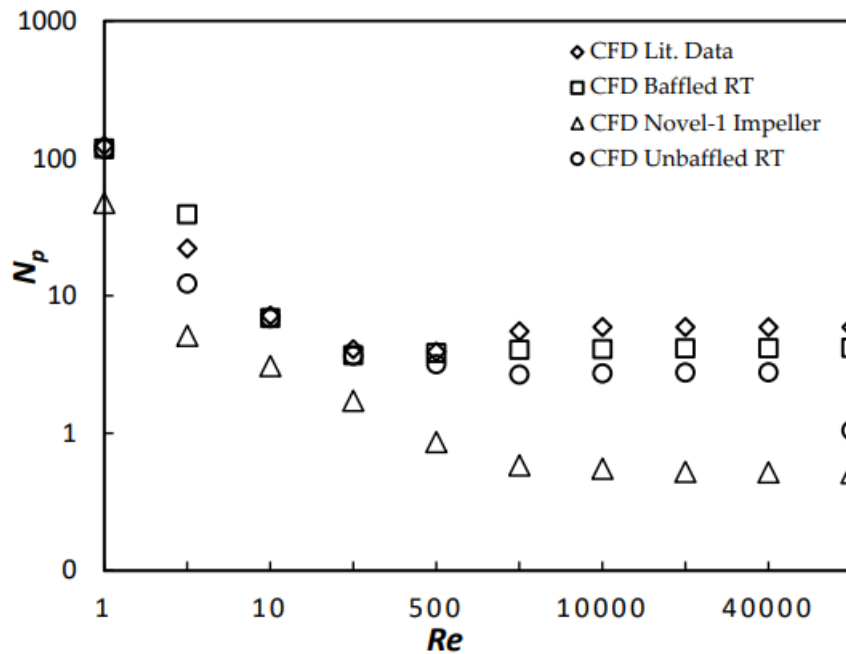


Fig. 6.2: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratta da [12]

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1	120.330
4.624	22.030
9.870	7.120
52.790	4.021
199.030	3.865
750.470	5.538
2829.1	5.921
10664	5.931
40204	5.942
151760	5.953

Tabella 6.2: Dati sperimentali disponibili in letteratura per un reattore agitato dotato di turbina Rushton a sei pale

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1	114.31
4.624	12.409
9.870	7.12
52.790	3.576
199.030	3.078
750.470	2.678
2829.1	2.741
10664	2.746
40204	2.781
151760	1.065

Tabella 6.3: Dati ottenuti dalle simulazioni CFD di Jaszczur et al. estratti da [12]

Per poter lanciare la simulazione risulta necessario, innanzitutto, definire le condizioni al contorno nell'apposita cartella *0*. All'interno sono stati creati due file relativi rispettivamente alla pressione (denominato con *p*) ed alla velocità (denominato con *U*) per il regime laminare. Nel caso, invece, di simulazioni in regime turbolento è stato necessario aggiungere i file relativi all'energia cinetica turbolenta (denominato con *k*), alla viscosità turbolenta (denominato con *nut*) e al tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta (denominato con *epsilon*). All'interno di ogni file sulla prima riga vengono definite le corrette unità di misura in accordo con il Sistema Internazionale (SI). In OpenFOAM la pressione viene definita come *pressione ridotta*, ovvero la pressione diviso la densità del fluido. Sulla seconda riga si definiscono le condizioni iniziali tramite la "entry" *internalField*. Attraverso la dicitura *uniform* viene assegnato il valore specificato a tutti gli elementi all'interno della regione considerata. Ovviamente, nel caso di una grandezza scalare sarà sufficiente definire un unico valore; nel caso di una grandezza vettoriale bisognerà specificare tre valori, uno per ogni direzione. Successivamente devono essere definite le condizioni al contorno. Per la pressione è stata utilizzata la condizione di *zeroGradient*, ossia di gradiente nullo su tutte le regioni. Per la velocità è stata imposta la condizione di *noSlip* per tutte le superfici solide ferme. L'unica velocità diversa da zero è quella a contatto con l'albero rotante. In questo caso, essendo un solido di rivoluzione che ruota, si definisce la condizione di *rotatingWallVelocity*. Si definisce con *origin* l'origine di rotazione in coordinate cartesiane; con *axis* l'asse di rotazione; e con *omega* la velocità angolare di rotazione dell'agitatore. Questo valore dovrà essere cambiato durante le varie simulazioni per analizzare una vasta gamma di numeri di Reynolds e ricavare i corrispondenti numeri di potenza. Per le grandezze turbolente, invece, sono stati specificati i modelli a basso numero di Reynolds per poter trattare le zone vicino alla parete. Si procede con la definizione delle proprietà di trasporto del fluido nel file *transportProperties*. Qui è stato impostato come modello di trasporto *newtonian*, indice del fatto che l'acqua è un fluido Newtoniano, ed è stato inserito il valore della viscosità cinematica dell'acqua, pari a $\nu = \frac{\mu}{\rho} = 0.0001 \frac{m^2}{s}$. Inoltre, è necessario definire il regime di lavoro nel file denominato *turbulenceProperties*. Nel caso di regime laminare è stato sufficiente impostare *laminar* come modello. Nel caso di regime turbolento è necessario, invece, individuare un modello di chiusura della turbolenza che, nel caso in esame, è $k - \varepsilon$.

Come solver è stato utilizzato il PIMPLE, denominato *pimpleFoam* nel file *fvSolution*. Per la velocità è stato impostato l'algoritmo di Gauss-Seidel e per la pressione GAMG. Nel file *fvSchemes* si osservano, invece, gli schemi di discretizzazione spaziale e temporale. La dicitura *ddtSchemes* si riferisce agli schemi temporali che servono per discretizzare i termini che contengono la derivata prima nel tempo. In questo caso è stato impostato il metodo implicito del secondo ordine, denominato *backward*. Esso indica un metodo transitorio, in accordo con il solver utilizzato. La dicitura *gradSchemes* serve per discretizzare i termini che contengono il gradiente. In questo caso è stato lasciato il metodo di default del secondo ordine, denominato *Gauss linear*. La dicitura *divSchemes* serve per discretizzare i termini che includono la divergenza. Per la velocità è stato utilizzato il metodo QUICK, per il termine diffusivo il metodo *Gauss linear* e per le grandezze turbolente il metodo *bounded Gauss linearUpwind*. Per ricavare il numero di potenza è necessario conoscere la potenza richiesta, *P*, per ruotare l'agitatore ad una data velocità di rotazione *N*. Essa viene calcolata come:

$$P = 2\pi N\tau \quad (6.1)$$

Dove τ è il *momento torcente* in $[N \cdot m]$ calcolato tramite apposite *functions*, riportate in Fig. 6.3, inserite nella *controlDict*.


```

functions
{
    forces_1
    {
        type          forces;
        libs           ("libforces.so");
        patches        (wall_side wall_bottom wall_top);
        rho            rhoInf;
        rhoInf          1000;
        CofR            (0 0 0);
        log            true;
    }
    forces_2
    {
        type          forces;
        libs           ("libforces.so");
        patches        (blades_mrf disc_mrf shaft_mrf shaft_rotating);
        rho            rhoInf;
        rhoInf          1000;
        CofR            (0 0 0);
        log            true;
    }
};

```

Fig. 6.3: Struttura della function "forces" riportata nella controlDict

La funzione *forces* genera una sottocartella all'interno della directory di riferimento denominata *postProcessing* all'interno della quale si avranno i file contenenti i valori delle forze e dei momenti torcenti per ogni time-step. In particolare, essi sono stati calcolati alle pareti, tramite *forces1* e all'agitatore rotante, tramite *forces2*. Infatti, come si osserva in Fig. 6.3, sono state richiamate le patches di riferimento. Per le forze e per i momenti vengono calcolati tre contributi: quello di pressione, quello viscoso e quello poroso.

Ovviamente, nel caso in esame, il contributo poroso sarà sempre nullo. Si denota con τ_P il contributo di pressione associato al momento torcente e con τ_v quello viscoso. Avendo a che fare con dei vettori, ognuno di essi sarà caratterizzato da tre componenti. Il momento torcente totale τ viene calcolato come:

$$\tau = \sqrt{\tau_{Px}^2 + \tau_{Py}^2 + \tau_{Pz}^2} + \sqrt{\tau_{vx}^2 + \tau_{vy}^2 + \tau_{vz}^2} \quad (6.2)$$

Il sistema in esame è stato confrontato anche con il reattore analizzato da Liangchao et al. in [15], il cui diametro è pari a 300 mm ed ha $\frac{D}{T} = \frac{1}{3}$ e $\frac{C}{T} = \frac{1}{3}$. Esso è caratterizzato anche dalla presenza di quattro baffle, a differenza dal caso studiato. Poiché le simulazioni sono state effettuate esclusivamente in regime laminare si è deciso di confrontare ugualmente i risultati. Questo perché Scargiali et al. hanno dimostrato che il numero di potenza in un reattore in presenza di deflettori è identico a quello senza, a parità di numero di Reynolds, in regime laminare. [27]. I risultati, che verranno riportati nella Sez. 7, sono stati confrontati con i valori riportati in Tab. 6.4 estrapolati dalla Fig. 6.4. per un rapporto $\frac{D}{T} = \frac{1}{3}$.

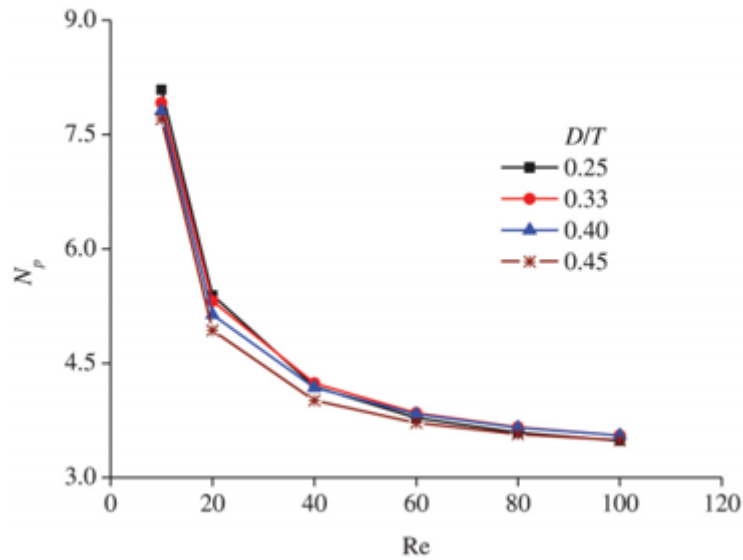


Fig. 6.4: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds per diversi diametri dell'agitatore estratta da [27].

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
9.8291	7.9194
19.997	5.3196
40.035	4.2442
60.126	3.8579
80.6	3.7169
99.175	3.5603

Tabella 6.4: Dati del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da Fig. 6.4.

6.2 Analisi di reattori agitati con fondo piatto in regime laminare e turbolento

Nonostante il forte interesse industriale, i reattori senza deflettori sono stati studiati poco. Infatti, sono disponibili poche informazioni in letteratura riguardo alle loro caratteristiche ed i criteri di scale-up da condizioni sperimentali di laboratorio a scale industriali.. Nel seguente lavoro di tesi sono state condotte delle simulazioni sfruttando il sistema geometrico investigato da Scargiali et al. e Rushton et al. in [27] e mostrato in Fig.6.5.

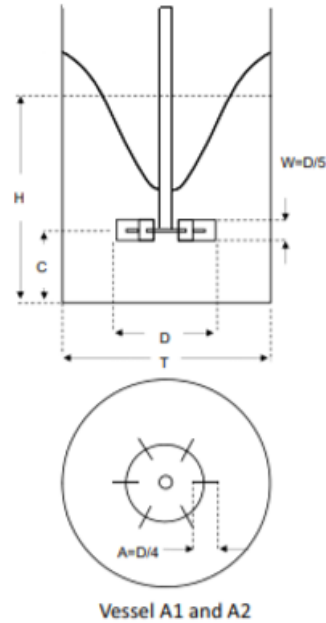


Fig. 6.5: Schema e dimensioni del recipiente agitato investigato estratto da [27].

Il sistema è agitato da una turbina Rushton a sei pale con un diametro della girante pari a $D = \frac{1}{3}T$, dove $T=190$ mm. Inoltre, $H=T$. I rapporti tra l'altezza/larghezza delle pale ed il diametro della girante valgono rispettivamente $\frac{W}{D} = \frac{1}{5}$ e $\frac{A}{D} = \frac{1}{5}$. Come si osserva in Fig.6.5 il serbatoio è caratterizzato da un fondo piatto e non pseudo-ellittico come nel caso precedente. Le velocità di rotazione sono state variate da 200 a 1200 rpm al fine di esplorare diversi regimi fluidodinamici. La mesh utilizzata per effettuare le simulazioni, che verrà indicata con C, contiene $6.98862 \cdot 10^5$ celle.

I dati di riferimento sono stati ottenuti valutando il consumo di potenza sperimentalmente misurando la coppia trasmessa dalla girante al serbatoio. In particolare, il recipiente è stato posto su un piatto di granito e la rotazione veniva ostacolata da un filo di Nylon flessibile. Quest'ultimo era collegato ad una puleggia, posta su una bilancia elettronica, e strettamente attaccato alla parete esterna del recipiente. Misurando la forza necessaria da applicare sul filo flessibile per inibire la rotazione del recipiente e moltiplicandola per il raggio esterno del recipiente è stata ricavata la coppia. Di conseguenza, è stata valutata la potenza P ed il numero di potenza correlato con le equazioni descritte in precedenza. L'unica correlazione per la previsione del numero di potenza in reattori agitati senza deflettori è quella proposta recentemente da Scargiali et al. [26]

$$P_0 = 19.5 Re^{-0.3} \quad (6.3)$$

L'equazione è valida indipendentemente dallo scale-up del recipiente e dipende dalle proprietà fisiche del liquido. Per quanto riguarda i valori sperimentali di P_0 ottenuti a $Re < 10$, dove prevalgono le forze viscosi, si ha la seguente relazione:

$$P_0 = \frac{90}{Re} \quad (6.4)$$

I dati sono stati confrontati anche con quelli ottenuti da Rushton et al., i quali hanno introdotto anche il numero di Froude definendo un numero adimensionale:

$$\Phi = \frac{P_0}{Fr^{[(a-\log Re)/b]}} \quad (6.5)$$

I due parametri a e b dipendono dalla geometria del sistema e, nel caso esaminato, valgono $a=1$ e $b=40$. In Tab. 6.5 e 6.6 si riportano i dati sperimentali ottenuti dagli autori.

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1.3451	52.064
2.0283	33.112
2.729	24.556
3.4209	19.415
4.8702	13.868
6.36989	9.938
11.521	6.383
22.029	4.829
37.089	4.339
83.874	3.868
166.98	3.574

Tabella 6.5: Dati sperimentali della correlazione di Rushton et al. del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da [25].

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1.3451	66.341
2.0283	41.573
2.729	30.56
3.4209	24.609
4.8702	17.087
6.36989	13.297
11.521	8.0527
22.029	5.4654
37.089	4.3019
83.874	3.2723
166.98	2.9871

Tabella 6.6: Dati sperimentali della correlazione di Scargiali et al. del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds estratti da [26].

In questo caso il file *blockMeshDict* è stato scritto soltanto per metà della geometria del reattore definendo delle condizioni di accoppiamento, come mostrato in Fig. 6.6. La tipologia definita come *cyclicAMI* è una condizione di accoppiamento tra una coppia di patch

che condividono gli stessi confini esterni, ma che possono differire internamente. Queste condizioni vengono definite nella cartella delle condizioni iniziali, cioè in θ , per tutte le variabili in gioco.

```
cyclic_stat_1
{
  type          cyclicAMI;
}
cyclic_stat_2
{
  type          cyclicAMI;
}
cyclic_rot_1
{
  type          cyclicAMI;
}
cyclic_rot_2
{
  type          cyclicAMI;
}
```

Fig. 6.6: Definizione delle patch cicliche

Per creare l'intera geometria del reattore è stato creato un nuovo file denominato *mirror-MeshDict* nella cartella *system* e riportato in Fig. 6.7.

```
pointAndNormalDict
{
  basePoint      (0 0 0);
  normalVector   (0 1 0);
}

planeTolerance   1e-3;
```

Fig. 6.7: Definizione del file mirrorMeshDict

Esso serve per specchiare la mesh attorno ad un dato piano definito dal vettore normale. Come solver per le equazioni di governo è stato utilizzato l'algoritmo SIMPLE, definito nel file *controlDict* dalla dicitura *simpleFoam*. Come schema di discretizzazione temporale è stato impostato *steadyState* e per la discretizzazione spaziale sono stati utilizzati gli schemi Upwind limitati. Le simulazioni sono state condotte in regime laminare ed utilizzando il modello Newtoniano poiché il fluido considerato è acqua. Per calcolare il momento torcente è stata sfruttata la funzione *forces* definita in Fig. 6.3. La procedura per il calcolo del numero di potenza rimane invariata.

6.3 Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic

Un secondo set di simulazioni ha riguardato il calcolo del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic in due sistemi differenti bidimensionali: una cavità ed un reattore agitato. L'obiettivo è calcolare il tempo necessario per raggiungere una condizione di omogeneità all'interno del sistema. Si tratta di due test-case ad utilità puramente accademica.

6.3.1 Analisi della cavità

La cavità è un sistema bidimensionale che può essere modellizzato come un quadrato, i cui lati sono proprio le pareti. In particolare, la parete superiore si muove lungo la direzione x con una velocità costante che verrà indicata con U_x , mentre le altre pareti sono stazionarie. Sono stati analizzati tre differenti valori per la velocità, rispettivamente pari a $0.01 \frac{m}{s}$, $0.1 \frac{m}{s}$ e $0.9 \frac{m}{s}$, per incrementare il numero di Reynolds e, quindi, il grado di turbolenza nel sistema studiato. All'istante iniziale di tempo la cavità è formata da una certa percentuale di acqua ed una di Pluronic. Questa verrà cambiata progressivamente ed impostata pari a 0.25, 0.35, 0.45, 0.55, 0.65 e 0.75. La velocità della parete viene specificata nella cartella 0 nell'unica superficie in movimento, cioè la *movingWall*. In tutte le altre regioni, ossia le pareti fisse, è stata impostata la condizione al contorno di no-slip. Per la pressione è stata utilizzata, come in precedenza, la condizione al contorno di gradiente nullo. Per le grandezze turbolente sono state applicati i modelli turbolenti a basso numero di Reynolds per trattare la regione adiacente alla parete. Per impostare la concentrazione iniziale di Pluronic è stato utilizzato il file *setFieldsDict* in cui è necessario specificare il valore di concentrazione e la regione in cui deve essere inserito il Pluronic. Per le simulazioni in regime turbolento è stato scelto come modello di chiusura il modello *k-kl-omega*, ossia un modello a tre equazioni. Questo è stato selezionato in *turbulenceProperties*. Come metodo di risoluzione delle equazioni di governo è stato impostato il PIMPLE, avendo a che fare con delle simulazioni transitorie. Per la discretizzazione temporale è stato scelto il metodo di Crank-Nicolson; per quella spaziale, invece, i metodi Upwind. Non avendo a che fare con acqua pura è stato necessario scegliere un modello per il calcolo della viscosità. In *transportProperties* è stato selezionato il modello di Bird-Carreau. Per valutare l'efficienza di miscelazione tra le due fasi è stato calcolato il coefficiente di variazione tramite un'opportuna *function* riportata nella *controlDict*.

6.3.2 Analisi del reattore 2D

Il caso della cavità, però, è privo di un vero e proprio significato fisico. Esso è stato effettuato come studio preliminare per poi ottenere dei risultati più concreti utilizzando un reattore. Prima di analizzare un reattore vero e proprio, è stato fatto uno studio su un reattore bidimensionale. In questo caso, ovviamente, la velocità da modificare sarà quella di rotazione dell'agitatore, specificata sia nel file *U* nella cartella 0 e sia in *MRFPProperties* nella cartella *constant*. Come solver di risoluzione è stato scelto il solver *passiveScalarPimpleFoam* per risolvere l'equazione di trasporto della concentrazione, che è una grandezza scalare. Lo schema di discretizzazione temporale scelto è Crank-Nicolson; come schemi di discretizzazione spaziale, invece, sono stati impostati i metodi Upwind. Come nel caso precedente, è stato necessario impostare la concentrazione di Pluronic,

posizionando quest'ultimo nella parte bassa del reattore. Per il calcolo del coefficiente di variazione è stata utilizzata la function riportata in Fig. 6.5.

```

functions
{
    degreeOfSegregation
    {
        // Mandatory entries (unmodifiable)
        type          volFieldValue;
        libs           ("libfieldFunctionObjects.so");

        // Mandatory entries (runtime modifiable)
        fields (C);
        operation      CoV;
        regionType     all;

        writeFields    false;
    }
}

```

Fig. 6.8: Struttura della function "DegreeOfSegregation" riportata nella controlDict

6.4 Analisi dei dati sperimentali dell'Università di Bologna

In ultima analisi è stato simulato il reattore studiato dall'Università di Bologna prima in una condizione con Pluronic puro e poi in un caso di 50% Pluronic e 50% acqua. In entrambi i casi è stata utilizzata un'approssimazione riguardante il valore della densità. Questo, infatti, è stato posto uguale a quello dell'acqua pura, cioè $1000 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. Per quanto riguarda il setting della viscosità la situazione è differente. Nel caso di Pluronic puro viene definito il modello reologico Bird-Carreau nel file *transportProperties*. I coefficienti sono riportati in Tab.6.7.

$\nu_0 \text{ [m}^2\text{/s]}$	$\nu_\infty \text{ [m}^2\text{/s]}$	$k \text{ [s}^{-1}\text{]}$	n
0.00267545	0.00071416	5.48485	-0.0669

Tabella 6.7: Valori numerici dei coefficienti del modello di Bird-Carreau

Nel caso del 50 % di Pluronic le misurazioni del consumo di potenza sono state effettuate ad una temperatura di 25°C . Il fluido, a questa temperatura, non ha un comportamento propriamente Newtoniano, ma verrà effettuata questa approssimazione per semplicità. Di conseguenza, il valore della viscosità inserito in *transportProperties* è stato calcolato come media dei valori sperimentali disponibili per $T=25^\circ\text{C}$ e riportati in Tab. 6.8. Effettuando la media aritmetica dei dati si ricava un valore pari a $0.684458387 \text{ [Pa} \cdot \text{s]}$. Come solver di risoluzione, in entrambi i casi, è stato utilizzato *simpleFoam* e, di conseguenza, come schema di discretizzazione temporale *steadyState*. Il metodo di discretizzazione spaziale scelto per il gradiente è *cellMDLimited leastSquares* e per la divergenza i metodi Upwind. Anche in questo caso l'assorbimento di potenza della girante può essere stimato calcolando la coppia che agisce su di essa. Questo viene fatto dalle funzioni *forces1* e *forces2*

definite in fondo al file controlDict e il loro output è scritto nella cartella postProcessing. Il consumo di potenza durante la miscelazione è calcolato da:

$$P = 2 \cdot N \cdot \tau \quad (6.6)$$

Risulta necessario inserire il pre-fattore 2 per tenere conto del fatto che i risultati sono stati ottenuti simulando soltanto metà della geometria reale. La velocità di rotazione N è espressa in [rad/s]. Per quanto riguarda τ è possibile considerare esclusivamente le componenti lungo la direzione z poiché sono le uniche che danno un contributo non trascurabile. In Tab. 6.9 e 6.10 si riportano i dati sperimentali forniti dall'Università di Bologna nel caso di Pluronic puro e del 50 %.

Viscosità [$Pa \cdot s$]
0.8559
0.81759
0.78443
0.76171
0.74832
0.73343
0.71849
0.71222
0.70929
0.70096
0.6912
0.68755
0.67849
0.67531
0.66817
0.66503
0.65894
0.65376
0.6502
0.6469
0.64406
0.64225
0.63951
0.63766
0.63645
0.63547
0.63468
0.63375
0.63307
0.63198
0.63144

Tabella 6.8: Valori sperimentali della viscosità per una temperatura pari a 25°C

Velocità di rotazione N [rpm]	Numero di potenza P_0
98.516	10.712
148.719	8.935
201.760	6.807
249.070	5.341
295.984	5.345
350.404	5.122
375.761	4.563
399.118	4.239
425.692	4.276
447.593	4.390
496.716	4.187

Tabella 6.9: Dati sperimentali nel caso di Pluronic puro

Velocità di rotazione N [rpm]	Numero di potenza P_0
103.473	4.019
149.312	1.929
201.414	2.162
247.182	2.891
298.438	3.155
349.060	3.294
378.854	2.829
398.179	2.740
424.335	2.851
445.699	3.365
501.912	2.993

Tabella 6.10: Dati sperimentali nel caso di 50 % di Pluronic

Capitolo 7

Presentazione e discussione dei risultati

7.1 Analisi dei reattori agitati con fondo pseudo-ellittico in regime laminare e turbolento

Per ogni velocità di rotazione N sono stati calcolati, grazie all'utilizzo del software OpenFOAM, i rispettivi valori di P e τ , tramite le Eq. 6.1 e 6.2, riportati in Tab 7.1.

Velocità di rotazione N [rad/s]	Momento torcente τ [$N \cdot m$]	Potenza P [W]
0.0013	$1.41 \cdot 10^{-9}$	$1.83 \cdot 10^{-12}$
0.006	$6.66 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-11}$
0.01265	$1.47 \cdot 10^{-8}$	$1.86 \cdot 10^{-10}$
0.067692	$2 \cdot 10^{-7}$	$1.35 \cdot 10^{-8}$
0.255213	$2.78 \cdot 10^{-6}$	$7.09 \cdot 10^{-7}$
0.962315	$4.39 \cdot 10^{-5}$	$4.22 \cdot 10^{-5}$
3.627706	$6.76 \cdot 10^{-4}$	$2.45 \cdot 10^{-3}$
13.67426	$9.49 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$
51.55289	$1.38 \cdot 10^{-1}$	7.11
194.5992	2.01	391

Tabella 7.1: Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh A al variare della velocità di rotazione N

Tramite l'Eq. 1.5 è stato possibile associare il numero di potenza al numero di Reynolds attraverso la velocità di rotazione N . I risultati ottenuti, per mezzo del software OpenFOAM, sono riportati in Tab. 7.2.

La mesh A ha mostrato una corrispondenza tra i dati sperimentali e quelli di letteratura. L'andamento che si osserva in Fig. 7.1 è quello tipico di un reattore agitato senza deflettori. Si conferma ciò che è stato descritto precedentemente a livello teorico. In regime laminare, il numero di potenza diminuisce all'aumentare del numero di Reynolds. In regime turbolento, invece, si osserva un numero di potenza che rimane pressoché costante. La curva blu rappresenta i dati ottenuti attraverso le simulazioni effettuate con OpenFOAM, riportati in Tab. 7.2; la curva arancione, invece, i dati disponibili in letteratura. Come è possibile osservare dalla Fig. 7.1 le due curve sono pressoché simili nella parte iniziale e finale della curva. Si ha una maggiore discrepanza nei valori nella parte centrale. La curva grigia rappresenta i dati ottenuti da Jaszczur et al. tramite le loro simulazioni. La differenza dai dati simulati con il reattore in esame potrebbe essere dovuta alle diffe-

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1	123.135
4.624	27.304
9.870	13.558
52.790	6.440
199.030	6.291
750.470	6.996
2829.1	7.581
10664	7.490
40204	7.663
151760	7.834

Tabella 7.2: Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh A

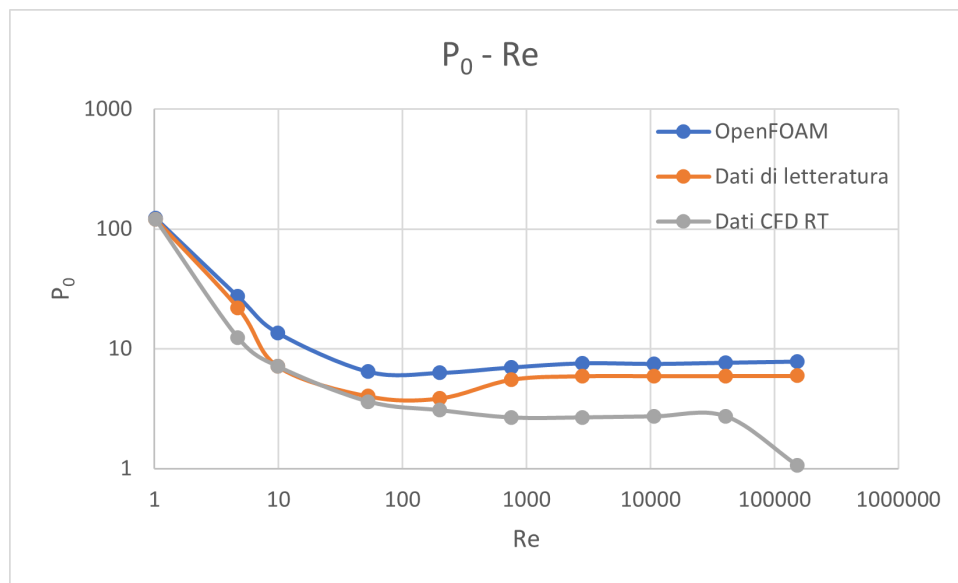


Fig. 7.1: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh A

renze geometriche evidenziate in precedenza. Infatti, ciò è a dimostrazione del fatto che la forma della girante ed il suo posizionamento rispetto al fondo del reattore, o clearance, hanno un impatto notevole sul valore del numero di potenza. Ciò conferma il lavoro di Rushton et al. secondo cui la geometria del recipiente agitato, la forma della turbina, la posizione e il numero di pale svolgono un ruolo essenziale nel consumo di energia e nell'intensità di miscelazione. [25]

Per ottenere dei risultati più accurati sono state effettuate le simulazioni utilizzando una mesh con un numero di celle maggiori, ossia la B. Anche in questo caso è stata seguita la procedura precedentemente descritta ottenendo i valori riportati in Tab. 7.3 e 7.4. L'andamento è riportato in Fig. 7.2. In Fig. 7.2 si osserva una migliore approssimazione dei dati sperimentali trovati in letteratura. Per avere un'idea quantitativa è stato calcolato l'errore relativo sul numero di potenza considerando come valore approssimato quello ottenuto dalle simulazioni di OpenFOAM e, come valore esatto, quello di riferimento dei dati di letteratura. I valori sono riportati in Tab. 7.5. Come è possibile osservare, soltanto tre valori nella zona centrale mostrano un errore elevato, intorno al 30-40 %.

La discrepanza tra i due valori, come illustrato in precedenza, potrebbe essere attribuita

Velocità di rotazione N [rad/s]	Momento torcente τ [$N \cdot m$]	Potenza P [W]
0.0013	$1.28 \cdot 10^{-9}$	$1.66 \cdot 10^{-12}$
0.006	$6.02 \cdot 10^{-9}$	$3.61 \cdot 10^{-11}$
0.01265	$1.36 \cdot 10^{-8}$	$1.72 \cdot 10^{-10}$
0.067692	$1.9 \cdot 10^{-7}$	$1.29 \cdot 10^{-8}$
0.255213	$2.46 \cdot 10^{-6}$	$6.28 \cdot 10^{-7}$
0.962315	$3.43 \cdot 10^{-5}$	$3.30 \cdot 10^{-5}$
3.627706	$5.53 \cdot 10^{-4}$	$2.01 \cdot 10^{-3}$
13.67426	$9.29 \cdot 10^{-3}$	$1.27 \cdot 10^{-1}$
51.55289	$1.21 \cdot 10^{-1}$	6.24
194.5992	1.28	249

Tabella 7.3: Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh B al variare della velocità di rotazione N

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1	112
4.624	24.679
9.870	12.543
52.790	6.12
199.030	5.574
750.470	5.466
2829.1	6.20
10664	7.33
40204	6.719
151760	4.989

Tabella 7.4: Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh B

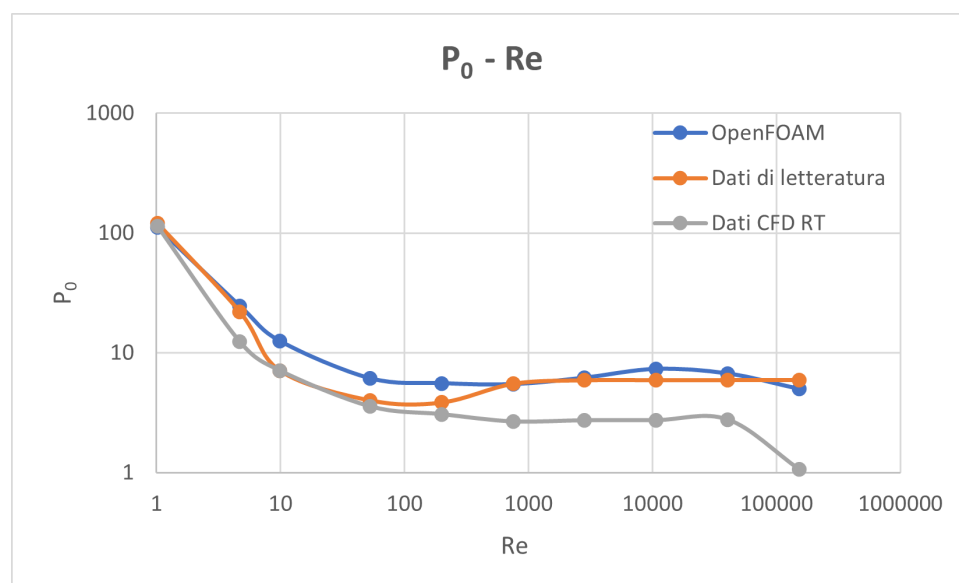


Fig. 7.2: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh B

alle differenze nelle geometrie dei due reattori o ad errori numerici di simulazione dovuti agli schemi utilizzati per discretizzare le equazioni di governo. Inoltre, rispetto alla mesh A, il risultato ottenuto è sicuramente più accurato e vicino a quello desiderato.

Errore relativo [%]
7.6
10.7
43.2
34.3
30.7
1.3
4.5
19.1
11.6
19.3

Tabella 7.5: Valori dell'errore relativo calcolati sul numero di potenza tra i dati ottenuti con le simulazioni tramite OpenFOAM e quelli disponibili in letteratura

Come descritto precedentemente, il software di postProcessing utilizzato è stato Paraview. Questo ha consentito di ricavare i *contour plots* della velocità che sono riportati in Fig. 7.3.

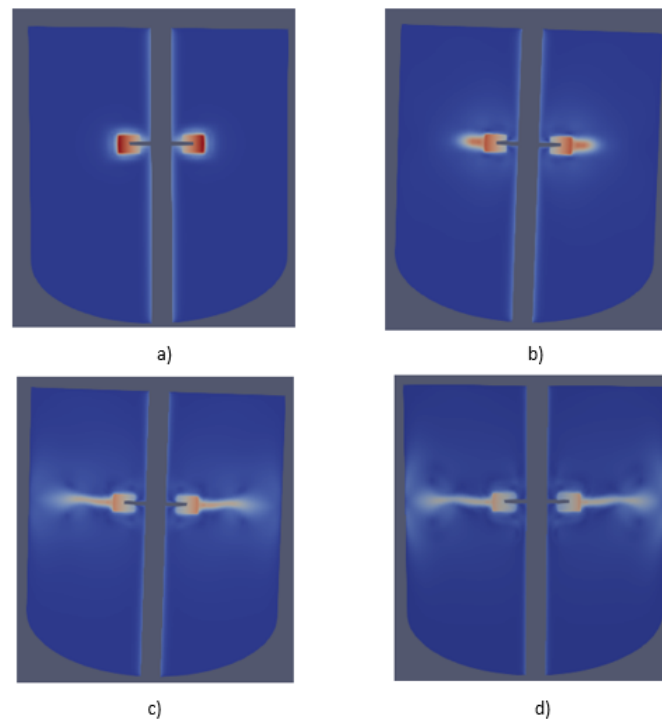


Fig. 7.3: Contour plots del campo di velocità estratti da Paraview al variare nel numero di Reynolds: a) $Re=9.87$, b) $Re=2.79$, c) $Re=750.47$, d) $Re=2829.1$.

Dal rosso al blu la velocità tende a diminuire. Ciò implica che le zone a maggiore velocità sono quelle in prossimità dell'agitatore; viceversa, quelle vicino alle pareti saranno a velocità inferiore. Dalla Fig. 7.3 si osserva che il flusso viene scaricato dalla girante in

direzione radiale, in accordo con quanto detto nel Cap. 1., con una parte del flusso che ricircola lungo la parete del recipiente muovendosi verso il fondo e il resto si muove verso la superficie superiore. Per alti numeri di Reynolds, come si osserva in Fig. 7.3c e 7.3d, si iniziano a generare i loop di circolazione intorno alla girante. Effettuando le simulazioni per valori ancora più elevati, non esplorati nel seguente lavoro di tesi, si dovrebbe osservare il campo di moto tipico della turbina Rushton.

Si riporta in Fig. 7.4 la curva di flusso ottenuta per il secondo set di simulazioni.

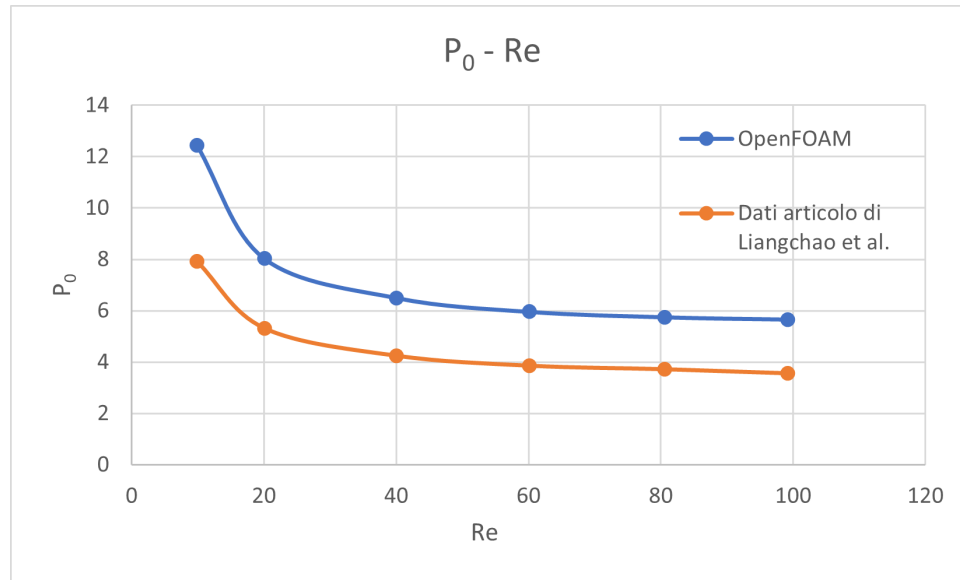


Fig. 7.4: Curva del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh B in regime laminare

Si conferma ciò che è stato detto nelle considerazioni precedenti.

7.2 Analisi dei reattori agitati con fondo piatto in regime laminare e turbolento

Per ogni velocità di rotazione N sono stati calcolati, grazie all'utilizzo del software OpenFOAM, i rispettivi valori di P e τ , tramite le Eq. 6.1 e 6.2, riportati in Tab 7.6. Tramite l'Eq. 1.5 è stato possibile associare il numero di potenza al numero di Reynolds attraverso la velocità di rotazione N . I risultati ottenuti, per mezzo del software OpenFOAM, sono riportati in Tab. 7.6. L'andamento rispettivo è riportato in Fig. 7.5. La curva arancione rappresenta i dati simulati con OpenFOAM; la curva blu i dati sperimentali della correlazione di Scargiali et al. e la curva grigia quelli di Rushton et al. Si osserva dal grafico che le tre curve sono pressoché vicine. In particolare, si ha una maggiore discrepanza con i risultati ottenuti da Scargiali et al. soprattutto nella parte iniziale. Man mano che il numero di Reynolds aumenta l'errore relativo diminuisce. Una migliore approssimazione si ha nei confronti dei dati di Rushton et al.

Le due curve, arancione e grigia, infatti sono praticamente uguali fino a $Re=11.521$ e tendono a discostarsi solo verso la fine. L'errore relativo massimo raggiunto, in quest'ultimo caso, è comunque del 15 %, assolutamente ragionevole per delle simulazioni numeriche. Nel caso della correlazione di Scargiali si raggiungono valori anche del 33 %. Per tale

Velocità di rotazione N [rad/s]	Momento torcente τ [$N \cdot m$]	Potenza P [W]
0.002107	$8.09 \cdot 10^{-10}$	$1.7 \cdot 10^{-12}$
0.003177	$1.22 \cdot 10^{-9}$	$3.88 \cdot 10^{-12}$
0.004275	$1.65 \cdot 10^{-9}$	$7.05 \cdot 10^{-12}$
0.005359	$2.08 \cdot 10^{-9}$	$1.11 \cdot 10^{-11}$
0.007629	$3.01 \cdot 10^{-9}$	$2.30 \cdot 10^{-11}$
0.009977	$4.02 \cdot 10^{-9}$	$4.01 \cdot 10^{-11}$
0.018047	$8.23 \cdot 10^{-9}$	$1.49 \cdot 10^{-10}$
0.034507	$2.21 \cdot 10^{-8}$	$7.63 \cdot 10^{-10}$
0.058098	$5.42 \cdot 10^{-8}$	$3.15 \cdot 10^{-9}$
0.131384	$2.42 \cdot 10^{-7}$	$3.18 \cdot 10^{-8}$
0.261565	$9.5 \cdot 10^{-7}$	$2.48 \cdot 10^{-7}$

Tabella 7.6: Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti con la mesh C al variare della velocità di rotazione N

Numero di Reynolds Re	Numero di potenza P_0
1.3451	44.360
2.0283	29.420
2.729	21.980
3.4209	17.633
4.8702	12.590
6.36989	9.832
11.521	6.151
22.029	4.518
37.089	3.909
83.874	3.413
166.98	3.380

Tabella 7.7: Dati ottenuti dalle simulazioni CFD sfruttando OpenFOAM con la mesh C

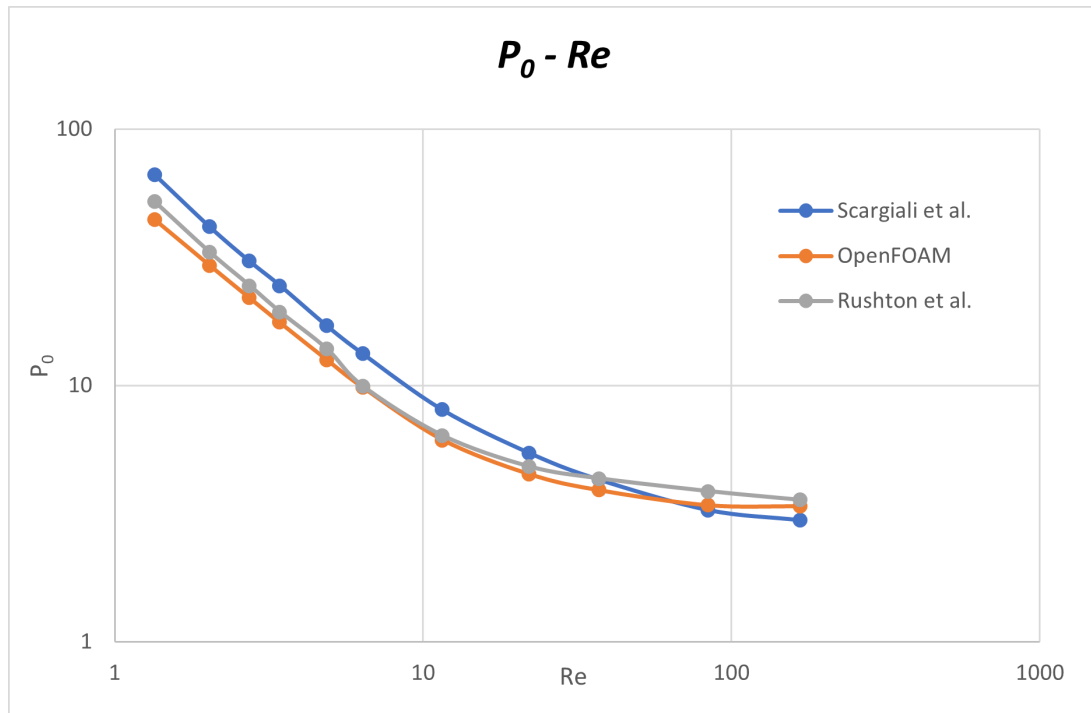


Fig. 7.5: Curva nel numero di potenza in funzione del numero di Reynolds con la mesh C

ragione si è deciso di provare a raffinare ulteriormente la mesh provando ad aumentare il numero di celle del 10 %, 20 % e 30 % non ottenendo comunque un miglioramento. In Tab. 7.8 si riportano i valori degli errori relativi calcolati nei due casi.

Errore relativo Scargiali [%]	Errore relativo Rushton [%]
33.1	14.8
29.2	11.1
28.1	10.4
28.3	9.2
26.3	9.2
26.1	1.1
23.6	3.6
17.3	6.4
9.1	9.9
4.3	11.8
13.2	5.4

Tabella 7.8: Valori numerici degli errori relativi per le due casistiche analizzate

7.3 Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic nella cavità

A titolo di esempio si riportano, in Fig. 7.6 e 7.7 alcuni contour plot della concentrazione di Pluronic al variare della velocità della parete. Le immagini sono state estratte da Paraview ad un tempo pari a 15 secondi. In Fig. 7.6 e 7.7, sulla sinistra, si osserva il caso con velocità della parete pari a $0.01 \frac{m}{s}$; sulla destra quello con velocità della parete pari a $0.1 \frac{m}{s}$. La regione rossa rappresenta la fase *Pluronic*, mentre la regione blu la fase *acqua*. In entrambe le casistiche studiate non si raggiunge un grado di miscelazione elevato. Il caso con un valore di velocità maggiore e, quindi con un grado di turbolenza superiore, garantirà comunque un'efficacia di miscelazione maggiore, come si osserverà anche negli andamenti del coefficiente di variazione nel tempo riportati in Fig. 7.8, 7.9 e 7.10. Per valori di concentrazione bassi (0.25, 0.35 e 0.45) sono state simulate solamente le velocità pari a 0.01 e $0.1 \frac{m}{s}$. Nel caso di concentrazioni di Pluronic maggiori (0.55, 0.65, 0.75 e 0.85) è stata simulata anche la velocità pari a $0.9 \frac{m}{s}$. In Fig. 7.7, 7.8 e 7.9 si osservano gli stessi andamenti del coefficiente di variazione. Nel caso di concentrazioni basse, per $u=0.01 \frac{m}{s}$ il coefficiente di variazione non ha una variazione nel tempo e rimane pressoché costante nell'intorno del valore 1, come si osserva dalle curve blu in Fig. 7.8. A livello fisico, ciò significa che le due fasi non sono miscelate. Aumentando la turbolenza nel sistema, quindi per $u=0.1 \frac{m}{s}$, si osserva una decrescita del coefficiente di variazione nel tempo fino ad assestarsi a valori intorno a 0.2. Ciò implica che è avvenuta una miscelazione tra le due fasi. Il caso ideale si avrebbe con un CoV nullo che implica la condizione di perfetta miscelazione ed omogeneità nel sistema. Ovviamente, nei sistemi reali non è possibile ottenere un valore pari a 0, ma potrebbe essere prossimo ad esso. Nel caso di concentrazioni più elevate, invece, si osserva un andamento costante del coefficiente di variazione nel tempo sia per $u=0.01 \frac{m}{s}$, sia per $u=0.1 \frac{m}{s}$. Per tale ragione sono state effettuate ulteriori simulazioni ad una velocità della parete maggiore e pari a $0.9 \frac{m}{s}$. In Fig. 7.9 e 7.10 le curve blu ed arancioni sono praticamente sovrapposte. La curva grigia (corrispondente alla velocità massima), invece, ha un andamento decrescente nel tempo e si assesta a valori nell'intorno di 0.4 per concentrazioni di Pluronic pari a 0.55, 0.65 e 0.75; nell'intorno di 0.2 per concentrazioni di Pluronic pari a 0.85.

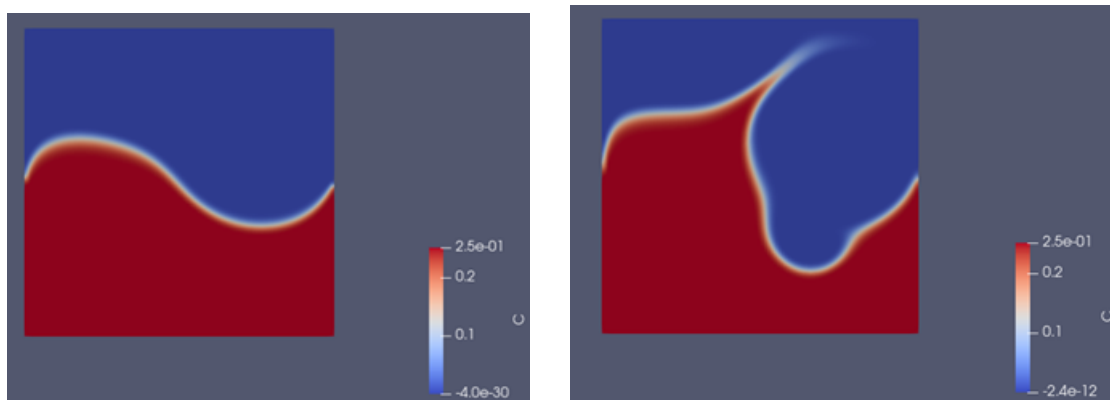


Fig. 7.6: Contour plot della concentrazione al variare della velocità della parete con $C_0 = 0.25$

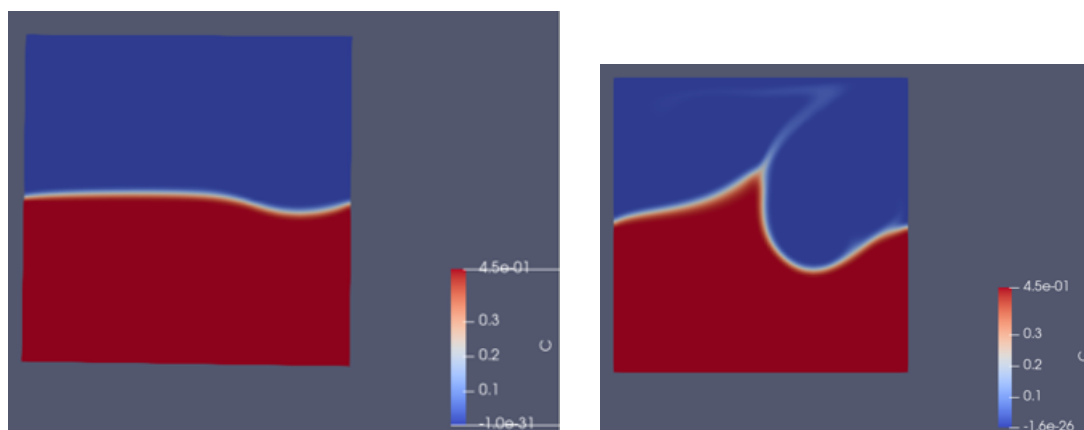


Fig. 7.7: Contour plot della concentrazione al variare della velocità della parete con $C_0 = 0.45$

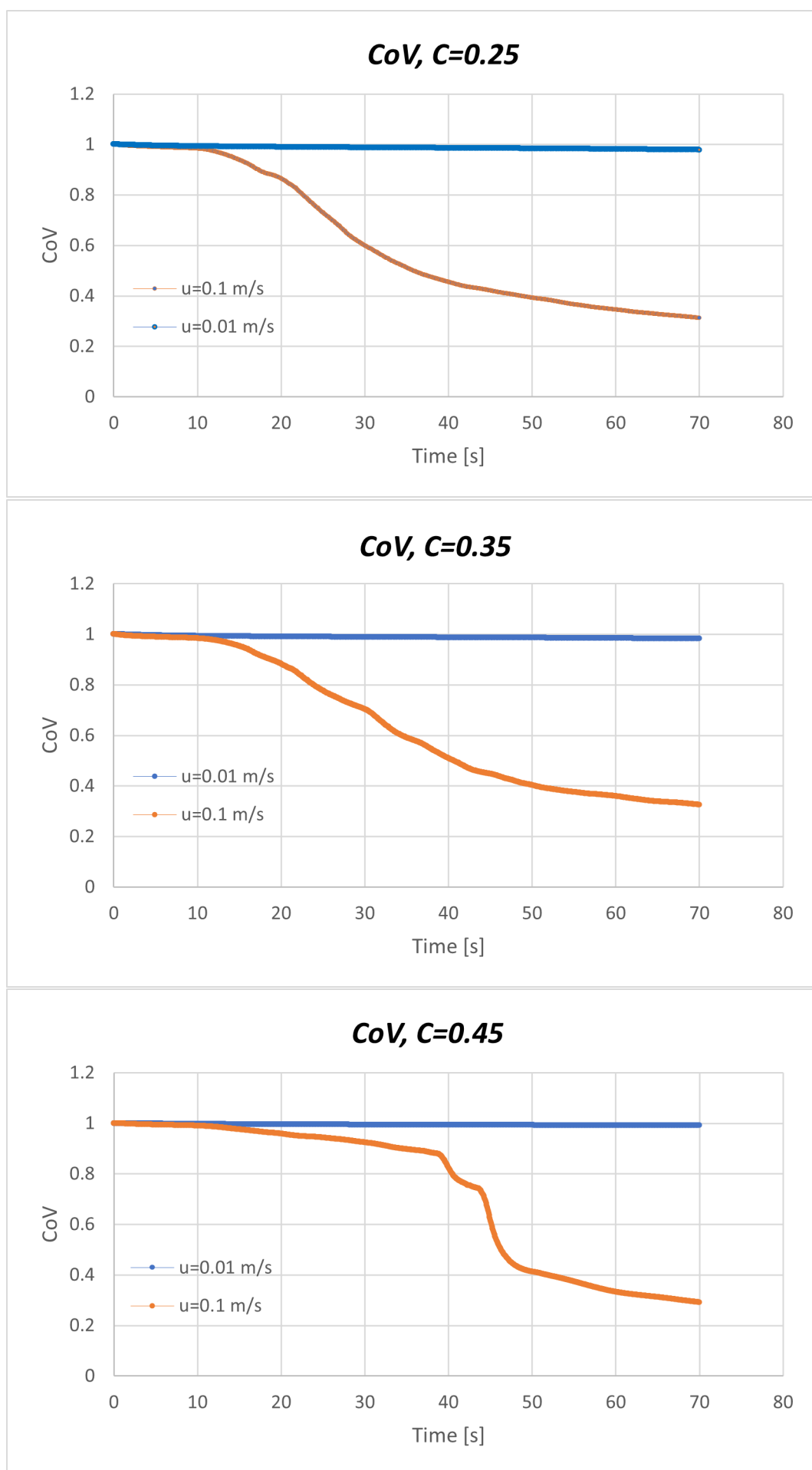


Fig. 7.8: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.25, 0.35 e 0.45 nella cavità

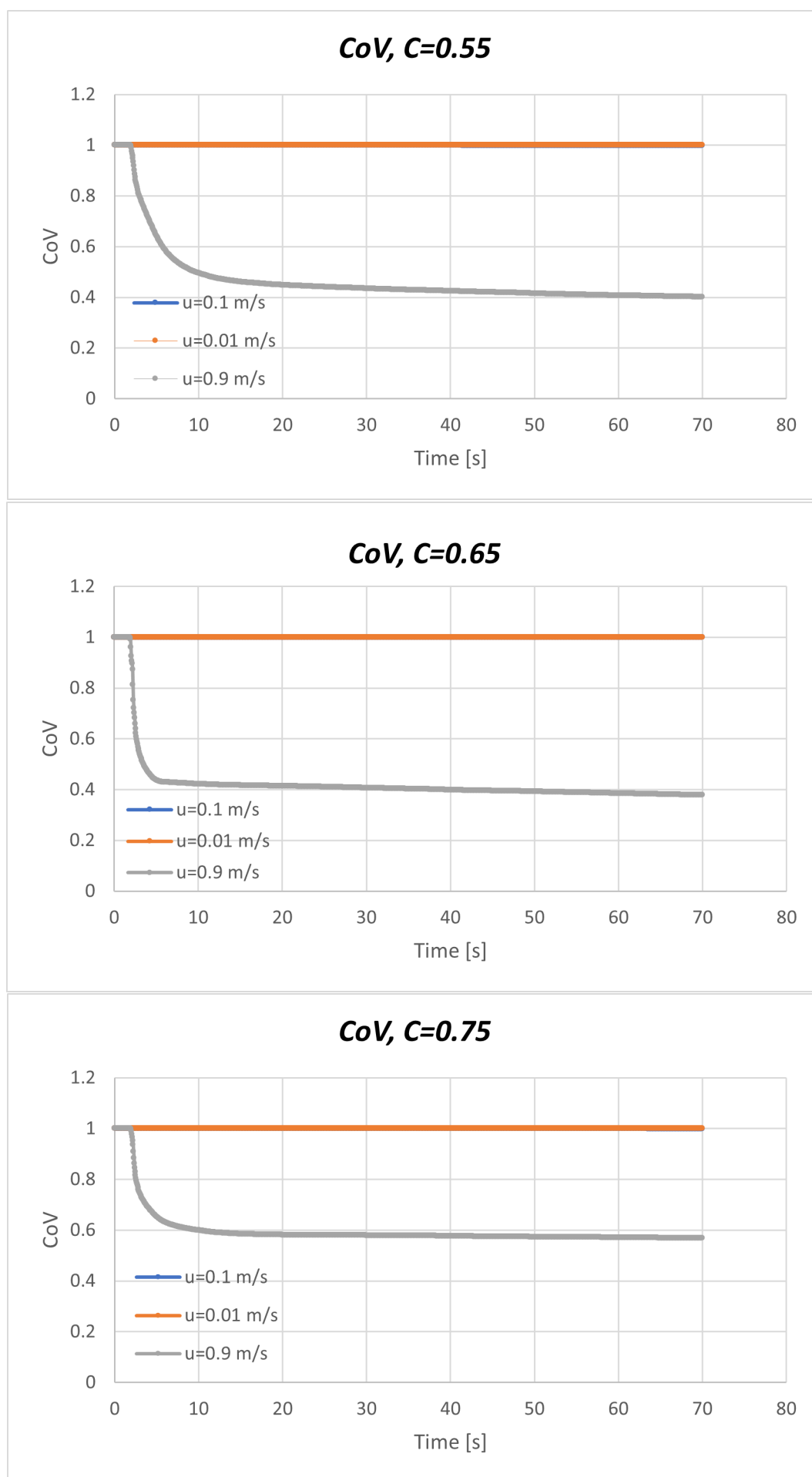


Fig. 7.9: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nella cavità

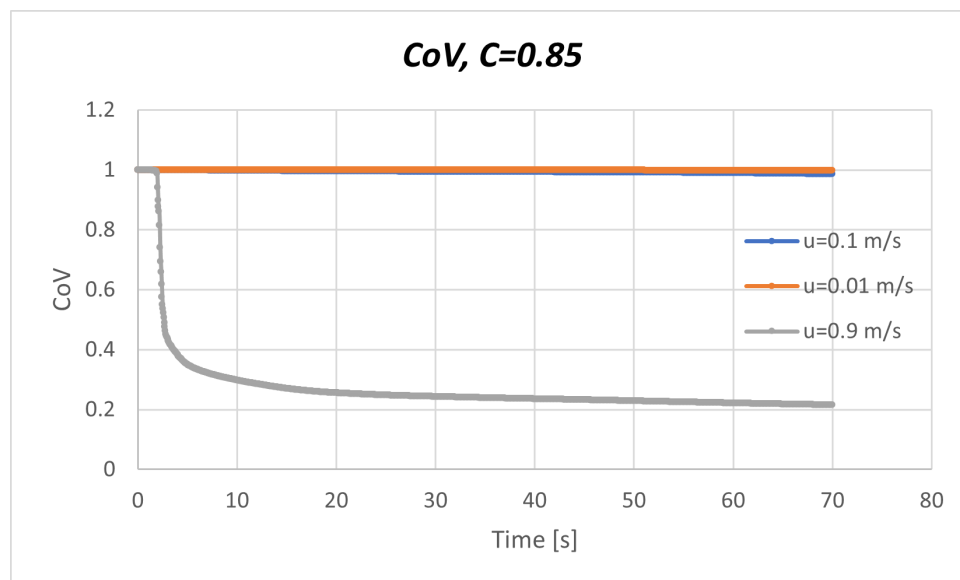


Fig. 7.10: Andamento del coefficiente di variazione nel tempo per un valore di concentrazione di Pluronic pari a 0.85 nella cavità

7.4 Analisi del tempo di miscelazione tra acqua e Pluronic nel reattore bidimensionale

Nel caso del reattore bidimensionale sono stati valutati i contour plots della concentrazione di Pluronic e gli andamenti del coefficiente di variazione nel tempo al variare della velocità di rotazione dell'agitatore. In particolare, sono stati valutati tre differenti valori pari rispettivamente a 25, 50 e 104.72 rad/s. In Fig. 7.13 si osservano gli andamenti per valori iniziali di concentrazione di Pluronic bassi. Si osserva che, con tutte e tre le velocità angolari simulate, si raggiunge una condizione di perfetta miscelazione in quanto il coefficiente di variazione tende a zero. Ovviamente, utilizzando una velocità di rotazione maggiore servirà meno tempo per miscelare in modo efficiente il sistema in esame. In Fig. 7.14 e 7.15 si osservano gli andamenti per valori iniziali di concentrazione di Pluronic maggiori. Per $C_0 = 0.55$ e $C_0 = 0.65$ con la velocità angolare inferiore, pari a 25 rad/s, non si raggiunge una condizione di perfetta miscelazione tra le due fasi. Per $C_0 = 0.75$ e $C_0 = 0.85$ questo si verifica anche utilizzando 50 rad/s come velocità di rotazione dell'agitatore. Per tutti e quattro i casi, invece, la velocità di 104.72 rad/s è sufficiente per ottenere un grado di miscelazione accettabile. Per poter raggiungere una condizione ottimale anche per valori di velocità angolare inferiori sono state effettuate delle simulazioni per tempi maggiori tra 500 e 2000 secondi. In Fig. 7.15 e 7.16 si osservano i risultati ottenuti. Per $C_0 = 0.75$ e $C_0 = 0.85$ neanche 2000 secondi sarebbero sufficienti per garantire una perfetta miscelazione utilizzando la velocità angolare di 25 rad/s: questa informazione è sufficiente ad esprimere la scarsa efficacia del processo di miscelazione a queste velocità e non sono quindi state svolte simulazioni a tempi maggiori. In Tab. 7.9 si riportano i valori numerici ottenuti (in secondi), tramite le simulazioni di OpenFOAM, per le diverse velocità angolari analizzate.

Concentrazione iniziale di Pluronic	Tempo di mixing per $\omega = 25$ rad/s	Tempo di mixing per $\omega = 50$ rad/s	Tempo di mixing per $\omega = 104.72$ rad/s
0.25	52	45	37
0.35	30	26	25
0.45	28	27	26
0.55	551	77	23
0.65	976	82	30
0.75	-	130	29
0.85	-	1031	37

Tabella 7.9: Valori numerici ricavati per i tempi di miscelazione al variare della concentrazione di Pluronic e della velocità angolare di rotazione dell'agitatore

Anche in questo caso si riportano i contour plots della concentrazione per alcuni casi particolari. In Fig. 7.11 si osserva il processo di miscelazione delle due fasi, ossia acqua e pluronico. Le tre immagini sono state catturate rispettivamente, a partire dall'alto, ad un tempo pari a 0 s, 25 s e 52 s, tempo in cui si raggiunge la completa omogeneità nel sistema. A titolo di esempio è stato riportato anche il caso con concentrazione iniziale di Pluronic pari a 0.55 e velocità di rotazione 25 rad/s. Come è possibile osservare in Fig. 7.12 in queste condizioni non viene raggiunta una condizione di omogeneità neppure per un tempo pari a 70 s (immagine in basso). Questo conferma le prove effettuate per tempi di simulazione maggiori.

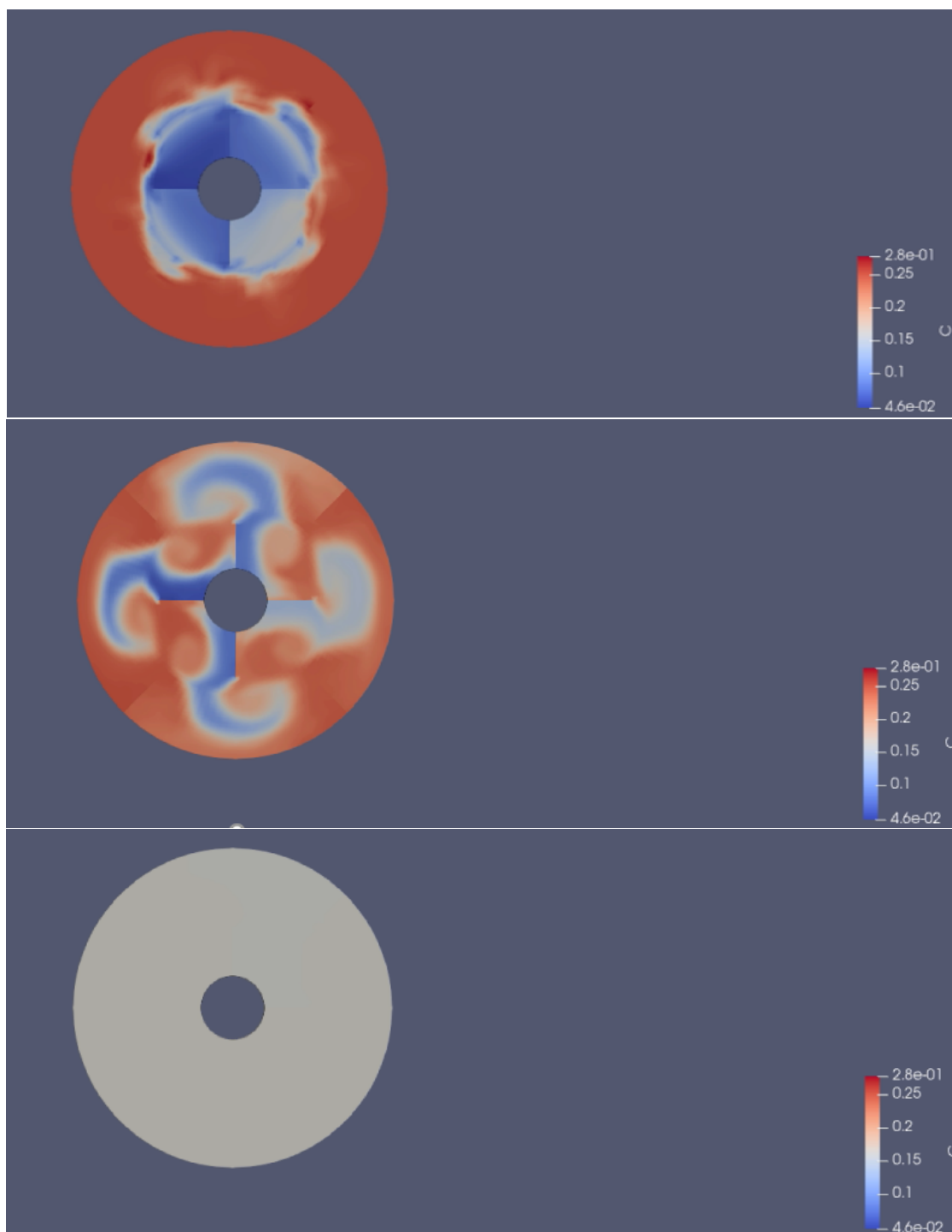


Fig. 7.11: Contour plots della concentrazione al variare del tempo di simulazione fino a raggiungere la completa miscelazione delle due fasi per $C=0.25$

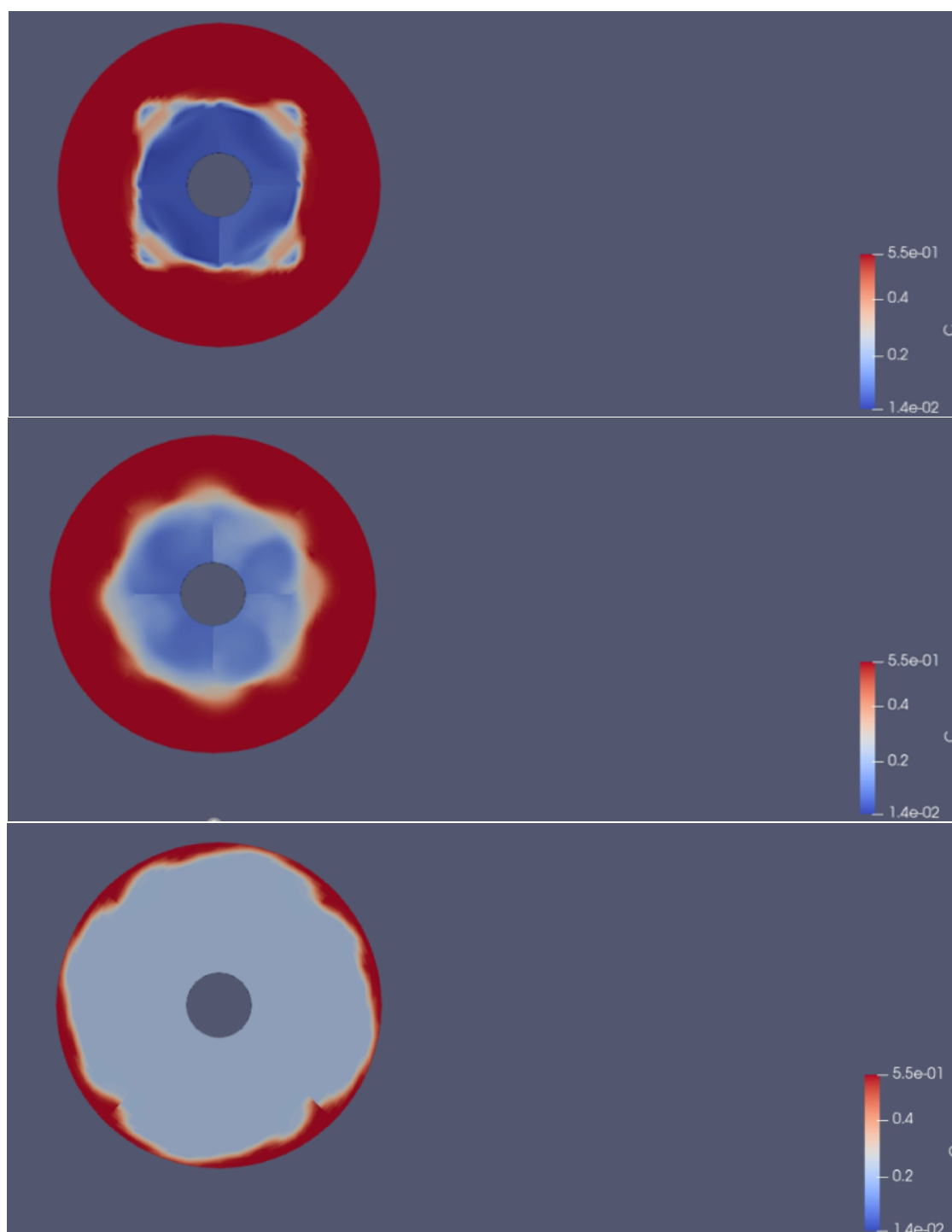


Fig. 7.12: Contour plots della concentrazione al variare del tempo di simulazione fino a raggiungere la completa miscelazione delle due fasi per $C=0.55$

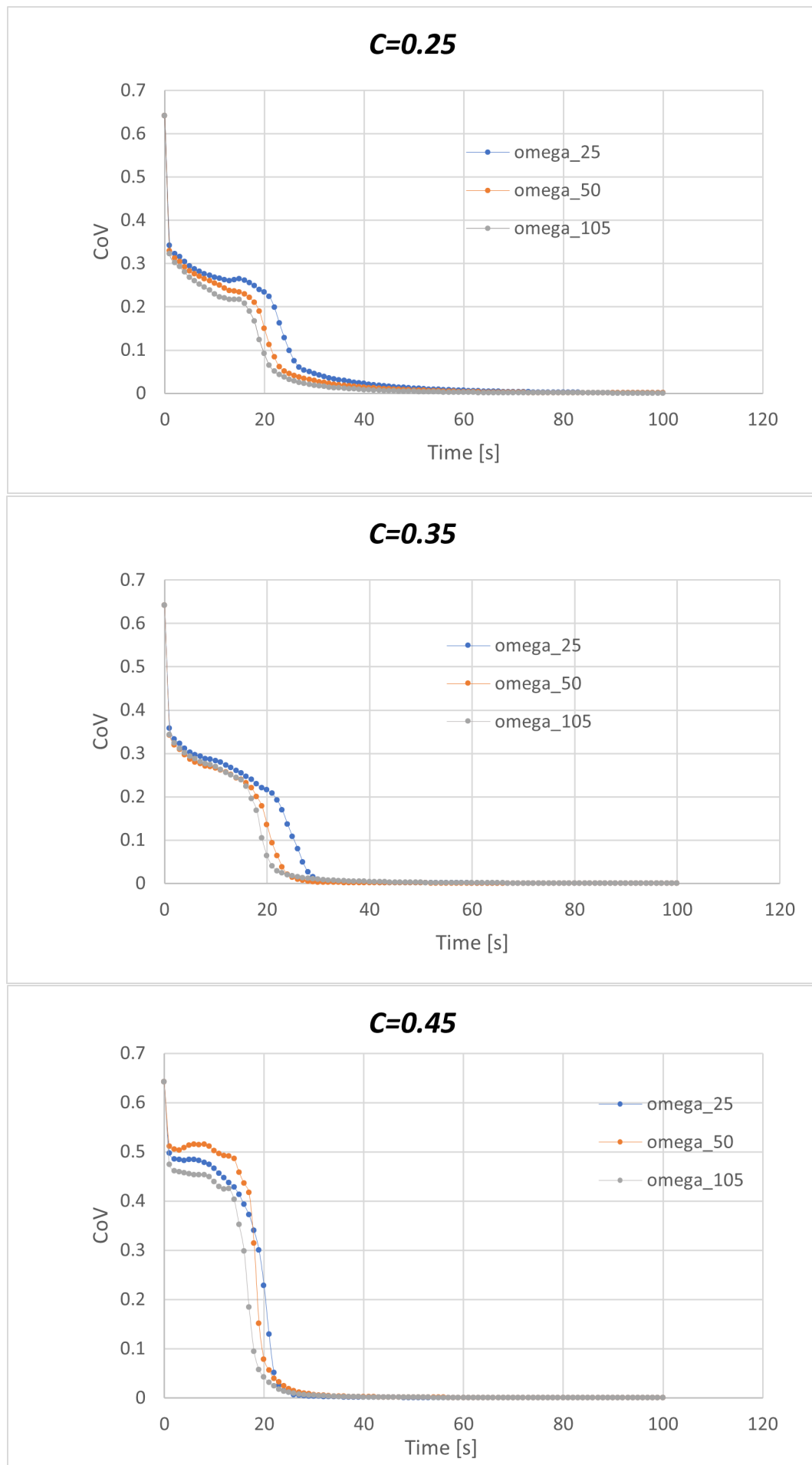


Fig. 7.13: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.25, 0.35 e 0.45 nel reattore a tre velocità differenti

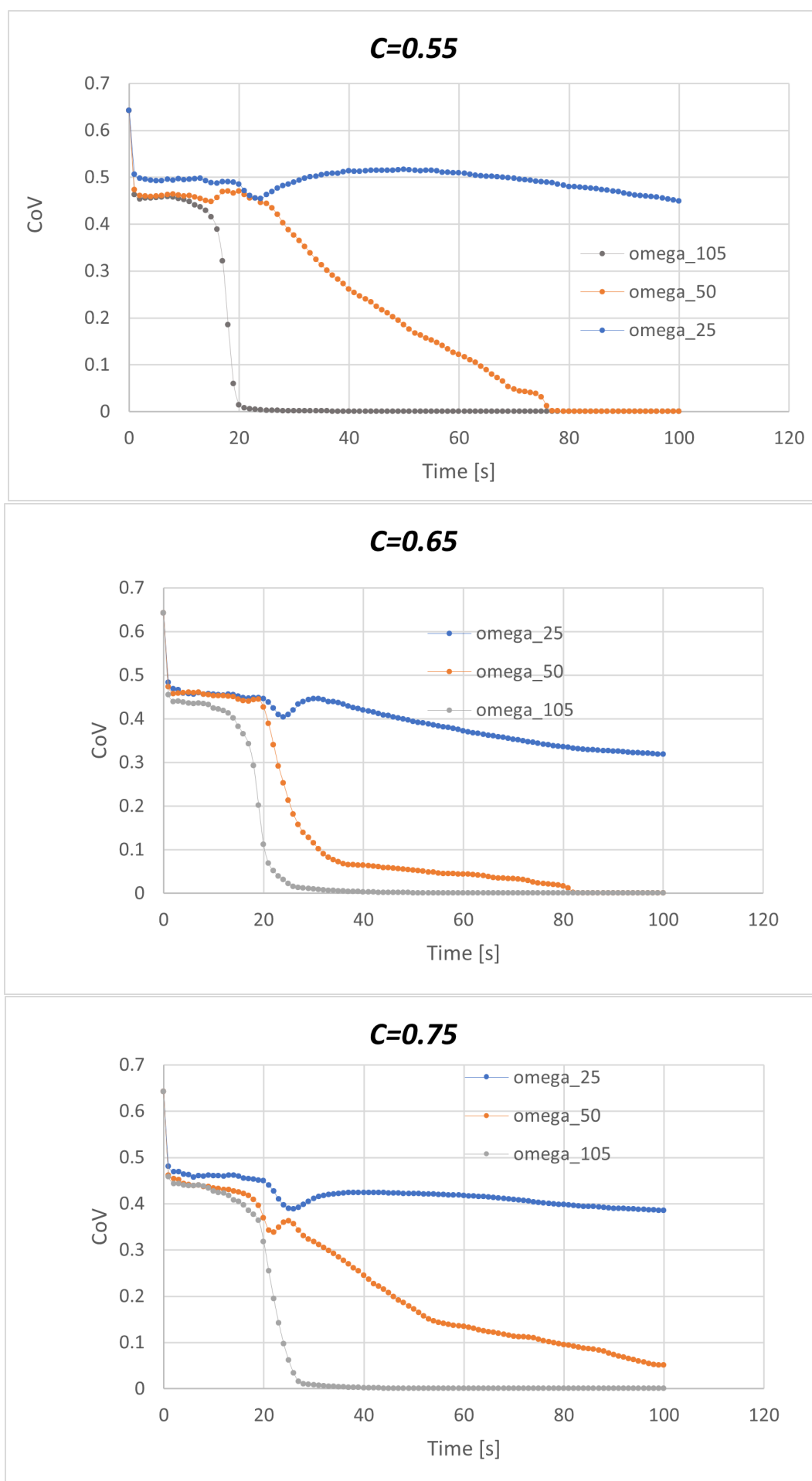


Fig. 7.14: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nel reattore

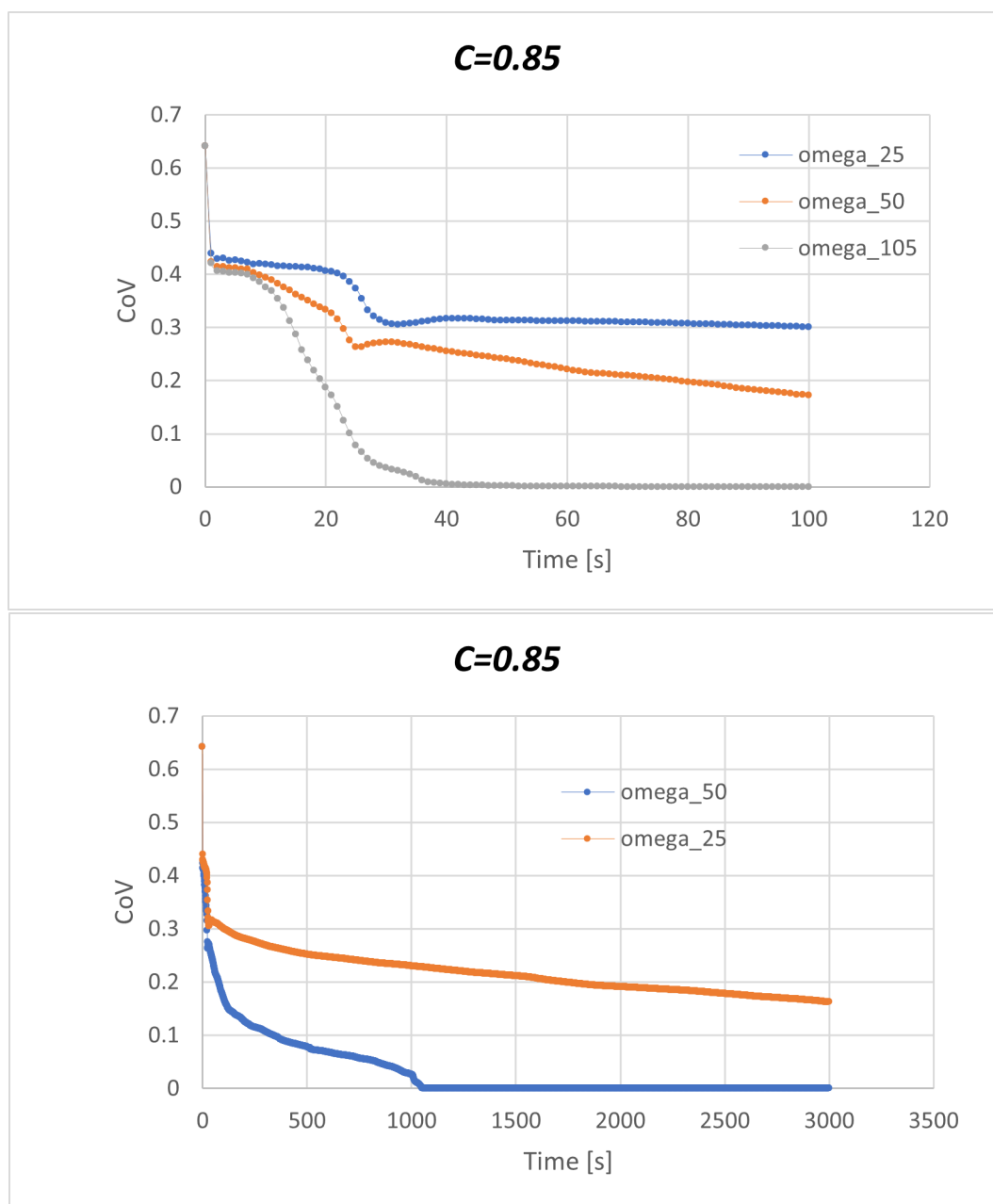


Fig. 7.15: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per un valore di concentrazione di Pluronic pari a 0.85 nel reattore per due tempi simulati differenti

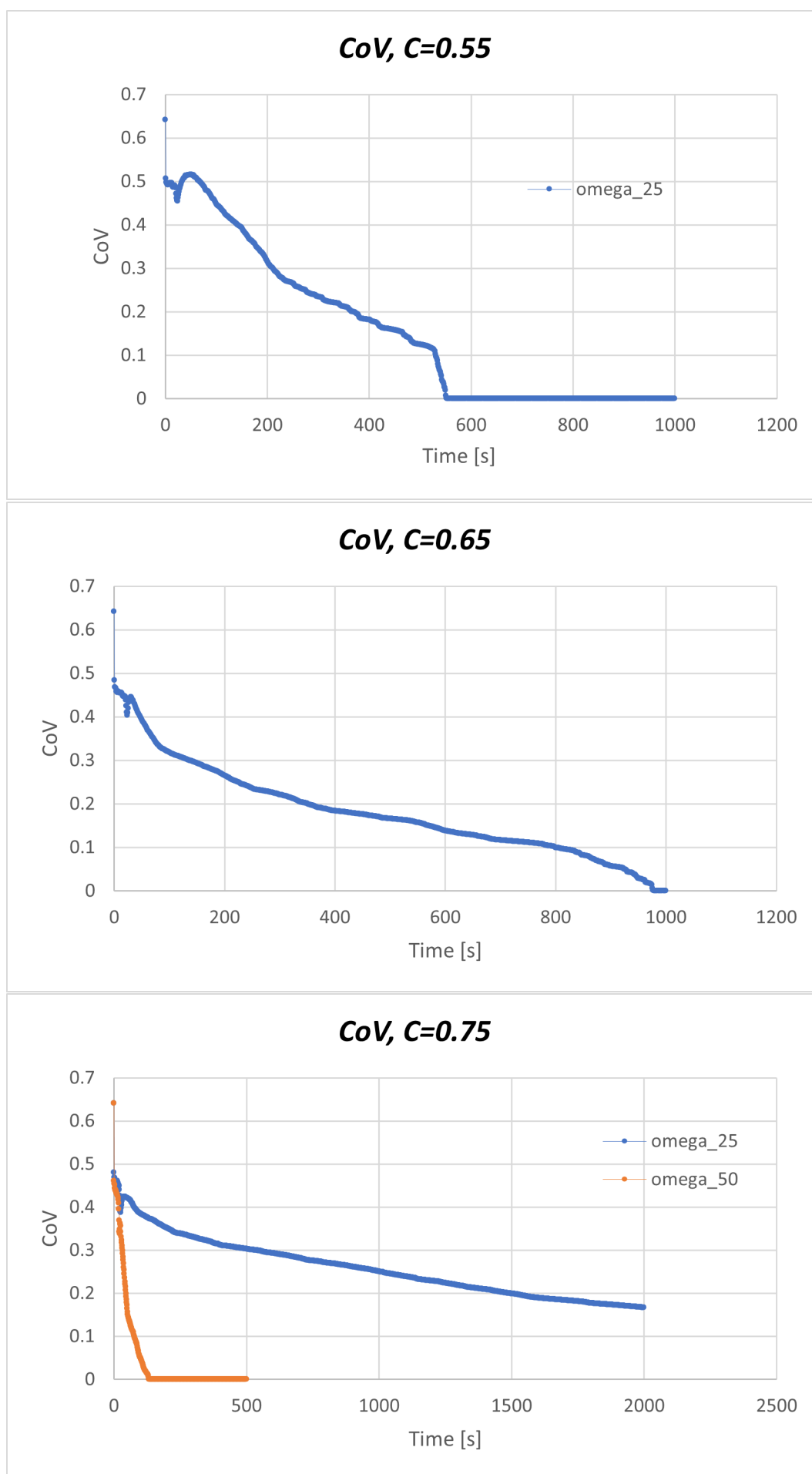


Fig. 7.16: Andamenti del coefficiente di variazione nel tempo per tre valori di concentrazione di Pluronic differente e pari a 0.55, 0.65 e 0.75 nel reattore per un tempo di simulazione maggiore

7.5 Analisi dei dati sperimentali dell'Università di Bologna

In prima analisi si riportano i risultati ottenuti nel caso di Pluronic puro. In Tab. 7.10 sono riportati i valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti al variare della velocità di rotazione. In Tab. 7.11 si riportano i valori del numero di potenza al variare della velocità di rotazione.

Velocità di rotazione N [rad/s]	Momento torcente τ [$N \cdot m$]	Potenza P [W]
10.3	$3.98 \cdot 10^{-3}$	$8.21 \cdot 10^{-2}$
15.6	$7.03 \cdot 10^{-3}$	$2.19 \cdot 10^{-1}$
21.1	$1.13 \cdot 10^{-2}$	$4.78 \cdot 10^{-1}$
26.1	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$8.29 \cdot 10^{-1}$
30.9	$2.11 \cdot 10^{-2}$	1.31
36.7	$2.81 \cdot 10^{-2}$	2.06
39.3	$3.17 \cdot 10^{-2}$	2.49
41.8	$3.52 \cdot 10^{-2}$	2.94
44.6	$3.94 \cdot 10^{-2}$	3.51
46.9	$4.30 \cdot 10^{-2}$	4.03
52.1	$5.17 \cdot 10^{-2}$	5.38

Tabella 7.10: Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti al variare della velocità di rotazione N con il sistema studiato dall'Università di Bologna nel caso di Pluronic puro

Velocità di rotazione N [rpm]	Numero di potenza P_0
98.5	7.82
148.7	6.06
201.8	5.29
249.1	4.89
295.9	4.59
350.4	4.36
375.8	4.28
399.1	4.21
425.7	4.14
447.5	4.09
496.7	3.99

Tabella 7.11: Valori numerici del numero di potenza ottenuto al variare della velocità di rotazione in rpm nel caso di Pluronic puro

L'andamento è riportato in Fig. 7.17. Si osserva che le due curve si discostano nella parte iniziale del grafico, per velocità di rotazione sufficientemente basse. Questo è in accordo con la maggiore difficoltà nel descrivere con accuratezza le regioni a più bassi numeri di Reynolds per le incertezze numeriche. Le due curve, invece, tendono a sovrapporsi all'aumentare del numero di Reynolds. Avendo calcolato un errore relativo massimo pari al 32 %, il sistema è considerato una buona approssimazione dei dati sperimentali simulati.

In Tab. 7.12 si riportano i valori numerici calcolati per l'errore relativo al variare della velocità di rotazione.

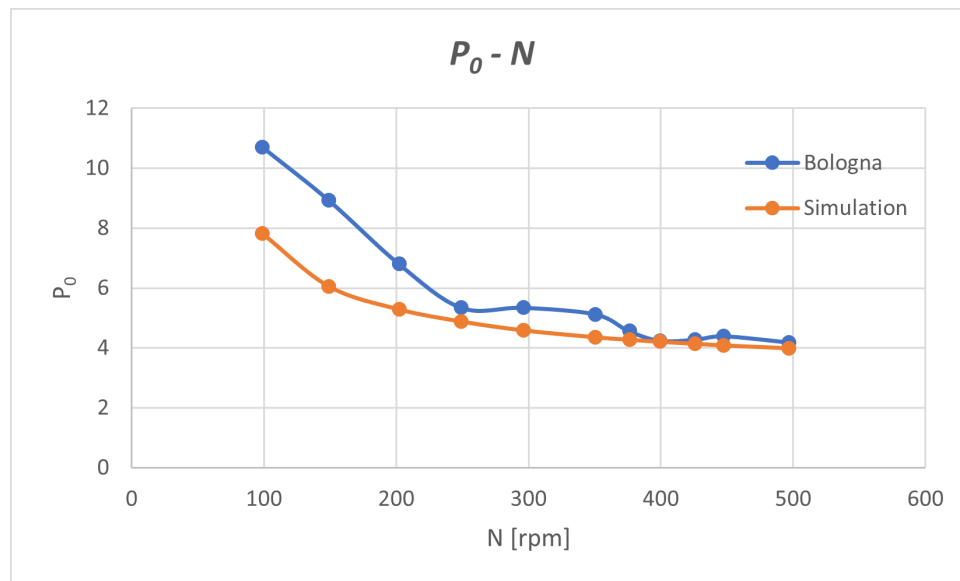


Fig. 7.17: Andamento del numero di potenza al variare della velocità di rotazione nel caso di Pluronic puro

Errore relativo [%]
27.0
32.2
22.3
8.5
14.1
14.8
6.2
0.6
3.1
6.8
4.6

Tabella 7.12: Valori numerici calcolati per l'errore relativo percentuale nel caso di Pluronic puro

In seconda analisi si riportano i risultati ottenuti per una concentrazione pari al 50 % di Pluronic nelle Tab. 7.13 e 7.14.

Velocità di rotazione N [rad/s]	Momento torcente τ [$N \cdot m$]	Potenza P [W]
10.8	4.04E-03	8.76E-02
15.6	6.89E-03	2.15E-01
21.1	1.10E-02	4.64E-01
25.9	1.54E-02	7.97E-01
31.3	2.10E-02	1.31
36.6	2.75E-02	2.01
39.7	3.16E-02	2.51
41.7	3.45E-02	2.88
44.4	3.86E-02	3.43
46.7	4.21E-02	3.93
52.6	5.21E-02	5.48

Tabella 7.13: Valori numerici del momento torcente e della potenza ottenuti al variare della velocità di rotazione N con il sistema studiato dall'Università di Bologna nel caso di 50 % di Pluronic

Velocità di rotazione N [rpm]	Numero di potenza P_0
103.5	7.19
149.3	5.89
201.4	5.17
247.2	4.80
298.4	4.49
349.1	4.30
378.9	4.20
398.2	4.15
424.3	4.09
445.7	4.04
501.9	3.94

Tabella 7.14: Valori numerici del numero di potenza ottenuto al variare della velocità di rotazione in rpm nel caso di 50 % di Pluronic

L'andamento è riportato in Fig. 7.18. Si osserva un andamento molto diverso da quello atteso. Questo potrebbe essere dovuto alla forte approssimazione effettuata per valutare la viscosità. Infatti, anche variazioni molto piccole nella temperatura possono portare a variazioni grandi nella viscosità finale calcolata.

Il campo di moto all'interno di un serbatoio agitato è influenzato significativamente dalla reologia del fluido considerato. Per tali ragioni, Metzner ed Otto hanno proposto un metodo ingegneristico per predire la potenza richiesta per la miscelazione di fluidi non Newtoniani. Questi ultimi a differenza dei fluidi Newtoniani, come già spiegato in Sez. 2, sono caratterizzati da una viscosità apparente variabile da punto a punto nel sistema per la sua dipendenza dallo *shear rate*. Per semplicità viene introdotto il concetto di *velocità di taglio effettiva* e *viscosità apparente efficace*. L'assunzione alla base del concetto di Metzner-Otto è che la velocità di taglio effettiva, in regime laminare, sia direttamente

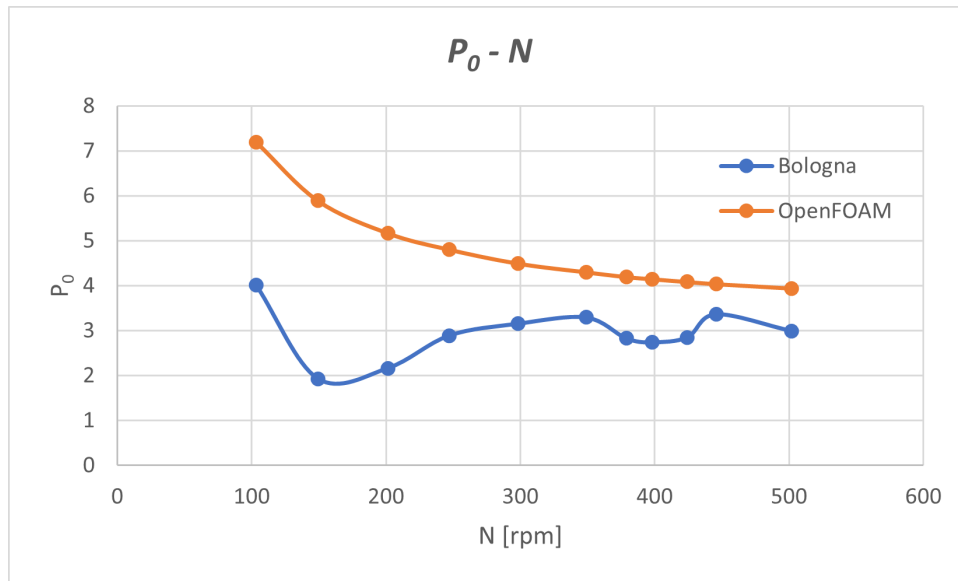


Fig. 7.18: Andamento del numero di potenza al variare della velocità di rotazione nel caso di 50 % di Pluronic

proporzionale alla velocità di rotazione della girante N .

$$\dot{\gamma}_{eff} = K \cdot N \quad (7.1)$$

La costante K è chiamata costante di Metzner-Otto e dipende esclusivamente dal sistema di miscelazione, ossia serbatoio ed agitatore.[25]

Essa viene determinata per mezzo della procedura di Metzner-Otto che viene qui illustrata nel caso di Pluronic puro. In primo luogo sono state effettuate le simulazioni, per le diverse velocità di rotazione della girante, approssimando il fluido come Newtoniano. Il valore di viscosità considerato, per semplicità, è pari alla media dei dati sperimentali, ossia $1.096 [Pa \cdot s]$. Dai dati simulati è stata ottenuta la curva Newtoniana riportata in Fig. 7.19.

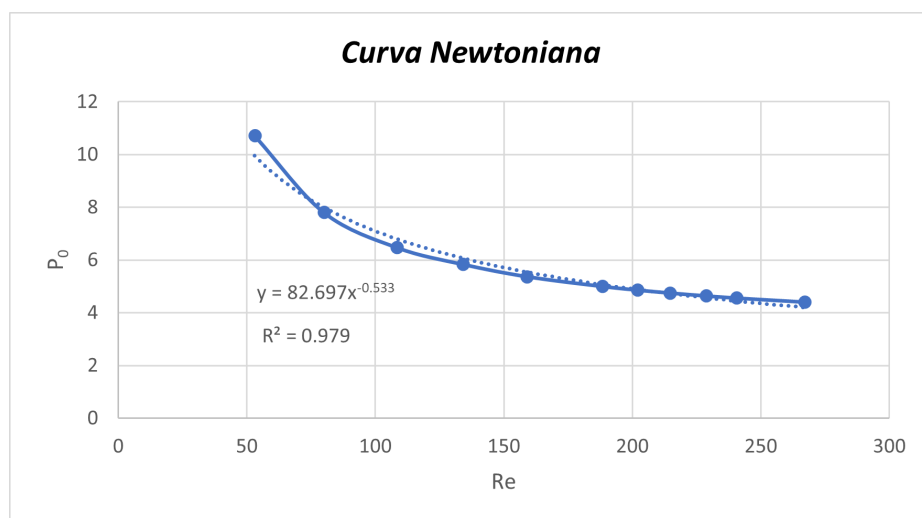


Fig. 7.19: Andamento del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds approssimando il fluido come Newtoniano

Per trovare una relazione funzionale tra P_0 e Re la curva è stata approssimata con una

legge di potenza ottenendo:

$$P_0 = 82.697 Re^{-0.533} \quad (7.2)$$

Dall'Eq. 7.2 è stato possibile ricavare il numero di Reynolds *apparente* sostituendo i valori sperimentali del numero di potenza forniti dall'Università di Bologna. Dalla nota definizione del numero di Reynolds è stato, quindi, possibile ricavare il valore della viscosità apparente per ogni velocità di rotazione, come riportato in Tab. 7.15.

Velocità di rotazione N [rad/s]	Numero di Reynolds apparente	Viscosità apparente [Pa · s]
10.31662	46.271	1.254
15.57383	65.029	1.347
21.12833	108.316	1.097
26.0826	170.735	0.859
30.99539	170.491	1.023
36.69425	184.671	1.118
39.34964	229.379	0.964
41.79553	263.351	0.892
44.57844	259.128	0.968
46.87185	246.594	1.069
52.01607	269.583	1.085

Tabella 7.15: Valori numerici ottenuti per il numero di Reynolds apparente e la viscosità apparente al variare della velocità di rotazione N

Il fluido considerato, però, è in realtà descritto correttamente dal modello reologico di Bird-Carreau. Di conseguenza, è stato necessario ricavare i parametri reologici ottenendo:

ν_∞ [Pa · s]	ν_0 [Pa · s]	α	n	k
0.714	2.675	2	-0.0669	5.845

Tabella 7.16: Parametri reologici per il modello Bird-Carreau nel caso di 100 % Pluronic

Sfruttando l'Eq. 4.76 è stato possibile, sostituendo al posto di ν il valore della viscosità apparente, ricavare il valore di velocità di taglio effettiva, come riportato in Tab. 7.17. Diagrammando la velocità di taglio effettiva in funzione della velocità di rotazione della girante si dovrebbe ottenere una retta, la cui pendenza è proprio la costante di Metzner-Otto K. Il grafico ottenuto, riportato in 7.20, riporta un andamento differente e caratterizzato, invece, da due picchi. L'andamento non è crescente monotono come era previsto dalla procedura di Metzner-Otto e la linea di tendenza lineare ha un valore di R^2 molto basso, pari a 0.8026, indice di una scarsa approssimazione della curva. Il significato di ciò è stato attribuito al range ristretto di dati sperimentali analizzati e, quindi, ad un range troppo piccolo di $\dot{\gamma}_{eff}$ esplorato. A conseguenza di ciò il valore di K ottenuto, pari alla pendenza della linea di tendenza tracciata in Fig. 7.20, è scorretto e lontano dai tipici valori per una turbina Rushton di 10-15. Probabilmente, esplorando un regime più ampio, il valore della costante si avvicina a quello desiderato.

Viscosità apparente [$Pa \cdot s$]	Velocità di taglio effettiva [$1/s$]
1.254	0.582
1.347	0.493
1.097	0.822
0.859	2.084
1.023	1.016
1.117	0.781
0.964	1.239
0.892	1.713
0.967	1.227
1.069	0.886
1.085	0.848

Tabella 7.17: Valori della velocità di taglio effettiva sfruttando il modello di Bird-Carreau

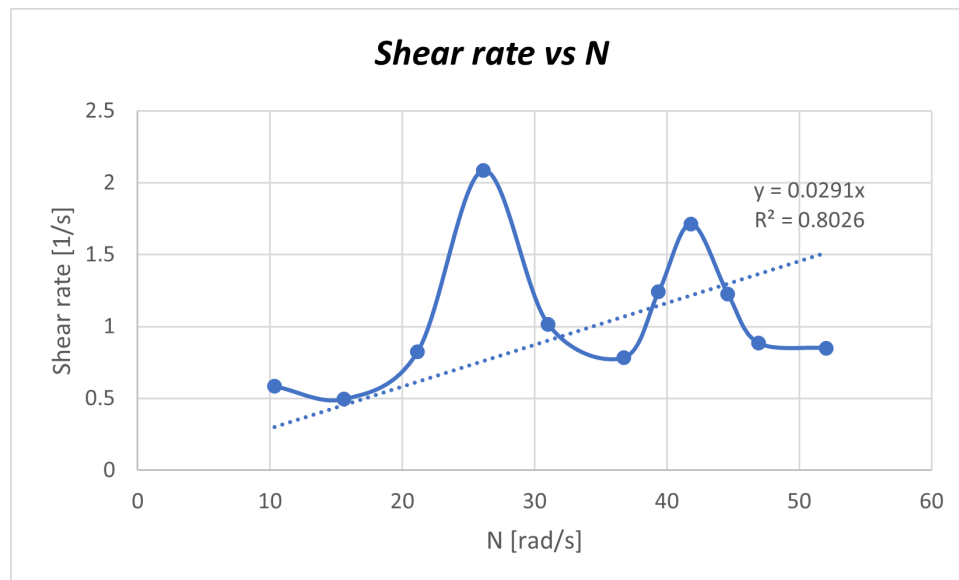


Fig. 7.20: Andamento della velocità di taglio effettiva al variare della velocità di rotazione della girante

Conclusioni

Nel seguente lavoro di tesi è stata utilizzata la *Computational Fluid Dynamics* (CFD) per ricavare informazioni sul consumo di potenza dei reattori agitati contenenti prima un fluido Newtoniano come l'acqua e, in seguito, un fluido complesso e non-Newtoniano, cioè la miscela di acqua e Pluronic L64.

In prima analisi sono state effettuate simulazioni di reattori con fondo pseudo-ellittico e con fondo piatto contenenti esclusivamente acqua. Sono state ricavate le curve del numero di potenza in funzione del numero di Reynolds per i vari sistemi e confrontate con i dati disponibili in letteratura confermando l'andamento tipico. In particolare, è stato osservato un andamento decrescente di P_0 all'aumentare del numero di Reynolds in regime laminare ed un andamento pressoché costante in regime turbolento. Nella zona di transizione, invece, è stato osservato un cambiamento poco significativo. Inoltre, i risultati ottenuti, essendo molto vicini ai dati sperimentali di riferimento, hanno dato modo di validare la mesh utilizzata nelle simulazioni. Nella prima parte del lavoro sono state confrontate due mesh a differenti livelli di raffinamento ed è stata individuato il livello di discretizzazione che ha portato ad un'accuratezza maggiore nei risultati ottenuti.

In seconda analisi è stato effettuato uno studio sul tempo di miscelazione tra le due fasi, acqua e Pluronic L64, prima in una cavità e poi in un reattore bidimensionale. Nella cavità è stato osservato che il tempo di miscelazione è correlato alla velocità con cui si muove la parete: in particolare, all'aumentare di essa e, quindi all'aumentare del grado di turbolenza all'interno del sistema fisico, si ottiene un tempo di miscelazione inferiore ed un grado di omogeneità maggiore. Lo stesso è stato osservato nel reattore bidimensionale dove si ha una correlazione tra il tempo di miscelazione e la velocità di rotazione della girante. In entrambi i casi sono stati riportati gli andamenti del coefficiente di variazione in funzione del tempo. E' stato osservato che esso ha un andamento decrescente all'aumentare del tempo, indice di una migliore miscelazione tra le due fasi. In alcuni casi specifici è stato necessario aumentare il tempo di simulazione e la velocità di rotazione della girante (o la velocità della parete) per ottenere dei gradi di miscelazione opportuni.

L'obiettivo finale del lavoro è quello di riprodurre con una simulazione CFD i dati sperimentali forniti dall'Università di Bologna. E' stata applicata la procedura di Metzner-Otto nel caso di Pluronic puro ottenendo un valore della costante K poco realistico. Questo è stato attribuito al piccolo range di valori esplorato, fornendo quindi una chiara indicazione sulla direzione verso la quale muoversi con lavori successivi sia sperimentali che modellistici.

Appendice A

Descrizione degli script OpenFOAM

Nella seguente appendice si riporta un esempio di script di OpenFOAM, scritti in linguaggio C++, utilizzati per effettuare una simulazione.

```

1  /*-----* C++ *-----*/
3  \
4  //      F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
5  //      O peration  | Website:  https://openfoam.org
6  //      A nd         | Version:   7
7  //      M anipulation|
8  \
9  FoamFile
10 {
11     version      2.0;
12     format       ascii;
13     class        volScalarField;
14     object       p;
15 }
16 // * * * * *
17 dimensions      [0 2 -2 0 0 0 0];
18
19 internalField    uniform 0;
20
21 boundaryField
22 {
23     shaft_rotating
24     {
25         type      zeroGradient;
26     }
27     blades_mrf
28     {
29         type      zeroGradient;
30     }
31     disc_mrf
32     {
33         type      zeroGradient;
34     }
35     shaft_mrf

```

```

37     {
38         type                zeroGradient;
39     }
40     wall_side
41     {
42         type                zeroGradient;
43     }
44     wall_bottom
45     {
46         type                zeroGradient;
47     }
48     wall_top
49     {
50         type                zeroGradient;
51     }
52     cyclic_stat_1
53     {
54         type                cyclicAMI;
55     }
56     cyclic_stat_2
57     {
58         type                cyclicAMI;
59     }
60     cyclic_rot_1
61     {
62         type                cyclicAMI;
63     }
64     cyclic_rot_2
65     {
66         type                cyclicAMI;
67     }
68 }
69 // * * * * *
70
71 /*-----* C++ *-----*/
72
73 2  =====
74 3  \ \ \ \ / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
75 4  \ \ \ \ / O p e r a t i o n | Website:  https://openfoam.org
76 5  \ \ \ \ / A n d             | Version:   7
77 6  \ \ \ \ / M a n i p u l a t i o n |
78
79 \*-----*/
80 FoamFile
81 {
82     version      2.0;
83     format       ascii;
84     class        volVectorField;
85     object       U;
86 }
87 // * * * * *
88
89 dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];

```

```

18 internalField    uniform (0 0 0);
20
21 boundaryField
22 {
23
24     wall_side
25     {
26         type          noSlip;
27     }
28     wall_top
29     {
30         type          noSlip;
31     }
32     wall_bottom
33     {
34         type          noSlip;
35     }
36     disc_mrf
37     {
38         type          noSlip;
39     }
40     blades_mrf
41     {
42         type          noSlip;
43     }
44     shaft_mrf
45     {
46         type          noSlip;
47     }
48     shaft_rotating
49     {
50         type          rotatingWallVelocity;
51         origin        (0 0 0);
52         axis          (0 0 1);
53         omega         10.3166221; // [rad/s]
54     }
55     cyclic_stat_1
56     {
57         type          cyclicAMI;
58     }
59     cyclic_stat_2
60     {
61         type          cyclicAMI;
62     }
63     cyclic_rot_1
64     {
65         type          cyclicAMI;
66     }
67     cyclic_rot_2
68     {

```

```

    type                cyclicAMI;
70     }

72 }

74 // *****

/*----- C++ -----*/
2  ===== |
   \|      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \|      /  O peration  | Website:  https://openfoam.org
   \|      /  A nd        | Version:   7
6  \|      /  M anipulation |
/*-----*/

8 FoamFile
{
10     version      2.0;
    format        ascii;
12     class        dictionary;
    location      "constant";
14     object        MRFPProperties;
}

16 // * * * * *

18 MRF
{
20     cellZone      MRF;
    active          yes;

22     // Fixed patches (by default they 'move' with the MRF zone)
24     nonRotatingPatches (wall_side wall_bottom wall_top cyclic_stat_1 cyclic_stat_2);

26     origin        (0.0 0.0 0.0);
    axis            (0 0 1);
28     omega          constant 10.3166221;
}

30 // *****

1 /*----- C++ -----*/
   ===== |
3  \|      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   \|      /  O peration  | Version:   4.x
5  \|      /  A nd        | Web:       www.OpenFOAM.org
   \|      /  M anipulation |
7 /*-----*/

FoamFile

```

```

9  {
    version      2.0;
11  format       ascii;
    class       dictionary;
13  object       transportProperties;
}
15 // * * * * *

17 transportModel  Newtonian;

19 nu              nu [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 0.001095578;

21 // *****

1 /*-----* C++ *-----*/
   |||||
3  \\\ /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   \\\ /  O peration  | Website:  https://openfoam.org
5  \\\ /  A nd        | Version:   8
   \\\ /  M anipulation |
7  \*-----*/
FoamFile
9  {
    version      2.0;
11  format       ascii;
    class       dictionary;
13  location      "constant";
    object       momentumTransport;
15 }
// * * * * *

17 simulationType  laminar;

19

21 // *****

1 /*-----* C++ *-----*/
   |||||
3  \\\ /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   \\\ /  O peration  |
5  \\\ /  A nd        | Copyright (C) 2016 Ehsan Madadi-Kandjani
   \\\ /  M anipulation |
7  \*-----*/
FoamFile
9  {
    version      2.0;
11  format       ascii;

```



```

13     class      dictionary;
        object      blockMeshDict;
    }
15 // * * * * *
17 convertToMeters 0.001;

19 // * * * * *

21 // mesh params
    // -----

23         // numbers of cells on each edge

25     r_in      26;
    r_out      20;

27

    h_low      35;
29     h_mid      20;
    h_up      30;

31

    circ      21;

33

        // grading on each edge (equal to 1 if not specified)
35     r_out_grad  0.3;

37     h_low_grad  0.3;
    h_up_grad  2.0;
39 // -----

41 vertices
43 (
    (-116 0 -58.2) // Vertex 0
45     (-50 0 -58.2) // Vertex 1
    (0 50 -58.2) // Vertex 2
47     (0 116 -58.2) // Vertex 3

49     (-8.99 0 -58.2) // Vertex 4
    (0 8.99 -58.2) // Vertex 5

51

    (-116 0 86.1) // Vertex 6
53     (-50 0 86.1) // Vertex 7
    (0 50 86.1) // Vertex 8
55     (0 116 86.1) // Vertex 9

57     (-8.99 0 86.1) // Vertex 10
    (0 8.99 86.1) // Vertex 11

59

    (-116 0 116.1) // Vertex 12
61     (-50 0 116.1) // Vertex 13
    (0 50 116.1) // Vertex 14

```

```

63      (0 116 116.1) // Vertex 15

65      (-8.99 0 116.1) // Vertex 16
        (0 8.99 116.1) // Vertex 17

67

69      (-116 0 202.8) // Vertex 18
        (-50 0 202.8) // Vertex 19
        (0 50 202.8) // Vertex 20
71      (0 116 202.8) // Vertex 21

73      (-8.99 0 202.8) // Vertex 22
        (0 8.99 202.8) // Vertex 23

75

77      (116 0 -58.2) // Vertex 24
        (50 0 -58.2) // Vertex 25
        (8.99 0 -58.2) // Vertex 26

79

81      (116 0 86.1) // Vertex 27
        (50 0 86.1) // Vertex 28
        (8.99 0 86.1) // Vertex 29

83

85      (116 0 116.1) // Vertex 30
        (50 0 116.1) // Vertex 31
        (8.99 0 116.1) // Vertex 32

87

89      (116 0 202.8) // Vertex 33
        (50 0 202.8) // Vertex 34
        (8.99 0 202.8) // Vertex 35

91    );

93    blocks

95    (
        //block0
97      hex (0 1 2 3 6 7 8 9)
        ($r_out $circ $h_low)
99      simpleGrading ($r_out_grad 1 $h_low_grad)

101     //block1
        hex (1 4 5 2 7 10 11 8)
103      ($r_in $circ $h_low)
        simpleGrading (1 1 $h_low_grad)

105     //block2
        hex (6 7 8 9 12 13 14 15)
107      ($r_out $circ $h_mid)
109      simpleGrading ($r_out_grad 1 1)

111     //block3
        hex (7 10 11 8 13 16 17 14)
113      ($r_in $circ $h_mid)

```

```

simpleGrading (1 1 1)
115
//block4
117 hex (12 13 14 15 18 19 20 21)
($r_out $circ $h_up)
119 simpleGrading ($r_out_grad 1 $h_up_grad)

121 //block5
hex (13 16 17 14 19 22 23 20)
123 ($r_in $circ $h_up)
simpleGrading (1 1 $h_up_grad)
125

//block6
127 hex (3 2 25 24 9 8 28 27)
($r_out $circ $h_low)
129 simpleGrading ($r_out_grad 1 $h_low_grad)

131 //block7
hex (2 5 26 25 8 11 29 28)
133 ($r_in $circ $h_low)
simpleGrading (1 1 $h_low_grad)
135

//block8
137 hex (9 8 28 27 15 14 31 30)
($r_out $circ $h_mid)
139 simpleGrading ($r_out_grad 1 1)

141 //block9
hex (8 11 29 28 14 17 32 31)
143 ($r_in $circ $h_mid)
simpleGrading (1 1 1)
145

//block10
147 hex (15 14 31 30 21 20 34 33)
($r_out $circ $h_up)
149 simpleGrading ($r_out_grad 1 $h_up_grad)

151 //block11
hex (14 17 32 31 20 23 35 34)
153 ($r_in $circ $h_up)
simpleGrading (1 1 $h_up_grad)
155

157 );
159
edges
161 (
    arc 4 5 (-6.35688996 6.35688996 -58.2)
163    arc 0 3 (-82.0243886 82.0243886 -58.2)
    arc 1 2 (-35.3553391 35.3553391 -58.2)

```

```

165         arc 10 11 (-6.35688996 6.35688996 86.1)
167         arc 6 9 (-82.0243886 82.0243886 86.1)
          arc 7 8 (-35.3553391 35.3553391 86.1)
169
          arc 16 17 (-6.35688996 6.35688996 116.1)
171         arc 12 15 (-82.0243886 82.0243886 116.1)
          arc 13 14 (-35.3553391 35.3553391 116.1)
173
          arc 22 23 (-6.35688996 6.35688996 202.8)
175         arc 18 21 (-82.0243886 82.0243886 202.8)
          arc 19 20 (-35.3553391 35.3553391 202.8)
177
          arc 5 26 (6.35688996 6.35688996 -58.2)
179         arc 3 24 (82.0243886 82.0243886 -58.2)
          arc 2 25 (35.3553391 35.3553391 -58.2)
181
          arc 11 29 (6.35688996 6.35688996 86.1)
183         arc 9 27 (82.0243886 82.0243886 86.1)
          arc 8 28 (35.3553391 35.3553391 86.1)
185
          arc 17 32 (6.35688996 6.35688996 116.1)
187         arc 15 30 (82.0243886 82.0243886 116.1)
          arc 14 31 (35.3553391 35.3553391 116.1)
189
          arc 23 35 (6.35688996 6.35688996 202.8)
191         arc 21 33 (82.0243886 82.0243886 202.8)
          arc 20 34 (35.3553391 35.3553391 202.8)
193
    );
195
    patches
197 (
        wall wall_side
199 (
            (0 3 9 6)
201            (6 9 15 12)
            (12 15 21 18)
203            (3 24 27 9)
            (9 27 30 15)
205            (15 30 21 33)
        )
207
        wall wall_bottom
209 (
            (0 1 2 3)
211            (1 4 5 2)
            (2 5 26 25)
213            (3 2 25 24)
        )
215

```

```

    wall wall_top
217  (
    (18 19 20 21)
219  (19 22 23 20)
    (20 23 35 34)
221  (21 20 34 33)
    )

223  patch cyclic-stat1
225  (
    (0 1 7 6)
227  (1 4 10 7)
    (6 7 13 12)
229  (12 13 19 18)
    (13 16 22 19)
231  )

233  patch cyclic-stat2
    (
235  (26 25 28 29)
    (25 24 27 28)
237  (28 27 30 31)
    (32 31 34 35)
239  (31 30 33 34)
    )

241  patch cyclic-rot1
243  (
    (7 10 16 13)
245  )

247  patch cyclic-rot2
    (
249  (29 28 31 32)
    )

251  /*
253  patch MRInterface
    (
255  (7 13 14 8)
    (13 16 17 14)
257  (7 10 11 8)
    (14 17 32 31)
259  (8 11 29 28)
    (8 28 31 14)
261  )
    */
263  );

1  /*-----* C++ *-----*\
    ==
3  \\\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox

```

```

    O peration      | Website : https://openfoam.org
A nd               | Version : 8
M anipulation     |
}
FoamFile
{
    version          2.0;
    format           ascii;
    class            dictionary;
    location         "system";
    object           controlDict;
}
// * * * * *
application        simpleFoam;

startFrom          startTime;

startTime          0;

stopAt             endTime;

endTime            4000;

deltaT             1;

writeControl       runtime;

writeInterval      1000;

purgeWrite         0;

writeFormat        ascii;

writePrecision     6;

writeCompression   off;

timeFormat         general;

timePrecision      7;

runtimeModifiable yes;

adjustTimeStep     no;

maxCo              1;

maxDeltaT          0.04;

functions

```

```

55 {
    forces_1
57 {
    type forces;
59 functionObjectLibs ("libforces.so");
    writeControl timeStep;
61 writeInterval 500;
    patches (wall_side wall_bottom wall_top);
63 rho rhoInf;
    log true;
65 rhoInf 1000;
    CofR (0 0 0);
67 }
    forces_2
69 {
    type forces;
71 functionObjectLibs ("libforces.so");
    writeControl timeStep;
73 writeInterval 500;
    patches (shaft_rotating blades_mrf shaft_mrf disc_mrf);
75 rho rhoInf;
    log true;
77 rhoInf 1000;
    CofR (0 0 0);
79 }
}

81

83 // ***** //

1 /*----- C++ -----*\
   |||||
3  \ \ \ \ \ F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   \ \ \ \ \ O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5  \ \ \ \ \ A n d | Version: 7
   \ \ \ \ \ M a n i p u l a t i o n |
7 \|*-----*/

FoamFile
9 {
    version      2.0;
11 format        ascii;
    class        dictionary;
13 location       "system";
    object        fvSchemes;
15 }
// * * * * * //

17 ddtSchemes
19 {
    default        steadyState;
21 }

```

```

23 gradSchemes
24 {
25     default          cellMDLimited leastSquares 1;
26 }
27
28 divSchemes
29 {
30     default          none;
31
32     div(phi,U)          bounded Gauss linearUpwind grad(U);
33     div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
34 }
35
36 laplacianSchemes
37 {
38     default          Gauss linear corrected;
39 }
40
41 interpolationSchemes
42 {
43     default          linear;
44 }
45
46 snGradSchemes
47 {
48     default          corrected;
49 }
50
51 // *****
52
53 /*-----* C++ -----*/
54
55      //      F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
56      //      O peration  | Website:  https://openfoam.org
57      //      A nd        | Version:   7
58      //      M anipulation |
59
60 /*-----*/
61
62 FoamFile
63 {
64     version      2.0;
65     format       ascii;
66     class        dictionary;
67     location     "system";
68     object       fvSolution;
69 }
70 // *****
71
72 solvers
73 {
74
75     p
76     {

```



```

23         solver          PCG;
           preconditioner  DIC;
25         tolerance      1e-6;
           relTol         0.001;
27     }

29     pFinal
    {
31         $p;
           relTol         0;
33     }

35     pcorr
    {
37         $p;
    }
39
41     U
    {
           solver          smoothSolver;
43         smoother        symGaussSeidel;
           tolerance      1e-07;
45         relTol         0.0001;
    }
47
49     UFinal
    {
           $U;
51         tolerance      1e-07;
           relTol         0;
53     }

55 }

57 SIMPLE
59 {
           correctPhi      yes;
61     nNonOrthogonalCorrectors 0;

63     pRefCell            50000;
           pRefValue       0;
65 }

67 relaxationFactors
    {
69         fields
        {
71             p            0.5;
        }
73     equations

```

```

75     {
76         ".*"
77     }
78
79
80
81 // *****
82
83 /*-----* C++ -----*/
84
85 //
86
87 //
88
89 //
90
91 //
92
93 //
94
95 //
96
97 //
98
99 //
100
101 //
102
103 //
104
105 //
106
107 //
108
109 //
110
111 //
112
113 //
114
115 //
116
117 //
118
119 //
120
121 //
122
123 //
124
125 //
126
127 //
128
129 //
130
131 //
132
133 //
134
135 //
136
137 //
138
139 //
140
141 //
142
143 //
144
145 //
146
147 //
148
149 //
150
151 //
152
153 //
154
155 //
156
157 //
158
159 //
160
161 //
162
163 //
164
165 //
166
167 //
168
169 //
170
171 //
172
173 //
174
175 //
176
177 //
178
179 //
180
181 //
182
183 //
184
185 //
186
187 //
188
189 //
190
191 //
192
193 //
194
195 //
196
197 //
198
199 //
200
201 //
202
203 //
204
205 //
206
207 //
208
209 //
210
211 //
212
213 //
214
215 //
216
217 //
218
219 //
220
221 //
222
223 //
224
225 //
226
227 //
228
229 //
230
231 //
232
233 //
234
235 //
236
237 //
238
239 //
240
241 //
242
243 //
244
245 //
246
247 //
248
249 //
250
251 //
252
253 //
254
255 //
256
257 //
258
259 //
260
261 //
262
263 //
264
265 //
266
267 //
268
269 //
270
271 //
272
273 //
274
275 //
276
277 //
278
279 //
280
281 //
282
283 //
284
285 //
286
287 //
288
289 //
290
291 //
292
293 //
294
295 //
296
297 //
298
299 //
300
301 //
302
303 //
304
305 //
306
307 //
308
309 //
310
311 //
312
313 //
314
315 //
316
317 //
318
319 //
320
321 //
322
323 //
324
325 //
326
327 //
328
329 //
330
331 //
332
333 //
334
335 //
336
337 //
338
339 //
340
341 //
342
343 //
344
345 //
346
347 //
348
349 //
350
351 //
352
353 //
354
355 //
356
357 //
358
359 //
360
361 //
362
363 //
364
365 //
366
367 //
368
369 //
370
371 //
372
373 //
374
375 //
376
377 //
378
379 //
380
381 //
382
383 //
384
385 //
386
387 //
388
389 //
390
391 //
392
393 //
394
395 //
396
397 //
398
399 //
400
401 //
402
403 //
404
405 //
406
407 //
408
409 //
410
411 //
412
413 //
414
415 //
416
417 //
418
419 //
420
421 //
422
423 //
424
425 //
426
427 //
428
429 //
430
431 //
432
433 //
434
435 //
436
437 //
438
439 //
440
441 //
442
443 //
444
445 //
446
447 //
448
449 //
450
451 //
452
453 //
454
455 //
456
457 //
458
459 //
460
461 //
462
463 //
464
465 //
466
467 //
468
469 //
470
471 //
472
473 //
474
475 //
476
477 //
478
479 //
480
481 //
482
483 //
484
485 //
486
487 //
488
489 //
490
491 //
492
493 //
494
495 //
496
497 //
498
499 //
500
501 //
502
503 //
504
505 //
506
507 //
508
509 //
510
511 //
512
513 //
514
515 //
516
517 //
518
519 //
520
521 //
522
523 //
524
525 //
526
527 //
528
529 //
530
531 //
532
533 //
534
535 //
536
537 //
538
539 //
540
541 //
542
543 //
544
545 //
546
547 //
548
549 //
550
551 //
552
553 //
554
555 //
556
557 //
558
559 //
560
561 //
562
563 //
564
565 //
566
567 //
568
569 //
570
571 //
572
573 //
574
575 //
576
577 //
578
579 //
580
581 //
582
583 //
584
585 //
586
587 //
588
589 //
590
591 //
592
593 //
594
595 //
596
597 //
598
599 //
600
601 //
602
603 //
604
605 //
606
607 //
608
609 //
610
611 //
612
613 //
614
615 //
616
617 //
618
619 //
620
621 //
622
623 //
624
625 //
626
627 //
628
629 //
630
631 //
632
633 //
634
635 //
636
637 //
638
639 //
640
641 //
642
643 //
644
645 //
646
647 //
648
649 //
650
651 //
652
653 //
654
655 //
656
657 //
658
659 //
660
661 //
662
663 //
664
665 //
666
667 //
668
669 //
670
671 //
672
673 //
674
675 //
676
677 //
678
679 //
680
681 //
682
683 //
684
685 //
686
687 //
688
689 //
690
691 //
692
693 //
694
695 //
696
697 //
698
699 //
700
701 //
702
703 //
704
705 //
706
707 //
708
709 //
710
711 //
712
713 //
714
715 //
716
717 //
718
719 //
720
721 //
722
723 //
724
725 //
726
727 //
728
729 //
730
731 //
732
733 //
734
735 //
736
737 //
738
739 //
740
741 //
742
743 //
744
745 //
746
747 //
748
749 //
750
751 //
752
753 //
754
755 //
756
757 //
758
759 //
760
761 //
762
763 //
764
765 //
766
767 //
768
769 //
770
771 //
772
773 //
774
775 //
776
777 //
778
779 //
780
781 //
782
783 //
784
785 //
786
787 //
788
789 //
790
791 //
792
793 //
794
795 //
796
797 //
798
799 //
800
801 //
802
803 //
804
805 //
806
807 //
808
809 //
810
811 //
812
813 //
814
815 //
816
817 //
818
819 //
820
821 //
822
823 //
824
825 //
826
827 //
828
829 //
830
831 //
832
833 //
834
835 //
836
837 //
838
839 //
840
841 //
842
843 //
844
845 //
846
847 //
848
849 //
850
851 //
852
853 //
854
855 //
856
857 //
858
859 //
860
861 //
862
863 //
864
865 //
866
867 //
868
869 //
870
871 //
872
873 //
874
875 //
876
877 //
878
879 //
880
881 //
882
883 //
884
885 //
886
887 //
888
889 //
890
891 //
892
893 //
894
895 //
896
897 //
898
899 //
900
901 //
902
903 //
904
905 //
906
907 //
908
909 //
910
911 //
912
913 //
914
915 //
916
917 //
918
919 //
920
921 //
922
923 //
924
925 //
926
927 //
928
929 //
930
931 //
932
933 //
934
935 //
936
937 //
938
939 //
940
941 //
942
943 //
944
945 //
946
947 //
948
949 //
950
951 //
952
953 //
954
955 //
956
957 //
958
959 //
960
961 //
962
963 //
964
965 //
966
967 //
968
969 //
970
971 //
972
973 //
974
975 //
976
977 //
978
979 //
980
981 //
982
983 //
984
985 //
986
987
```

```

    wall_side
45  {
        type triSurfaceMesh;
47      file "wall_side.stl";
    }
49  wall_bottom
    {
51      type triSurfaceMesh;
        file "wall_bottom.stl";
53  }
    wall_top
55  {
        type triSurfaceMesh;
57      file "wall_top.stl";
    }
59

61  //— Used to define MRF zone and refine mesh round the turbine
    MRF
63  {
        type searchableCylinder;
65      point1 (0.0 0.0 0.1161);
        point2 (0.0 0.0 0.0861);
67      radius 0.05;
    }
69 }

71
    castellatedMeshControls
73 {

75     maxLocalCells 3000000;

77     maxGlobalCells 5000000;

79     minRefinementCells 0;

81     nCellsBetweenLevels 3;

83     maxLoadUnbalance 0.10;

85     features
    (
87         {
                file "blades_mrf.eMesh";
89             level 0;
            }
91         {
                file "disc_mrf.eMesh";
93             level 0;
            }
    )

```

```

95         {
96             file "shaft_mrf.eMesh";
97             level 0;
98         }
99
100        {
101            file "shaft_rotating.eMesh";
102            level 0;
103        }
104
105        {
106            file "wall_side.eMesh";
107            level 0;
108        }
109
110        {
111            file "wall_top.eMesh";
112            level 0;
113        }
114
115        {
116            file "wall_bottom.eMesh";
117            level 0;
118        }
119
120    );
121
122    resolveFeatureAngle 10;
123
124    refinementSurfaces
125    {
126
127        blades_mrf
128        {
129            level (2 2);
130            faceType baffle;
131        }
132        shaft_mrf
133        {
134            level (0 0);
135        }
136        disc_mrf
137        {
138            level (2 2);
139        }
140
141        shaft_rotating
142        {
143            level (0 0);
144        }
145    }

```

```

    }
147
    wall_side
149    {
        level (0 0);
151
        faceZone wall_side;
153        cellZone wall_side;
        cellZoneInside inside;
155    }

    wall_top
157    {
159        level (0 0);

        faceZone wall_top;
161        cellZone wall_top;
163        cellZoneInside inside;
    }
    wall_bottom
165    {
167        level (0 0);
    }
169    MRF
    {
171        level (0 0);

        faceZone MRF;
173        cellZone MRF;
175        cellZoneInside inside;
    }
177 }

179 refinementRegions
    {
181         blades_mrf
            {
183                 mode distance;
                 levels ((0.002 2) (0.004 1));
185             }
        disc_mrf
187        {
            mode distance;
189            levels ((0.002 2) (0.004 1));
        }
191
193    }

195    locationInMesh (0.05 0.05 0); // Inside point

```

```

197     allowFreeStandingZoneFaces true;
198 }
199 // Settings for the snapping.
200 snapControls
201 {
202     nSmoothPatch 1; // was 5
203     tolerance 2.0;
204     nSolveIter 100;
205     nRelaxIter 10;
206     nFeatureSnapIter 10;
207     nFaceSplitInterval 10;
208     implicitFeatureSnap true;
209     explicitFeatureSnap false;
210     multiRegionFeatureSnap false;
211     avoidDiagonal false;
212 }
213 // Settings for the layer addition.
214 addLayersControls
215 {
216     relativeSizes false;
217     layers
218     {
219         "(wall_side|wall_bottom|wall_top)"
220         {
221             nSurfaceLayers 3;
222         }
223     }
224     expansionRatio 1.2;
225     finalLayerThickness 0.0008;
226     minThickness 0.0005;
227     nGrow 0;
228     featureAngle 110;

```

```

249     nRelaxIter 5;

251     nSmoothSurfaceNormals 1;

253     nSmoothNormals 3;

255     nSmoothThickness 10;

257     maxFaceThicknessRatio 0.5;

259     maxThicknessToMedialRatio 0.5;

261     minMedianAxisAngle 5;

263     nBufferCellsNoExtrude 0;

265     nLayerIter 50;

267     nRelaxedIter 20;
}
269 meshQualityControls
271 {
    #include "meshQualityDict"

273     relaxed
275     {
        maxNonOrtho 50;
277     }
}

279 writeFlags
281 (
);

283 mergeTolerance 1E-6;

285

287 // *****

1 /*-----* C++ -*-----*\
|=====|
|
3 | \ \      /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|
| \ \      /  O p e r a t i o n      | Version: 8
|
5 | \ \      /  A n d      | Website: www.openfoam.org
|
| \ \ /      M a n i p u l a t i o n      |
|

```

```

7  \*
FoamFile
9  {
    version      2.0;
11     format      ascii;
    class        dictionary;
13     object       surfaceFeaturesDict;
}
15  // * * * * *
17  shaft_rotating
{
19     surfaces
    (
21         "shaft_rotating.stl"
    );
23     includedAngle    170;
}
25  blades_mrf
27  {
    surfaces
29  (
        "blades_mrf.stl"
31  );
    includedAngle    170;
33  }
35  shaft_mrf
{
37     surfaces
    (
39         "shaft_mrf.stl"
    );
41     includedAngle    170;
}
43  disc_mrf
{
45     surfaces
    (
47         "disc_mrf.stl"
    );
49     includedAngle    170;
}
51  wall_side
{
53     surfaces
    (
55         "wall_side.stl"
    );
57     includedAngle    170;
}

```



```

    }
59 wall_top
61 {
        surfaces
63     (
            "wall_top.stl"
65     );
        includedAngle    170;
67 }

69 wall_bottom
71 {
        surfaces
73     (
            "wall_bottom.stl"
75     );
        includedAngle    170;
77 }

79 // *****

/*-----* C++ *-----*\
2 |=====|
  |      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 |      / O peration  | Version: 2.2.0
  |      / A nd        | Web:      www.OpenFOAM.org
6 |      /\ M anipulation |
  |
  |-----*\
8 FoamFile
  {
10     version      2.0;
    format        ascii;
12     class        dictionary;
    object        topoSetDict;
14 }

16 // * * * * *

18 // Do a synchronisation of coupled points after creation of any patches.
  // Note: this does not work with points that are on multiple coupled patches
20 //      with transformations (i.e. cyclics).
    pointSync false;

22 // Patches to create.

```

```

24 patches
25 (
26     {
27         name cyclic_rot_1;
28
29         // Dictionary to construct new patch from
30         patchInfo
31         {
32             type cyclicAMI;
33             neighbourPatch cyclic_rot_2;
34             transform rotational;
35             rotationAxis (0 0 1);
36             rotationCentre (0 0 0);
37             matchTolerance 1E-2;
38         }
39
40         constructFrom patches;
41         patches (cyclic-rot1);
42     }
43     {
44         name cyclic_rot_2;
45
46         // Dictionary to construct new patch from
47         patchInfo
48         {
49             type cyclicAMI;
50             neighbourPatch cyclic_rot_1;
51             transform rotational;
52             rotationAxis (0 0 1);
53             rotationCentre (0 0 0);
54             matchTolerance 1E-2;
55         }
56
57         constructFrom patches;
58         patches (cyclic-rot2);
59     }
60     {
61         name cyclic_stat_1;
62
63         // Dictionary to construct new patch from
64         patchInfo
65         {
66             type cyclicAMI;
67             neighbourPatch cyclic_stat_2;
68             transform rotational;
69             rotationAxis (0 0 1);
70             rotationCentre (0 0 0);
71             matchTolerance 1E-2;
72         }
73
74         constructFrom patches;

```

```

76     }
77     {
78         name cyclic_stat_2;

80         // Dictionary to construct new patch from
            patchInfo
82         {
            type cyclicAMI;
84             neighbourPatch cyclic_stat_1;
            transform rotational;
86             rotationAxis      (0 0 1);
            rotationCentre      (0 0 0);
88             matchTolerance 1E-2;
        }

90         constructFrom patches;
92         patches (cyclic-stat2);
93     }
94 );
// * * * * *

```

Bibliografia

- [1] P. Alexandridis e T. A. Hatton. “Amphiphilic copolymers and their applications”. In: *Current Opininion in Colloid and Interface Science* 1.4 (1996), pp. 490–501.
- [2] P. Alexandridis e T. A. Hatton. “Poly(ethylene oxide)-poly(propylene oxide)-poly(ethylene oxide) block copolymer surfactants in aqueous solutions and at interfaces: thermodynamics, structure, dynamics, and modeling”. In: *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 96.1 (1995), pp. 1–46.
- [3] P. Alexandridis e B. Lindman. *Amphiphilic Block Copolymers - Self-Assembly and Applications*. Elsevier, 2000.
- [4] Bengt Andersson et al. *Computational fluid dynamics for engineers*. Cambridge university press, 2011.
- [5] R.B. Bird, E.N. Lightfoot e W.E. Stewart. *Transport Phenomena*. John Wiley Sons, 2002.
- [6] F.B. INOX - Fondi Bombati ed affini in acciaio Inossidabile. 2013. URL: <https://www.fbinox.com/IT/prodotti/FB5.asp>.
- [7] H. Hoffmann G. Wanka e W. Ulbricht. “Phase Diagrams and Aggregation Behavior of Poly(oxyethylene)-Poly(oxypropylene)-Poly(oxyethylene) Triblock Copolymers in Aqueous Solutions”. In: *Macromolecules* 27.41 (1994), pp. 45–59.
- [8] Ramesh R. Hemrajani e Gary B. Tatterson. “Computational Fluid Mixing”. In: *Handbook of Industrial Mixing*. John Wiley Sons, Ltd, 2003. Cap. 5, pp. 257–344.
- [9] Ramesh R. Hemrajani e Gary B. Tatterson. “Experimental Methods”. In: *Handbook of Industrial Mixing*. John Wiley Sons, Ltd, 2003. Cap. 4, pp. 146–256.
- [10] Ramesh R. Hemrajani e Gary B. Tatterson. “Mechanically Stirred Vessels”. In: *Handbook of Industrial Mixing*. John Wiley Sons, Ltd, 2003. Cap. 6, pp. 345–390.
- [11] Ramesh R. Hemrajani e Gary B. Tatterson. “Mixing in Pipelines”. In: *Handbook of Industrial Mixing*. John Wiley Sons, Ltd, 2003. Cap. 7, pp. 391–477.
- [12] Marek Jaszczur, Anna Młynarczykowska e Luana Demurtas. “Effect of Impeller Design on Power Characteristics and Newtonian Fluids Mixing Efficiency in a Mechanically Agitated Vessel at Low Reynolds Numbers”. In: *Energies (Basel)* 13.3 (2020), p. 640.
- [13] Suzanne M. Kresta et al. “Flow Patterns and Mixing”. In: *Advances in Industrial Mixing*. John Wiley Sons, Incorporated, 2015. Cap. 6b, pp. 153–189.
- [14] R.G. Larson. *The Structure and Rheology of Complex Fluids*. Oxford University Press, 1999.

- [15] Li Liangchao et al. “CFD Study on the Flow Field and Power Characteristics in a Rushton Turbine Stirred Tank in Laminar Regime”. In: *International journal of chemical reactor engineering* 17.11 (2019).
- [16] A. B. Metzner e R. E. Otto. “Agitation of non-Newtonian fluids”. In: *AIChE Journal* 3.1 (1957), pp. 3–10.
- [17] James Y. Nagata S. Oldshue. “Mixing—principles and applications”. In: *AIChE Journal* 22.2 (1975), pp. 412–413.
- [18] *OpenFOAM*. 2020. URL: <https://openfoam.org/>.
- [19] *Introduction*. 2020. URL: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v8-introduction/#x3-20001>.
- [20] *OpenFOAM cases*. 2020. URL: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v8-cases/#x15-1210004>.
- [21] *Mesh generation and conversion*. 2020. URL: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v8-mesh/#x23-1670005>.
- [22] D. Zhou P. Alexandridis e A. Khan. “Lyotropic liquid crystallinity in amphiphilic block copolymers: temperature effects on phase behavior and structure for poly (ethylene oxide)-b-poly (propylene oxide)-b-poly (ethylene oxide) copolymers of different composition”. In: *Langmuir* 12.2 (1996), pp. 690–700.
- [23] Anaïs Pitto-Barry e Nicolas P. E. Barry. “Pluronic® block-copolymers in medicine: from chemical and biological versatility to rationalisation and clinical advances”. In: *Polym. Chem.* 5.10 (2014), pp. 3291–3297.
- [24] J.F. Richardson e R.P. Chhabra. *Non-Newtonian flow in the process industries: fundamentals and engineering applications*. Butterworth-Heinemann, 1999.
- [25] J.H. Rushton, E.W. Costich e H.J. Everett. “Power characteristics of mixing impellers”. In: *Chemical Engineering Progress* 46.2 (1950), p. 640.
- [26] A. Scargiali F. and Busciglio et al. “Power Consumption in Uncovered Unbaffled Stirred Tanks: Influence of the Viscosity and Flow Regime”. In: *Industrial engineering chemistry research* 52.42 (2013), pp. 14998–15005.
- [27] F. Scargiali et al. “On the assessment of power consumption and critical impeller speed in vortexing unbaffled stirred tanks”. In: *Chemical engineering research design* 123 (2017), pp. 99–110.
- [28] *Non-Newtonian Models*. 2011. URL: <https://www.simscale.com/docs/simulation-setup/materials/non-newtonian-models/>.
- [29] T.A. Witten et al. *Structured Fluids: Polymers, Colloids, Surfactants*. Oxford University Press, 2004.
- [30] Shuai Ye et al. “Improving Initial Guess for the Iterative Solution of Linear Equation Systems in Incompressible Flow”. In: *Mathematics (Basel)* 8.1 (2020), p. 119.