

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

Effetto delle diverse forze interfacciali nelle simulazioni fluidodinamiche di colonne a bolle



Relatori

Antonio Buffo
Marco Vanni

.....
.....

Candidato

Lorenzo Puliserti

Dicembre 2018

Indice

1. Introduzione.....	1
1.1 I sistemi gas liquido.....	1
1.1.1 Generalità sui sistemi gas-liquido.....	1
1.1.2 Le colonne a bolle.....	2
1.1.3 Cenni di fluidodinamica delle colonne a bolle.....	3
1.1.4 Il regime omogeneo.....	4
1.2 Simulazioni fluidodinamiche su colonne a bolle.....	5
2. Principi teorici.....	10
2.1 Equazioni che governano il sistema.....	10
2.1.1 Predizione della popolazione di particelle e funzione numero di densità (NDF).....	10
2.1.2 Bilancio di popolazione generalizzato GBPE.....	11
2.1.3 Momenti della funzione numero di densità e rispettive equazioni di trasporto.....	12
2.1.4 Evoluzione rispetto alla dimensione e alla composizione delle particelle.....	14
2.2 Analisi dei fenomeni di coalescenza e rottura.....	15
2.2.1 Introduzione.....	15
2.2.2 Modelli che descrivono i fenomeni di coalescenza e rottura.....	16
2.2.3 I modelli utilizzati in questo lavoro.....	17
2.3 Analisi delle forze interfacciali.....	18
2.3.1 Introduzione.....	18
2.3.2 Forza di drag.....	19
2.3.3 Contributo della gravità, della forza di galleggiamento e della forza di drag.....	24
2.3.4 Forza di lift.....	24
2.3.5 Forze di disperisione turbolenta e wall lubrication.....	27
2.3.6 Cenni sulla forza di massa virtuale.....	28
3. Metodi e strumenti.....	29
3.1 La fluidodinamica computazionale.....	29
3.1.1 Soluzione numerica per equazioni non risolvibili analiticamente.....	29
3.1.2 Cenni di fluidodinamica computazionale per sistemi turbolenti.....	31
3.2 Il software OpenFOAM.....	33
3.2.1 Applicazioni e librerie.....	34
3.2.2 Struttura delle simulazioni su OpenFOAM.....	34
3.2.3 Definizione della mesh.....	35
3.2.4 Il Post Processing.....	36
3.3 Metodi di risoluzione ed implementazione del GBPE.....	37
3.3.1 Limitatezza e realizzabilità del momento.....	38
3.3.2 Implementazione del modello in OpenFOAM.....	41
4. Descrizione dei casi esaminati e dettagli numerici.....	43
4.1 Colonna di Diaz.....	45
4.1.1 Introduzione.....	45
4.1.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni.....	47
4.2 Colonna di Deen.....	49
4.2.1 Introduzione.....	49
4.2.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni.....	52
4.3 Colonna di Zhang.....	54
4.3.1 Introduzione.....	54

4.3.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni.....	55
4.4 Colonna di Kulkarni.....	58
4.4.1 Introduzione.....	58
4.4.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni.....	60
5.Analisi dei risultati ottenuti.....	63
5.1 Colonna di Diaz.....	63
5.2 Colonna di Deen.....	70
5.2.1 Simulazione con la forza di Drag.....	70
5.2.2 Simulazione con Drag e Lift.....	73
5.2.3 Simulazione con Drag e Turbulent dispersion.....	74
5.2.4 Effetto combinato di Drag, Lift e Turbulent Dispersion.....	76
5.2.5 Simulazione del modello completo.....	76
5.3 Colonna di Zhang.....	80
5.3.1 Simulazione con la sola forza di Drag.....	80
5.3.2 Simulazione completa.....	81
5.4 Colonna di Kulkarni.....	81
6.Conclusioni.....	85
Bibliografia.....	87

Capitolo 1

Introduzione

1.1 I sistemi gas-liquido

1.1.1 Generalità sui sistemi gas-liquido

I sistemi gas-liquido sono molto utilizzati nell'industria chimica. Si possono trarre esempi da molte fasi di un processo chimico: serbatoi in cui si scalda una sostanza per portarla ad ebollizione, reattori in cui un reagente è liquido ed un altro è in fase gas, sistemi agitati, processi di separazione, quali assorbimento, distillazione, barilotti di flash, e altro ancora. È pertanto importante studiare le caratteristiche ed i principi di questi sistemi al fine di migliorare l'efficienza dei fenomeni di trasporto per ottenere un miglioramento nelle rese dei processi in cui questi sistemi sono coinvolti. L'approccio di studio e progetto di questi sistemi è generalmente di natura empirica e semi empirica, con correlazioni formulate in seguito a prove sperimentali. Questi sistemi sono caratterizzati da una fase continua ed una fase dispersa, le quali interagiscono e da questo dipendono i fenomeni di trasporto. Queste interazioni possono essere continue o discontinue in base alla scala di spazio e tempo considerata: per dimensioni infinitesime il processo è continuo, mentre per scale di dimensioni superiori il processo è discontinuo. Questi fenomeni incidono sull'area di interfaccia tra le due fasi, modificando il coefficiente di trasporto e di conseguenza l'efficienza di trasferimento della proprietà studiata. È pertanto cruciale studiare il legame tra questi aspetti fluidodinamici ed i fenomeni di trasporto, in quanto i regimi solitamente studiati dipendono da questi fenomeni. Un cenno doveroso va fatto alle apparecchiature in cui i sistemi gas-liquido sono presenti. Nell'industria chimica ci sono varie apparecchiature, quali bollitori o condensatori in cui queste due fasi sono presenti, ma un ruolo importante viene ricoperto dai reattori gas-liquido. In questi ci sono due fasi fluide: liquido e gas. Il meccanismo consiste nell'assorbimento in fase di un reagente in cui entrano in gioco i meccanismi di trasporto citati prima, e nella reazione chimica vera e propria. Ci sono due famiglie di reattori gas-liquido: un primo gruppo in cui viene rimosso un componente indesiderato da una corrente gassosa (un esempio è la purificazione dei gas di scarico); il secondo gruppo invece ha come obiettivo la produzione di una molecola di prodotto desiderato. Pertanto ci sono due fini: uno produttivo ed uno di purificazione. Esempi tipici di questi sistemi sono la rimozione di idrogeno e anidride carbonica in seguito al reforming di idrocarburi, ad opera di un reagente liquido di natura basica (ad esempio la monoetanoammina, MEA); altri esempi sono l'idrogenazione del benzene o la sintesi di acido nitrico. Da un punto di vista industriale questi sistemi possono assumere diverse tipologie che dipendono dalla natura dei reagenti, dalle condizioni termodinamiche e dal catalizzatore impiegato. Si possono avere dei letti impaccati, reattori slurry (questi due sono sistemi trifase, in quanto il catalizzatore è un solido e si ha un reagente gassoso ed uno liquido), colonne a spray in cui il liquido è disperso in goccioline nella fase gassosa continua, colonne a bolle in cui il gas è disperso in bolle nella fase liquida continua che generalmente è stagnante. Quest'ultimo caso è un reattore semi batch o fed batch. I casi studiati in questo lavoro sono colonne a bolle in cui i componenti sono aria ed acqua, pertanto non ci sono reazioni chimiche. Pertanto si studia la fluidodinamica delle colonne a bolle di quattro differenti geometrie.

1.1.2 Le colonne a bolle

Le colonne a bolle sono contattori gas / liquido che vengono spesso utilizzati come reattori chimici. Non impiegano parti in movimento per produrre miscelazione, ma ottengono ciò solo dall'idrodinamica. Nella loro forma più semplice, le colonne a bolle sono strutture di forma cilindrica che a volte possono contenere camicie esterne, tubi o bobine interne per il controllo del trasferimento di calore. Ci possono essere versioni più complicate con down-comers interni o esterni per fornire il ricircolo del liquido e quindi un maggiore tempo di residenza del liquido. Qui la considerazione sarà focalizzata sul tipo più semplice senza inserimenti. Molte delle equazioni pubblicate per la progettazione di colonne a bolle sono correlazioni empiriche e, pertanto, le loro applicazioni dovrebbero essere limitate all'interpolazione. La fluidodinamica computazionale è stata applicata alle colonne a bolle e può dare buoni risultati. Importanti parametri geometrici nella progettazione di una colonna a bolle sono l'altezza della colonna, il diametro e la distribuzione, il tipo e la dimensione dei fori nell'iniettore del gas. Questi devono essere considerati insieme alle densità di gas e liquido, alla viscosità del liquido e alla presenza e concentrazione di sostanze chimiche, in particolare quelle che possono inibire la coalescenza a bolle, ad esempio sali, alcoli e altri tensioattivi.

In semplici colonne a bolle, sono stati identificati i seguenti regimi di flusso di base: flusso omogeneo o a bolle; flusso eterogeneo o agitato da turbolenza e flusso di slug. A basse portate di gas, con distributori di gas "fini" attentamente progettati, viene prodotto un flusso omogeneo. Questo assume la forma di piccole bolle che sono uniformemente disperse all'interno della colonna. A velocità di gas superiori, quando transita nel flusso eterogeneo, appaiono bolle più grandi che si intersecano tra quelle piccole. Con distributori "grezzi", il flusso eterogeneo viene prodotto a tutti gli ingressi del gas. In colonne di diametro ridotto (≤ 100 mm), a velocità del gas più elevate, le grandi bolle sono stabilizzate dalle pareti della colonna e il flusso diventa flusso irregolare. Mudde *et al.* (2009) hanno osservato che la maggior parte delle colonne di bolle industriali operano nella regione di regime di flusso eterogeneo. Nelle colonne della scala di laboratorio, è possibile in genere avere i seguenti tre regimi di flusso: omogeneo, eterogeneo, di transizione.

Un parametro importante nel design delle colonne a bolle è l'hold-up di gas che, insieme alle dimensioni della bolla, determina l'area di interfaccia gas-liquido, che è fondamentale per il trasferimento di massa tra le fasi. L'hold-up di gas è definito come il rapporto tra il volume della fase gassosa e il volume totale della dispersione. Da esperimenti su colonne con diametri di 0,15, 0,225 e 0,4 m, Groen (2004) ha mostrato che c'è un piccolo effetto del diametro della colonna sulla relazione complessiva tra hold-up del gas e velocità del gas superficiale. Nel regime omogeneo l'altezza netta del liquido ha mostrato la diminuzione dell'hold-up di gas man mano che l'altezza della miscela a due fasi aumentava. Al contrario, nel regime eterogeneo, si vede una piccola differenza tra i dati di Letzel *et al.* (1999) (colonna a bolla alta 1,2 m con fori di diametro $200 \times 0,5$ mm) e quella di Cheng *et al.* (1998), il quale riguardava una colonna alta 10 m con misurazioni effettuate al livello di 5 m e fori di diametro 6 mm per l'ingresso dell'aria. Se si aumenta la viscosità del liquido, l'effetto principale è quello di ridurre l'hold-up di gas. Tuttavia, in alcuni casi, in particolare nel regime omogeneo, può essere segnalato un "duplice effetto" della viscosità, il quale fa aumentare l'hold-up e allo stesso tempo lo riduce, con un massimo che si verifica da qualche parte entro 1-10 mPa s. Anderson e Quinn (1970) hanno misurato l'hold-up di gas in una colonna a bolle con acqua a diversi livelli di purezza. Le impurità sopprimono la coalescenza di bolle e quindi aumentano l'hold-up di gas. Dal momento che l'acqua del rubinetto ha più impurità rispetto all'acqua deionizzata o distillata, non sorprende che il suo hold-up di gas fosse superiore a quello degli altri due. In un esperimento di Ribeiro e Mewes (2007) la concentrazione di sale nell'acqua è stata variata e ha comportato un aumento di hold-up di gas quando la concentrazione di sale è aumentata. Tuttavia, quando il contenuto di sale è ulteriormente aumentato, è stata osservata una caduta nel valore di hold-up di gas. È stato osservato che i tensioattivi possono influenzare l'hold-up di gas con un effetto duale. Si noti

che i sali (elettroliti) possono produrre i fenomeni Marangoni in modo simile alle sostanze organiche e quindi meritare il nome di "tensioattivi". Allo stesso modo, si è osservato che questi diversi effetti "doppi" si verificano anche quando erano presenti particelle solide, cioè in colonne a bolle di slurry. Nella tabella 1.1 è possibile osservare come variano le proprietà di diversi sistemi gas-liquido studiati a diverse portate di gas.

Table 11-3 Characteristics of Gas-Liquid Contacting Equipment^a

Type of Absorber	Typical Gas Velocity $\times 10^2$ (m/s)	Residence Time Distribution		Residence Time of Liquid	Fractional Liquid Holdup	$k_L \times 10^4$ (m/s)	a (m^2/m^3)	$k_{L,a} \times 10^2$ (s^{-1})
		Gas	Liquid					
Film type: packed column and trickle bed reactors	10-100	Plug	Plug	Very low	0.05-0.1	0.3-2	2-35	0.06-7
With gas dispersed as bubbles in liquids								
Bubble columns	1-30	Plug	Mixed	Unlimited	0.6-0.8	1-4	2.5-100	0.25-40
Packed bubble columns	1-20	Plug	Mixed	Unlimited	0.5-0.7	1-4	10-30	1-12
Bubble cap plate columns	50-200	Plug	Mixed	Unlimited	0.7-0.7	1-4	10-40	1-16
Plate columns without downcomers	50-300	Plug	Mixed	Limited variation	0.5-0.5	1-4	10-20	1-8
Mechanically agitated contactors	0.1-2	Mixed	Mixed	Unlimited	0.5-0.8	1-5	20-100	2-50
Horizontal pipeline contactors	5-300	Plug	Plug	Low	0.1-0.8	2-6	10-40	2-24
Static mixers	0.05-20	Plug	Plug	Low	0.01-0.99	1-20	10-100	10-200
With liquid dispersed in gas								
Spray columns	5-300	Mixed	Plug	Very low	—	0.5-1.5	2-15	0.1-2.25
Sieve plate in spray regime	100-300	Plug	Mixed	Unlimited	—	1-3	5-20	0.5-6

^aThese are comparative values only, based on air and water. See also Table 13-9.

Figura 1.1: Caratteristiche di alcuni sistemi gas-liquido a diverse portate di gas (immagine presa dal libro Handbook of industrial mixing di Edward L.Paul, Victor A. Atiemo-Obeng e Suzanne M. Kresta)

1.1.3 Cenni di fluidodinamica delle colonne a bolle

Sono state derivate moltissime equazioni per prevedere l'hold-up di gas nelle colonne a bolle. Molti di questi modelli sono empirici e non tengono conto del regime di flusso che è presente. Tre dei metodi sono basati su semplici modelli del flusso e corrispondono ai tre regimi. Nel primo, per il regime omogeneo, Wallis (1969) suggerì che l'accumulo di gas poteva essere determinato dal rapporto tra velocità del gas superficiale e velocità effettiva di risalita delle bolle. Si comprende che a una concentrazione più elevata la presenza di altre bolle ostacolerebbe l'aumento delle bolle. L'approccio di assestamento ostacolato di Richardson e Zaki (1954) è stato impiegato per spiegare questo effetto. Questi autori hanno proposto un fattore di correzione alla velocità delle bolle in uscita dalla colonna, che dipende da un numero di Reynolds basato sul diametro e sulla velocità di risalita della bolla. Ciò si traduce in un calcolo iterativo che permette di trovare il valore di hold-up. Nel secondo, il regime eterogeneo, l'hold-up di gas può essere calcolato dal rapporto tra la velocità del gas superficiale e la velocità effettiva delle bolle utilizzando il modello proposto da Zuber e Findlay (1965) in cui entra in gioco un termine che spiega gli effetti del profilo radiale sulla sezione trasversale e la velocità di deriva, ossia la velocità tipica delle bolle. Nel terzo, ossia nella transizione tra i due regimi, in cui l'hold-up passa attraverso un massimo all'aumento di portata di gas in ingresso, Krishna ed Ellemberger, (1996) hanno adottato un concetto più obsoleto di bolle "piccole e grandi" e hanno dedotto le proporzioni di bolle grandi e piccole dai risultati di esperimenti dinamici di disinnesto del gas, che è stato progettato per questo scopo. Hanno illustrato un tipico risultato sperimentale per un sistema aria / tetradecano in una colonna del diametro di 0,1 m con un'altezza iniziale di 1,2 m, che mostra la transizione quando l'hold-up passa attraverso un picco, come dovrebbe. Oltre il picco ricordano che le grandi bolle hanno iniziato a dare un contributo significativo all'hold-up del gas. L'hold-up di gas contenuto in piccole bolle è diventato indipendente dalla portata del gas a valori superiori a quelli critici. Per comprendere le regioni

omogenee e le regioni eterogenee è stato identificato un punto di transizione. Inoltre è stato assunto che una parte del flusso, la cui portata corrisponde al valore di transizione, scorre come piccole bolle. Qualsiasi portata di gas oltre questo valore scorre come bolle grandi. Inoltre le bolle più grandi sono state formate dalla coalescenza di quelle più piccole. Letzel *et al.* (1999) hanno derivato una correlazione empirica per prevedere direttamente l'accumulo di gas di grandi bolle e un metodo per combinare piccole e grandi bolle di gas. Al contrario, Krishna *et al.* (1996) calcolò la velocità di risalita della bolla grande dai metodi di Collins (1967) che consentivano l'effetto delle pareti della colonna.

Sono state identificate le forze rilevanti che influenzano la dimensione delle bolle formate negli orifizi. Questi sono stati modellati per i casi in cui ciascuna delle tre forze (inerzia, tensione superficiale e viscosità del liquido) era dominante. Ciò ha comportato una metodologia piuttosto ingombrante per prevedere le dimensioni delle bolle e quindi è stata sviluppata un'equazione esplicita relativamente semplice che ha dato un buon adattamento a tali modelli. Questa equazione ha mostrato di fornire previsioni ragionevoli delle dimensioni medie delle bolle per le colonne a bolle. Nel nostro lavoro l'attenzione viene posta sul regime omogeneo, in quanto è il regime fluidodinamico presente nelle colonne studiate alle condizioni imposte nei dati.

1.1.4 Il regime omogeneo

In questo regime l'andamento dell'hold-up di gas $\varepsilon_g(u_{gs})$ è tipicamente convesso a causa dell'effetto di impedimento e può essere applicato empiricamente da una legge di potenza con esponente maggiore di 1. Un approccio più solido utilizza una funzione di ostacolo, ad esempio l'equazione proposta da Richardson e Zaki (1954), che è ampiamente utilizzata e considerata una descrizione molto efficace,

$$u = k(1 - \varepsilon_g)^n \quad (1.1)$$

Qui k dovrebbe essere vicino alla velocità del terminale a bolle u_0 (che è spesso, ma non sempre, il caso). I valori degli esponenti n , che sono risultati essere maggiori di 0, indicano la forza dell'effetto di ostacolo. I valori tipici sono dell'ordine di unità. Tra le molte altre formule che esprimono questa velocità, c'è la seguente

$$u = u_0 \left(\frac{1 - a\varepsilon_g}{1 - \varepsilon_g} \right) \quad (1.2)$$

Ha due parametri con un chiaro significato fisico (un coefficiente a di derivazione idrodinamica di Darwin) e sarà usato anche sotto. Se si misurano u_g e ε_g e si ottiene $u = u_{gs} / \varepsilon_g$, i parametri di impedimento (k , n e u_0 , a) possono essere trovati adattando i dati con le equazioni precedenti. L'hold-up di gas omogeneo viene quindi descritto da una relazione implicita nella forma:

$$\varepsilon_g = \frac{u_{gs}}{u(\varepsilon_g)} \quad (1.3)$$

chiusa dalle equazioni (1.1) e (1.2). Con l'aumentare della portata del gas, si sviluppano le circolazioni del liquido e il regime omogeneo perde stabilità nel primo punto critico, u_{gs1} , dove si trasforma nel regime di transizione. Questo punto è contrassegnato da un equilibrio tra gli effetti di ostacolo ed accrescimento e i dati iniziano a deviare dalle equazioni di ostacolo.

In alternativa, è possibile utilizzare l'approccio del grafico del flusso di drift proposta da Wallis (1969).

1.2 Simulazioni fluidodinamiche su colonne a bolle

Per studiare questi sistemi è stata utilizzata la fluidodinamica computazionale. Il metodo principale di studio consiste nel formulare un modello, simularlo su un software e confrontarlo con i dati sperimentali. Se l'accordo è positivo il modello è valido per descrivere la fluidodinamica del sistema. Ci sono vari metodi di approccio matematico (meglio illustrati nel capitolo 3). Nel lavoro di Deen *et al.* (2001) è stato utilizzato il metodo LES (large eddy simulation) per studiare il flusso gas-liquido in una colonna a bolle. Per descrivere le equazioni del moto delle due fasi è stato utilizzato l'approccio Euleriano, descritto in seguito. In questo lavoro è stata dimostrata una maggior efficacia del metodo LES rispetto all'approccio RANS (Reynolds average Navier Stokes) con equazioni del modello k- ϵ , in termini di accordo dei risultati con i dati sperimentali. La predizione del comportamento fluidodinamico di sistemi gas-liquido in regime turbolento viene storicamente fatta con l'implicita assunzione di considerare separatamente le caratteristiche fluidodinamiche dall'evoluzione della fase dispersa. Tuttavia è possibile unire questi due aspetti in un unico modello matematico multidimensionale. Si tratta di un bilancio di popolazione che descrive le interazioni tra fase continua e fase dispersa, così come tutte le interazioni tra le bolle di gas disperse nella fase liquida. Questo modello, proposto da Buffo *et al.*, (2012), ha come obiettivo il calcolo degli effetti di queste interazioni sulla popolazione delle bolle disperse, e la stima della distribuzione della velocità, della dimensione e della composizione delle bolle, così come lo stato della fase liquida continua. Un altro studio su fenomeni di coalescenza e rottura delle bolle in un sistema multifase è stato fatto da Laakkonen *et al.*, (2006). In questo lavoro è stato studiato in un sistema agitato multifase (turbina Rushton da 194 dm³) il trasferimento di materia tra il gas ed il liquido insieme ai fenomeni di aggregazione delle bolle di gas disperse nella fase liquida continua. È stata misurata la distribuzione locale delle dimensioni delle bolle a diverse condizioni con la tecnica di aspirazione capillare. Questi dati sono stati confrontati con l'imaging digitale e l'anemometro Doppler in fase. Ci fu un accordo parziale causato probabilmente da limiti delle tecniche di misurazione. Nello studio è stato implementato un modello in cui il bilancio di popolazione risulta discretizzato ed il trasporto di massa viene studiato con la teoria dei due film di Maxwell-Stefan. Il modello considera le condizioni di trasferimento di materia all'interno del sistema agitato ed è sufficientemente semplice per ottimizzare matematicamente i parametri sconosciuti. Essi riguardano la coalescenza e la rottura delle bolle. Con essi è stato fatto un fitting contro la misurazione della distribuzione locale della dimensione delle bolle misurata sperimentalmente. Dopo fu regolato un parametro nella correlazione riguardante il trasferimento di materia in seguito a prove sperimentali inerenti all'assorbimento e al desorbimento dell'ossigeno. Sono state calcolate le aree di trasferimento di massa gas-liquido locali dal modello di equilibrio della popolazione. Le simulazioni con i modelli convalidati mostrano un buon accordo contro gli esperimenti. D'altra parte, i parametri adattati si discostano dai valori teorici, il che enfatizza la necessità di validazione del modello contro esperimenti accurati. A causa del loro carattere fondamentale e del processo di convalida, i modelli adattati sembrano essere strumenti utili per la progettazione e la scalabilità di reattori gas-liquido agitati. In un altro lavoro di Laakkonen *et al.*, (2007) è stato creato un modello per studiare la distribuzione dimensionale delle bolle con il bilancio di popolazione in un sistema multiblocco agitato. Sono entrati in gioco diversi parametri sconosciuti, adattati in seguito al confronto tra i dati sperimentali e le previsioni teoriche. Questo modello si è dimostrato un compromesso ottimale tra l'accuratezza ed il costo computazionale e le chiusure fenomenologiche e di coalescenza necessitano di validazioni sperimentali per vari casi sia in termini di flusso che in termini di ambiente. Spesso il sistema oggetto della simulazione può essere ricco di difficoltà, a causa di meccanismi fisici coinvolti e di particolari geometrie da investigare. Una di queste difficoltà consiste nel fatto che gli

elementi dispersi (bolle, particelle, ecc.) hanno una natura discreta e sono caratterizzati da diverse proprietà, come ad esempio dimensione e forma, massa e velocità, diametro e composizione. Un'altra difficoltà è rappresentata dalla presenza dei flussi multifase turbolenti in diversi contesti dell'ingegneria chimica, la cui applicazione riguarda diverse linee produttive: dalla chimica generale alla farmaceutica, fino all'industria alimentare. Pertanto è fondamentale comprendere a fondo i processi multifase nei suoi stati critici e transitori. Nel lavoro di Buffo *et al.* (2013) sono state classificate tre principali classi di metodi di studio di sistemi multifase: la prima è un tipo di approccio fully-resolved in cui gli elementi della fase dispersa e le loro interazioni con la fase continua sono risolti in maniera completa (senza trascurare nulla). Ciò comporta un elevatissimo costo computazionale. La seconda classe è costituita dall'approccio Lagrangiano. Esso offre una buona alternativa al primo, in quanto trascura i dettagli delle interazioni tra la fase dispersa e la fase continua circostante, abbassando il costo computazionale. La terza classe, basata sull'approccio Euleriano, rappresenta il giusto compromesso per descrivere e simulare problemi complessi su scala industriale. L'approccio Euleriano è stato utilizzato in uno studio condotto da Colombo e Fairweather (2015) per studiare le abilità di un modello multifase per predire il flusso di aria in un sistema aria acqua. Vengono considerati flussi verso l'alto e verso il basso confrontando i risultati ottenuti con questo approccio implementato con il metodo RANS, con 19 differenti esperimenti, al fine di valutare l'accuratezza del modello derivato. Particolare attenzione nel lavoro viene data alla predizione della turbolenza dovuta alla sua importanza nel progetto di sistemi multifase. Complessivamente, si ottiene un'accuratezza soddisfacente nella previsione delle velocità dei liquidi e delle distribuzioni delle frazioni di vuoti in tutte le condizioni, compresi i flussi verso l'alto e verso il basso e i profili del vuoto con picchi murari e del nucleo, quando i valori del diametro delle bolle sono specificati dai dati sperimentali. Data la sua importanza per la corretta previsione del livello di turbolenza in questi flussi, è stato introdotto un modello di turbolenza indotto da bolle, a partire da una formulazione esistente. I termini della sorgente dovuti alla resistenza sono stati inclusi nell'energia cinetica della turbolenza e le equazioni della velocità di dissipazione dell'energia della turbolenza del modello di turbolenza $k-\varepsilon$ e l'ottimizzazione della sorgente di turbolenza hanno fornito previsioni sulla fluttuazione della velocità in accordo con i dati sperimentali. Dopo il confronto con questi ultimi, è stato anche dimostrato un miglioramento nelle previsioni di altri modelli di turbolenza. In un altro studio di Colombo e Fairweather (2016) viene utilizzato l'approccio Euleriano per analizzare l'evoluzione del diametro delle bolle nel tempo utilizzando il modello S_γ , basato sul momento della distribuzione dimensionale delle bolle. I fenomeni che governano l'evoluzione sono principalmente coalescenza e rottura. Una limitazione dell'approccio Euleriano risiede nel fatto che tutti gli elementi della fase dispersa sono assunti identici in termini di proprietà chimico-fisiche. Per ovviare a questo problema è stato inserito il bilancio di popolazione nella formulazione del problema. Anche per questo ci sono molte soluzioni, non tutte però sono adatte ad essere implementate in simulazioni fluidodinamiche. Tra queste vale la pena ricordarne alcune. Uno dei primi metodi elaborati richiede la discretizzazione delle proprietà di interesse, come ad esempio le dimensioni delle particelle disperse, in classi o sezioni. Per ogni classe si doveva risolvere un'equazione di trasporto da implementare con un codice CFD, con una grossa spesa in termini di costo computazionale. Al fine di ridurre il costo computazionale si tende a minimizzare le classi da considerare con un risultato non ottimale per studi fluidodinamici, in quanto si ottengono dati frutto di grosse semplificazioni. Un'interessante alternativa a questo metodo consiste nel riscrivere il bilancio di popolazione in termini di momenti della distribuzione della proprietà di interesse. Questo metodo è conosciuto come metodo dei momenti e sarà utilizzato per risolvere il bilancio di popolazione in questo lavoro. Tuttavia in principio questo metodo fu ostacolato dalla cosiddetta chiusura del problema, la quale è generalmente ottenuta dalla ricostruzione della funzione numero di densità, data dal numero di particelle di una certa dimensione L nell'unità di volume, che caratterizza completamente il sistema. Solo recentemente è stata elaborata una soluzione per applicare questo metodo a problemi multivariabile. Esso è stato sperimentato in studi su sistemi multifase ed implementato con codici CFD. Il metodo

originale è chiamato metodo di quadratura dei momenti (oppure con l'acronimo inglese QMOM). La sua corretta implementazione richiede la derivazione delle equazioni di trasporto utilizzate in fluidodinamica ed il bilancio di popolazione, derivato dal bilancio di popolazione generalizzato (noto con l'acronimo inglese GBPE). Il metodo QMOM ha generato un'intera classe di soluzioni, note come metodi basati sulla quadratura dei momenti (noti anche con l'acronimo di QBMM). In un articolo di Buffo *et al.*, (2016) vengono discussi alcuni aspetti numerici cruciali riguardanti l'implementazione di metodi di momento basati sulla quadratura dei momenti (QBMM) nel codice CFD (Open Fluid Computational Fluid Dynamics) open source. Come ben noto questi metodi si basano sulla semplice idea di risolvere un'equazione cinetica principale, non in termini della funzione numero di densità (NDF), ma in termini dei momenti della NDF stessa, tramite equazioni di trasporto del momento. Questi aspetti numerici sono infatti spesso trascurati, risultando in implementazioni che non soddisfano le proprietà di limitatezza e realizzabilità per i momenti del NDF. La limitatezza è una proprietà importante (vale a dire, i momenti del NDF devono essere limitati tra alcuni valori minimi e massimi), che a sua volta dipende dalle condizioni iniziali e al contorno. Il limite può essere garantito utilizzando un approccio coerente rispetto ai vincoli imposti alle variabili di trasporto, come la frazione del volume di fase dispersa. La fattibilità è invece correlata all'esistenza di un NDF sottostante corrispondente a un momento specifico impostato. È noto che gli schemi di discretizzazione spaziale e temporale possono corrompere un momento impostato a meno che non siano specificamente progettati per preservarne la realizzabilità. Una di queste soluzioni, la quadratura condizionale del metodo dei momenti (nota con l'acronimo CQMOM) è stata utilizzata da Buffo *et al.*, (2016) per effettuare simulazioni che studiavano il comportamento di sistemi multifase polidispersi utilizzando il bilancio di popolazione. Nelle simulazioni effettuate è stata studiata la fluidodinamica di un colonna a bolle, per la cui geometria è nota come colonna di Diaz, implementando le equazioni che governano il sistema (equazioni di trasporto e bilancio di popolazione) con OpenFOAM, in particolare con il solver compressibleTwoPhaseEulerFoam. Lo scopo era di mostrare la relazione tra modelli fluidodinamici di sistemi multifase e il bilancio di popolazione. Le equazioni derivate sono state così derivate, implementate ed applicate al caso della colonna di Diaz. I risultati mostrano che questo metodo è in grado di descrivere in maniera adeguata le complesse interazioni tra la portata di fluido, coalescenza, rottura e trasporto di materia. Il tutto con un costo computazionale modesto. Questo è stato dimostrato da un buon accordo tra i dati raccolti nelle simulazioni riguardo a hold-up del gas, diametro medio di Sauter e periodo di oscillazione del pennacchio, con i valori sperimentali disponibili in letteratura. In uno studio di Buffo *et al.*, (2012) questo metodo, insieme al metodo di quadratura diretta dei momenti, è stato confrontato con il metodo di simulazione diretta Monte Carlo (DSMC) al fine di studiare la coalescenza, la rottura ed il trasporto di materia tra bolle di gas disperse in una fase liquida. I metodi dei momenti prima citati superano la chiusura del problema con un'approssimazione di quadratura, e vengono confrontati valutando le loro prestazioni in termini spaziali per sistemi omogenei e disomogenei. I metodi di quadratura dei momenti sono infine stati implementati al fine di studiare una colonna a bolle bidimensionale. Questi diversi metodi sono impiegati in una serie di casi tra cui molti esempi di reazioni chimiche veloci, al fine di evidenziare se il problema della coalescenza delle bolle, della rottura e del trasporto di materia ha davvero bisogno di un bilancio di popolazione bivariata da affrontare e qual è il numero ottimale di nodi per l'approssimazione della quadratura. In seguito è stato fatto un secondo studio su altri sistemi gas-liquido, in aggiunta alla colonna investigata nel primo studio, focalizzato su modelli di mesoscala per l'accoppiamento dei momenti, sullo "sciame" di bolle e sugli effetti delle turbolenze alla microscala presenti nel regime turbolento di queste apparecchiature. Sono stati studiati i casi di diversi sistemi con il liquido stagnante e il gas introdotto nel sistema a diverse portate, per studiare gli effetti del regime turbolento sul sistema gas-liquido, raccogliendo dati che sono stati confrontati con quelli sperimentali disponibili in letteratura, trovando anche per questo lavoro un buon accordo. È stato quindi utilizzato un modello con equazioni e correlazioni con molti coefficienti di natura empirica, spesso soggetti a diverse incertezze, dovute al fatto di non considerare incertezze sperimentali nella misurazione di grandezze fisiche legate al regime turbolento. Il motivo di questa

scelta risiede nel fatto che molti modelli sono stati derivati con forti assunzioni sulla distribuzione dimensionale delle bolle, considerando distribuzioni monodisperse senza contare fenomeni di coalescenza e rottura, tipici di questi sistemi in regime turbolento. Come anticipato prima, è stato trovato un buon accordo tra i valori sperimentali e quelli ottenuti con le simulazioni, specie per quanto riguarda le proprietà locali, come ad esempio velocità, frazione volumica di gas, energia cinetica turbolenta, velocità di dissipazione della turbolenza, distribuzione dimensionale delle bolle. Anche per le proprietà globali, come ad esempio hold-up di gas e periodo di oscillazione del pennacchio è stato trovato un buon accordo. La forza di trascinamento ha giocato un ruolo importante nella descrizione matematica dei sistemi determinando la distribuzione del gas e pertanto ha definito le velocità locali di coalescenza e rottura delle bolle. Questo dimostra che il modello proposto può essere utilizzato per una buona descrizione matematica dei sistemi in esame. È stata inoltre superata la problematica legata alla variabile di hold-up di gas: prima di questo modello essa veniva sottostimata ma ora la dimensione delle bolle prevista dal modello risulta in buon accordo con i valori sperimentali in diverse geometrie e condizioni. L'importanza di questi studi risiede nel fatto che sistemi gas-liquido sono presenti in moltissimi processi industriali. Ci sono varie apparecchiature (colonne a bolle, sistemi agitati, reattori) in cui è molto importante lavorare in regime turbolento, in quanto favorisce il trasporto di materia ed energia, permettendo la riduzione di tempi e costi di processo. La simulazione di sistemi gas-liquido in regime turbolento con modelli di fluidodinamica computazionale è molto rilevante, a causa del ruolo sempre più importante che gioca nel progetto, in termini di costruzione, scale up ed ottimizzazione, di impianti ed apparecchiature per l'industria chimica. Questi modelli superano la limitazione di correlazioni empiriche, unicamente valide per geometrie specifiche sotto particolari condizioni operative. L'approccio più comune per descrivere sistemi su larga scala che lavorano in condizioni industrialmente rilevanti è basato sull'idea di risolvere equazioni per alcune caratteristiche macroscopiche del sistema, come ad esempio la frazione volumica, o la velocità di gas e liquido. Si tratta di un approccio multi-fluido, o approccio Euleriano, nel quale queste proprietà macroscopiche sono momenti di una funzione numero di densità che definisce interamente il sistema studiato, la cui evoluzione nel tempo è descritta dal bilancio di popolazione generalizzato. Ogni fase presente nel sistema condivide una porzione di spazio disponibile (frazione volumica) ed interagisce con le altre fasi attraverso un accoppiamento di fase. Quest'ultimo rappresenta lo scambio ed il trasporto di materia, energia e momento tramite le interazioni tra le bolle oppure tra le bolle e il liquido. Ci sono molte variabili in gioco e nonostante ci siano forti semplificazioni nella maggior parte di questi modelli, questi ultimi vengono usati per studiare sistemi turbolenti ad elevata frazione volumica, che spesso portano a sovrastimare o sottostimare le principali caratteristiche fluidodinamiche dei sistemi studiati. Ciò rappresenta un problema per il trasporto del momento tra la fase liquida e la fase gas, determinato da forze interfacciali. Nell'ultimo lavoro citato sono stati studiati sistemi gas-liquido tenendo conto delle forze di gravità, trascinamento e galleggiamento agenti sulle bolle. In questo lavoro è stato posto come obiettivo una descrizione matematica degli stessi sistemi, in termini di geometria e condizioni operative, studiati nel 2016, con un modello più completo in cui si tengono in considerazione le forze interfacciali tra le bolle che sono state trascurate nel precedente studio, ossia dispersione turbolenta, lubrificazione a parete e trascinamento. Trascuriamo la massa virtuale. Per il caso della colonna di Diaz il nuovo modello viene implementato per studiare il sistema a tutte le portate analizzate nel lavoro di Buffo *et al.*, (2013), calcolando i valori di hold up, diametro medio di Sauter e periodo di oscillazione del pennacchio (POP), e confrontando gli stessi con i valori ottenuti sperimentalmente ed i valori ottenuti con il modello simulato nel 2013. Anche per la colonna di Deen, Zhang e Kulkarni l'obiettivo è un confronto di dati ottenuti sperimentalmente, dati ottenuti con il modello proposto nell'articolo di Buffo *et al.*, (2016) e dati raccolti con il nuovo modello proposto in questo lavoro. La scrittura di questa tesi prevede, oltre a questo capitolo introduttivo, un secondo capitolo in cui vengono descritti i principi teorici e le equazioni che governano il sistema, un terzo capitolo in cui si illustrano i metodi matematici e gli strumenti di calcolo utilizzati in questo lavoro. A questi tre capitoli introduttivi si aggiungono un quarto capitolo in cui di analizzano nel

dettaglio i casi (test case) studiati con il nostro modello, sono pertanto presenti una descrizione della tipologia i colonna ed esperimenti fatti su di essa a cui si aggiunge un'analisi dettagliata dell'impostazione della simulazione; un quinto capitolo in cui sono mostrati i risultati, con il confronto, anticipato sopra, tra i nuovi risultati ottenuti con quelli sperimentali e quelli del modello già esistente; infine un sesto capitolo conclusivo.

Capitolo 2

Principi Teorici

2.1 Equazioni che governano il sistema

2.1.1 Predizione della popolazione di particelle e funzione numero di densità (NDF)

Per studiare l'evoluzione della popolazione di particelle supponiamo che ogni particella sia caratterizzata da una dimensione. Per un sistema con un numero di particelle con un ordine molto elevato bisogna ricorrere a metodi statistici. Viene pertanto definita una funzione distributiva, detta funzione numero di densità, o NDF, che esprime la concentrazione espressa in numero di particelle di dimensione L nell'unità di volume. L'area sottesa tra due dimensioni L_1 e L_2 (si assume $L_1 > L_2$) fornisce il numero di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 . Integrando questa funzione tra 0 e $+\infty$ si ottiene il numero totale di particelle nel sistema per unità di volume indipendentemente dalla propria dimensione. Questa funzione non deve essere negativa e il suo integrale tra 0 e $+\infty$ deve dare un valore finito. Infatti per $L < 0$ la curva non ha significato fisico. Calcoliamo ora la funzione distributiva per un sistema miscelato. Supponiamo di conoscere la distribuzione di particelle in ingresso $n_e(L)$. Serve un'equazione per trovare $n(L)$, ma non essendo il regime stazionario la funzione n dipende anche dal tempo. Sarà pertanto $n(L, t)$. Per ricavare questa relazione è possibile scrivere un bilancio sul numero di particelle di dimensione compresa tra L_1 e L_2 contenute nel sistema. L'equazione di bilancio avrà 7 termini: il primo termine rappresenta la variazione del numero di particelle comprese tra L_1 e L_2 tra un istante di tempo t e l'istante successivo $t+dt$; il secondo termine è il numero di particelle di dimensioni comprese tra L_1 e L_2 in ingresso nel periodo considerato (t ; $t+dt$); il terzo termine è il numero di particelle di dimensioni comprese tra L_1 e L_2 in uscita nel periodo considerato (t ; $t+dt$); il quarto termine rappresenta la variazione del numero di particelle in seguito alla crescita che hanno superato L_1 uscendo dal range studiato; analogamente il quinto termine rappresenta la variazione del numero di particelle che per crescita hanno superato L_2 entrando così nel range studiato; il sesto ed il settimo termine tengono conto dei fenomeni di aggregazione e rottura e rappresentano il numero di particelle nate di dimensioni comprese tra L_1 e L_2 , ed il numero di particelle morte di dimensioni comprese tra L_1 e L_2 . In termini matematici diventa:

$$V \int_{L_2}^{L_1} \frac{dn(L, t)}{dt} dL = \int_{L_2}^{L_1} n \dot{V}_e dt dL - \int_{L_2}^{L_1} n \dot{V}_u dt dL + Vn(L_1)G(L_1)dt - Vn(L_2)G(L_2)dt + \int_{L_2}^{L_1} VB(n(L))dt dL - \int_{L_2}^{L_1} VD(n(L))dt dL \quad (2.1)$$

Con alcuni passaggi matematici, qui omissi, si ottiene:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial L}(Gn) = \frac{\dot{V}}{V}(n_e - n) + B - D \quad (2.2)$$

Questa espressione ci permette di calcolare la funzione di distribuzione. È un'equazione di 1° ordine sia rispetto a t che rispetto a L . Serve pertanto una condizione al contorno sia per il tempo che per la dimensione. La condizione inerente al tempo è legata allo stato iniziale del sistema, ovvero $n(L, t=0) = n_0$, mentre per la dimensione L assumiamo che:

$$n(L, t)|_{L=0} = 0 \quad (2.3)$$

2.1.2 Bilancio di popolazione generalizzato GBPE

Consideriamo un sistema multifase costituito da elementi dispersi in una fase continua. Esso può essere definito in termini di velocità delle particelle $v_p(v_{p1}, v_{p2}, v_{p3})$, coordinate interne delle particelle $\xi_p(\xi_{p1}, \xi_{p2}, \dots, \xi_{pm})$, velocità della fase fluida continua vista dalle particelle $v_f(v_{f1}, v_{f2}, v_{f3})$ e coordinate interne della fase continua vista dalle particelle $\xi_f(\xi_{f1}, \xi_{f2}, \dots, \xi_{fq})$. Esempi tipici di coordinate interne delle particelle sono la dimensione delle particelle, l'area superficiale, il volume, la massa totale, la massa dei componenti chimici che costituiscono la particella, l'entalpia, ecc. La velocità della fase continua può essere considerata come la velocità del fluido in prossimità dello strato limite istantaneo circostante ogni particella, che permette una quantificazione delle forze delle particelle fluide e una descrizione coerente della fase continua. Infine, il vettore di coordinate interno della fase fluida continua, raggruppa tutte le altre proprietà rilevanti della fase continua viste dalla particella (come il volume, la composizione e l'entalpia). L'NDF è definita attraverso una procedura di media di insieme in modo tale che la seguente quantità: $n(t, x, v_p, \xi_p, v_f, \xi_f) dx dv_p d\xi_p dv_f d\xi_f$, rappresenti il numero atteso di particelle attorno al punto fisico x nell'istante di tempo t , con velocità delle particelle e del fluido all'interno nell'intervallo (v_p, v_p+dv_p) e (v_f, v_f+dv_f) , e le coordinate interne di particelle e fluidi con $(\xi_p, \xi_p+d\xi_p)$ e $(\xi_f, \xi_f+d\xi_f)$. Quando entrambe le fasi continue e disperse sono incompressibili e costituite da due soli componenti chimici, una scelta molto comune (che definisce unicamente lo stato della particella) consiste nel considerare la dimensione particellare come prima delle coordinate interne delle particelle: $\xi_{p1} = L$, e le moli di uno dei due componenti all'interno della particella come seconda coordinata interna: $\xi_{p2} = \Phi$. Nel nostro caso non è stato considerato il trasferimento di materia, pertanto si considera una sola coordinata, pari alla taglia L . Una scelta ragionevole per la fase continua è invece quella del volume di fase continua per la particella: $\xi_{f1} = V$, e la concentrazione molare di una delle due componenti (nella fase continua ma vista dalla particella): $\xi_{f2} = \psi_f$. Sono anche possibili scelte alternative, ma non influenzano in modo significativo il resto della discussione. Per questo sistema il bilancio di popolazione generalizzato (GBPE) da cui è possibile ricavare la NDF si scrive:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(v_p n) + \frac{\partial}{\partial v_p}[(\langle A_p \rangle + \langle A_{fp} \rangle)n] + \frac{\partial}{\partial \xi_p}(\langle G_p \rangle n) + \frac{\partial}{\partial v_f}[(\langle A_f \rangle + \langle A_{pf} \rangle)n] + \frac{\partial}{\partial \xi_f}(\langle G_f \rangle n) = S \quad (2.4)$$

Il primo termine rappresenta l'accumulo ed il secondo termine è un termine di convezione nello spazio fisico. Il terzo termine descrive la variazione di n a causa della continua accelerazione di particelle, causata a sua volta da forze di campo e dallo scambio di quantità di moto tra le particelle e la fase continua circostante. Il quarto termine considera i cambiamenti continui delle coordinate interne delle particelle a causa di processi continui, che in assenza di reazioni chimiche sono genericamente causati dal trasferimento di massa tra la fase continua e quella dispersa; $\langle G_p \rangle = (\dot{L}, \dot{\Phi})$. Questo termine viene qui riportato per una scrittura completa del bilancio, ma, come già anticipato, non viene considerato in questo lavoro, pertanto nelle equazioni successive verrà ommesso. Il quinto e il sesto termine rappresentano variazioni di n causate dalla variazione continua della velocità del fluido, dovuta a forze di campo e forze di interazione tra le particelle e la fase continua. Particolare attenzione deve essere data alla formulazione di appropriati modelli di mesoscala per $\langle A_f \rangle$ e $\langle A_{pf} \rangle$ poiché devono essere rispettati vincoli specifici al fine di predire un comportamento realistico. Il termine sorgente sul lato destro dell'equazione (2.4), S , tiene conto invece delle variazioni discontinue di n a causa di eventi discreti come coalescenza e rottura. È importante sottolineare che la distinzione tra eventi continui e discontinui dipende dalla scala temporale dei processi coinvolti. In generale, quando il processo è di natura molecolare (come nel caso del trasferimento di massa o nel caso di forze esercitate dalla fase continua) i cambiamenti indotti sulle proprietà delle particelle in un intervallo temporale infinitesimale sono infinitesimali. Al contrario, i processi basati sulle particelle possono, molto spesso, causare cambiamenti finiti nelle proprietà delle particelle anche in un intervallo di tempo infinitesimale. Tuttavia, questa condizione viene rispettata solo se le particelle

interagiscono attraverso un potenziale di sfera rigida (cioè i componenti non "si vedono" fino a quando non si bloccano istantaneamente); quando altri potenziali sono più appropriati (ad esempio sfera soft) la descrizione delle interazioni tra particelle come salti discontinui o eventi discreti potrebbe non essere adeguata, nel caso in cui la scala spaziale e temporale scelta è troppo piccola.

2.1.3 Momenti della funzione numero di densità e rispettive equazioni di trasporto

A causa del numero di variabili indipendenti coinvolte, la soluzione diretta dell'equazione (2.4) con un approccio euleriano è troppo onerosa in termini computazionali. Una strategia interessante consiste nell'integrare le variabili indipendenti e ricavare equazioni di trasporto per i momenti di n . Ad esempio la frazione volumica della fase dispersa è definita come il momento di ordine 3 di n rispetto alla dimensione delle particelle L moltiplicata da un fattore di forma delle particelle k_v , assunto uguale a $\frac{\pi}{6}$ nel caso di particelle sferiche:

$$\alpha_p \equiv k_v \int \dots \int L^3 n dv_p dL dv_f d\xi_f \quad (2.5)$$

Dove v_p è la velocità delle particelle, v_f è la velocità della fase continua, L è la dimensione delle particelle disperse e ξ_f è la coordinata della fase continua. Integrando allo stesso modo i termini del bilancio di popolazione (2.4) è possibile ricavare l'equazione di trasporto per il momento dell'ordine 3 rispetto alla dimensione delle particelle. Si ottiene:

$$\frac{\partial \alpha_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_p U_p) = S_v \quad (2.6)$$

Dove la velocità media del volume della fase dispersa è il momento di ordine tre rispetto alla dimensione delle particelle e dell'ordine uno rispetto alla velocità delle particelle v_p :

$$\alpha_p U_p \equiv k_v \int \dots \int L^3 n v_p dv_p dL dv_f d\xi_f \quad (2.7)$$

Quando la nucleazione è assente e la coalescenza e la rottura sono l'unico fattore rilevante allora: $S_v \equiv 0$. Coalescenza e rottura, infatti, non cambiano il volume totale della densità della fase dispersa. La risoluzione dell'equazione (2.6) richiede la conoscenza della velocità della fase dispersa media del volume, U_p , che a sua volta può essere derivata dall'equazione (2.4) applicando la trasformazione del momento di terzo ordine rispetto alla dimensione delle particelle e di ordine uno rispetto alle tre componenti del vettore della velocità delle particelle e moltiplicando l'equazione risultante al fattore di forma del volume:

$$\frac{\partial \alpha_p U_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_p F_p) = \alpha_p \left(\llbracket A_p \rrbracket_v + \llbracket A_{fp} \rrbracket_v \right) + \alpha_p \llbracket S \rrbracket_v \quad (2.8)$$

In cui il primo termine rappresenta l'accumulo di quantità di moto, il secondo termine è un termine convettivo, dato dal prodotto della frazione volumica per il tensore dei momenti delle velocità delle particelle che si ricava applicando la definizione di momento:

$$\alpha_p F_p \equiv k_v \int \dots \int L^3 n (v_p \otimes v_p) dv_p dL dv_f d\xi_f \quad (2.9)$$

Il terzo termine rappresenta la variazione di frazione volumica causata dall'accelerazione dovuta a forze di campo (primo termine della parentesi) e allo scambio di momento tra fase continua e particelle disperse (secondo termine della parentesi). Viene riportato qui sotto il passaggio in cui si applica la definizione di momento.

$$\alpha_p \left(\llbracket A_p \rrbracket_v + \llbracket A_{fp} \rrbracket_v \right) \equiv k_v \int \dots \int L^3 n(\langle A_p \rangle + \langle A_{fp} \rangle) dv_p dL dv_f d\xi_f \quad (2.10)$$

In assenza di nucleazione, ossia tenendo conto dei soli fenomeni di coalescenza e rottura $\llbracket S \rrbracket_v = 0$. In generale l'equazione di bilancio non è un problema chiuso. Si tratta cioè di una sola equazione con più di un'incognita. Per risolvere questo problema ed arrivare alla soluzione dell'equazione si può assumere che la popolazione di particelle sia monodispersa, ossia che tutte le bolle abbiano uguale dimensione (con $L = d_p$). Quindi se considero la gravità e le altre forze di campo, interfacciali e di interazione tra fase continua e fase dispersa, queste ultime raccolte in un unico termine, si ottiene la seguente equazione:

$$\frac{\partial \alpha_p U_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_p U_p \otimes U_p) = \alpha_p g - \frac{\alpha_p}{\rho_p} \frac{\partial p_f}{\partial x} + \sum_i F_i + U_p (S_v) \quad (2.11)$$

dove g è l'accelerazione di gravità, ρ_p la densità di materiale (costante) della fase dispersa, p_f la pressione della fase continua, $\sum_i F_i$ è il termine che raccoglie tutte le forze di interazione (gravità esclusa) e S_v è il termine sorgente per fenomeni discontinui. La risoluzione dell'equazione (2.11) fornisce la velocità della particella prevista condizionata sul valore della dimensione delle particelle, $L = d_p$. In altre parole risolvendo l'equazione (2.11) si trova la velocità di particelle di dimensione pari a d_p . La conoscenza della velocità delle particelle è sufficiente per il calcolo del termine di convezione nello spazio reale dell'equazione (2.4) e la risoluzione dell'equazione (2.11) chiude completamente il problema. Tuttavia ciò richiede che la conoscenza di U_f che possa essere definita dal NDF. Come per α_p e U_p , le equazioni di trasporto per α_f e U_f possono essere derivate applicando all'equazione (2.4) il momento di ordine uno rispetto alla prima coordinata interna della fase continua, risultante in:

$$\frac{\partial \alpha_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f U_f) = -S_v \quad (2.12)$$

dove α_f è la frazione di volume in fase continua e U_f è la velocità media del volume di fase continua in cui per definizione si ha: $\alpha_p + \alpha_f = 1$. L'equazione di trasporto per la fase continua diventa:

$$\frac{\partial \alpha_f U_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f U_f \otimes U_f) = \alpha_f g - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \tau_f}{\partial x} - \frac{\alpha_f}{\rho_f} \frac{\partial}{\partial x} \tau_f + \sum_i F_i + U_p (S_v) \quad (2.13)$$

dove inoltre è necessario un modello costitutivo per il tensore dello stress fluido τ_f (per gli stress sia viscosi che turbolenti). È importante sottolineare qui che la derivazione delle equazioni (2.12) e (2.13) richiede un'ulteriore ipotesi di semplificazione e l'imposizione di dichiarazioni di coerenza tra le fasi. Le equazioni (2.6) e (2.12), derivate dall'equazione generalizzata di bilancio di popolazione, possono essere pensate come equazioni di continuità per le fasi continue e disperse, mentre le equazioni (2.11) e (2.13), derivate da trasformazioni in termini di momenti del GPBE, come equazioni di bilancio di quantità di moto per le fasi disperse e continue. Questo insieme di equazioni è identico al ben noto

modello a due fluidi, generalmente derivato da procedure di mediazione condizionale e può essere risolto quando il termine S_v è scritto in forma disgiunta dal termine che considera il trasporto di materia (non considerato in questo lavoro) e quando una strategia accurata per calcolare un valore rappresentativo per d_p è stata formulata. È importante sottolineare qui che, come per il modello a due fluidi, questo approccio è applicabile quando la velocità delle particelle dipende unicamente dalla dimensione delle particelle (cioè le collisioni non alterano la quantità di moto media) e quando tutte le particelle vedono un fluido con la stessa velocità U_f . Infine, è utile ricordare che spesso queste equazioni sono utilizzate per simulare sistemi multifase turbolenti, semplicemente estendendo il modello k- ϵ di singola fase. Ciò si traduce nell'introduzione di una viscosità turbolenta, funzione dell'energia cinetica turbolenta e dalla velocità di dissipazione turbolenta in fase continua.

2.1.4 Evoluzione rispetto alla dimensione e alla composizione delle particelle

Assumendo che la velocità delle particelle dipenda dalle dimensioni delle particelle e che le particelle vedano un fluido con la stessa velocità uguale a U_f con lo stesso vettore di coordinate interno, è possibile effettuare la seguente assunzione sull'NDF:

$$n(t, x, v_p, \xi_p, v_f, \xi_f) = n^*(t, x, \xi_p) \delta[v_p - U_p(\xi_p)] \delta[v_f - U_f] \delta[\xi_f - \eta_f] \quad (2.14)$$

Dove le funzioni multidimensionali delta sono definite (come ad esempio nel caso della velocità delle particelle) in questo modo:

$$\delta[v_p - U_p(\xi_p)] = \prod_{i=1}^3 \delta[v_{pi} - U_{pi}(\xi_p)] \quad (2.15)$$

In cui $U_p(\xi_p) = (U_{p1}, U_{p2}, U_{p3})$ è la velocità prevista delle particelle caratterizzata da un valore specifico del vettore coordinata interna di particelle uguale a ξ_p , come calcolato dall'equazione (2.11). Ugualmente U_f viene calcolato risolvendo l'equazione (2.13); η_f invece è calcolato risolvendo equazioni aggiuntive che dipendono dalle caratteristiche del sistema e sono necessarie alla chiusura del problema. Sostituendo l'equazione (2.14) nella (2.4) e integrando velocità delle particelle, velocità del fluido e coordinate interne, si ottiene la seguente equazione:

$$\frac{\partial n^*(L)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (U_p(L) n^*(L)) + \frac{\partial}{\partial L} (n^*(L)) = S^* \quad (2.16)$$

Questa equazione può essere risolta usando il metodo dei momenti. Definiamo la seguente quantità:

$$M_k(t, x) = \iint_0^{+\infty} n^*(t, x, L) L^k dL \quad (2.17)$$

come il momento del NDF ridotto dell'ordine k rispetto alle dimensioni delle particelle e l rispetto alla composizione delle particelle. L'equazione di trasporto per M_k , può essere trovata applicando di nuovo la trasformata tematica all'equazione (2.16) risultante in:

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\iint_0^{+\infty} U_p(L) n^*(L) L^k dL \right) = \iint_0^{+\infty} S^* L^k dL \quad (2.18)$$

Si è assunto che NDF fosse nullo sui confini dello spazio delle fasi:

$$n^*(\xi_p)|_{L=0,L=\infty} = 0 \quad (2.19)$$

Come si può vedere, l'equazione (2.18) in generale non è chiusa, infatti, solo in alcuni casi semplici può essere scritta in termini di momenti conosciuti. Per esempio, se la velocità delle particelle dipende dalla dimensione delle particelle e inoltre non si verificano eventi discontinui (cioè $S^* \equiv 0$), l'equazione (2.18) si riduce a:

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(U_p M_k) = 0 \quad (2.20)$$

In tutti gli altri casi si deve cercare una chiusura affidabile. Una chiusura sufficiente è basata sull'uso di approssimazioni in quadratura, o in modo equivalente sull'ipotesi che la funzione numero di densità sia costituita da una somma delle funzioni delta di Dirac. U_p viene calcolata risolvendo queste equazioni:

$$\frac{\partial \rho_c \alpha_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_c \alpha_c U_c) = 0 \quad (2.21a)$$

$$\frac{\partial \rho_c \alpha_c U_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_c \alpha_c U_c U_c) = -\nabla \cdot (\alpha_c \tau_c) - \alpha_c \nabla p + \rho_c \alpha_c g + \Lambda_c \quad (2.21b)$$

$$\frac{\partial \rho_d \alpha_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_d \alpha_d U_d) = 0 \quad (2.22a)$$

$$\frac{\partial \rho_d \alpha_d U_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_d \alpha_d U_d U_d) = -\nabla \cdot (\alpha_d \tau_d) - \alpha_d \nabla p + \rho_d \alpha_d g + \Lambda_d \quad (2.22b)$$

per la fase continua e per la fase dispersa, dove $\alpha_{c,d}$ è la frazione di volume della generica fase, $\rho_{c,d}$ è la sua densità, $\tau_{c,d}$ è il tensore che tiene conto sia degli sforzi viscosi che turbolenti, p è la pressione campo condiviso tra tutte le fasi, g è la gravità, $\Lambda_{c,d}$ è il termine di scambio di quantità di moto tra le fasi presenti nel sistema. È utile menzionare che entrambe le equazioni sono derivate dalla media dell'ensemble (Drew e Passman, 1998), poiché si riferiscono a sistemi turbolenti. Pertanto, le quantità α_i e U_i dovrebbero essere intese come medie d'insieme. Come sottolineato nei lavori di Buffo e Marchisio (2014) e Buffo *et al.*, (2013), entrambe le equazioni possono anche essere derivate dal GPBE.

2.2 Analisi dei fenomeni di coalescenza e rottura

2.2.1 Introduzione

Nei flussi di bolle, la distribuzione della dimensione delle bolle determina l'area interfacciale disponibile per i processi di trasferimento interfase e, pertanto, la comprensione del comportamento e delle caratteristiche medie della popolazione di bolle è fondamentale per la previsione di questi tipi di flussi. I fenomeni principali che portano al cambiamento della distribuzione della dimensione delle bolle sono coalescenza e rottura. La coalescenza è il fenomeno per cui due bolle si uniscono per dare vita ad una bolla maggiore; la rottura è il fenomeno opposto: una bolla si divide in due entità di dimensione minore. Essi sono legati alla turbolenza del sistema studiato. Ci sono vari modelli in letteratura per studiare questi fenomeni e vale la pena citarne alcuni in questo lavoro.

2.2.2 Modelli che descrivono i fenomeni di coalescenza e rottura

Kocamustafaogullari e Ishii (1995) e Wu *et al.* (1998) hanno identificato i meccanismi di coalescenza e rottura delle bolle basandosi sulla loro analisi sull'interazione della bolla con le bolle circostanti e i vortici turbolenti. Hanno categorizzato i principali meccanismi di coalescenza e rottura delle bolle indotte dall'interazione in cinque meccanismi principali tra cui i 2 meccanismi di coalescenza a bolle dovuti alla collisione casuale tra le bolle guidate dalla turbolenza e il processo di trascinamento della scia risultante dai moti relativi delle bolle con dimensioni diverse e i 3 meccanismi di rottura delle bolle a causa dell'impatto turbolento, del taglio e dell'instabilità interfacciale. Hibiki *et al.* (2000a) riportarono che i meccanismi di rottura delle bolle dovuti al taglio e all'instabilità interfacciale avvengono principalmente intorno a bolle relativamente grandi, che appaiono nella regione di transizione del flusso bubbly to slug e il flusso di slug, e il loro contributo è piccolo nei flussi a bolle. Quindi, è ragionevole considerare i meccanismi di coalescenza della coalescenza dovuti a collisione casuale e trascinamento della scia ed il meccanismo di rottura delle bolle dovuto all'impatto turbolento come i principali meccanismi di trasporto dell'area di interfaccia nei flussi a bolle. Ora verranno citati alcuni modelli che descrivono la coalescenza e la rottura.

- Il modello di Wu *et al.* (1998) descrive il comportamento delle bolle focalizzandosi sulle interazioni tra le entità vicine e i vortici turbolenti del flusso. Questa formulazione si basa sulla descrizione della coalescenza in seguito a collisione casuale e trascinamento della scia, mentre la rottura avviene in seguito ad impatto turbolento.
- Il modello di Kim (1999) è molto simile a quello di Wu *et al.* (1998) ma ha migliorato la descrizione del contributo alla coalescenza del trascinamento della scia. Nel suo lavoro è stato inoltre sviluppato un modello per la collisione casuale e per la rottura per impatto turbolento.
- Hibiki e Ishii (2000a) hanno formulato un modello dopo aver scoperto che le bolle catturate nella regione di scia di una grande bolla avrebbero lasciato facilmente la regione a causa della turbolenza liquida e il processo avrebbe comportato un contributo minore del meccanismo di trascinamento della scia al trasporto dell'area interfaccia nel flusso a bolle con relativamente condizioni di flusso elevato. Quindi, Hibiki e Ishii (2000a) hanno sviluppato solo il modello per la collisione casuale per il meccanismo di coalescenza delle bolle e il modello per l'impatto turbolento per il meccanismo di rottura delle bolle nei flussi a bolle.
- Hibiki e Ishii nel 2002 hanno formulato un secondo modello, rifinando la trattazione del fenomeno di collisione casuale per la coalescenza ed impatto turbolento per la rottura.
- Il modello di Yao e Morel (2004) si focalizza sul meccanismo della coalescenza a bolle basato sulla collisione casuale e il meccanismo di rottura delle bolle per impatto turbolento derivante dalle interazioni di bolle con bolle adiacenti e vortici turbolenti. È stato sviluppato un modello per la coalescenza di bolle prendendo in considerazione il tempo di viaggio libero e il tempo di interazione nella descrizione della collisione casuale e il loro modello per la rottura delle bolle considera il meccanismo di risonanza delle bolle per analizzare l'impatto turbolento in flussi di bolle.
- Il modello di Nguyen *et al.* (2013) ha apportato un miglioramento per il modello di collisione casuale per la coalescenza e il modello di impatto turbolento per la rottura delle bolle di Yao e Morel (2004), in quanto sono stati considerati i fenomeni di soppressione turbolenta che avvengono nei turbolenti flussi di bolle con alta velocità del liquido e hanno presentato il seguente modello di collisione casuale e il modello di rottura delle bolle per impatto turbolento per prevedere in modo dinamico l'evoluzione della popolazione di bolle nei flussi di bolle a due fasi.

- Nel modello di Sun *et al.* (2004a) è stato osservato che per modellare in modo affidabile la transizione del regime di flusso dai flussi di bolle a quelli di flusso in un flusso a due fasi, le equazioni di trasporto all'interfaccia dovrebbero essere scritte a due gruppi per considerare i contributi di entrambe le bolle di gruppo 1 e 2. Sun *et al.* (2004a) hanno modellato analiticamente i cinque principali meccanismi di interazione delle bolle tra bolle e vortici turbolenti come i termini sorgente e sink scrivendo equazioni di trasporto all'interfaccia a due gruppi. I loro modelli includono quelli per le interazioni tra bolle interne e inter-gruppo. I loro sviluppi dei modelli collisione casuale e trascinarsi della scia per i meccanismi di coalescenza a bolle del gruppo 1 e il modello di impatto turbolento per il meccanismo di rottura delle bolle del gruppo 1 sono analoghi a quelli di Wu *et al.* (1998) e Kim (1999) per un gruppo di bolle. Originariamente ritenevano che l'esistenza della fase gassosa producesse la distribuzione della concentrazione del numero di vortice in funzione delle dimensioni dei vortici, migliorando il modello di rottura delle bolle per impatto turbolento di Wu *et al.* (1998) e proposero un nuovo modello di impatto turbolento per la rottura delle bolle del gruppo 1.
- Nel modello di Smith *et al.* (2012a) è stato sviluppato e convalidato un set completo di modelli di interazione a bolle a due gruppi per equazioni di trasporto all'interfaccia a due gruppi applicabili a tubi verticali di grande diametro. Smith *et al.* (2012a) pensavano che i processi di modellazione intra-gruppo per le bolle del gruppo 1 fossero in gran parte simili per molti tipi di geometria dei canali di flusso. Di conseguenza, hanno seguito il metodo di Wu *et al.* (1998) per un gruppo bolle e derivato il modello di collisione casuale per il meccanismo di coalescenza a bolle di gruppo 1. Inoltre hanno tenuto conto del tempo richiesto per la coalescenza e il tempo di contatto delle bolle nei flussi turbolenti e hanno affrontato la frequenza delle collisioni e l'efficienza della coalescenza in modi diversi.

2.2.3 I modelli utilizzati in questo lavoro

Il termine sorgente nel bilancio di popolazione è somma di quattro termini: due indicano la nascita e la morte di particelle di dimensione L per coalescenza; gli altri due indicano la nascita e la morte di particelle di dimensione L per rottura. Ci sono vari modelli in letteratura per il calcolo del kernel, ossia il valore che stima la frequenza con cui avvengono questi fenomeni. I modelli formulati hanno una derivazione spesso di natura semi-empirica, talvolta basata su forti assunzioni semplificative. Come evidenziato nel paragrafo precedente, ci sono vari fenomeni che fanno avvenire la coalescenza e la rottura. Nei sistemi turbolenti le collisioni tra le bolle avvengono principalmente a causa delle fluttuazioni di velocità. In altre parole i vortici creati dalla turbolenza bombardano la superficie delle bolle fino ad avvenuta rottura, mentre la coalescenza avviene quando i vortici avvicinano ed uniscono due bolle. Il kernel per la coalescenza di bolle utilizzato in questo lavoro è stato formulato nel lavoro di Coualoglou e Tavlarides (1977) e presenta la seguente espressione:

$$a(\lambda, L) = C_1 \epsilon^{1/3} (\lambda + L)^2 (\lambda^{2/3} + L^{2/3})^{1/2} \eta(\lambda, L) \quad (2.23)$$

dove λ e L sono le dimensioni delle due bolle coinvolte nel processo, ϵ è la velocità di dissipazione della turbolenza (l'esponente $1/3$ è motivato dalla teoria della turbolenza omogenea, in cui la differenza di velocità tra due particelle di dimensioni diverse è proporzionale a $1/3$) e $\eta(\lambda, L)$ è l'efficienza di coalescenza, stimata come il rapporto tra il contatto tra le bolle e il drenaggio del liquido come scale temporali (Coualoglou e Tavlarides, 1977):

$$\eta(\lambda, L) = \exp \left\{ -C_2 \frac{\mu_c \rho_c \epsilon}{\sigma^2} \left(\frac{\lambda L}{\lambda + L} \right)^4 \right\} \quad (2.24)$$

dove $C_1 = 0,88$ e $C_2 = 6 \cdot 10^9$. Questo kernel di coalescenza è stato originariamente sviluppato per goccioline liquide (Alopaeus *et al.*, 2002), ma in seguito esteso ai sistemi gas-liquido (Laakkonen *et al.*, 2006). I valori dei parametri costanti utilizzati in questo lavoro sono il risultato di prove sperimentali eseguite in altri lavori (Petitti *et al.* (2010), Laakkonen *et al.* (2007)) su sistemi aria-acqua. La rottura della bolla si traduce in due bolle di diverse dimensioni, descritte dalla seguente funzione di distribuzione della figlia (Laakkonen *et al.*, 2006):

$$P(\lambda, L) = 180 \left(\frac{L^2}{\lambda^3} \right) \left(\frac{L^3}{\lambda^3} \right)^2 \left(1 - \frac{L^3}{\lambda^3} \right)^2 \quad (2.25)$$

dove L è la dimensione della bolla figlia, creata dalla rottura della bolla madre delle dimensioni λ . La discussione sulla distribuzione delle dimensioni delle figlie è molto ricca e diversi punti di vista devono essere riconciliati. Le distribuzioni a forma di U, laddove l'evento più probabile è la rottura asimmetrica (si formano una grande bolla e una piccola bolla), proposto secondo argomenti di energia-equilibrio, si oppongono a curve di distribuzione di tipo gaussiano, dove l'evento più probabile è la rottura simmetrica, secondo lo stato attivato in cui la bolla è equilibrata dalla tensione superficiale in due frammenti di dimensioni uguali appena prima della rottura. L'equazione (2.25) segue quest'ultima linea di pensiero e questa scelta è stata supportata dal confronto con gli esperimenti precedenti (Laakkonen *et al.*, 2006, 2007). La frequenza di rottura causata da turbolenze di fluttuazione è stimata mediante il seguente kernel (Laakkonen *et al.*, 2006):

$$\beta(L) = C_3 \epsilon^{1/3} \operatorname{erfc} \left\{ C_4 \frac{\sigma}{\rho_c \epsilon^{2/3} L^{5/3}} + C_5 \frac{\mu_c}{\sqrt{\rho_c \rho_b} \epsilon^{1/3} L^{4/3}} \right\} \quad (2.26)$$

dove $C_3 = 6.0$, $C_4 = 0.04$ e $C_5 = 0.01$. Il valore di queste costanti sono i risultati di una procedura appropriata eseguita nei lavori di Petitti *et al.*, 2010 e di Laakkonen *et al.*, 2006, e, in linea di principio, dovrebbero essere universali per ogni sistema aria-acqua. In effetti, i modelli includono tutte le dipendenze con il rispetto delle proprietà fisiche e di flusso per adattarsi a condizioni diverse. Per questo motivo, le stesse costanti sono state utilizzate per tutti i casi investigati in questo lavoro. Tuttavia, come sottolineato nei lavori di Buffo e Marchisio, 2014 e di Petitti *et al.*, 2013, la difficoltà nel predire le caratteristiche del flusso e dei campi turbolenti (in particolare per il tasso di dissipazione della turbolenza ϵ che appare nei kernel usati), rende molto difficile la formulazione di modelli accurati in mesoscala e l'identificazione di costanti universali. In effetti, qualsiasi incertezza di predizione ϵ influisce principalmente sulle costanti del kernel. Pertanto, con il miglioramento della descrizione della turbolenza, i parametri che compaiono nei kernel subiranno una messa a punto. Tuttavia i valori utilizzati in questo lavoro sembrano essere adeguati, con il modello di turbolenza adottato, per descrivere i sistemi esaminati.

2.3 Analisi delle forze interfacciali

2.3.1 Introduzione

Il moto delle bolle è determinato da interazioni tra le bolle e le stesse con la fase continua. Queste interazioni sono descritte da modelli di mesoscala che tengono conto di forze interfacciali presenti nel bilancio di quantità di moto. Esse possono dare un contributo più o meno importante alla predizione del modello finale, in particolare per le proprietà macroscopiche, come ad esempio l'hold up globale di gas. L'obiettivo è trovare una soluzione per la chiusura dell'equazione di bilancio. Questi modelli di mesoscala tengono conto di tutte le forze che agiscono sulle bolle, che sono tipicamente divise tra

forze di campo (come la gravità) e forze di interazione tra bolle e liquido circostante. Un esempio di queste ultime è dato dalle forze di spinta di galleggiamento, trascinamento, sollevamento, massa virtuale e forze di Basset. Le forze per unità di massa che agiscono su ogni bolla sono tipicamente assunte con identica velocità di bolla caratteristica U_p , identica velocità caratteristica della fase continua attorno alla bolla U_f , e la stessa dimensione d_p . Successivamente, partendo dalle forze per unità di massa che agiscono su una singola bolla applicando strategie appropriate, basate principalmente sull'introduzione di correzioni, possono essere formulati diversi modelli per considerare l'effetto di gruppi di bolle. È difficile valutare con precisione l'effetto di forze aggiuntive, dal momento che le correlazioni solitamente adottate per valutare queste forze hanno numerosi coefficienti di natura empirica soggetti a grandi incertezze. Tuttavia, in questo lavoro vengono considerate le forze di galleggiabilità, gravità, trascinamento, forza di sollevamento, forza di dispersione turbolenta e forza di lubrificazione (wall lubrication). Tale approccio può essere visto come empirico, infatti in seguito per le forze analizzate verranno descritti modelli con relazioni di natura empirica.

2.3.2 Forza di drag

La forza di trascinamento (drag) per unità di massa (cioè l'accelerazione) che agisce su una bolla che si muove nel liquido stagnante è calcolata con la seguente espressione:

$$A_{D,0} = \frac{3 \rho_c C_{D,0}(Re_b)}{4 \rho_b d_b} |u_c - u_b|(u_c - u_b) \quad (2.27)$$

In cui ρ_c e ρ_b sono rispettivamente le densità della fase continua e della bolla, d_b è la dimensione della bolla, u_c e u_b la velocità del liquido attorno alla bolla e della bolla stessa, rispettivamente. Il coefficiente di trascinamento per la singola bolla isolata, $C_{D,0}$, è una funzione del numero di Reynolds della bolla ($Re_b = \frac{\rho_c d_b |u_c - u_b|}{\mu_c}$), numero di Eötvös ($Eo = \frac{d_b^2 g |\rho_c - \rho_b|}{\sigma}$), che esprime il rapporto tra galleggiabilità e tensione superficiale, il quale se è inferiore a 4 significa che la particella tende ad assumere una forma sferica, mentre per valori superiori la forma delle bolle può essere differente; e il numero di Morton ($Mo = \frac{u_c^4 g |\rho_c - \rho_b|}{\rho_c^2 \sigma^3}$), e tiene conto delle diverse forme possibili della bolla. In un sistema laminare molto diluito, in cui le bolle non interagiscono tra loro, l'equazione (2.23) è rispettata individualmente da ogni bolla. Se la popolazione è monodispersa (cioè tutte le bolle hanno dimensione pari a d_b), la forza di trascinamento per unità di volume della miscela gas-liquido può essere facilmente valutata moltiplicando l'accelerazione $A_{D,0}$ dalla massa di gas per unità di volume, $\alpha_b \rho_b$ (α_b rappresenta la frazione di volume del gas):

$$F_D = \alpha_b \frac{3 C_D}{4 d_b} \rho_{mix} |U_c - U_b|(U_c - U_b) \quad (2.28)$$

In cui si assume che $\rho_{mix} = \alpha_c \rho_c + \alpha_b \rho_b \approx \alpha_c \rho_c$. Questo valore è la densità media della miscela gas-liquido "vista" dalle bolle che sostituisce ρ_c ; C_D , il coefficiente di resistenza che ora non si riferisce più a una singola bolla ma a molte bolle e U_c e U_b sono le velocità medie di fluido e bolle. Nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016) questa forza è la sola ad essere considerata nello studio delle colonne a bolle, con una correzione aggiuntiva al coefficiente che tiene conto delle turbolenze del sistema. Infatti il coefficiente di resistenza alla dispersione C_D è diverso dal coefficiente di resistenza in condizioni diluite, $C_{D,0}$, perché deve comprendere l'effetto dell'affollamento delle bolle e della turbolenza su micro scala. Per il suo valore nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016) è stata adottata questa espressione:

$$C_D = f(\alpha_b)C_{D,0}(Re_{eff}) \quad (2.29)$$

dove $f(\alpha_b)$ è la funzione di sciame di bolle (che tiene conto dell'effetto di spargimento), mentre $C_{D,0}(Re_{eff})$ è il coefficiente di resistenza per la singola bolla, calcolata con un numero di Reynolds a bolle modificato per tenere conto della turbolenza su micro scala. Alcune espressioni per $f(\alpha_b)$ sono state formulate negli ultimi anni, come quello derivato dagli esperimenti di Simonnet *et al.* (2007, 2008) e quello formulato da simulazioni di tracking frontale da parte di Roghair *et al.* (2011, 2013b). Tuttavia, in entrambi gli studi non si considera l'effetto della coalescenza e della rottura sulla distribuzione delle dimensioni delle bolle, assumendo una distribuzione di bolle monodisperse. In un lavoro successivo di Roghair *et al.* (2013b) sono stati studiati sistemi bi-dispersi, confermando che la forma proposta della correzione di resistenza per gli effetti di affollamento anche per i sistemi bi-dispersi. In questo lavoro, insieme al GPBE che tiene conto della polidispersità locale della bolla, è stata adottata una semplice correzione dell'espressione di $f(\alpha_b)$ per l'effetto di affollamento:

$$f(\alpha_b) = \begin{cases} (1 - \alpha_b)^{C_A} & \alpha_b \leq 0.8 \\ 1 & \alpha_b > 0.8 \end{cases} \quad (2.30)$$

dove C_A è un parametro del modello. Questa espressione è basata sul lavoro di Wen e Yu (1966) per i letti fluidizzati e Ishii e Zuber (1979) per i sistemi fluido-fluido: hanno proposto questa semplice correzione della legge di potenza nel calcolo della forza di trascinamento per soddisfare l'intero bilancio. Questa relazione è stata confermata attraverso il confronto con i dati sperimentali. Inoltre, sembra naturale collegare l'effetto di affollamento alla frazione di volume locale della fase continua, ossia lo spazio vuoto tra uno sciame di bolle. È interessante notare che questa funzione presenta una discontinuità per $\alpha_b = 0,8$: la fase gassosa non è più dispersa a questa frazione volumica, poiché la cosiddetta transizione di fase si verifica intorno a 0,6-0,7 (limite massimo di packing per le sfere). In queste condizioni l'effetto di affollamento non è più presente poiché si verifica l'inversione di fase. L'intervallo del parametro del modello non dovrebbe essere diverso da quello indicato nelle opere originali (Wen e Yu, 1966, Ishii e Zuber, 1979): C_A viene solitamente assunto tra -3.0 e -1.0 e probabilmente dipende da alcuni parametri di flusso rilevanti, come il numero di Reynolds della bolla. Tuttavia, poiché in questo lavoro limitiamo l'intervallo di validità della relazione proposta per descrivere la forza di drag, un valore costante è stato adottato come prima approssimazione. Un'analisi di sensitività su questo valore è stata eseguita su un precedente lavoro di Buffo *et al.* (2013) su questa correzione per un singolo caso di utilizzando il valore $C_A = -1.3$ in tutte le simulazioni, dando il miglior accordo con gli esperimenti. Va notato che la dipendenza da Re_b potrebbe probabilmente consentire di descrivere altri regimi di fluidodinamica, come il regime eterogeneo. Un'espressione molto utilizzata per calcolare il coefficiente di trascinamento per la singola bolla $C_{D,0}$ è stata proposta da Tomiyama *et al.* (2002), ottenuta da esperimenti su sistemi aria-acqua (completamente contaminati):

$$C_{D,0} = \max\left[\frac{24}{Re_b}(1 + 0.15Re_b^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4}\right] \quad (2.31)$$

Dove μ_c al denominatore del numero di Reynolds è la viscosità molecolare della fase continua, g è l'accelerazione di gravità e σ al denominatore del numero di Eötvös è la tensione superficiale. Questa correlazione combina la nota correlazione di Schiller e Naumann per le sfere rigide con un termine aggiuntivo per il drag costante del cap sferico. Come accennato in precedenza, questa correlazione per il coefficiente di drag è derivata per una singola bolla (cioè sotto il regime diluito, $\alpha_c \rightarrow 1$) che sale in un fluido quiescente, mentre in condizioni turbolente, il movimento dello sciame di bolle è anche influenzato dalla turbolenza su micro scala che rallenta il moto di risalita delle bolle. Per questo motivo, è stata adottata una correzione basata su valori locali delle quantità turbolente, mediante la

definizione di un numero di Reynolds modificato (Bakker e Van den Akker, 1994; Brucato *et al.*, 1998):

$$\mu_{eff} = \mu_c + C_B \rho_c \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.32)$$

dove una sorta di viscosità effettiva è definita come una funzione della viscosità molecolare della fase continua μ_c , dell'energia cinetica turbolenta k e della velocità di dissipazione turbolenta ε della fase continua. Questa formulazione è basata sugli studi di Bakker e Van den Akker (1994) e di Brucato *et al.* (1998), dove la diminuzione della velocità di slip di una bolla che si muove in un campo di flusso turbolento è spiegata attraverso la definizione di una viscosità effettiva del liquido, scritta come funzione delle quantità turbolente. È evidente che il contributo turbolento alla viscosità effettiva, $C_B \rho_c \frac{k^2}{\varepsilon}$ ha la stessa forma della viscosità turbolenta nel modello $k-\varepsilon$, $C_\mu \rho_c \frac{k^2}{\varepsilon}$. Ciò significa che il C_B costante si collega alla frazione di vortici più piccoli della dimensione della bolla che influenza lo strato limite della bolla, e quindi questo valore dovrebbe essere in linea di principio funzione della dimensione della bolla e dello spettro della turbolenza. Inoltre, questo parametro del modello dovrebbe essere più piccolo della costante $C_\mu = 0.09$ del modello $k-\varepsilon$ standard, poiché solo una frazione dello spettro di turbolenza (cioè i vortici più piccoli della dimensione della bolla) è responsabile della turbolenza della scala di forma e per la riduzione della velocità in uscita delle bolle. Teoricamente, questo valore dovrebbe dipendere dalla dimensione della bolla e dalla forma dello spettro di turbolenza, tuttavia come prima approssimazione in questo lavoro viene proposto un valore ottimale costante di 0,002 per le dispersioni gas-liquido turbolente.

Introducendo la definizione di μ_{eff} nell'espressione di Re_{eff} che a sua volta viene sostituito a Re_b , l'equazione (2.28) diventa:

$$C_{D,0} = \max\left[\frac{24}{Re_{eff}} (1 + 0.15 Re_{eff}^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4}\right] \quad (2.32bis)$$

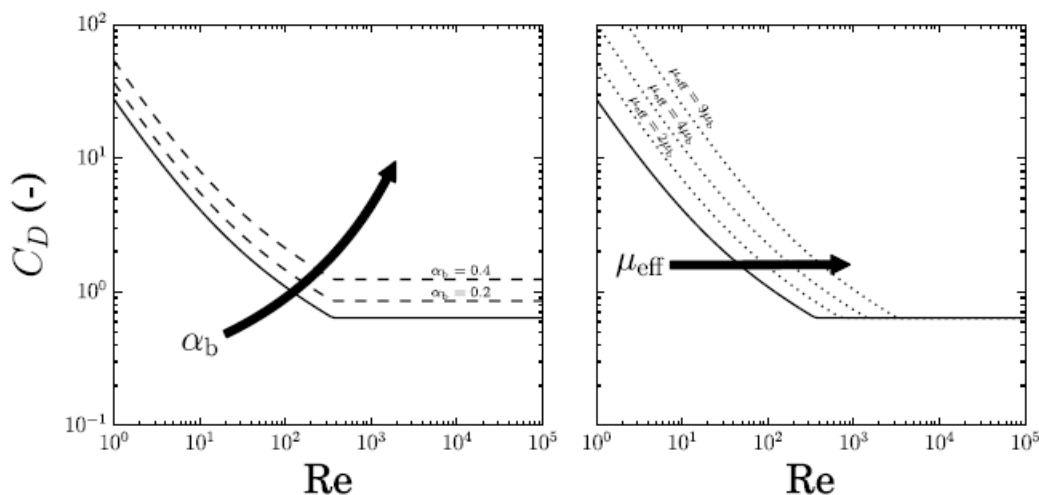


Figura 2.1 Effetto delle correzioni proposte sul coefficiente di drag. Il primo grafico (da sinistra) mostra l'effetto della correzione dovuta allo sciame di bolle; il secondo mostra l'effetto della turbolenza alla microscala (da A. Buffo, M. Vanni, P. Renze, D. Marchisio, Empirical drag closure for polydisperse gas liquid systems in bubbly flow regime: bubble swarm and micro-scale turbulence, Chem. Eng. Res. Des. 113 (2016) 284–303).

L'effetto delle correzioni proposte è illustrato in Fig. 2.1, dove il coefficiente di trascinamento per la bolla isolata si muove in un fluido stagnante, caso per cui il coefficiente viene calcolato con

l'equazione (2.28) (nel grafico rappresentato da linee continue), viene confrontato con quello di un sistema gas-liquido realistico, riportato nell'equazione (2.26). Un'osservazione più ravvicinata del grafico chiarisce come le due correzioni contribuiscano ad aumentare il coefficiente di forza di drag e la forza total drag per bolle con diametro medio di Sauter uguale a 3 mm. È importante il ruolo svolto dalla previsione della quantità di turbolenza, dal momento che la proposta di chiusura del problema con la forza di drag utilizza i valori di k ed ϵ . È stato dimostrato da numerosi lavori in letteratura (Montante *et al.*, 2001, Paul *et al.*, 2004; Deglon and Meyer, 2006; Coroneo *et al.*, 2011; Bashiri *et al.*, 2016; Gao *et al.*, 2016), che le previsioni delle quantità di turbolenza possono dipendere dalla dimensione della griglia, in particolare per i serbatoi agitati, in cui sono presenti gradienti di velocità fortemente localizzati. Ad esempio, in un lavoro sui serbatoi a più fasi con la metodologia CFD-PBM (Gao *et al.*, 2016), è stato dimostrato che il numero di potenza calcolato dalla coppia applicata alle pareti si stabilizza dopo i raffinamenti della griglia e concorda in modo uniforme con gli esperimenti, quando si ottiene una risoluzione indipendente dalla griglia. Tuttavia, ciò non si verifica sempre per il numero di potenza calcolato dalla velocità volumica media di dissipazione della turbolenza. In effetti, perfezionando la griglia, le sue previsioni possono migliorare, ma il valore indipendente dalla griglia ottenuto in alcuni casi è ancora lontano da quello sperimentale. Non è possibile quindi affermare che il modello CFD è in grado di descrivere le principali caratteristiche fluidodinamiche del sistema, dal momento che il numero di potenza è ben previsto, ma d'altra parte non riesce a descrivere i dettagli della turbolenza. In altre parole questo indica chiaramente le difficoltà intrinseche nel prevedere correttamente le proprietà turbolente, sulle quali si basa la legge per il coefficiente di trascinamento. Tuttavia, è importante sottolineare che la discrepanza tra la velocità di dissipazione turbolenta mediata dal volume e l'input di potenza sperimentale (per unità di massa) è principalmente causata da previsioni errate della velocità di dissipazione turbolenta nella regione localizzata del serbatoio (cioè la regione di scarica della girante), limitando l'incertezza complessiva e l'impatto sul lavoro. Tuttavia, quando viene adottata una strategia coerente per l'indipendenza dalla griglia, gli stessi valori di C_A e C_B possono essere utilizzati con successo per descrivere le principali caratteristiche fluidodinamiche dei diversi sistemi gas-liquido e, nonostante i possibili esperimenti, anche per prevedere turbolenta quantità in ragionevole accordo. Ciò suggerisce che il modello di drag proposto è abbastanza robusto da essere applicato nei casi di test reali. In effetti, se abbinati a modelli di turbolenza alternativa o ad altri fluidi diversi dall'aria-acqua, molto probabilmente sarebbe necessario un nuovo studio parametrico per la messa a punto dei valori dei coefficienti C_A e C_B . Per derivare l'espressione finale per la forza globale di drag, scambiare tra una popolazione di bolle polidisperse e la fase continua, deve essere introdotto il concetto di GPBE e NDF. Le equazioni costitutive per un sistema gas-liquido possono essere derivate attraverso la definizione di una NDF, la cui evoluzione è definita tramite GPBE. Se viene considerata solo la polidispersione rispetto alla dimensione della bolla può essere usata la seguente definizione di NDF:

$$n(L, x, t)dL$$

che rappresenta il numero previsto di bolle per unità di volume del punto x e del tempo t con dimensioni comprese tra L e $L + dL$. Questa NDF appare nella definizione della forza di drag totale per unità di volume (la dipendenza dallo spazio e dal tempo è omessa) per un sistema polidisperso:

$$F_D = \frac{3}{4}k_v \int L^3 \frac{C_D}{L} \rho_{mix} |U_c - U_b| (U_c - U_b) n(L) dL \quad (2.33)$$

Definendo α_b come grandezza proporzionale al momento di ordine 3 della NDF rispetto alla dimensione L delle bolle ed inserendolo nella (2.29) moltiplicando e dividendo per questa quantità si ottiene:

$$F_D = \alpha_b \frac{3 k_v \int L^2 C_D \rho_{mix} |U_c - U_b| (U_c - U_b) n(L) dL}{4 k_v \int L^3 n(L) dL} \quad (2.33b)$$

In questa scrittura si può notare al denominatore la definizione del diametro medio di Sauter, in quanto rapporto tra il momento di ordine 3 ed il momento di ordine 2 della NDF rispetto alla dimensione caratteristica L. Pertanto la (2.29b) diventa:

$$F_D \approx \alpha_b \frac{3 C_D(d_{32})}{4 d_{32}} \rho_{mix} |U_c - U_b| (U_c - U_b) \quad (2.33c)$$

dove k_v è il fattore di forma volumetrico (uguale a $\pi/6$ per le sfere). Non è stata fatta alcuna ipotesi sulla forma di una bolla: la dimensione della bolla del bilancio della popolazione è definita come il diametro di una sfera con lo stesso volume della bolla. In altre parole, il volume della bolla è la vera variabile dell'equilibrio della popolazione e questa definizione viene costantemente utilizzata durante il lavoro. Inoltre, come è possibile notare, con questo approccio il C_D non è costante e fisso durante la simulazione: dal momento che la distribuzione delle dimensioni delle bolle viene calcolata, la forza di trascinamento interfacciale può variare da punto a punto e dal passo temporale al tempo secondo distribuzione delle dimensioni locali delle bolle. L'equazione (2.33c) è l'espressione usata in questo lavoro per stimare la forza di resistenza totale per unità di volume, considerando l'effetto di polidispersione a bolle, sciame di bolle e turbolenza su scala ridotta, e appare nelle equazioni di equilibrio del momento sia disperse che continue fasi. Questo significa che i campi di velocità media calcolati dipendono dalla dimensione della bolla, poiché la dimensione della bolla media è diversa in ogni cella del dominio computazionale come risultato del bilanciamento istantaneo tra coalescenza e rottura. Il GPBE che governa l'evoluzione del NDF, che in questo semplice la forma è anche conosciuta semplicemente come l'Equazione di Bilancio di Popolazione (PBE), e, omettendo per brevità le interdipendenze su coordinate interne così come spazio e tempo, viene scritta così:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(U_b n) + \frac{\partial}{\partial L}(Gn) = h \quad (2.34)$$

dove U_b , ossia la velocità media locale delle bolle, viene calcolata attraverso l'equazione del bilancio del momento per la fase gas del modello a due fluidi e si presume che sia identica per tutte le bolle (cioè, tutte le bolle si muovono con una singola velocità), G rappresenta la tasso di variazione delle dimensioni delle bolle a causa di processi continui (ad esempio processi molecolari, come trasferimento di massa, reazione chimica o espansione di bolle dovute a fattori di pressione) e assunto qui uguale a zero, e h è il termine che tiene conto di coalescenza e rottura. L'ipotesi che le bolle si muovano con la stessa velocità è solo locale, cioè le bolle attorno a un punto specifico del dominio si muovono con una velocità media (cioè $U_b = U_b(x, t)$). Questa ipotesi è ancora coerente con l'uso del modello di bilancio di popolazione, poiché l'approccio consente ancora la dimensione della bolla media (e quindi la velocità media, dovuta alla dipendenza della forza di resistenza totale sul diametro medio di Sauter) per essere diverso da punto a punto e da ciascun istante di tempo. Inoltre, sotto le condizioni operative investigate (regime di bubble flow) la distribuzione delle dimensioni delle bolle varia tra 1 e 9 mm, un intervallo in cui la velocità terminale della bolla è approssimativamente la stessa (Clift *et al.*, 1978); tuttavia, questa ipotesi potrebbe non essere più valida quando la distribuzione delle bolle è più ampia come in altri regimi di fluidodinamica. È importante notare qui che i modelli di mesoscala sono necessari anche per risolvere l'equazione (2.34).

La soluzione del bilancio di popolazione è una sfida a causa del numero di variabili indipendenti. Molti metodi numerici sono stati sviluppati in passato con diversi gradi di accuratezza e corrispondenti costi computazionali. Una classe particolarmente conveniente di metodi è

rappresentata da QBMM (Marchisio e Fox, 2013), in cui l'evoluzione di alcuni momenti dell'ordine inferiore del NDF viene tracciata risolvendo le loro equazioni corrispondenti, ottenute a loro volta applicando la trasformazione del momento all'equazione (2.34) (Buffo *et al.*, 2013b). In alcuni casi semplici le equazioni di momento possono essere scritte come una funzione dei momenti stessi, ma nella maggior parte dei casi (di interesse pratico) questo non è possibile. Questo è il cosiddetto problema di chiusura (Hulburt e Katz, 1964) che viene generalmente risolto assumendo una forma funzionale specifica del NDF. Con QBMM, l'NDF è scritto come una sommatoria di funzioni di base, spesso funzioni delta di Dirac, a loro volta incise sui nodi di una quadratura gaussiana o ordine N. Gli N pesi e gli N nodi dell'approssimazione di quadratura sono calcolati dai primi 2N momenti del NDF attraverso il cosiddetto algoritmo Wheeler. Quando tutto questo viene fatto per una singola variabile, vale a dire la dimensione della bolla, il metodo è chiamato QMOM (per i dettagli vedi Marchisio e Fox, 2013). Il numero di nodi determina il grado di precisione e in generale un numero di nodi compreso tra due e quattro è sufficiente, corrispondente alla soluzione delle equazioni di trasporto per i primi quattro a otto tempi.

2.3.3 Contributo della gravità, della forza di galleggiamento e della forza di drag

Le forze per unità di massa (in termini dimensionali accelerazione) che agiscono su una unità che può essere una singola bolla sono somma di contributi dovuti alla gravità, alla galleggiabilità e al drag facilmente quantificate e utilizzate per derivare la velocità condizionale spazio-fase, risultanti in:

$$\langle A_b \rangle = g - \frac{1}{\rho_b} \frac{\partial p_c}{\partial x} + \alpha_b \frac{3}{4} \frac{C_D(d_{32})}{d_{32}} \rho_{mix} |U_c - U_b| (U_c - U_b) \quad (2.35)$$

Questo contributo è presente nel bilancio di quantità di moto per ricavare la velocità delle bolle necessaria per risolvere il bilancio di popolazione e ricavare la funzione numero di densità. Come già anticipato, questa è la chiusura del problema adottata nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016), con il coefficiente di trascinamento corretto da un fattore per tenere conto delle turbolenze del sistema. In questo lavoro questa correzione è assente in quanto vengono considerate altre forze interfacciali oltre a queste tre sopra illustrate: si tratta della forza di lift, di dispersione turbolenta e di wall lubrication.

2.3.4 Forza di lift

Le equazioni di massa, quantità di moto e conservazione dell'energia per il modello a due o più fluidi scritte con approccio Euleriano include termini che riflettono l'interazione tra le fasi, cioè trasferimento di massa, quantità di moto ed energia. Sono necessari ulteriori modelli per chiudere il set di equazioni. Per il regime di tipo bubble flow il trasporto del momento è dovuto a forze che agiscono sulle bolle. Le forze più importanti sono: massa virtuale, lift e forze di dispersione turbolenta. La prima è trascurata in questo lavoro. Ci sono conclusioni contraddittorie in letteratura sull'importanza delle singole forze. Ovviamente il ruolo delle singole forze dipende anche dalla situazione di flusso considerata. Se una bolla sale con una velocità relativa in un flusso in una fase liquida continua, una forza netta agisce nella direzione perpendicolare alla velocità relativa della bolla a causa della distribuzione non costante della pressione sulla superficie della bolla. Questo è il cosiddetto sollevamento laterale indotto dal taglio. Assumendo una bolla rigida sferica che sale in un liquido verso l'alto la velocità relativa tra la superficie della bolla e il liquido è più grande sul lato con la velocità del liquido più bassa, cioè la pressione è più bassa su questo lato. Per questo motivo la forza di sollevamento in questo caso agisce per spostare la bolla verso la regione con il basso verso l'alto velocità del liquido. Per il flusso del tubo verso l'alto, la bolla quindi migra verso la parete del

tubo.

Pertanto quando una bolla è immersa in un liquido, altre forze insorgono, oltre a galleggiamento e drag. Ad esempio, è ben noto che le bolle in risalita sono anche soggette a uno spostamento laterale, con conseguente spinta alle pareti del sistema. Attraverso numerosi esperimenti, è stato dimostrato che questo spostamento laterale dipende fortemente dalle dimensioni della bolla (ad esempio, piccole bolle tendono ad andare verso le pareti, mentre quelli grandi, al centro del sistema). La forza di sollevamento rappresenta la forza trasversale dovuta alla vorticità, valutata nel centro della bolla soggetto a tale forza. L'espressione generale per la forza di sollevamento per unità di massa (o accelerazione), inizialmente proposto da Saffman (1965), è la seguente (Drew e Lahey):

$$\langle A_b \rangle = C_L \frac{\rho_c}{\rho_b} (U_c - U_b) \times (\nabla \times U_c) \quad (2.36)$$

dove C_L è il coefficiente di lift. La forza di sollevamento sulla bolla proviene dal gradiente di velocità della fase continua e la velocità relativa tra la bolla e la fase liquida. Ha un effetto significativo sulla distribuzione della frazione di vuoti nei flussi frizzanti. Bolle che viaggiano attraverso un fluido dentro il movimento di taglio avverte la forza di sollevamento trasversalmente alla direzione di movimento. Per i sistemi aria-acqua a basso numero di Reynolds (per piccole bolle) il coefficiente di lift C_L varia tra 0,25 e 0,30 (Zun 1980). Una correlazione per calcolare C_L dopo numerosi esperimenti nel caso di una singola bolla nel sistema aria-acqua è stata proposta da Tomiyama et al. (2002):

$$C_L \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_b), f(Eo_d)] & Eo_d < 4 \\ f(Eo_d) & 4 \leq Eo_d \leq 10.7 \end{cases} \quad (2.37)$$

In cui $f(Eo_d) = 0.00105Eo_d^3 - 0.0159Eo_d^2 - 0.0204Eo_d + 0.474$. È importante far notare che il numero di Eötvös è stato modificato nella forma $Eo_d = \frac{d_H^2 g |\rho_c - \rho_b|}{\sigma}$. d_H è la massima dimensione orizzontale delle bolle e può essere valutata con la seguente formula (Wellek et al., 1966):

$$d_H = d_b \sqrt[3]{1 + 0.163 Eo^{0.757}} \quad (2.38)$$

Si deve considerare che l'espressione per la $f(Eo_d)$, è stata ottenuta dagli esperimenti effettuati su singole bolle, in un flusso di taglio lineare laminare e per un sistema ad alta viscosità (soluzioni glicerolo-acqua). Questo porta direttamente al dubbio riguardo all'applicabilità di questa relazione in altre situazioni di flusso e altre proprietà del fluido. Molti flussi rilevanti sono caratterizzati dalla polidispersione, alta percentuale di vuoti, proprietà di flusso turbolento e numeri di Morton molto più piccoli (ad esempio per flussi di aria-acqua o vapore-acqua). Altre indagini numeriche usando la simulazione numerica diretta (DNS) o metodi Volume of Fluid (VOF) (ad esempio, da Ervin e Tryggvason, 1997 e Bothe et al., 2007) hanno confermato il cambiamento di segno della forza di lift per le bolle deformate ma erano anche stati fatti in condizioni ideali, ossia assumendo il flusso di taglio lineare laminare e sistemi ad alta viscosità. È possibile trovare alcuni suggerimenti sull'applicabilità delle correlazioni in letteratura. Per flussi poli-dispersi con un ampio spettro di dimensioni delle bolle Lucas et al. (2001) hanno sviluppato un modello multi bolle semplificato per il calcolo dei profili di frazione del gas radiale per un flusso sviluppato dalle distribuzioni delle dimensioni delle bolle misurate basato su un equilibrio radiale delle forze della bolla. Considerarono le correlazioni di Tomiyama per lift e forze di parete (Tomiyama et al., 1995) insieme al modello per la forza di dispersione turbolenta di Lahey et al. (1993) e un'ulteriore contabilità a dispersione per oscillazioni di bolle. Dall'equilibrio di queste forze hanno ottenuto profili radiali della frazione di volume del gas separatamente per ciascuno gruppo di dimensioni della bolla. I profili totali della

frazione di volume del gas radiale sono stati ottenuti riassumendo questi profili ponderati dalla distribuzione delle dimensioni delle bolle misurata. Questi profili di frazione di vuoto sono stati confrontati con quelli misurati. Nel risultato è stato mostrato che la transizione tra il muro e il picco del nucleo nei profili per il flusso di aria-aria verso l'alto poli-disperso in un tubo di 51,2 mm era bene riflesso usando la correlazione di Tomiyama. Più tardi su questo modello è stato esteso e utilizzato per indagare sulle forze di bolla per un altro database esteso comprendente tubi di grandi dimensioni (diametro interno 200 mm) (Lucas *et al.*, 2007). In tutti i casi la correlazione portano a buoni risultati rispetto a quelli sperimentali scoperte. L'applicabilità della correlazione ai flussi di aria-acqua è stata discussa anche da Tomiyama *et al.* (2002). È stato ottenuto un "diametro critico della bolla", cioè l'equivalente di sfera diametro della bolla a cui la forza di lift cambia il suo segno, di 5,8 mm per flusso aria-acqua a condizioni ambiente. Per flussi di bolle monodispersi hanno introdotto tre flussi diversi regimi per flusso verticale ascendente:

- il regime delle pareti per dimensioni delle bolle comprese tra 0,4 e 5 mm;
- il regime neutro per le dimensioni delle bolle nel range da 5 a 6 mm;
- il regime di base per le bolle più grandi di 6 mm.

Nel confronto con i dati corrispondenti per la frazione di vuoto i dati di Sakaguchi *et al.* (1996) hanno mostrato un buon accordo con questa classificazione. Inoltre i dati sulla posizione radiale più probabile di una bolla verso l'alto in un regime turbolento ottenuto da Grossetete (1995) sono stati utilizzati da Tomiyama *et al.* (2002) per un controllo della loro correlazione sulla forza di sollevamento. Di nuovo ci fu un buon accordo ottenuto.

Per flussi di aria-acqua polidispersi in cui sono presenti bolle più piccole e più grandi della dimensione critica, il cambiamento di segno della forza di sollevamento dovrebbe portare a una separazione di piccole e grandi bolle. Piccole bolle dovrebbero essere trovate preferibilmente nella regione della parete vicina mentre quelle grandi dovrebbero concentrarsi vicino all'asse del tubo. Ciò è stato confermato sperimentalmente da Prasser *et al.* (2002). Utilizzando la tecnologia del sensore a rete metallica (Prasser *et al.*, 1998) le dimensioni delle bolle possono essere ottenute con algoritmi speciali descritto da Prasser *et al.* (2001). Conoscendo le dimensioni di ciascuna misura profili di frazione del volume del gas radiale della bolla decomposti a la dimensione della bolla può essere generata. Questi profili mostrano un muro trasparente picco per bolle inferiori a 5,5 mm mentre è stato osservato un picco di nucleo per bolle più grandi. Questa è una chiara indicazione che anche la forza di lift è importante per flusso polidisperso con alta frazione di vuoto. Tuttavia non c'è consenso in letteratura sul ruolo del lift laterale forza in tali flussi. Non appena la frazione di vuoti supera di diversi punti percentuali effetti dinamici come coalescenza di bolle e rottura supera i possibili effetti della forza di sollevamento. Anche le grandi bolle salgono velocemente nel nucleo del tubo possono spingere piccole bolle verso la parete del tubo e quindi generare distribuzioni a picco del muro per piccole bolle. Speciale attenzione deve essere prestata all'effetto della turbolenza sulla forza di lift. Anche in flussi uniformi di bolle c'è una complessa interazione tra turbolenza in fase liquida e migrazione di bolle come discusso nel lavoro di Lance e Bataille (1991). A causa delle fluttuazioni turbolente la velocità locale dovrebbe essere la forza istantanea di sollevamento modificata. Rabha e Buwa (2010) hanno condotto simulazioni numeriche usando il volume di metodo fluido per le singole bolle che si alzano in un campo lineare di taglio, nonché per gruppi di bolle monodisperse e polidisperse. Le simulazioni hanno confermato che c'è una chiara influenza di una bolla principale sulla migrazione laterale delle bolle nella sua scia. Essi hanno scoperto che la forza di sollevamento mediata nel tempo era più piccola per gruppi di bolle rispetto alle singole bolle. Tuttavia le simulazioni mostrano anche una tendenza simile riguardo al cambiamento del segno della forza di sollevamento per singole bolle e gruppi di bolle. Le indicazioni sopra menzionate suggeriscono che vi è un effetto netto della forza di sollevamento per le caratteristiche mediate nel tempo anche per flussi altamente turbolenti e flussi con vuoto elevato frazione. La conoscenza del ruolo della forza di sollevamento in tali flussi è importante per una modellazione adeguata. Tuttavia questo approccio non è l'unico che descrive la forza di lift. Ci sono altre equazioni che permettono di descrivere efficacemente questo tipo di forza

disponibili in letteratura.

La forza di lift governa la direzione di migrazione trasversale delle bolle in una fase di liquido continuo. La grandezza e la direzione della forza di lift è legata ai parametri delle bolle, come dimensioni e deformabilità. I fattori chiave che influenzano il coefficiente di lift sono il numero di Reynolds della bolla, velocità di taglio e deformabilità della bolla. Una prima ricerca sperimentale in un sistema bifase (Tomiyama *et al.*, 2002) ha osservato che piccole bolle tendono a migrare verso la parete del tubo che provoca una distribuzione della bolla del picco del muro, mentre le bolle grandi tendono a migrare verso il centro del tubo che si traduce in una distribuzione di bolle core-peak. Per una bolla assunta di forma sferica in risalita, il coefficiente di lift C_L è positivo in modo che la forza di sollevamento agisce in direzione della velocità del liquido decrescente, cioè nella direzione verso la parete del tubo.

2.3.5 Forze di dispersione turbolenta e wall lubrication

La forza di dispersione turbolenta viene definita quando la velocità del liquido fluttua continuamente e casualmente ed agisce sulla frazione di gas vuoto. La forza di dispersione turbolenta tiene conto dell'effetto dei vortici turbolenti nel liquido sulle bolle. L'espressione della forza di dispersione turbolenta è proposta da Lahey *et al.* (1993):

$$\langle A_b \rangle = C_{TD} \rho_c k_c \nabla \alpha_b \quad (2.39)$$

dove k_c è l'energia cinetica della turbolenza della fase continua. Il coefficiente di forza di dispersione turbolento, C_{TD} , per il flusso bifase in cui il gas è disperso è stato assunto pari a 0,1 da Lahey *et al.* (1993). Il coefficiente di dispersione turbolenta varia da 0,0 a 0,5 a seconda delle condizioni di funzionamento (Pourtousi *et al.*, 2014).

Come già accennato, la turbolenza può modificare fortemente il campo di flusso dei sistemi gas-liquido e il suo effetto sull'interfaccia le forze sono in alcuni casi non trascurabili. L'energia cinetica turbolenta può essere dissipata agendo in modi diversi e influenzando le dimensioni della bolla, area interfacciale, o velocità di scorrimento, o influenzando l'intensità turbolenta della fase continua. A causa delle difficoltà relative alle tecniche sperimentali, sono difficili da isolare i diversi effetti e quindi formulare modelli coerentemente. Alcuni autori tengono conto di questo fenomeno modificando il coefficiente di drag (Bakker e van den Akker 1994); mentre altri hanno espresso una nuova forza in grado di considerare le modifiche sulla fase dispersa indotta dalla turbolenza.

Quando una bolla in aumento arriva in prossimità delle pareti, il drenaggio normalmente uniforme del fluido intorno alla bolla cambia drasticamente. La condizione di no slip alla parete rallenta il tasso di drenaggio tra la bolla e la parete stessa che a sua volta aumenta la velocità di drenaggio al lato opposto. L'effetto netto di questa asimmetria è creare una forza idrodinamica che agisce per allontanare la bolla dalla parete. La forza di wall lubrication è espressa come:

$$\langle A_b \rangle = C_{WL} \rho_c \alpha_b \frac{|U_b - U_c|}{D} n_w \quad (2.40)$$

dove il coefficiente C_{WL} è stato usato come indicato da Antal *et al.* (1991), D è il diametro delle bolle e n_w è il versore normale esterno sulla superficie del muro. Il lavoro di modellazione di Jiao e Podowski (2012) ha rivelato che il movimento della bolla non è vincolato dalla forza di wall lubrication quando la distanza dalle pareti è maggiore del diametro della bolla. Shaver e Podowski (2015) hanno proposto una modifica al coefficiente C_{WL} basato sulla distanza dalla parete e suggeriva di usare la forza di sollevamento modificata vicino al muro anziché usando la forza di wall lubrication.

2.3.6 Cenni sulla forza di massa virtuale

La forza di drag tiene conto delle interazioni tra il liquido e le bolle in un campo di moto uniforme in condizioni stazionarie. Tuttavia, se le bolle sono accelerate in relazione al liquido, anche il liquido che circonda la bolla sarebbe accelerato. Questo contributo aggiuntivo è la cosiddetta forza di massa aggiuntiva o massa virtuale. Il concetto di forza di massa virtuale può essere compreso considerando il cambiamento nell'energia cinetica del liquido circondando una bolla in accelerazione. In un flusso potenziale, l'accelerazione induce una forza di resistenza su una sfera uguale a circa la metà della massa del fluido spostato dall'accelerazione della bolla. L'espressione generale per questo forza per unità di massa (quando agisce da solo sulle bolle) è la seguente (Drew e Lahey 1987):

$$\langle A_b \rangle = \left(\frac{C_{vm}\rho_c}{\rho_b + C_{vm}\rho_c} \right) \frac{DU_c}{Dt} \quad (2.41)$$

dove il coefficiente di massa virtuale C_{vm} è uguale a 0,5 per una sfera rigida in un flusso potenziale e varia tra 0,25 e 0,5 per una singola bolla. Per un sistema reale (affollato) è generalmente una funzione della frazione di volume del gas, α_b e la seguente relazione fu proposta da Wijngaarden e Jeffrey (1976):

$$C_{vm} = 1 - \frac{1}{3}(1 + 2.78)\alpha_b \quad (2.42)$$

dove α_b rappresenta qui l'hold up di gas globale. È importante notare che questa forza è solitamente trascurata quando si può assumere il movimento della fase dispersa come fermo. È il caso di questo lavoro in cui la descrizione di questa forza è stata fatta per completezza, ma all'atto pratico non è stata considerata.

Capitolo 3

Metodi e strumenti

3.1 La fluidodinamica computazionale

La fluidodinamica computazionale (nota anche con la sigla CFD che deriva dall'inglese Computational Fluid Dynamics) è uno strumento fondamentale nella ricerca e nell'ottimizzazione dei processi chimici. Si tratta di un metodo che utilizza algoritmi e procedure che portano ad una soluzione numerica dei problemi di fluidodinamica, le cui equazioni, nella maggior parte dei casi, non hanno una soluzione esatta. Ciò è possibile mediante l'utilizzo di un calcolatore e di un software, indispensabili per questo tipo di studi. Nella ricerca infatti, tramite simulazioni dettagliate è possibile descrivere il sistema oggetto di studio, rappresentando un ottimo sostituto di esperimenti pratici spesso costosi e talvolta impraticabili. In fluidodinamica si risolvono principalmente l'equazione di Navier-Stokes e altre relazioni ad essa collegate utilizzando metodi di discretizzazione che portano ad una soluzione numerica. Inoltre bisogna considerare il costo computazionale, ossia la quantità di tempo e memoria impiegata, per risolvere le equazioni. Talvolta è molto elevato e bisogna scegliere l'approccio giusto, il quale deve essere un buon compromesso tra massima accuratezza e costo minimo.

3.1.1 Soluzione numerica per equazioni non risolvibili analiticamente

Come accennato nell'introduzione in molti casi non è possibile risolvere le equazioni di trasporto in maniera analitica. Questo perché molte equazioni sono alle derivate parziali. A seconda del caso studiato ci possono essere equazioni alle derivate parziali ellittiche, paraboliche ed iperboliche. Per risolvere un problema non stazionario risultano solitamente equazioni iperboliche. Le equazioni paraboliche risultano da problemi diffusivi e quelle ellittiche sono tipiche di alcune equazioni, come ad esempio quella di Poisson. Esistono diversi metodi per risolvere le equazioni non risolvibili analiticamente. Il primo metodo è il metodo delle differenze finite: se ho un problema monodimensionale, come ad esempio il flusso in un tubo, si suddivide il dominio in tanti nodi, si individua un indice i che identifica i vari nodi ($i-1$, i , $i+1$, ...). Pertanto la discretizzazione della derivata prima rispetto alla coordinata x di una generica proprietà Φ sarà:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_i = \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{x_{i+1} - x_i} + O(\Delta x) \quad (3.1)$$

Si tratta di una serie di Taylor troncata al primo ordine per trovare un'equazione per la derivata. Per il punto $i-1$ la situazione è analoga (è sufficiente sostituire i con $i-1$ e $i+1$ con i). Si può anche scrivere la derivata nel punto i usando una differenza centrata, che considera il valore della variabile nei punti $i+1$ e $i-1$:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_i = \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + O(\Delta x^2) \quad (3.2)$$

Con questo metodo si possono valutare operatori di qualunque tipo e di qualunque variabile. È possibile discretizzare tutti gli operatori differenziali individuando i nodi nel dominio e trovando così i coefficienti di discretizzazione. Tuttavia la maggior parte dei calcoli numerici si basa su un metodo diverso da questo, il metodo dei volumi finiti. Nelle equazioni di trasporto viene sancita la conservazione della proprietà studiata, la quale non è necessariamente garantita da questi metodi. Ci sono metodi conservativi che con una semplificazione danno una soluzione sbagliata, ma con proprietà che si conservano. Il metodo dei volumi finiti condivide molte cose col metodo delle differenze finite e consente di conservare la proprietà studiata. Questo metodo è basato sulla riscrittura integrale delle equazioni differenziali così da poterle risolvere. Tutte le equazioni di trasporto hanno una forma simile:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + q_\Phi \quad (3.3)$$

Consideriamo un parallelepipedo: esso può essere diviso in tanti cubetti (detti volumi finiti). Ognuno di questi cubetti non ha intersezioni è la loro unione rappresenta il volume finale. Considerando uno solo di questi cubetti l'equazione (3.3) può essere integrata nel volume V del cubetto. Per calcolare Φ ho bisogno di indici (i,j,k) per ognuno dei quali dovrò ripetere il calcolo. Per capire meglio questo calcolo consideriamo un esempio bidimensionale. Se voglio calcolare tramite l'equazione (3.3) l'evoluzione di $\Phi(x,y)$ in una cella quadrata in regime stazionario scrivo il termine convettivo in funzione della proprietà entrante in ognuna delle 4 facce. Analogamente il termine viscoso. Il quarto termine rappresenta la generazione della proprietà studiata, termine che può essere positivo o negativo. Si usa la notazione Compass: individuo la cella con il centro P e le quattro facce vengono identificate con i quattro punti cardinali. Si calcola il flusso della proprietà studiata come somma dei 4 termini dei 4 lati della cella. Per calcolare il flusso della proprietà studiata ai lati e al centro di ogni cella è necessaria un'interpolazione. Si divide un dominio bidimensionale in tanti intervalli i cui centri identificano i volumetti di ogni cella. Considerando tre celle si ha una cella centrale, una ad est ed una ad ovest. Immaginando che il flusso si muova da sinistra a destra ad una velocità U in regime stazionario e senza generazione, l'equazione (3.3) si discretizza in questo modo:

$$(\rho U \Phi_e) S_e - (\rho U \Phi_w) S_w + (-\Gamma \nabla \Phi_e) S_e - (-\Gamma \nabla \Phi_w) S_w = 0 \quad (3.4)$$

In questa equazione ρ è la densità della generica proprietà Φ , U è la velocità, Γ è il coefficiente diffusivo e S_e e S_w sono rispettivamente le facce est e ovest delle celle. Questo calcolo deve essere ripetuto per ogni cella. Nell'equazione (3.4) compare l'operatore gradiente che, nel caso di una sola dimensione, rappresenta la derivata della proprietà Φ rispetto alla coordinata x . Viene discretizzata in questo modo:

$$\nabla \Phi_e = \frac{\Phi_e - \Phi_p}{x_e - x_p} \quad (3.5a)$$

$$\nabla \Phi_w = \frac{\Phi_p - \Phi_w}{x_p - x_w} \quad (3.5b)$$

Sostituendo le equazioni (3.5a-b) nella (3.4) si ottiene l'equazione di trasporto discretizzata (sapendo che $S_w = S_e$):

$$\Phi_e - \Phi_w - \frac{\Gamma}{\rho U} \frac{\Phi_e - \Phi_p}{x_e - x_p} + \frac{\Gamma}{\rho U} \frac{\Phi_p - \Phi_w}{x_p - x_w} = 0 \quad (3.6)$$

La procedura è identica per ogni cella. Si ottiene alla fine un sistema di equazioni lineare. Il calcolo di Φ al centro della cella può avvenire solo se si esplicita il suo valore al centro della faccia. Ora vediamo come si può calcolare Φ ad ovest e ad est della cella. Noto il suo valore al centro della cella, è possibile calcolarne il valore ai lati con una media aritmetica o pesata, a seconda delle dimensioni della griglia. Questa ipotesi va bene per un profilo di Φ lineare lungo la cella. Tuttavia con un fenomeno convettivo che rende il profilo non lineare, con questo metodo si genera un errore che aumenta all'aumentare dell'importanza del fenomeno convettivo rispetto a quello viscoso nell'equazione di bilancio. Pertanto viene scelto il valore a monte in relazione alla direzione del fluido. Il primo metodo illustrato è chiamato CDS (Central Differencing Scheme), mentre il secondo metodo è detto UDS (Upwind Differencing Scheme). Il metodo UDS è del primo ordine, mentre il CDS è del secondo ordine. Tornando alle tre celle considerate prima, se volessi discretizzare l'equazione di trasporto col metodo UDS, l'equazione (3.4), in caso di assenza di generazione e in regime stazionario, diventa:

$$\Phi_w \left(-1 - \frac{\Gamma}{\rho U \Delta x} \right) + \Phi_p \left(1 + 2 \frac{\Gamma}{\rho U \Delta x} \right) + \Phi_e \left(-\frac{\Gamma}{\rho U \Delta x} \right) = 0 \quad (3.7)$$

Questa equazione si riferisce ad una singola cella. Per una generica cella i -esima di un insieme di N celle, si imposta un sistema di equazioni in cui i pedici di Φ variano nel seguente modo: il pedice w diventa $i-1$, il pedice p diventa i , il pedice e diventa $i+1$. $\frac{\Gamma}{\rho U \Delta x}$ è un gruppo adimensionale. Per convenienza è meglio prendere in considerazione il suo inverso, definito come il numero di Peclet di cella: $Pe_c = \frac{\rho U \Delta x}{\Gamma}$. Questo particolare numero indica la discretizzazione della cella. Per casi tridimensionali conviene utilizzare la notazione indiciale:

$$\Phi_{i-1}(-1 - Pe_c) + \Phi_i(Pe_c + 2) + \Phi_{i+1}(-1) = 0 \quad (3.8)$$

Questa equazione è stata ottenuta moltiplicando la (3.7) per Pe_c . Si ottiene pertanto, in questo caso semplificato, un sistema lineare di N equazioni in N incognite, tante quante il numero di celle, con una matrice $N \times N$ tridiagonale. In due dimensioni ho 5 diagonali non nulle, in 3 dimensioni ne ho 7. La componente dovuta alla sorgente è un termine forzante perché rende diverso da zero il termine noto.

3.1.2 Cenni di fluidodinamica computazionale per sistemi turbolenti

Un sistema turbolento è dinamico in maniera non periodica e costituito, secondo una ricostruzione semplificata, da vortici di varie dimensioni. I vortici più grandi sono di dimensione pari in ordine di grandezza alla scala del sistema, e si spezzano in vortici sempre più piccoli secondo la cosiddetta cascata di energia cinetica turbolenta, fino ad arrivare alla scala più piccola, detta scala di Kolmogorov, oltre la quale i vortici si disperdono per attrito viscoso. Dall'adimensionalizzazione dell'equazione di trasporto deriva il numero di Reynolds, il quale se è basso indica che il regime è laminare, mentre se è elevato il flusso è turbolento. Il termine convettivo crea instabilità nel sistema, il termine viscoso la dissipa. Esistono diversi modelli per considerare la turbolenza nelle simulazioni:

- Direct Numerical Simulation (metodo DNS): è l'approccio più semplice da un punto di vista concettuale in cui si creano delle griglie che discretizzano lo spazio ed il tempo nella dimensione voluta per eseguirne i calcoli. Restituisce risultati accurati, ma ha un costo computazionale molto elevato.
- Reynolds Average Navier Stokes (metodo RANS): in questo approccio le equazioni vengono mediate secondo la media di Reynolds. Si assume cioè che si possa predire il moto turbolento come una grandezza media a cui si somma una grandezza variabile che fluttua nel tempo.

Queste grandezze esprimono un moto nel tempo. Pertanto le grandezze vengono mediate in un intervallo di tempo, riducendo in questo modo il tempo di calcolo, poiché viene solamente calcolato il moto medio, mentre il moto turbolento viene modellato.

- Large Eddy Simulation (metodo LES): si calcola numericamente il comportamento delle scale turbolente più grandi e si modellano le scale più piccole. Per operare questa suddivisione si creano appositi filtri numerici, con un risultato finale ancora più accurato del metodo RANS ed un costo computazionale che può essere ragionevole, a seconda del sistema in esame.

Per lo studio dei sistemi turbolenti è necessario definire l'energia cinetica turbolenta, matematicamente scritta come $k = \frac{1}{2}(u'_x u'_x + u'_y u'_y + u'_z u'_z)$, e la dissipazione di energia cinetica turbolenta, scritta come $\varepsilon = \nu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y}\right)^2$. Per la prima grandezza, ossia l'energia cinetica turbolenta k , è possibile scrivere un bilancio in cui compaiono due termini P ed ε . Il primo indica la velocità con cui si produce la turbolenza, il secondo indica la velocità con cui la turbolenza viene dissipata. La produzione della turbolenza avviene in presenza di un gradiente di velocità non nullo e si verifica su grandi scale. La dissipazione della turbolenza avviene su piccole scale ad opera della viscosità che prende i vortici e ne dissipa la turbolenza a causa delle interazioni viscosive tra le molecole. Questi due termini possono essere dello stesso ordine di grandezza e la turbolenza può essere creata e distrutta contemporaneamente.

Ci sono inoltre diversi modelli matematici per studiare i fenomeni inerenti alla turbolenza. Il modello k - ε è il modello più comune utilizzato in fluidodinamica computazionale per simulare le caratteristiche di flusso medio per un regime turbolento. Si tratta di un modello che fornisce una descrizione generale della turbolenza mediante due equazioni di trasporto. L'obiettivo principale per il modello k - ε è quello di migliorare il modello basato sulla lunghezza di mescolamento di Prandtl. A differenza dei precedenti modelli di turbolenza, il modello k - ε si concentra sui meccanismi che influenzano l'energia cinetica turbolenta. L'ipotesi alla base di questo modello è che la viscosità turbolenta è isotropa, in altre parole, il rapporto tra lo stress di Reynolds e la velocità media delle deformazioni è lo stesso in tutte le direzioni di velocità. Le equazioni alla base di questo modello sono due: una per l'energia cinetica turbolenta k ed una per la sua velocità di dissipazione ε :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \langle U_i \rangle \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P - \varepsilon \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle U_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + S_i \quad (3.9b)$$

In queste equazioni ci sono diversi parametri: $\langle U_i \rangle$ è la velocità media nella direzione i -esima, ν_T è la viscosità turbolenta, σ_k è il numero di Schmidt turbolento (il cui valore è circa unitario), P è un termine di produzione della turbolenza alle grandi scale, che dipende dalla viscosità turbolenta e dal gradiente di velocità ed è sempre positivo; σ_ε è un coefficiente empirico, circa pari a 1,3.

Questo modello è il modello di turbolenza più utilizzato e convalidato con applicazioni che vanno dai flussi industriali a quelli ambientali. Trova applicazioni nelle simulazioni di fluidi che escono da un tubo e si espandono in un mezzo stagnante. Può anche essere indicato come il modello di turbolenza più semplice per il quale devono essere fornite solo condizioni iniziali e al contorno. Tuttavia è più costoso in termini computazionale, ossia di memoria, rispetto al modello basato sulla lunghezza di mescolamento di Prandtl in quanto richiede due equazioni di trasporto in più. Questo modello sarebbe una scelta inappropriata per problemi quali iniettori e compressori poiché è stata dimostrata la riduzione sperimentale della precisione per flussi contenenti gradienti di

pressione di grandi dimensioni. Il modello k-ε non è molto efficace per studiare una varietà di casi importanti come flussi non confinati, strati limite curvi, flussi rotanti e flussi in condotti non circolari. Tuttavia viene utilizzato in questo lavoro per simulare i sistemi multifase, considerando solamente la fase continua liquida come turbolenta. In questo caso le equazioni (3.9a-b) diventano:

$$\frac{\partial \alpha_l k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_l k U_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_l \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \alpha_l (P - \varepsilon) \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_l \varepsilon U_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_l \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \alpha_l S_i \quad (3.9b)$$

In cui α_l è la frazione di liquido e $S_i = \frac{\varepsilon}{k} (1.44P - 1.92\varepsilon)$.

3.2 Il software OpenFOAM

OpenFOAM è un framework per lo sviluppo di applicazioni che utilizzano pacchetti funzionali contenuti in una raccolta di circa 100 librerie, scritte nel linguaggio C ++, per l'esecuzione di equazioni algebriche e differenziali su campi scalari e tensoriali. OpenFOAM viene fornito con circa 250 applicazioni predefinite che rientrano in due categorie: risolutori, ciascuno progettato per risolvere un problema specifico nella meccanica dei fluidi (o dei continui); e utility, progettate per eseguire attività che implicano la manipolazione dei dati. I risolutori di OpenFOAM coprono una vasta gamma di problemi in fluidodinamica. Gli utenti possono estendere la raccolta di solutori, utility e librerie in OpenFOAM. OpenFOAM è fornito con ambienti pre e post-elaborazione. L'interfaccia per la pre-elaborazione e il post-processing sono essi stessi utility OpenFOAM, garantendo in tal modo una gestione coerente dei dati in tutti gli ambienti.

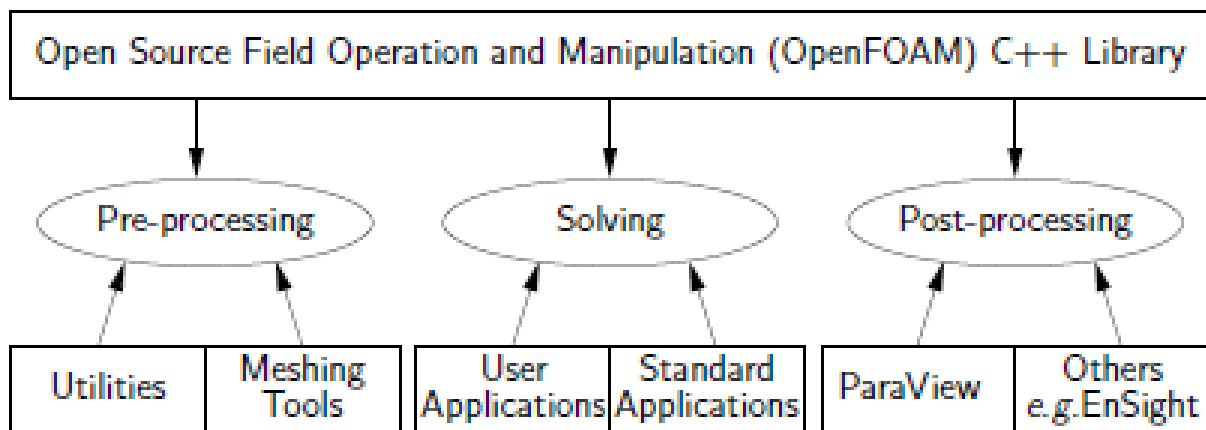


Figura 3.1: struttura del programma OpenFOAM

In figura 3.1 si può vedere uno schema della logica di programmazione di questo software: si parte definendo il pre-processing in cui vengono definite le condizioni al contorno, la geometria del sistema, vengono inseriti i dati e vengono definiti i metodi risolutivi; la seconda fase è la risoluzione in cui viene lanciata la simulazione. Il software elabora i dati inseriti con i metodi prestabiliti e calcola i risultati che verranno analizzati nella terza parte. Nel post-processing vengono analizzati i dati calcolati. Per quest'ultimo tipo di analisi viene utilizzato un programma, detto Paraview, che permette di analizzare il caso investigato con una scala di colori la cui intensità determina il valore di una grandezza e di conseguenza è possibile interpretare la fisica del sistema. Infine è possibile analizzare i dati creando grafici con Python, che permette un'ottima precisione nel tracciamento dei diagrammi stessi.

3.2.1 Applicazioni e librerie

OpenFOAM possiede un ampio insieme di applicazioni precompilate e in più gli utenti hanno anche la libertà di crearne di propri o modificare quelli esistenti. Le applicazioni sono suddivise in due categorie principali: solver progettati ciascuno per risolvere un problema specifico nella meccanica del continuum computazionale; utility che eseguono semplici attività di pre-e post-elaborazione, che coinvolgono principalmente la manipolazione dei dati e calcoli algebrici. OpenFOAM è diviso in un insieme di librerie precompilate che sono collegate dinamicamente durante la compilazione dei solver e delle utility. Librerie come quelle per i modelli fisici sono fornite come codice sorgente in modo che gli utenti possano aggiungere comodamente i propri modelli alle librerie. La compilazione è parte integrante dello sviluppo di applicazioni che richiede un'attenta gestione poiché ogni pezzo di codice richiede le proprie istruzioni per accedere ai componenti dipendenti della libreria OpenFOAM. Nei sistemi UNIX / Linux queste istruzioni sono spesso organizzate e consegnate al compilatore utilizzando l'utility UNIXmake standard. OpenFOAM usa il proprio script di compilazione wmake che è versatile e facile da usare. Ogni applicazione è progettata per essere eseguita da una riga di comando del terminale e per scrivere un set di file di dati associati a un caso particolare. I file di dati per un caso sono memorizzati in una directory dei vari casi. Per qualsiasi applicazione, la forma della voce della riga di comando per qualsiasi può essere trovata semplicemente inserendo il nome dell'applicazione sulla riga di comando con l'opzione -help. Tuttavia le applicazioni possono essere eseguite in parallelo. Il metodo di calcolo parallelo utilizzato da OpenFOAM è noto come decomposizione del dominio, in cui la geometria e i campi associati sono suddivisi in pezzi e allocati per separare i processori per soluzione. Il processo di computazione parallela implica: decomposizione della mesh e campi; eseguire l'applicazione in parallelo; e, dopo l'elaborazione del caso scomposto. L'esecuzione parallela utilizza l'implementazione openMPI di dominio pubblico dell'interfaccia standard di passaggio dei messaggi (MPI) per impostazione predefinita, sebbene sia possibile utilizzare altre librerie. I solver con la distribuzione OpenFOAM si trovano nella directory \$ FOAM_SOLVERS, raggiungibile mediante una riga di comando sul terminale. Questa directory è ulteriormente suddivisa in diverse directory per categoria di caso studiato in termini di caratteristiche chimico fisiche del sistema e dei suoi componenti (ad es. flusso incomprimibile, combustione e analisi della sollecitazione del corpo solido). Ad ogni solver viene dato un nome che è ragionevolmente descrittivo della situazione studiata, ad esempio, icoFoam risolve il flusso laminare incomprimibile. È disponibile una lunga lista di solver che permette di studiare la fisica di molti sistemi. Il metodo twoPhaseEulerFoam è adatto a sistemi di due fasi comprimibili fluide di cui una continua ed una dispersa. Pertanto è stato adottato nel nostro lavoro.

3.2.2 Struttura delle simulazioni su OpenFOAM

In questo paragrafo viene illustrata brevemente la struttura dei file e dell'organizzazione dei casi simulati su OpenFOAM. Normalmente, un utente assegnerebbe un nome ad ogni caso studiato, come ad esempio il caso del flusso in una cavità presente nella prima parte del tutorial ufficiale del software (disponibile online in formato pdf) che viene semplicemente chiamato cavity. Questo nome diventa il nome di una directory in cui sono archiviati tutti i file dei casi e le sottodirectory. Le directory dei casi possono essere localizzate ovunque, ma sarebbe meglio che vengano inserite all'interno di una sottodirectory di esecuzione della directory del progetto dell'utente. Un vantaggio di questo è che la variabile d'ambiente \$ FOAM_RUN è impostata su \$ HOME / OpenFOAM / \$ {USER} -6 / run per impostazione predefinita; l'utente può spostarsi rapidamente in quella directory eseguendo un alias predefinito sulla riga di comando. La struttura di base della directory per un caso OpenFOAM, che contiene il set minimo di file necessari per eseguire un'applicazione, possiede le seguenti caratteristiche:

- Una directory chiamata “constant”, che contiene una descrizione completa della mesh del caso in una sottodirectory polyMesh e file che specificano le proprietà fisiche per l'applicazione in questione, ad esempio transportProperties, o phaseProperties.
- Una directory chiamata “system,” per l'impostazione dei parametri associati alla procedura della soluzione stessa. Contiene almeno i seguenti 3 file (altri file sono necessari per svolgere altre operazioni, come ad esempio l'analisi dei dati):
 - “controlDict” dove sono i parametri di controllo dell'esecuzione set comprensivo di ora di inizio / fine, passo temporale e parametri per l'output dei dati;
 - “fvSchemes” dove gli schemi di discretizzazione utilizzati nella soluzione possono essere selezionati in fase di esecuzione;
 - “fvSolution” dove sono impostati i metodi numerici per il risolutore, le tolleranze e altri controlli dell'algoritmo per la corsa.
- Le directory "tempo" contenenti singoli file di dati per particolari campi, ad es. velocità e pressione. I dati possono essere i valori iniziali e le condizioni al contorno che l'utente deve specificare per definire il problema oppure i risultati scritti su file da OpenFOAM. I campi OpenFOAM devono sempre essere inizializzati. Il nome di ciascuna directory temporale è basato sul tempo simulato in cui i dati sono scritti. Poiché solitamente iniziamo le nostre simulazioni al tempo $t = 0$, le condizioni iniziali sono solitamente memorizzate in una directory denominata 0. Ad esempio il campo di velocità U e il campo di pressione p vengono inizializzati rispettivamente dai file 0 / U e 0 / p .

3.2.3 Definizione della mesh

La mesh è parte integrante della soluzione numerica e deve soddisfare determinati criteri per garantire una soluzione valida e quindi accurata. Durante ogni esecuzione, OpenFOAM verifica che la mesh soddisfi un insieme abbastanza ristretto di vincoli di validità e cessa di funzionare se i vincoli non sono soddisfatti.

Per impostazione predefinita, OpenFOAM definisce una mesh di celle poliedriche arbitrarie in 3-D, delimitate da facce poligonali arbitrarie, cioè le celle possono avere un numero illimitato di facce dove, per ogni faccia, non vi è alcun limite sul numero di nodi né alcuna restrizione su il suo allineamento. OpenFOAM offre grande libertà nella generazione e manipolazione di mesh, in particolare quando la geometria del dominio è complessa o cambia nel tempo. Le condizioni che una mesh deve soddisfare sono:

- **Punti.** Un punto è una posizione nello spazio 3D, definita da un vettore in unità di metri (m). I punti sono compilati in un elenco e ogni punto è indicato da un'etichetta, che rappresenta la sua posizione nell'elenco, a partire da zero. L'elenco punti non può contenere due punti diversi in una posizione esattamente identica né un punto che non faccia parte almeno di una faccia.
- **Facce.** Una faccia è una lista ordinata di punti, a cui un punto fa riferimento con la sua etichetta. L'ordine delle etichette punto in una faccia è tale che ogni due punti vicini sono collegati da un bordo, cioè si seguono punti mentre si viaggia lungo la circonferenza della faccia. Ogni faccia è indicata dalla sua etichetta, che rappresenta la sua posizione nella lista. La direzione del vettore normale della faccia è definita dalla regola della mano destra, cioè guardando verso una faccia, se la numerazione dei punti segue un percorso antiorario, il vettore normale punta verso di te.

Ci sono due tipi di faccia:

- **Facce interne.** Sono quelle facce che collegano due celle (e non può mai essere più di due). Per ogni faccia interna, l'ordinamento dei punti è tale che la i punti normali della

faccia siano nella cella con il numero più grande, cioè per le celle 2 e 5, i punti normali in 5;

- **Facce di confine.** Il confine si trova di fronte a quei punti che appartengono a una cella che coincide con il limite del dominio. L'ordinamento delle etichette dei punti è tale che i punti normali della faccia siano fuori dal dominio computazionale.

Le facce dovrebbero generalmente essere convesse; per lo meno il centro della faccia deve essere al suo interno. Le facce possono essere deformate, cioè non tutti i punti di esse devono essere complanari.

- **Celle.** Una cella è una lista di facce in ordine arbitrario. Le celle devono avere le proprietà elencate di seguito.
 - **Contiguità.** Le celle devono coprire completamente il dominio computazionale e non devono sovrapporsi l'un l'altro.
 - **Convessità.** Ogni cella deve essere convessa e il suo centro deve essere al suo interno.
 - **Chiusura.** Ogni cella deve essere chiusa, sia geometricamente che topologicamente dove:
 - la chiusura geometrica richiede che quando tutti i vettori dell'area faccia sono orientati verso l'esterno della cella, la loro somma dovrebbe essere uguale al vettore zero con precisione di macchina;
 - la chiusura topologica richiede che tutti i bordi di una cella vengano usati esattamente da due facce della cella in questione.
- **Facce di confine.** Si tratta di un elenco di patch, ciascuno dei quali è associato ad una condizione al contorno. Una patch è un elenco di etichette delle facce che chiaramente devono contenere solo volti di contorno e nessuna faccia interna. Il limite è richiesto per essere chiuso, cioè la somma di tutti i vettori dell'area della faccia di confine equivale a zero alla tolleranza della macchina.

La directory constant contiene una sottodirectory polyMesh in cui sono contenute le informazioni sulla griglia. La descrizione nella cartella polyMesh è basata su facce e, come già detto, le facce interne connettono 2 celle e le facce di confine indirizzano una cella e una patch limite. A ciascuna faccia viene pertanto assegnata una cella "proprietario" e una cella "vicina", in modo che la connettività attraverso una determinata faccia possa essere semplicemente descritta dal proprietario e dalle etichette delle celle adiacenti. Nel caso dei confini, la cella connessa è il proprietario e al vicino viene assegnata l'etichetta "-1".

3.2.4 Il Post Processing

Il principale strumento di post-processing fornito con OpenFOAM è un modulo lettore per l'esecuzione con ParaView, un'applicazione di visualizzazione open-source. Il modulo è compilato in 2 librerie, PVFoamReader e vtkPVFoam utilizzando la versione 5.4.0 di ParaView fornita con la versione OpenFOAM. ParaView utilizza Visualization Toolkit (VTK) come motore di elaborazione dati e rendering e può pertanto leggere qualsiasi dato in formato VTK. OpenFOAM include l'utility foamToVTK per convertire i dati dal formato originale al formato VTK. Ciò significa che qualsiasi strumento grafico basato su VTK può essere utilizzato per fare il post-processing dei casi studiati su OpenFOAM. Questo fornisce un mezzo alternativo per usare ParaView con OpenFOAM. In altre parole, il modulo lettore per ParaView è lo strumento di post-elaborazione primario per OpenFOAM. In alternativa i dati OpenFOAM possono essere convertiti in formato VTK per essere letti da ParaView o da qualsiasi altro strumento grafico basato su VTK.

paraFoam è uno script che avvia ParaView utilizzando il modulo lettore fornito con Open-FOAM. Viene eseguito come qualsiasi utilità di OpenFOAM tramite il singolo comando all'interno della directory case o con l'opzione -case con il percorso case come argomento.

ParaView utilizza una struttura ad albero in cui i dati possono essere filtrati dal modulo del caso di livello superiore per creare set di sottomoduli. Ad esempio, un tracciato del contorno di pressione potrebbe essere un sottomodulo del modulo case che contiene tutti i dati di pressione. Il punto di forza di ParaView è che l'utente può creare un numero di sotto-moduli e visualizzare quelli che servono per creare l'immagine o l'animazione desiderata. Ad esempio, possono utilizzare le opzioni geometria solida, vettori mesh e velocità, ad un grafico di pressione del contorno, attivando e disattivando qualsiasi elemento, se necessario.

3.3 Metodi di risoluzione ed implementazione del GBPE

L'equazione di bilancio di popolazione generalizzato (GPBE) descrive l'evoluzione dei sistemi multifase di particelle polidisperse che trovano applicazioni in molti campi, dalla fisica e dalla chimica fino ad applicazioni di tipo ingegneristico. In letteratura negli ultimi anni sono stati proposti diversi metodi di soluzione per il GPBE. Tra questi, i metodi dei momenti basati sulla quadratura (QBMM) nell'ultimo decennio sono diventati sempre più in uso nei casi studiati a causa del loro basso costo computazionale. Molti metodi appartengono a questa categoria: il Quadrature Method of Moments (QMOM), il Direct Quadrature Method of Moments (DQMOM), il Conditional Quadrature Method of Moments (CQMOM), e l'Extended Quadrature Method of Moments (EQMOM). Questi metodi si basano sull'idea di risolvere il bilancio di popolazione generalizzato tracciando l'evoluzione spaziale e temporale di alcune proprietà integrali della funzione di densità numerica sottostante (NDF), che a sua volta definisce lo stato del sistema multifase polidisperso. Queste proprietà intrinseche sono note come momenti del NDF e, per la soluzione di molti problemi teorici e pratici, è necessaria solo una piccola serie di momenti di ordine inferiore. A causa delle sue caratteristiche, il metodo della quadratura dei momenti (QMOM) è particolarmente adatto per risolvere problemi spazialmente disomogenei, dove la popolazione dispersa di particelle, bolle o goccioline, che costituisce la fase polidispersa del sistema multifase, si sposta nello spazio fisico. Quindi l'integrazione di questi metodi in codici di fluidodinamica computazionale (CFD) commerciali, accademici interni e open source è l'obiettivo di molti lavori recenti di ricerca.

I momenti della funzione numero di densità (NDF) sono collegati tra loro da complesse relazioni matematiche, che esprimono l'esistenza di una NDF sottostante. Se gli schemi numerici (per l'integrazione del tempo e dello spazio) utilizzati per la soluzione delle equazioni di trasporto del momento non conservano queste relazioni, il corrispondente insieme di momenti, dopo l'integrazione numerica, può diventare irrealizzabile. Per garantire la realizzabilità dei momenti è necessario utilizzare specifici metodi numerici. Vikas et al. (2011) hanno proposto una particolare metodo che preserva la realizzabilità usando schemi di discretizzazione di alto ordine per le equazioni di trasporto dei momenti. Tuttavia, questi metodi numerici non garantiscono che i momenti della NDF siano tra valori minimi e massimi fisicamente significativi specifici del problema particolare analizzato durante i calcoli. Questi vincoli possono dipendere dalle condizioni al contorno e / o dalle condizioni iniziali e possono essere rispettati cercando procedure numeriche che mantengano la soluzione limitata. Su questo aspetto particolare, è importante analizzare gli approcci adottati per altre variabili limitate. L'esempio più semplice si riferisce a uno scalare passivo delimitato tra un valore minimo e un valore massimo: in questo senso molti schemi di discretizzazione sono adatti per garantire questa proprietà, dal first order upwind al cosiddetto schema bounded Total Variation Diminishing (TVD). Un altro importante esempio è quello della frazione di volume della fase dispersa che è direttamente correlata a un momento del NDF. Chiaramente, la frazione di volume deve essere limitata tra zero e uno mediante la procedura numerica. Rusche (2002) ha sottolineato che gli esistenti schemi di

discretizzazione limitati potrebbero non garantire il limite della frazione di volume a causa del forte legame tra la frazione di volume e l'accoppiamento di velocità multifase. A questo proposito, Weller (2002) ha proposto uno schema di discretizzazione efficiente preservando i limiti della frazione di volume, attualmente disponibile all'interno del codice CFD OpenFOAM. Anche i momenti della NDF sono quantità fisiche che devono essere limitate tra un determinato intervallo sancito dalla fluidodinamica del sistema. Analogamente alla fase dispersa, vengono proposti altri momenti di NDF con il loro campo di velocità ma con la differenza che i valori minimo e massimo dei momenti non sono noti a priori. Pertanto, al fine di garantire sia la limitazione che la realizzabilità dei momenti della NDF dal punto di vista numerico, è necessario adottare specifiche misure in termini di implementazione e soluzione numerica delle equazioni di trasporto del momento all'interno dei codici CFD. Naturalmente, questi devono essere implementati coerentemente con la struttura del codice CFD utilizzato, e per questo motivo alcune delle soluzioni qui proposte non sono universali, ma dipendono dal codice CFD adottato. In un lavoro di Buffo et al (2016) è discussa e sperimentata, per la prima volta con il codice OpenFOAM, una specifica implementazione, che garantisce limiti, insieme a schemi numerici che preservano la sostenibilità. Questa implementazione si basa sull'estensione del summenzionato metodo di Weller (2002) alle equazioni di trasporto del momento, insieme all'utilizzo degli schemi di discretizzazione realistici proposti da Vikas et al. (2011).

3.3.1 Limitatezza e realizzabilità del momento

Come è noto, la soluzione numerica di equazioni differenziali alle derivate parziali (come il metodo a volume finito, FV, tipico dei codici CFD) può introdurre degli errori, che possono sommarsi, portando addirittura a previsioni sbagliate. L'errore di discretizzazione, che rappresenta la differenza tra la soluzione esatta delle equazioni di conservazione e la soluzione esatta del sistema algebrico lineare delle equazioni derivate dalla discretizzazione, può essere generalmente ridotto diminuendo la dimensione della griglia o usando metodi di discretizzazione di tempo e spazio di alto ordine. L'errore numerico, intrinseco alla procedura numerica, poiché è la differenza tra la soluzione iterativa e la soluzione esatta delle equazioni lineari, può essere limitato impostando tolleranze appropriate o adottando misure particolari nell'implementazione delle equazioni. Anche per quanto riguarda la soluzione numerica delle equazioni di trasporto del momento nei codici CFD, è evidente che questi due tipi di errore non possono essere evitati, influenzando la limitatezza e la realizzabilità del momento, ma solo limitati utilizzando appropriate procedure numeriche. Come menzionato i momenti della NDF rappresentano quantità fisiche e quindi assumono valori limitati tra minimi e massimi. Queste non sono semplici quantità scalari, ma rappresentano la polidispersità di un sistema multifase. Inoltre, i momenti devono rispettare le relazioni complesse per i vincoli di realizzabilità e i valori massimo e minimo non sono noti a priori. La limitatezza può essere violata localmente a causa di errori di iterazione, ma usando una corretta implementazione numerica questo problema può essere risolto. Si noti, infatti, che i momenti vengono trasportati nello spazio fisico con la velocità della fase dispersa U_d ad obbedire a un'equazione di trasporto simile a quella della frazione di volume della fase dispersa α_d . Per definizione α_d è delimitato tra zero e uno e come sottolineato da Hill (1998) e Rusche (2002) la soluzione numerica della sua equazione di trasporto può violare questo vincolo fisico, anche quando si utilizzano schemi di discretizzazione limitati. Inoltre, il fatto che la frazione di volume della fase dispersa sia correlata ai momenti del NDF suggerisce che la procedura numerica adottata per evitare errori di iterazione e per assicurare il limite per α_d possa essere applicata anche all'equazione di trasporto del momento. Cerchiamo di descrivere prima il problema relativo alla frazione di volume. Le equazioni dominanti per α_d e per il suo complemento a uno, α_c , derivano dalla seguente equazione:

$$\frac{\partial \rho_i \alpha_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \alpha_i U_i) = \Gamma_i \quad (3.10)$$

dove ρ_i è la densità della fase i-esima, α_i è la frazione volumica della fase i-esima e Γ_i è il termine di scambio di massa; e può essere scritta nella seguente forma non conservativa:

$$\frac{\partial \alpha_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d U_d) = \frac{\Gamma_d}{\rho_d} - \frac{\alpha_d}{\rho_d} \left(\frac{\partial \rho_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla \rho_d \right) \quad (3.11a)$$

$$\frac{\partial \alpha_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c U_c) = \frac{\Gamma_c}{\rho_c} - \frac{\alpha_c}{\rho_c} \left(\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + U_c \cdot \nabla \rho_c \right) \quad (3.11b)$$

e insieme con le due condizioni $\alpha_d + \alpha_c = 1$ e $\Gamma_d + \Gamma_c = 0$, le equazioni (3.11a-b) garantiscono che la massa del sistema sia correttamente conservata. È importante osservare anche che, in caso di trasferimento di materia e quando entrambe le fasi sono incompressibili, i termini sorgente di entrambe le equazioni sono uguali a zero. Lo schema di discretizzazione adottato può giocare un ruolo nel preservare il limite di α_d e α_c tra 0 e 1 anche nella soluzione numerica delle equazioni (3.11a-b). In generale, per le grandezze scalari, è noto che lo schema di first order upwind è in grado di garantire il limite, mentre i regimi standard di ordine superiore possono produrre soluzioni illimitate, quando la griglia adottata è troppo grossolana. Negli ultimi anni, molti schemi di discretizzazione di alto ordine sono stati proposti specificamente per quantità che sono limitate tra un intervallo definito. Tuttavia, in caso di errori di iterazione che influenzano la soluzione dei campi di velocità, il valore di α_d può essere illimitato, indipendentemente dal particolare schema di discretizzazione adottato per l'equazione della frazione di volume. In questo caso, una diversa strategia di implementazione dell'equazione (3.11a) può risolvere questo problema (Rusche, 2002) come descritto di seguito. Nel modello di approccio euleriano a due fluidi (Two Fluid Model, TFM) solitamente implementato nei codici CFD solo l'equazione (3.11a) è risolta, quindi la frazione di volume della fase continua α_c viene calcolata come complemento ad 1 della frazione della fase dispersa. La conservazione totale di massa viene applicata sommando le equazioni (3.11a-b) che portano alla seguente espressione:

$$\nabla \cdot (U_{vm}) = \frac{\Gamma_d}{\rho_d} + \frac{\Gamma_c}{\rho_c} - \frac{\alpha_d}{\rho_d} \left(\frac{\partial \rho_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla \rho_d \right) - \frac{\alpha_c}{\rho_c} \left(\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + U_c \cdot \nabla \rho_c \right) \quad (3.12)$$

dove $U_{vm} = \alpha_d U_d + \alpha_c U_c$ è la velocità volumetrica media, il cui campo è a divergenza nulla, se entrambe le fasi sono incompressibili e non vi è trasferimento di massa. L'equazione di Poisson per il calcolo della pressione è derivata dall'equazione (3.12), assicurando che l'interpolazione di U_{vm} alle facce delle celle soddisfi esattamente l'equazione di continuità della miscela (dal punto di vista numerico). Tuttavia, come sottolineato da Rusche (2002), U_d potrebbe non essere a divergenza nulla. Questo fatto, insieme agli errori di iterazione intrinseci alla procedura numerica, può portare alla violazione locale del vincolo di limitatezza per la frazione di volume della fase dispersa. Diversi approcci proposti per superare questo problema sono stati testati da Rusche (2002), dimostrando che un modo efficace per garantire il limite per la frazione di volume, è quello proposto da Weller (2002). Questo metodo inizia dalla definizione della velocità volumetrica media U_{vm} e della velocità relativa $U_r = U_c - U_d$, così che è possibile scrivere la velocità della fase di dispersione nel modo seguente:

$$U_d = U_{vm} - \alpha_c U_r = U_{vm} - (1 - \alpha_d) U_r \quad (3.13)$$

Sostituendo questa equazione nella (3.11a) si ottiene:

$$\frac{\partial \alpha_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d U_{vm}) - \nabla \cdot (\alpha_d (1 - \alpha_d) U_r) = \frac{\Gamma_d}{\rho_d} - \frac{\alpha_d}{\rho_d} \left(\frac{\partial \rho_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla \rho_d \right) \quad (3.14)$$

In caso di assenza di trasferimento di massa (cioè $\Gamma_d = 0$) e quando la fase dispersa è incomprimibile, si può dimostrare che l'implementazione riportata nell'equazione (3.14) è in grado di preservare il limite della frazione del volume di fase dispersa: infatti, il secondo termine fornisce una soluzione limitata se il campo di U_{vm} è a divergenza nulla e il terzo termine garantisce che $0 \leq \alpha_d \leq 1$ poiché va a zero a entrambi i limiti. Rusche (2002) ha osservato che questa procedura numerica non può ancora garantire il limite della frazione di volume se vengono adottati schemi di discretizzazione di alto ordine standard, specialmente nel caso di griglie grossolane; tuttavia questo inconveniente può essere evitato utilizzando schemi di discretizzazione limitati (Passalacqua e Fox, 2011). Inoltre, un altro limite noto di questo approccio è la non linearità dell'equazione (3.14) rispetto a α_d : il limite è garantito solo se l'equazione è risolta in modo completamente implicito, richiedendo iterazioni per raggiungere la convergenza. Ma, come sottolineato da Rusche (2002), la procedura di iterazione potrebbe non essere sempre convergente, specialmente quando il passo di integrazione temporale non è sufficientemente piccola: ma ancora questo aspetto non rappresenta un problema nelle simulazioni transitorie, perché i piccoli passi temporali sono solitamente richiesti per problemi di stabilità. Nel caso di simulazioni stazionarie, invece, questo approccio non è ancora sufficiente per garantire campi limitati di α_d e anche la soluzione addizionale dell'equazione di trasporto per la frazione di volume di fase continua α_c . Dopo ogni iterazione, la limitatezza della frazione di volume viene applicata localmente mediante la seguente equazione:

$$\alpha_d^* = \frac{\alpha_d}{\alpha_d + \alpha_c} \quad (3.15)$$

dove la frazione di volume α_d^* è ora delimitata tra 0 e 1. In questo caso, la conservazione totale di massa (cioè, $\alpha_d^* + \alpha_c^* = 1$) è assicurata solo quando viene raggiunta la convergenza finale. È importante osservare che il limite di α_d è garantito dall'implementazione mostrata nell'equazione (3.14) per le simulazioni transitorie solo se le due fasi sono entrambe incomprimibili e non c'è trasferimento di massa. Altrimenti, quando una delle due condizioni non viene verificata, il limite non è necessariamente garantito da questa specifica procedura numerica, poiché la massa non è più una quantità conservata. In questi casi, un'attenzione particolare dovrebbe essere prestata quando le equazioni sono risolte, utilizzando un intervallo di tempo appropriato (o coefficienti di sotto-rilassamento in caso di simulazioni di stato stazionario); tuttavia, il termine non lineare presente nell'equazione (3.14) dovrebbe in ogni caso ridurre la possibilità di una soluzione illimitata. Come accennato in precedenza, l'equazione di trasporto del momento generico del NDF è simile all'equazione della frazione del volume della fase dispersa, e quindi è chiaro che un approccio simile per preservare il limite può essere applicato anche all'equazione del trasporto del momento. Infatti, se l'equazione di trasporto del momento è implementata come scritto nell'equazione finale di trasporto del momento, possono verificarsi problemi simili a quelli che appaiono per α_d , poiché la velocità U_d è usata per trasportare i momenti nello spazio fisico. Sostituendo la velocità di fase dispersa U_d definita nell'equazione (3.13), la seguente equazione di bilancio può essere scritta come segue:

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + \nabla \cdot (M_k U_{vm}) - \nabla \cdot (M_k (1 - \alpha_d) U_r) = S_k \quad (3.16)$$

dove il secondo termine è limitato quando U_{vm} è a divergenza nulla (in caso di fase incomprimibile senza trasferimento di massa) e il terzo termine va a zero nel limite di α_d tendente all'unità, cioè quando la popolazione di elementi dispersi sta diventando la fase continua (la cosiddetta inversione di fase) e quindi i momenti non sono più definiti, portando a una soluzione non fisica. Come accennato in precedenza, la realizzabilità del momento impostato è correlata all'esistenza di una funzione numero di densità sottostante, che corrisponde a quel momento specifico impostato. La realizzabilità influisce sulla stabilità della simulazione, poiché nel metodo basato sulla quadratura dei

momenti (QMOM) viene adottato un algoritmo di inversione per ricostruire la NDF; quando un insieme di momenti irrealizzabili viene alimentato all'algoritmo di inversione, viene ottenuta una NDF ricostruita non realizzabile che porta a instabilità numeriche indesiderate. La generazione di insiemi di momenti irrealizzabili o "corrottabili" può sorgere in primo luogo quando si utilizzano schemi di discretizzazione spaziale e schemi di tempo standard di ordine elevato per il trasporto dei momenti della NDF. Ad esempio, gli schemi di interpolazione di ordine elevato spaziale per i valori di momento sulla faccia tra due celle vicine possono trasformare un insieme realizzabile in uno non realizzabile, e questo insieme corrotto può propagarsi rapidamente nel dominio computazionale attraverso il termine convettivo. In alcuni lavori sono state proposte diverse strategie per correggere un momento corrotto, ma questi sono solo in grado di ripristinare l'insieme, non per prevenire e risolvere in modo permanente il problema di corruzione. Inoltre, queste correzioni sono state proposte per una NDF monovariata, vale a dire quando viene considerata una sola coordinata interna, perché in questo caso la condizione di realizzabilità può essere verificata a priori attraverso i determinanti di Hankel-Hadamard. Per NDF multivariata, vale a dire con più coordinate interne, la teoria matematica per la realizzabilità non è disponibile e non è possibile stabilire a priori se un insieme di momenti è realizzabile prima dell'applicazione dell'algoritmo di inversione. Tuttavia, è importante osservare che se un set valido viene trasportato correttamente nello spazio fisico la proprietà di realizzabilità viene preservata. Molto recentemente è stata introdotta una classe di schemi numerici di alto livello, basata sul metodo dei volumi finiti, che garantisce la realizzabilità di un insieme di momenti. Questa classe di schemi di discretizzazione si basa sull'idea di calcolare i flussi di momento interpolando sulle facce delle celle i valori dei pesi e dei nodi di quadratura, rappresentando la NDF ricostruita, invece dei momenti stessi: in questo modo, è possibile costruire schemi di discretizzazione che impediscano sempre il sorgere del problema di corruzione del momento. In particolare, è stato dimostrato che il momento impostato è sempre realizzabile quando i nodi di quadratura sono interpolati usando il first order upwind e i pesi di quadratura sono interpolati con schemi di ordine elevato, a condizione che lo schema di integrazione temporale sia esplicito e il passo di integrazione temporale utilizzato segue alcuni vincoli specifici. Inoltre, è anche possibile dimostrare che è matematicamente equivalente usare il metodo first order upwind per pesi e nodi o interpolare direttamente il momento con gli schemi di first order upwind. Per ulteriori dettagli il lettore può fare riferimento alla letteratura specialistica, ossia ai lavori citati sopra. In questo lavoro è stato utilizzato lo schema di discretizzazione First order upwind per le equazioni di trasporto dei momenti, garantendo quindi limitatezza e realizzabilità dei momenti.

3.3.2 Implementazione del modello complessivo in OpenFOAM

In questo lavoro, il solver TFM TwoPhaseEulerFoam viene modificato introducendo la soluzione del bilancio di popolazione basata sul QBMM per la descrizione di sistemi fluido-fluido o di fluido-particelle. Questo solver è stato progettato sul lavoro di Weller (2002) per la soluzione della frazione di volume e l'algoritmo di PIMPLE (combinazione di SIMPLE e PISO) per la soluzione dell'accoppiamento pressione-velocità. Questa procedura consente il sotto-rilassamento all'interno della fase temporale, migliorando la convergenza e la robustezza dell'algoritmo. Una rappresentazione schematica della procedura del solutore è riportata in figura 3.2 (nella pagina successiva). Le equazioni risolte in questo codice sono le seguenti:

$$\frac{\partial \alpha_d}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_d U_d) = \frac{\Gamma_d}{\rho_d} - \frac{\alpha_d}{\rho_d} \left(\frac{\partial \rho_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla \rho_d \right) \quad (3.11a)$$

$$\frac{\partial \rho_i \alpha_i U_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \alpha_i U_i U_i) = -\nabla \cdot (\alpha_i \tau_i) - \alpha_i \nabla p + \rho_i \alpha_i g + \Gamma_i U_i + \Lambda_i \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + \nabla \cdot (M_k U_{vm}) - \nabla \cdot (M_k (1 - \alpha_d) U_r) = S_k \quad (3.16)$$

L'equazione di trasporto (3.18) viene risolta due volte inserendo al posto del pedice i il pedice c per la fase continua ed il pedice d per la fase dispersa. Si impongono le seguenti condizioni per i termini di trasferimento di materia e quantità di moto:

$$\Gamma_d + \Gamma_c = 0 \quad (3.19a)$$

$$\Gamma_d U_d + \Gamma_c U_c + \Lambda_c + \Lambda_d = 0 \quad (3.19b)$$

I tensori di tensione τ_d e τ_c , che esprimono stress sia viscosi che turbolenti, sono formulati secondo le approssimazioni di Newton e Boussinesq. Lo standard k- ε il modello per la fase continua viene utilizzato come modello di turbolenza (basato sulle equazioni 3.9a-b):

$$\frac{\partial \alpha_c k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c k U_c) - \nabla \cdot \left(\alpha_c \frac{\mu_{tc}}{\rho_c \sigma_k} \nabla k \right) = \alpha_c (G - \varepsilon) \quad (3.20a)$$

$$\frac{\partial \alpha_c \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \varepsilon U_c) - \nabla \cdot \left(\alpha_c \frac{\mu_{tc}}{\rho_c \sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) = \alpha_c \left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \right) \quad (3.20b)$$

Le costanti del modello sono quelle del modello k- ε standard: $C_\mu = 0.09$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$, $C_{\varepsilon,1} = 1.44$ e $C_{\varepsilon,2} = 1.92$. Il termine G è il tasso di produzione della turbolenza, indicato nelle equazioni (3.9a-b) con la lettera P, definito come: $G = 2 \frac{\mu_{tc}}{\rho_c} (S : \nabla u_c)$, dove il tensore velocità di deformazione è a sua volta definito come $S = \frac{1}{2} (\nabla u_c + (\nabla u_c)^T)$.

Capitolo 4

Descrizione dei casi esaminati e dettagli numerici

In questo capitolo verranno illustrati tutti i casi analizzati, descrivendo con precisione i dettagli numerici di ogni simulazione effettuata in questo lavoro. Non avendo trovato in letteratura un esperimento ideale, con un insieme soddisfacente di misure locali e globali eseguite in un ampio spettro di condizioni operative, necessarie per una completa convalida del modello, sono stati considerati molti casi differenti. In questo lavoro sono state effettuate simulazioni sui quattro sistemi diversi: la colonna di Diaz, la colonna di Deen, la colonna di Zhang e la colonna di Kulkarni. Le previsioni ottenute dalle simulazioni effettuate verranno confrontate con i dati sperimentali presenti in letteratura e con i risultati ottenuti nel lavoro di Buffo *et al.* (2016). In tutti i casi considerati, il sistema è costituito da aria come fase dispersa e acqua di rubinetto come fase continua e sono state utilizzate proprietà fisiche standard. Nei casi delle colonne di Deen e Zhang, è stato aggiunto NaCl all'acqua per prevenire la coalescenza e la rottura delle bolle. Pertanto, in questi due casi, le simulazioni sono state eseguite con un diametro di bolla fisso. Invece, negli altri casi la coalescenza e la rottura sono state considerate attraverso la soluzione del bilancio di popolazione. È stato eseguito uno studio indipendente sulla griglia per ogni geometria considerata in questo lavoro. Questo aspetto è importante in quanto la soluzione finale dipende dalle dimensioni della griglia stessa, in particolare dalle previsioni relative alle quantità di turbolenza. Questa procedura è stata eseguita in una fase preliminare prima di procedere alla simulazione di tutte le condizioni operative mostrate nel manoscritto. Un esempio dello studio di dipendenza dalla griglia è stato riportato in un lavoro di Buffo *et al.* (2013), in cui la colonna rettangolare di Diaz *et al.* (2008) è stata studiata. In quel caso, i ricercatori hanno iniziato con un approccio molto grossolano e hanno monitorato la variazione di variabili globali importanti (come l'hold up di gas, il periodo di oscillazione del pennacchio e il diametro medio di Sauter delle bolle). In seguito sono state effettuate simulazioni con griglie a diverso numero di celle, a dimostrazione che una griglia di 32 (larghezza) \times 11 (profondità) \times 70 (altezza) di celle non uniformi, vale a dire un totale di 24.640 celle, rappresentano un buon compromesso tra accuratezza e costi di composizione. Ulteriori raffinamenti portavano a variazioni trascurabili. La stessa procedura è stata applicata anche qui per tutti i casi: alla fine dello studio è stata adottata per i casi delle colonne di Deen e Zhang, rispettivamente una griglia uniforme 30 \times 30 \times 136 (122.400 celle), ed una griglia uniforme 30 \times 30 \times 270 (243.000 celle). Per il caso inerente alla colonna di Kulkarni, la situazione ottimale è stata raggiunta con una griglia di 176.400 celle, con il piano circolare del cilindro discretizzato con una maglia con una griglia a forma di O (O-grid mesh) di 980 elementi e la direzione longitudinale con 180 elementi. È importante notare che l'obiettivo principale di questo lavoro è la descrizione delle principali caratteristiche fluidodinamiche del sistema e non dei dettagli fini della turbolenza. Per questo motivo, è stato deciso di esaminare la variazione delle variabili globali importanti con la dimensione della griglia. Probabilmente si potrebbe raffinare ulteriormente le griglie computazionali per calcolare meglio le quantità turbolente, ma l'inconveniente dell'aumento del costo computazionale sarebbe molto più significativo dei vantaggi derivati da una descrizione migliorata della fisica. Una rappresentazione grafica degli schemi delle colonne è mostrata in figura 4.1a, mentre lo schema delle griglie computazionali utilizzate è riportata in figura 4.1b.

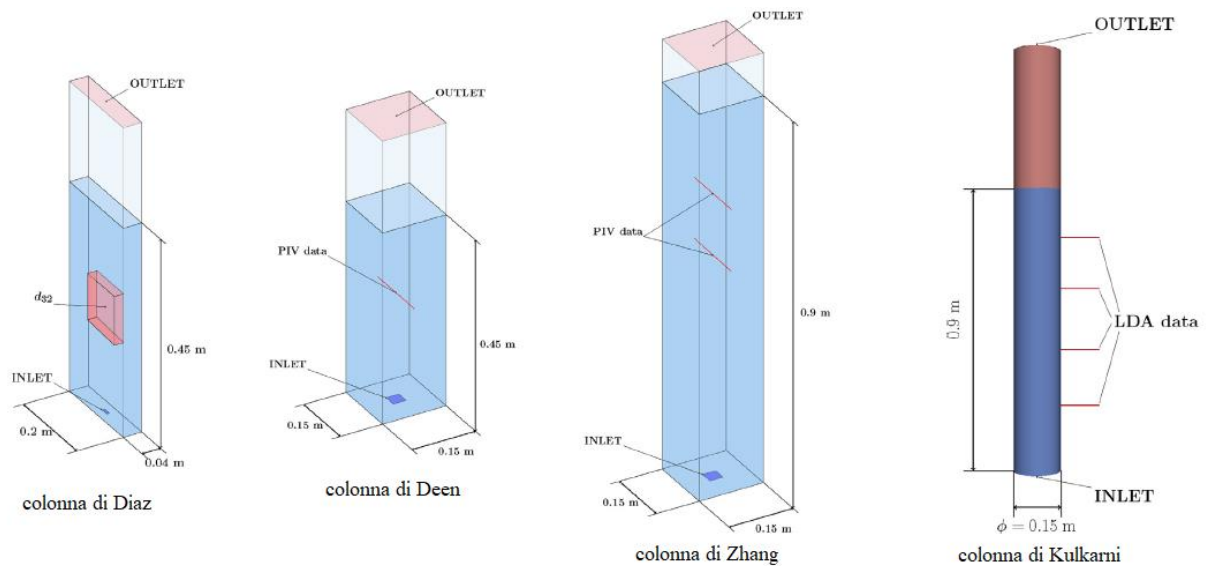


Figura 4.1a: le colonne studiate in questo lavoro



Figura 4.1b: le colonne studiate con la propria griglia computazionale

L'integrazione del tempo è stata effettuata secondo una soluzione di discretizzazione del primo ordine implicita, con una selezione adattiva del passo temporale secondo la condizione CFL: questa scelta assicura la stabilità della simulazione anche a velocità di gas superficiali più elevate. In tutti i casi, il processo di formazione di bolle e di distacco dallo sparger non è stato simulato, ma modellato mediante l'uso di superfici in ingresso con area totale pari all'area totale di passaggio dello sparger. Poiché vi sono differenze significative tra gli sparger porosi e quelli forati in termini di dimensioni delle bolle risultanti, vengono utilizzate due correlazioni diverse per stimare la media di ingresso in

forma di bolle: nel primo caso la correlazione di Kazakis *et al.* (2008) è stato utilizzato, mentre nel secondo caso è stata adottata la correlazione formulata da Geary and Rice (1991).

4.1 Colonna di Diaz

4.1.1 Introduzione

L'approccio sperimentale del primo caso in esame prevede una colonna a bolle in PMMA (polimetilmetacrilato) con una larghezza di 0,2 m, un'altezza di 1,8 m e 0,04 m di profondità. La colonna viene riempita con acqua ($H = 45$ cm) a temperatura ambiente e pressione atmosferica mentre l'aria è alimentata da una camera a gas attraverso un diffusore di alluminio (otto fori centrati di 1 mm di diametro e 6 mm di passo). Questa configurazione di colonna si è rivelata molto interessante dal momento che nel liquido i vortici generati dai pennacchi delle bolle sono un fattore favorevole per miscelare e, quindi, per accelerare tutti i fenomeni di trasporto, migliorando l'efficienza di trasferimento di molte proprietà. Inoltre, l'esistenza di strutture di flusso mostrano che il ricircolo è un fenomeno tipico in colonne a bolle su scala industriale. La velocità superficiale del gas varia da 2,4 a 21,3 mm/s mediante l'appropriata combinazione di misuratori di portata volumetrici. La convalida delle simulazioni numeriche si basa su tre punti principali:

1. Osservazioni visive: le immagini sono state ottenute utilizzando un sistema video digitale costituito da una fotocamera digitale e un Luce alogena da 500W.
2. Valutazione globale dell'hold-up di gas e POP (plume oscillation period): è basata sulle serie temporali di pressione ottenuta mediante due sensori piezoresistivi (Keller PR35X, 0-200 e 0-500 mbar con e una risoluzione di 0,002% di fondo scala) montati a filo sul fianco della colonna. Il calcolo dell'hold-up globale di gas si basa sul noto metodo manometrico che considera la differenza di pressione statica tra due sensori di pressione. D'altra parte, il calcolo del POP viene eseguito mediante la trasformazione delle serie temporali di pressione dal dominio del tempo al dominio della frequenza e la successiva identificazione del frequenza caratteristica del picco nella banda a bassa frequenza (0-1 Hz).
3. Diametro medio di Sauter della bolla: un sistema di immagini video costituito da una fotocamera digitale ad alta velocità (Redlake MotionScope PCI® 1000s) e una lampada alogena da 500W è stato usato per tale scopo. Sono stati selezionati diversi frame per ogni valore di velocità. Dopo la manipolazione delle istantanee ottenute mediante un software di elaborazione delle immagini, il diametro medio della bolla Sauter (d_{32}) viene calcolato tramite il rapporto tra il momento di ordine tre ed il momento di ordine due della NDF.

Per la soluzione numerica delle equazioni del modello è stato usato un sistema di discretizzazione ad alta risoluzione nel lavoro di Diaz *et al.* (2007). Al fine di stabilire una risoluzione spaziale adeguata, sono state utilizzate tre differenti griglie esaedriche non uniformi con celle 17 (larghezza) \times 7 (profondità) \times 25 (altezza)(grossa), $32 \times 11 \times 47$ (medie) e $62 \times 19 \times 92$ (fini). L'integrazione temporale viene eseguita da mezzo di uno schema di discretizzazione del tempo di Eulero implicito di secondo ordine. L'effetto di cambiare il passo temporale sui risultati è studiato per dimostrare l'adeguatezza del passo di tempo selezionato. L'area dello sparger attraverso cui il gas entra nel dominio è modellato come un rettangolo con un'area uguale all'area totale racchiuso da 8 fori circolari 1mm centrati. L'ingresso del gas è modellato fornendo il valore della velocità normale in funzione della portata volumetrica del gas. All'uscita del gas, viene implementata una condizione limite di degassamento. Questo tipo di condizione al contorno viene utilizzata per modellare una superficie libera da cui bolle disperse, che "vedono" questo confine come un'uscita, possono uscire, ma la fase liquida, che "vede" è come una parete senza attrito. La pressione di uscita non è specificata, invece, una distribuzione di pressione è calcolata su questa posizione fissa limite, rappresentativa del peso delle variazioni di altezza della superficie nel flusso reale. L'altezza della dispersione gas-liquido è considerata uguale all'altezza del fase liquida al tempo zero. Considerando che il massimo hold-up

globale di gas osservato sperimentalmente in questo lavoro è circa pari al 4%, questa approssimazione può essere considerata valida. Al resto delle pareti sono impostate una condizione no slip per il liquido fase e una condizione al contorno di no slip per la fase gassosa. Nel lavoro di Diaz *et al.* (2008) le simulazioni vengono eseguite su due computer alimentati da un processore AMD Athlon 64 3200+ in esecuzione a 2,01 GHz con 2,00 Gb di RAM e un AMD Athlon 64 X2 4400+ Dualcore processore in esecuzione a 2,21 GHz con 3.37 GBRAM, rispettivamente. Ogni simulazione transitoria dura da diverse ore a diversi giorni a seconda della risoluzione spaziale e temporale. Nel lavoro di Diaz *et al.* (2008) sono state eseguite le simulazioni considerando solamente la forza di trascinamento. Il modello di riferimento del lavoro svolto da Diaz *et al.* (2008) ha considerato una distribuzione a più dimensioni delle bolle, costituito da un minimo di 10 gruppi di bolle e diametri compresi tra 1 e 10 mm, rispettivamente. La convalida qualitativa del modello proposto è stata basata sull'analisi di immagini del flusso gas-liquido nella colonna a bolle e sul confronto tra dati sperimentali e risultati simulati di tre parametri essenziali nella fisica idrodinamica di questo tipo di flusso bifase: hold-up globale di gas, il POP, o periodo di oscillazione del pennacchio, e la distribuzione delle dimensioni della bolla (diametro medio di Sauter). Con l'intenzione di studiare altre alternative al modello di riferimento descritto sopra, sono state introdotte due modifiche. Innanzitutto, la distribuzione dimensionale multipla delle bolle è stata sostituita da una singola dimensione della bolla e i risultati sono stati confrontati. Il secondo aspetto è l'inclusione delle forze di non trascinamento (massa virtuale e forze di sollevamento). Inoltre sono stati compiuti precedenti studi sull'influenza della risoluzione della mesh e del passo temporale al fine di stabilire la miglior soluzione di compromesso fra il costo computazionale e la precisione dei risultati per griglia e passo temporale per le simulazioni. I risultati presentati nel lavoro di Diaz *et al.* (2008) rivelano che, qualitativamente, il modello riproduce il tipo di flusso gas-liquido osservato nella colonna a bolle, cioè il flusso vorticoso a tre regioni. Il modello predice regioni in cui il pennacchio è discendente, vorticoso e centrale così come il movimento oscillante del pennacchio che sono stati distinti visivamente. Inoltre, l'evoluzione dell'aerazione osservata sperimentalmente nella colonna a bolle è in buon accordo con i risultati calcolati. Quantitativamente, sia l'hold-up globale di gas che il POP sono stati riprodotti abbastanza bene dalle simulazioni con errori relativi (in valore assoluto) oscillanti tra 0-9% e 0-22%. Quando i risultati ottenuti con un modello di distribuzione di dimensioni multiple vengono confrontati con i risultati ottenuti utilizzando la distribuzione delle dimensioni di una singola bolla, è stato osservato che la maggior parte delle previsioni di hold-up di gas e POP globali ottenute risultavano peggiori con il secondo modello, specialmente a valori più alti della velocità di gas in ingresso. Tuttavia, a basse velocità del gas superficiale ($U_G = 0,24$ e $0,71$ cm/s), ossia quando la coalescenza e i fenomeni di disgregazione sono meno importanti, il modello monodisperso genera valori POP più vicini ai valori sperimentali. I risultati sperimentali ottenuti per il diametro di Sauter globale rivelano l'esistenza di una velocità di gas superficiale ($U_G \approx 1,20$ cm/s) che separa due regioni: una regione a cui predomina la coalescenza (a U_G bassa) e un secondo regione in cui si ha equilibrio tra i fenomeni di coalescenza e rottura. Il diametro di Sauter ottenuto per mezzo delle simulazioni è in buon accordo con i risultati sperimentali per valori di U_G da $1,20$ cm/s in su. A valori più bassi di U_G , l'accordo tra dati sperimentali e calcolati viene sempre meno e, quindi, e i modelli di coalescenza e rottura usati nel lavoro di Diaz *et al.* (2008) non sono in grado di riprodurre accuratamente la frequenza di insorgenza di questi fenomeni. La considerazione delle forze di non-trascinamento ha portato a due conclusioni diverse: la forza di massa virtuale non ha un effetto considerevole sui risultati in nessuno dei valori studiati di U_G ; mentre la forza di sollevamento ha un'influenza maggiore sui parametri calcolati ai valori più alti di U_G , con un maggiore disaccordo con i valori sperimentali. Per quanto riguarda l'hold-up globale di gas calcolato e il POP, oltre alla media temporale e al tempo dipendente, i risultati delle simulazioni effettuate nel lavoro di Diaz *et al.* (2008) differiscono notevolmente dai risultati sperimentali.

4.1.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni

La colonna di Diaz viene divisa in celle secondo le sue dimensioni: alla base della colonna utilizzata sperimentalmente si ha un rettangolo largo 0,2 m e profondo 0,04 m, mentre l'altezza del battente di liquido è pari a 0,45 m. In questo lavoro lo spigolo corrispondente alla larghezza viene diviso in 32 celle, mentre per lo spigolo corrispondente alla profondità viene diviso in 11 celle. Infine l'altezza è suddivisa in 70 celle. Il risultato è un parallelepipedo di dimensioni $32 \times 11 \times 70$ celle. In figura 4.2 è possibile osservare il particolare della base della colonna, grazie ad un'istantanea scattata virtualmente all'interno della colonna. Tuttavia è possibile notare che le celle non hanno forma cubica. Ogni spigolo è stato discretizzato con una diversa dimensione della singola cella monodimensionale. Nella colonna sperimentale è stato utilizzato uno sparger dotato di otto fori circolari, come mostrato in figura 4.3a: i centri dei fori circolari sono distanziati 6 mm l'uno dall'altro e ciascuno ha diametro pari a 1 mm (in figura 4.3b è possibile vedere lo sparger nelle simulazioni). Nelle nostre simulazioni questa struttura è stata rimpiazzata con un'unica sezione rettangolare di dimensione pari ad un rettangolo di 6×3 celle e riportato nella figura 4.3b. Nelle figure 4.4a e 4.4b è proposta una visione frontale e laterale della colonna di Diaz. L'obiettivo delle simulazioni effettuate sulla colonna di Diaz è un confronto con i dati sperimentali e con il modello simulato da Buffo *et al.* (2013) del nuovo modello proposto in questo lavoro e simulato in OpenFOAM. Il confronto si basa sulla valutazione delle tre grandezze investigate negli studi precedenti di carattere sia sperimentale che modellistico: l'hold-up globale di gas, il plume oscillation period (POP) e il diametro medio di Sauter delle bolle (d_{32}). Saranno inoltre analizzati gli andamenti di queste grandezze nel tempo ad ogni simulazione effettuata. Il calcolo delle grandezze in esame sarà effettuato con una media dei dati ottenuti scartando quelli inerenti alla fase transitoria (che si assume corrisponda a circa 40 secondi). Ci sarà un primo confronto alla minima portata di gas ($U_G=2.4\text{mm/s}$), in cui sono state effettuate cinque simulazioni facendo entrare in gioco una forza alla volta ed analizzando l'influenza di ognuna di esse sulla fluidodinamica del sistema.

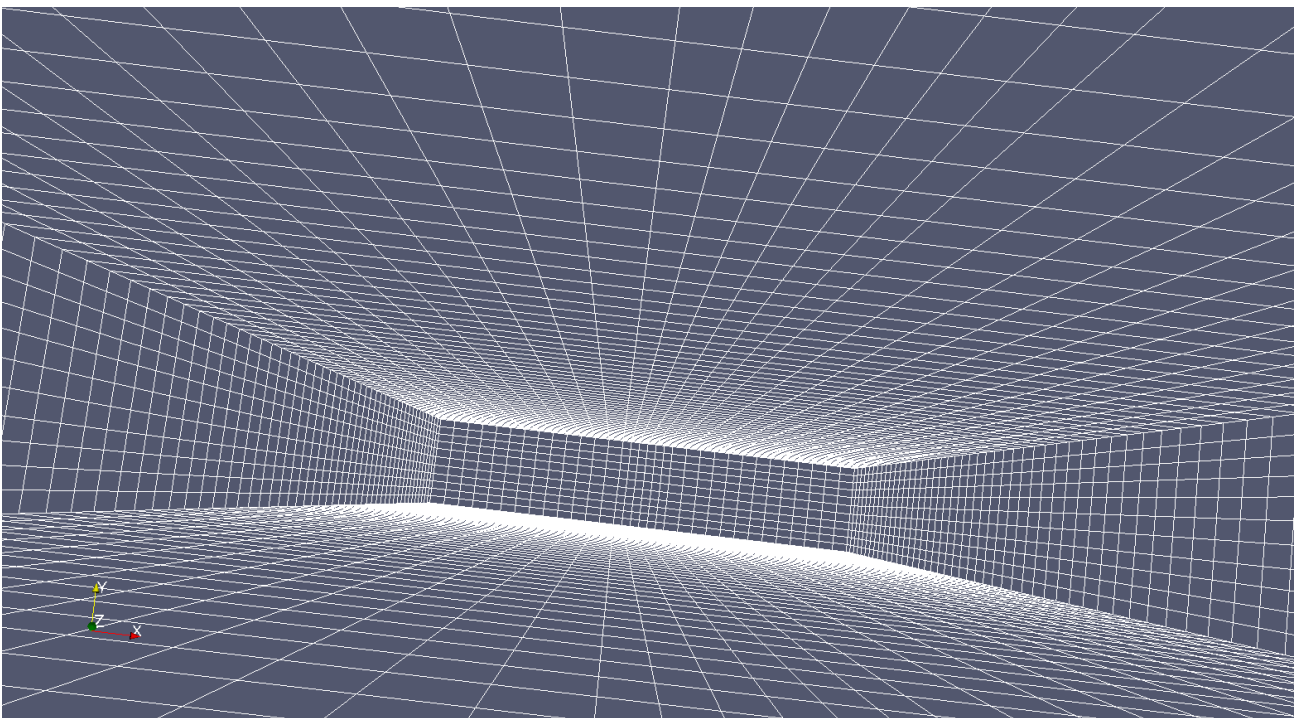


Figura 4.2: Interno della colonna di Diaz (Paraview)

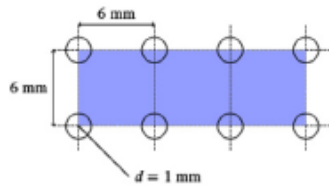


Figura 4.3a: Forma e dimensioni dello sparger della colonna di Diaz utilizzata negli esperimenti



Figura 4.3b: Forma dello sparger della colonna di Diaz nelle simulazioni effettuate (Paraview)

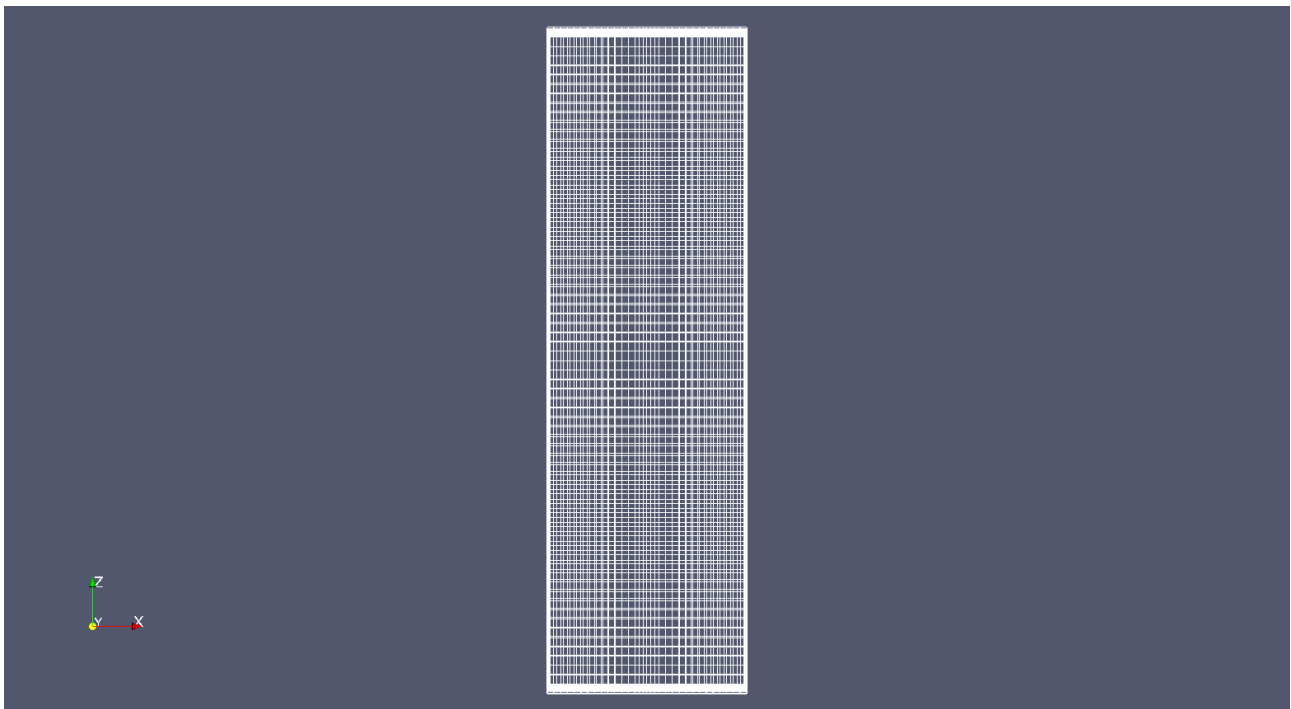


Figura 4.4a: Vista frontale della mesh della colonna di Diaz (Paraview)

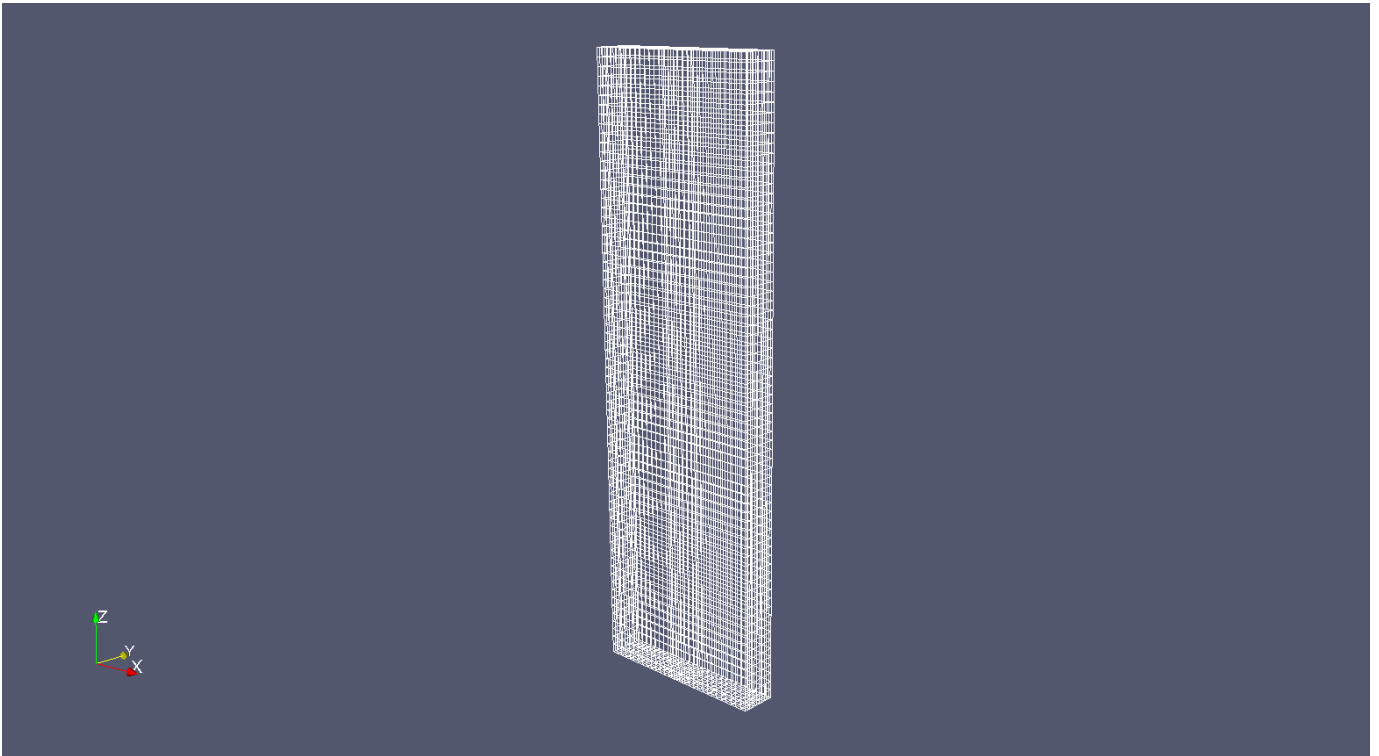


Figura 4.4b: Vista laterale della colonna di Diaz (Paraview)

Successivamente questo confronto verrà operato alla massima portata ($U_G=21.3\text{mm/s}$), ripetendo la medesima procedura di analisi. Le simulazioni effettuate sono elencate qui sotto:

SIMULAZIONE	FORZE IN GIOCO
1	Drag
2	Drag e lift
3	Drag e turbulent dispersion
4	Drag, lift e turbulent dispersion
5	Drag, lift, turbulent dispersion e wall lubrication

Tabella 4.1: schema delle simulazioni del primo confronto della colonna di Diaz (operato alle portate di 2.4mm/s e 21.3mm/s)

Il secondo confronto che sarà fatto, si focalizzerà sul modello completo di tutte le forze che verrà simulato a cinque diverse portate, incluse le due già simulate in occasione del primo confronto (pertanto sono state effettuate tre simulazioni a tre portate intermedie), e verrà confrontato con i dati sperimentali e delle simulazioni effettuate in precedenza. Il confronto verrà operato come nella prima parte: si calcolano Hold-up, POP, e diametro medio di Sauter con le simulazioni del nuovo modello e si confrontano con i dati sperimentali e delle precedenti simulazioni. Le simulazioni effettuate sono elencate qui sotto:

SIMULAZIONE	PORTATA (MODELLO COMPLETO)
1	2.4 mm/s
2	7.1 mm/s
3	11.9 mm/s
4	16.6 mm/s
5	21.3 mm/s

Tabella 4.2: schema delle simulazioni del secondo confronto della colonna di Diaz (operato con tutte le forze in gioco, ossia drag, lift, turbulent dispersion e wall lubrication)

Tutte le simulazioni hanno una durata di 180 secondi, analogamente al lavoro di Buffo *et al.* (2013), in modo da avere un confronto su una medesima scala temporale.

4.2 Colonna di Deen

4.2.1 Introduzione

Nel lavoro di Deen *et al.* (2001) sono stati eseguiti alcuni esperimenti in una colonna a bolle tridimensionale riempita con acqua distillata. Per ottenere un sistema con assenza di fenomeni di coalescenza, vennero introdotti 4 g di sale da cucina per litro l'acqua presente nella colonna. La colonna ha una sezione trasversale quadrata ($W \times D$) di $0,15 \times 0,15 \text{ m}^2$ e un'altezza (L) di 1m. La colonna è inizialmente riempita con acqua fino ad un'altezza di 0,45 m. L'aria è stata introdotta nel sistema attraverso uno sparger piatto. La piastra del distributore conteneva 49 fori, con un diametro di 1 mm, che sono stati posizionati nel parte centrale della colonna con un passo quadrato di 6,25 mm. È stato utilizzato un sistema di immagine velocimetrica a particelle (PIV) a due telecamere per misurare simultaneamente le velocità del gas e del liquido. Nelle simulazioni numeriche del lavoro di Deen *et al.* (2001) questa colonna venne studiata imponendo le seguenti condizioni al contorno: la velocità del gas in ingresso $v_{g,in}$ veniva calcolata con la seguente formula:

$$v_{g,in} = \frac{v_{g,s}WD}{\alpha_g A_{in}} \quad (4.1)$$

dove $v_{g,s}$ è la velocità del gas superficiale e $W \times D$ denota l'area della sezione trasversale della colonna. È stato utilizzato il metodo LES (large eddy simulation) per studiare la fluidodinamica del sistema. Nel caso di utilizzo di una griglia più grossolana, l'area di ingresso del gas A_{in} è stata implementata in un'area centrale di 3×3 celle. Una velocità del gas superficiale di $4,9 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ porta a velocità del gas all'ingresso di 0,12 m/s. Nel caso delle griglie fini di 8×8 celle (cioè $A_{in} = 0,038 \times 0,038 \text{ m}^2$) erano utilizzato per l'ingresso del gas, che porta alla $v_{g,in} = 0,078 \text{ m/s}$. Sono state effettuate simulazioni con l'approccio RANS, in cui la turbolenza del sistema viene studiata con il modello k- ϵ , con l'introduzione alle pareti di wall functions come condizioni al limite, e simulazioni con l'approccio LES, con condizioni no slip alle pareti. All'uscita della colonna, è stata utilizzata una condizione al contorno per la pressione. Nel caso del modello k- ϵ , la superficie libera era catturata nelle simulazioni. La superficie libera è stata omessa per il LES, a causa di problemi di convergenza per i casi in cui erano incluse la forza di lift e/o la forza di massa virtuale. Nelle simulazioni, uno schema QUICK di terzo ordine limitato è stato utilizzato per la discretizzazione dei termini di convezione. Il sistema è stato simulato per un periodo di 150 s. I dati sono stati raccolti mediando le grandezze nel tempo negli ultimi 140 s, al fine di escludere la fase transitoria. Le simulazioni sono durate circa 90 ore in tempo reale su una macchina SGI Origin 2000, utilizzando 4 processori. I risultati ottenuti nel lavoro di Deen *et al.* (2001) mostrano che quando solo la forza di trascinamento è stata considerata, il pennacchio risale fino alla cima della colonna, senza diffusione trasversale. Questo è in contrasto con l'esperimento, dove il pennacchio invece si muove in direzione trasversale alla colonna in aggiunta al moto di risalita, il tutto in modo casuale. Di conseguenza, il profilo di velocità del liquido previsto mostra un forte picco al centro, dove il gas sale e una moderata corrente discendente accanto al pennacchio. Quando la forza di massa virtuale è inclusa, il comportamento è fondamentalmente lo stesso. Il piccolo effetto della forza di massa virtuale può essere spiegato dal fatto che le simulazioni producono uno stato quasi stazionario. Quando sia la forza di drag che la forza di lift è inclusa, il pennacchio si muove anche in direzione trasversale nella colonna, a causa della natura della forza di lift. Quando, oltre a queste forze, viene aggiunta la forza di massa virtuale, le differenze sono piccole. Dai risultati mostrati si nota che le simulazioni sono in buon accordo con i dati sperimentali, specialmente quelle effettuate utilizzando il modello LES. Questo perché nel

modello k- ϵ tutte le fluttuazioni di velocità su piccola scala sono modellate, mentre solo le fluttuazioni su larga scala vengono risolte. Nel lavoro di Deen *et al.*, (2001) queste fluttuazioni sembrano di dimensioni molto piccole, per questo motivo il modello LES sembra essere più adatto. Inoltre nelle simulazioni RANS si osservano grandi vortici lungo i lati del pennacchio. A causa dell'alta viscosità turbolenta, si ottiene uno stato quasi stazionario. In queste simulazioni si vede un grande vortice fisso accanto al pennacchio che produce una soluzione asimmetrica. Questo non accade per il modello LES perché predice profili di velocità, mediati nel tempo, più simmetrici, come osservato negli esperimenti. Per quanto riguarda il confronto con i dati sperimentali riguardo alle fluttuazioni di velocità nelle direzioni radiali e assiali, il modello k- ϵ risulta inadeguato alla loro descrizione, predicendo dei profili rispettivamente di un ordine di grandezza superiore e inferiore. Il modello LES invece si comporta molto meglio a tale riguardo. Infatti entrambi i profili mostrano un buon accordo con i dati sperimentali. Un ultimo confronto può essere fatto per l'energia cinetica turbolenta, k . Si vede che entrambe le simulazioni con il modello k- ϵ e il modello LES catturano la tendenza in modo ragionevole. La simulazione con il modello LES comunque mostra nel complesso il miglior accordo con i dati sperimentali. Nel lavoro di Buffo *et al.* (2016) è stata simulata in OpenFOAM la colonna a bolle a sezione quadrata studiata dal gruppo di Deen *et al.* (2001). La presenza di elettroliti, aggiunti per prevenire la coalescenza e la rottura negli esperimenti e per fissare la dimensione delle bolle ad un valore desiderato, è stata modellata semplicemente forzando a zero i termini sorgente del GPBE, risultando in valori costanti per i momenti del NDF. Ciò equivale a fissare la dimensione della bolla media (d_{32}) ad un valore costante, corrispondente alla dimensione della bolla d'ingresso, come riportato negli esperimenti, pari a 4 mm. È importante ribadire che i dati sperimentali sono misurazioni particle image velocimetry (PIV) eseguite su una linea orizzontale in una sezione trasversale centrale situata a 0,25 m rispetto alla sezione di ingresso della colonna. A causa della prossimità tra la sezione di misurazione e l'ingresso, l'altezza totale della colonna liquida e la portata del gas, il pennacchio delle bolle ha un moto puramente caotico e non viene raggiunta una configurazione stabile, anche perché la sezione quadrata non fissa il movimento del pennacchio ad un percorso pseudo bidimensionale, vincolato nella stessa direzione, come nella colonna di Diaz. L'accordo ottenuto dalle simulazioni di Buffo *et al.* (2016) con l'esperimento per questo caso è ragionevole per tutte le variabili misurate, ad eccezione della velocità assiale del liquido, dove il modello sottostima sia i percorsi di ricircolo ai lati sia il valore massimo della velocità del liquido al centro della colonna, e per le fluttuazioni della radice quadrata della velocità media del liquido nella direzione x , dove il modello non è in grado di catturare il sistema reale. Inoltre, le fluttuazioni di velocità del liquido lungo la coordinata z si trovano tra i valori di 0.4-0.7 della lunghezza normalizzata, mentre il valore di k è sovrastimato rispetto agli esperimenti nell'intervallo di lunghezza normalizzata. Questo disaccordo può essere spiegato dal fatto che le misure PIV sono planari, quindi sono misurate solo le coordinate x e z della velocità del liquido, mentre la k prevista è l'energia cinetica turbolenta calcolata con il modello k- ϵ e contiene tutte e tre le componenti delle fluttuazioni di velocità del liquido. Inoltre, vale la pena notare che negli esperimenti le fluttuazioni su piccola scala sono perse a causa della media spaziale delle misurazioni PIV, dove vengono misurate solo le fluttuazioni misurabili secondo la risoluzione dello strumento. A causa di ciò, le misurazioni PIV possono essere pensate come una controparte sperimentale del modello LES. Pertanto, il confronto viene eseguito tra le "fluttuazioni su larga scala" della velocità del liquido, misurata da PIV, e le "fluttuazioni su larga scala" istantanee dal modello di Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes (U-RANS). Il disaccordo può essere spiegato con il fatto che le "fluttuazioni su larga scala" misurate da PIV includono una parte delle fluttuazioni su piccola scala (fino alla dimensione del filtro PIV), che sono invece modellate dal nostro approccio di RANS non stazionario (usando l'ipotesi di turbolenza omogenea ed isotropa, sebbene le fluttuazioni di velocità in questo tipo di sistemi possano essere anisotrope). Se consideriamo anche questo aspetto, la discrepanza osservata è accettabile.

4.2.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni

La colonna di Deen viene divisa in celle secondo le sue dimensioni: alla base della colonna utilizzata sperimentalmente si ha un quadrato di lato pari a 0,15 m, mentre l'altezza della colonna di soluzione NaCl-acqua è pari a 0.45 m (altezza analoga alla colonna di Diaz). In questo lavoro lo spigolo corrispondente al lato del quadrato di base viene suddiviso in 30 celle, mentre per quanto riguarda l'altezza, lo spigolo corrispondente è suddiviso in 68 celle. È importante notare che viene simulato il pelo libero della fase liquida, pertanto la divisione in 68 celle non è da considerare per l'altezza di 0.45m della fase liquida, ma è l'altezza totale della colonna, pari a 1m. Il risultato è un prisma quadrato di dimensioni 30×30×68 celle. In figura 4.5 è possibile osservare il particolare della base della colonna, grazie ad un'istantanea scattata all'interno della colonna.

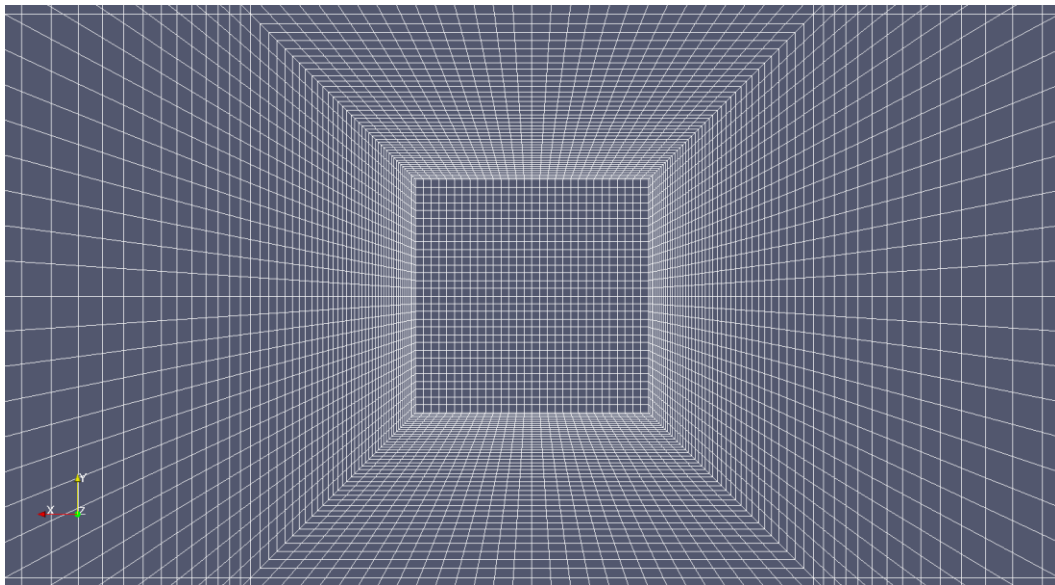


Figura 4.5: Interno della colonna di Deen (Paraview)

Lo sparger in questo caso è costituito da 49 fori disposti a formare un quadrato, che nel nostro lavoro viene virtualmente rappresentato da un quadrato di 6×6 celle. Nella figura 4.6 è possibile vedere un'istantanea della nostra simulazione:



Figura 4.6: Forma dello sparger della colonna di Deen nelle simulazioni effettuate (Paraview)

Le figure 4.7a-b mostrano un ulteriore schema della mesh della colonna di Deen con vista frontale e laterale con una leggera posizione sfalsata:

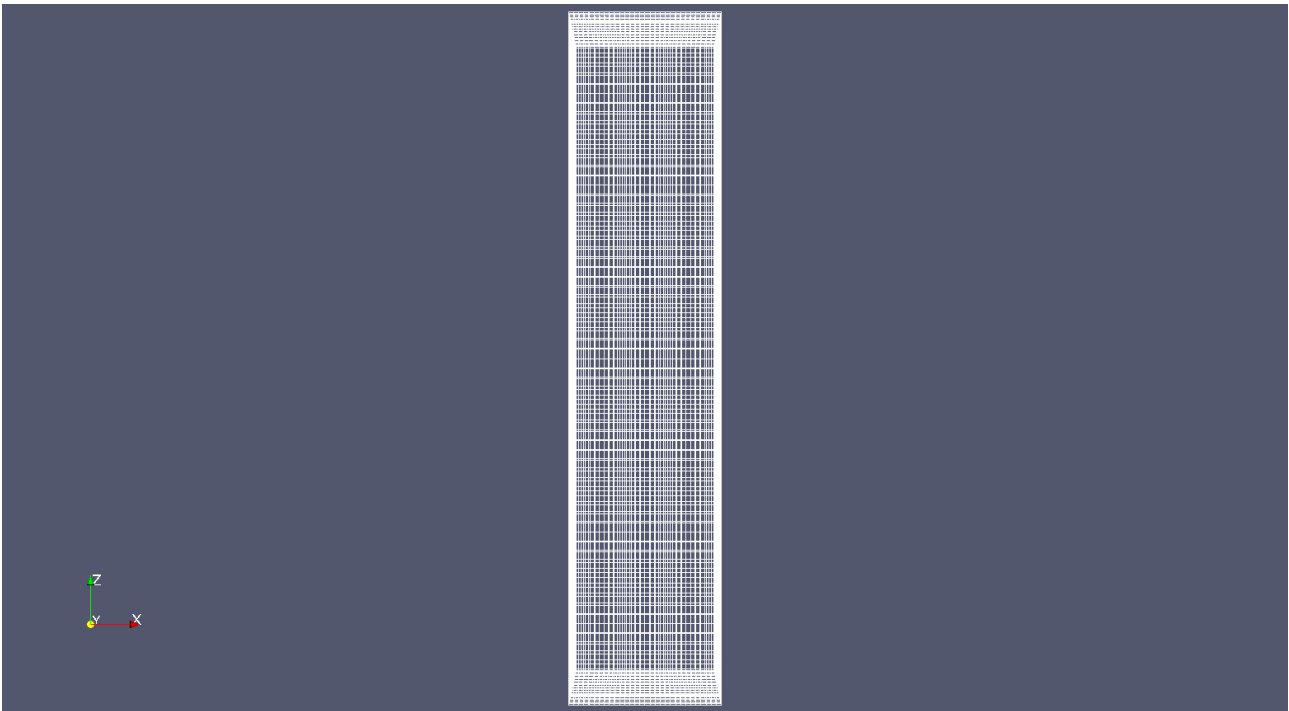


Figura 4.7a: Vista frontale della mesh della colonna di Deen (Paraview)

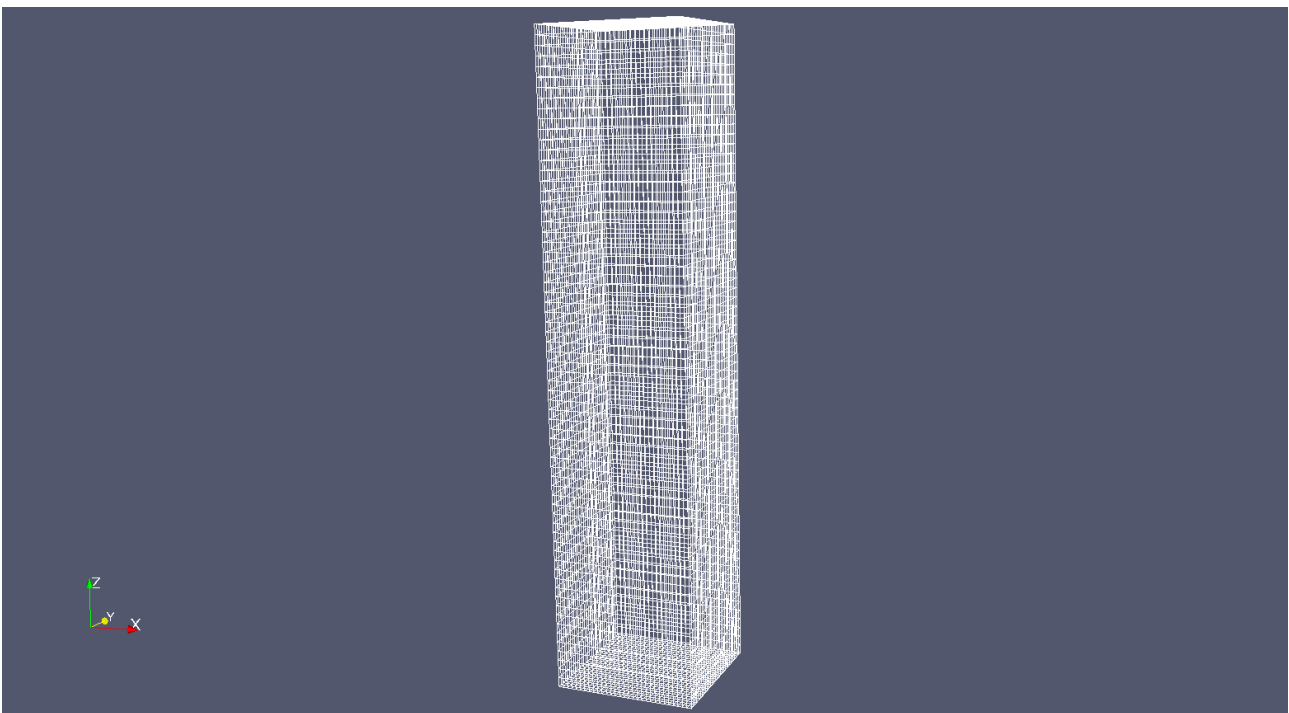


Figura 4.7b: Vista laterale della colonna di Deen (Paraview)

Per la colonna di Deen si analizza un unico caso fluidodinamico in cui la velocità superficiale di gas è pari a 4,9 mm/s, analogo al caso studiato nel lavoro di Buffo *et al.* (2016). Per questo caso si effettueranno cinque simulazioni facendo entrare in gioco ogni singola forza e studiandone l'effetto. È lo stesso metodo di studio che è stato applicato alla colonna di Diaz, ma in questo caso ci sono

alcune differenze: le simulazioni in questo lavoro hanno durata di 180 secondi, a differenza del lavoro di Buffo *et al.*, (2016) in cui la durata era fissata a 5000 secondi. Nelle simulazioni di questo lavoro entrano in gioco le forze di Drag, Lift, Turbulent dispersion e Wall lubrication. Nella tabella 4.3 sottostante viene riassunto l'insieme delle simulazioni effettuate e le forze in gioco in ognuna di esse:

SIMULAZIONE	FORZE IN GIOCO
1	Drag
2	Drag e lift
3	Drag e turbulent dispersion
4	Drag, lift e turbulent dispersion
5	Drag, lift, turbulent dispersion e wall lubrication

Tabella 4.1: schema delle simulazioni del primo confronto della colonna di Deen (operato alla portata di 4,9mm/s)

L'obiettivo di queste cinque simulazioni è un confronto con i dati sperimentali e con il modello fluidodinamico proposto nel lavoro di Buffo *et al.* (2016) per valutare l'effetto delle diverse forze interfacciali. Le grandezze che vengono monitorate in ciascuna simulazione sono l'energia cinetica turbolenta, i profili assiali di velocità di liquido e gas e le fluttuazioni di velocità del liquido (per la componente x e la componente z).

4.3 Colonna di Zhang

4.3.1 Introduzione

La colonna di bolle studiata da Zhang *et al.* (2006) è un caso molto simile a quello studiato nel lavoro di Deen *et al.* (2001). L'unico cambiamento dimensionale è dato dall'altezza della colonna d'acqua che raddoppia, passando da 0,45m a 0,9m. L'intera colonna è inizialmente riempita d'acqua, che funge da fase liquida continua. L'aria è usata come fase gassosa dispersa e introdotta nel centro del piano inferiore della colonna con $A_{in} = 0,03 \times 0,03m^2$ e $V_{G, in} = 0,1225m/s$ corrispondenti a una velocità del gas superficiale di 4,9 mm/s (il dato è identico alla portata in ingresso per la colonna di Deen). Anche in questo caso il regime fluidodinamico è omogeneo (bubbly flow regime) e non vengono considerati fenomeni di coalescenza e di rottura. La larghezza, profondità e altezza della colonna sono, rispettivamente, impostati su $W = 0,15$ m, $D = 0,15$ m, e $H = 0,90$ m. Lo sparger che introduce il gas è situato sulla base inferiore della colonna ad una distanza di 0,06m da ciascuna delle pareti circostanti della colonna. La dimensione della bolla di 4 mm usato nel lavoro di Deen *et al.* (2001) si basa sulle osservazioni sperimentali ed è stata ottenuta con la stessa procedura della colonna studiata da Deen *et al.* (2001), ossia aggiungendo NaCl per formare una soluzione salina che impedisca la coalescenza e la rottura, mantenendo così il diametro costante. Per ottenere informazioni più accurate sulle dimensioni della bolla nel lavoro di Zhang *et al.* (2006) sono state effettuate misurazioni delle dimensioni delle bolle utilizzando la tecnica digitale di analisi delle immagini descritta da Van den Hengel *et al.* (2005). Si è constatato che le dimensioni della bolla sono effettivamente nell'ordine di 4 mm. Nel lavoro di Zhang *et al.* (2006) sono state condotte simulazioni numeriche del flusso bifase gas-liquido in due colonne a bolle a sezione quadrata (colonna di Zhang confrontata con la colonna di Deen) con l'utilizzo del pacchetto software commerciale CFX-4.4. Anche in questo lavoro il modello LES ed il modello k-ε sono stati testati per modellare la viscosità turbolenta della fase liquida. È stato trovato che con un valore crescente della costante di modello di sottogriglia per le simulazioni LES C_s aumenta la viscosità turbolenta e di conseguenza i profili di velocità media diventano più ripidi, e la dinamica del pennacchio ridotta. In questo lavoro, si è visto che con un valore di $C_s = 0.08-0.10$, i risultati numerici concordano bene con i dati sperimentali. Si è anche scoperto che lo smorzamento della viscosità turbolenta vicino alle pareti del sistema non è

intrinsecamente ottenuta con il modello SGS di Smagorinsky nella simulazione del regime bubbly flow. Per il modello k- ϵ , invece, sono stati utilizzati diversi approcci per modellare la bubble induced turbulence (BIT), ovvero la turbolenza indotta dalle bolle. Sia con l'approccio LES che con l'approccio RANS, i modelli di turbolenza possono produrre una buona soluzione per la velocità assiale mediata nel tempo. Quando i termini sorgente aggiuntivi sono aggiunti nelle equazioni di k ed ϵ , per considerare la BIT, sia i profili di velocità mediati nel tempo e sia i profili delle fluttuazioni di velocità concordano con le misurazioni sperimentali. Inoltre si è visto che lo stesso predice meglio il comportamento di colonne alte rispetto a quelle più basse. Questa osservazione implica che il modo in cui il pennacchio delle bolle si estende su tutta la colonna e varia con l'aspetto della colonna rapporto e apparentemente non c'è ancora una chiusura interfacciale universale del modello disponibile per la simulazione del bubbly flow. Si è constatato che la chiusura del modello per la forza di drag influisce fortemente sui profili di velocità verticale e sulla distribuzione del gas. Nella colonna di Deen, il coefficiente di drag di Ishii e Zuber (1979) fornisce una soluzione migliore di quella di Tomiyama (2004), anche se quest'ultimo modello fornisce una migliore previsione della velocità relativa tra le fasi. Nella colonna di Zhang, tuttavia, la correlazione di trascinamento di Tomiyama produce una soluzione migliore di quella di Ishii e Zuber. Entrambe le correlazioni di trascinamento sono valide per il caso di una singola bolla; gli effetti dello sciame sulla chiusura della forza di resistenza non sono considerati. Inoltre, come affermato nel lavoro di Tomiyama *et al.* (2002), il coefficiente di resistenza è anche una funzione delle dimensioni bolla. È stato osservato che la forza di massa virtuale ha un'influenza molto piccola sul flusso studiato come la zona in cui la forza di massa virtuale attiva è piuttosto piccola. La forza di sollevamento al contrario ha un grande impatto sulla dinamica del flusso, come determina la dispersione del pennacchio, e successivamente influenzano la forma di il profilo di velocità verticale. Il coefficiente di lift di Tomiyama è preferito per la colonna più alta (Zhang). Secondo Tomiyama (2004), il coefficiente di lift dipende dall'aspect ratio della bolla e dal Numero di Reynolds locale. Nel lavoro di Buffo *et al.* (2016) l'accordo con i dati sperimentali per la colonna di Zhang, dove misure e simulazioni sono eseguite in una colonna simile al caso della colonna di Deen, è migliore rispetto a quest'ultima. Per questa colonna, le previsioni delle simulazioni per le velocità sia del gas che del liquido sono molto vicine alle misurazioni sperimentali. In questo caso, la distanza della prima sezione di misura dallo sparger è circa 0,51m e le bolle iniettate dallo sparger hanno lo spazio per raggiungere una sorta di configurazione di equilibrio, con il pennacchio centrale che ha anche la possibilità di assumere un movimento oscillante caratteristico stabile. Il modello sembra essere in grado di prevedere in modo soddisfacente il comportamento fluidodinamico più stabile della colonna più alta. Inoltre, poiché tutte le variabili riportate sono misurate su una linea di una sezione quadrata, i profili di velocità del liquido non si integrano a zero, anche la velocità del gas non si integra con la portata del gas. Non ci sono misure disponibili per gli angoli della sezione quadrata, dove le simulazioni effettuate localizzano il ricircolo del liquido verso il basso, rispettando il bilancio di massa complessivo.

4.3.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni

La colonna di Zhang non presenta grosse differenze strutturali con la colonna di Deen, è solamente alta il doppio. Pertanto si utilizza una mesh molto simile a quella utilizzata per la colonna di Deen: lo spigolo corrispondente al lato del quadrato di base viene suddiviso in 30 celle, mentre per quanto riguarda l'altezza, lo spigolo corrispondente è suddiviso in 137 celle. Il risultato è un prisma quadrato di dimensioni 30×30×137 celle. In figura 4.8 è possibile osservare il particolare della base della colonna, grazie ad un'istantanea scattata virtualmente all'interno della colonna. Anche per la colonna di Zhang, come per quella di Deen, la suddivisione in celle dell'altezza riguarda l'intera struttura della colonna e non il battente di liquido. Pertanto viene diviso 1m di altezza della colonna in 137 celle.

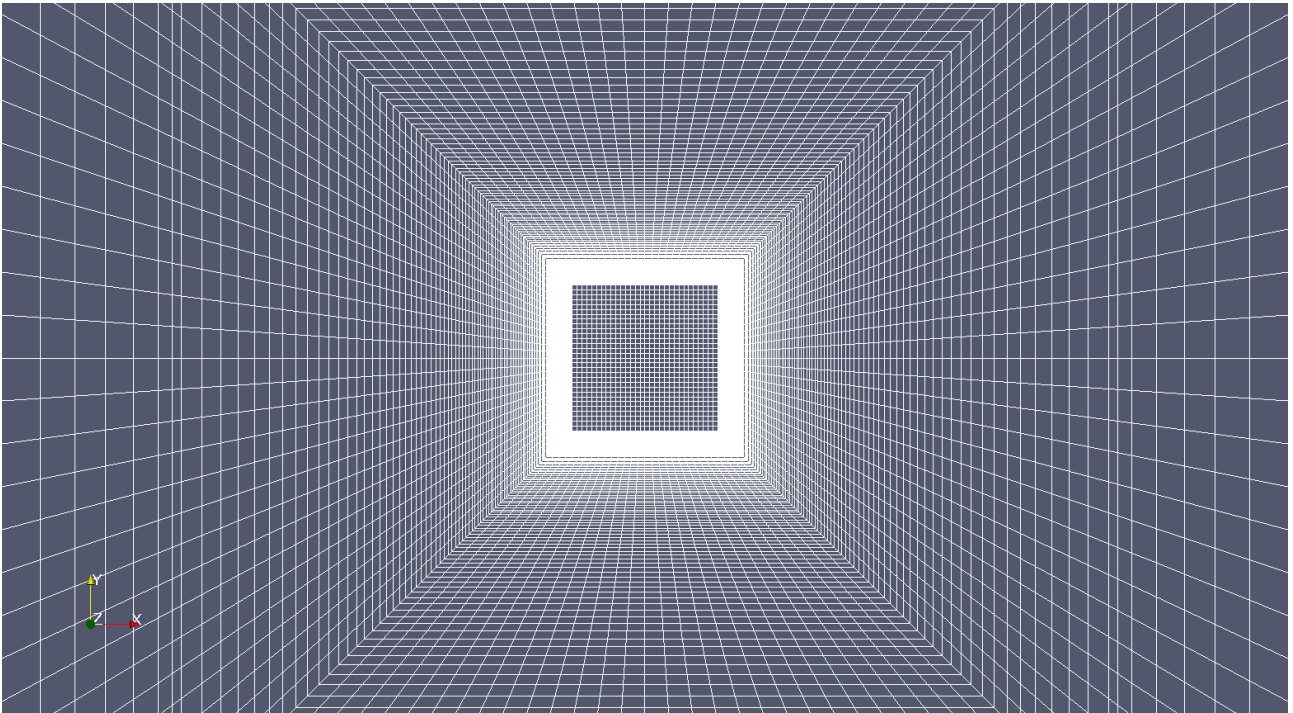


Figura 4.8: Interno della colonna di Zhang (Paraview)

Anche per la colonna di Zhang lo sparger è costituito da 49 fori disposti a formare un quadrato, che nel nostro lavoro viene virtualmente rappresentato da un quadrato di 6×6 celle. Nella figura 4.9 è possibile vedere un'istantanea della nostra simulazione:



Figura 4.9: Forma dello sparger della colonna di Zhang nelle simulazioni effettuate (Paraview)

Le figure 4.10a-b mostrano un ulteriore schema della mesh della colonna di Zhang con vista frontale e laterale con una leggera posizione sfalsata:

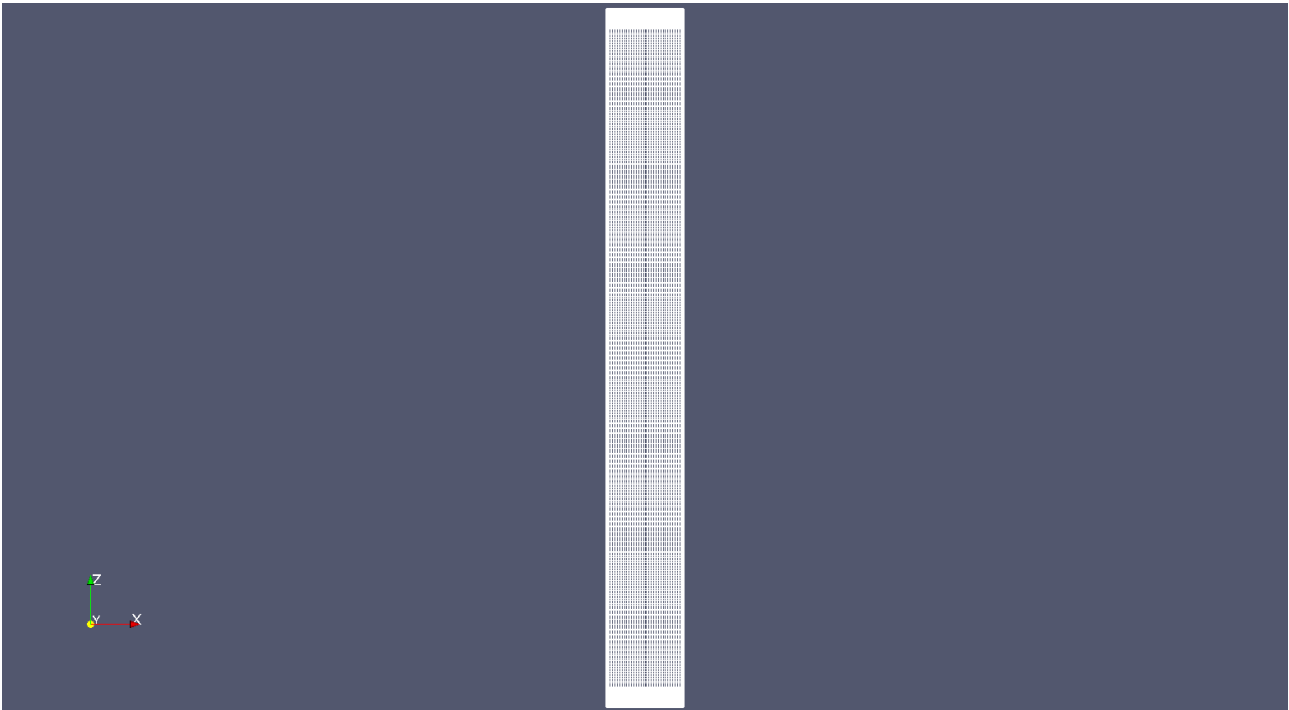


Figura 4.10a: Vista frontale della mesh della colonna di Zhang (Paraview)

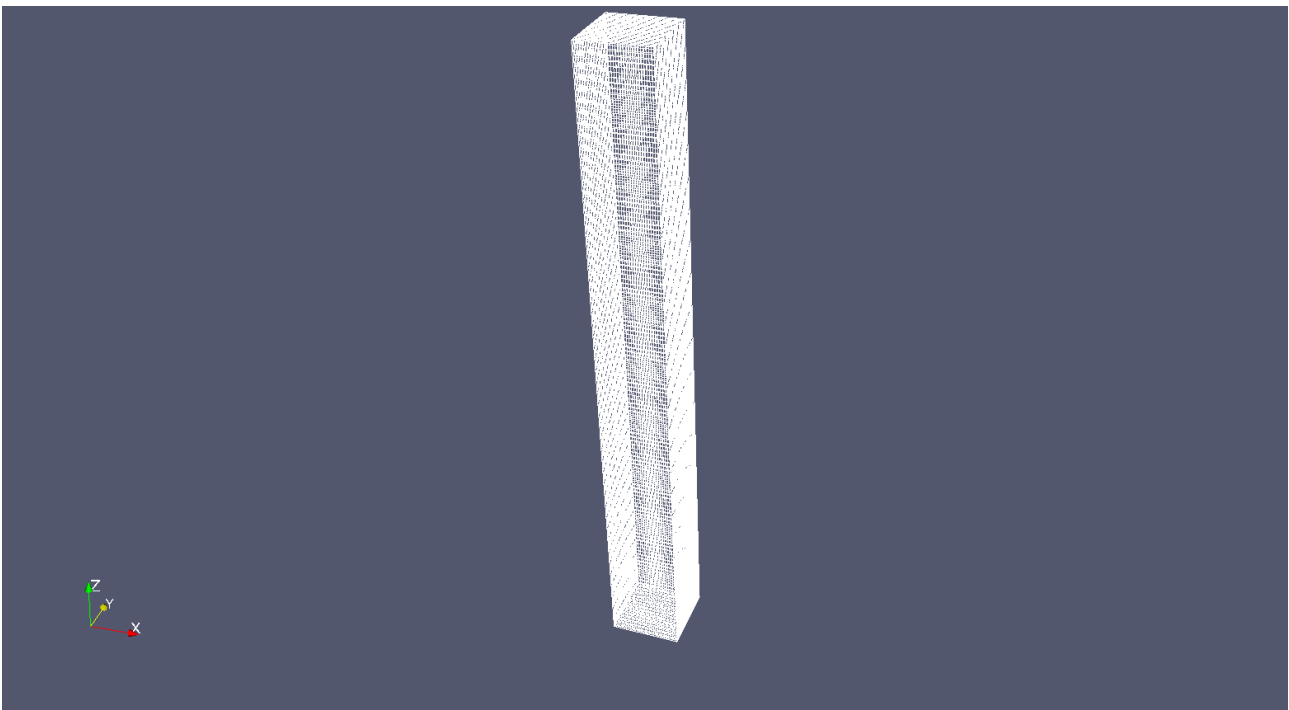


Figura 4.10b: Vista laterale della colonna di Zhang (Paraview)

Per questo caso di studio sono state fatte solamente due simulazione, ciascuna di 180 secondi, contro un tempo di 2000 secondi nel lavoro di Buffo *et al.* (2016). Nella prima simulazione si include nella chiusura del problema la sola forza di drag, mentre la seconda simulazione viene fatta con tutte le forze in gioco. Vale la pena ricordare che le forze in gioco sono: drag, lift, turbulent dispersion e wall lubrication. L'analisi dei risultati prevede un confronto con i dati sperimentali ed i risultati del lavoro di Buffo *et al.* (2016) dei profili di velocità assiali di gas e liquido in funzione della lunghezza normalizzata (x/L dove L è il lato del quadrato di base). Si campiona la colonna a due altezze diverse:

la prima è per un valore di z/H pari a 0,57 (H è l'altezza della colonna, pari a 0,9m), la seconda è per un valore di z/H pari a 0.73.

4.4 Colonna di Kulkarni

4.4.1 Introduzione

Un'analisi completa dello sviluppo del modello CFD per una colonna a bolle è presentata nel lavoro di Kulkarni *et al.*, (2006) attraverso diversi esperimenti con misurazioni LDA. Nelle misurazioni LDA, sono state eseguite le misurazioni simultanee di velocità in funzione del tempo in diverse posizioni radiali e molte sezioni trasversali assiali della colonna per due diversi sparger. I risultati sperimentali hanno mostrato che la velocità tangenziale media varia sistematicamente nelle coordinate radiali e lungo le coordinate assiali. Sono stati analizzati anche l'energia cinetica turbolenta e il tasso di dissipazione di energia. Gli esperimenti sono stati effettuati in una colonna a bolle di plexiglass di forma cilindrica di 150mm di diametro con due diversi sparger (single point e multipoint sparger). Per il caso di uno sparger a piastra forata (area forata 0,25% della sezione di passaggio complessiva, diametro dei fori pari a 1,96 mm) sono state realizzate misure LDA della velocità assiale in funzione del raggio e della coordinata angolare θ a cinque diverse altezze della colonna ($H/D = 1.4, 2.6, 3.2, 3.9$ e 5). Inoltre, sono state realizzate misure anche sui componenti di velocità assiale, radiale e tangenziale nella zona di disinnesto ($H/D = 6.2$) e nella zona di sparger ($H/D = 0,2$). I dati LDA sono stati acquisiti anche su diverse posizioni radiali e quattro livelli assiali ($H/D = 0.5, 2.5, 3.4, 4.6$) per il caso di un singolo foro centrale con diametro pari a $d_0 = 3,17$ mm. La sorgente a laser utilizzata è ad argon a 150mW. In entrambi i casi, il livello iniziale di liquido contenuto nella colonna è pari a 6 volte il diametro della colonna ($H=0,9m$). Ad ogni livello assiale, le misurazioni sono state effettuate in 32 posizioni radiali dal centro alla parete con intervallo di 2 mm e fino a una distanza di 5 mm dalla parete. L'impossibilità di avvicinarsi ulteriormente alla parete costituisce un limite della tecnica LDA. Il tasso di dati è stato mantenuto nell'intervallo di 90-150 Hz con la validità dei dati sempre superiore al 90%. A ogni posizione sono stati raccolti 50.000 dati. La configurazione sperimentale utilizzata ed i relativi dettagli inclusa l'elaborazione dei dati l'hardware è presente nel lavoro di Kulkarni *et al.* (2001). La velocità superficiale del gas è stata mantenuta a 20 mm/s e l'hold-up medio di gas $\epsilon_G = (H_D - H) / H_D$ calcolato in modo indipendente dalla differenza tra l'altezza del liquido e l'altezza dispersa. Per il caso di un flusso bifasico, le bolle potrebbero incrociarsi con il raggio laser ed interferire con l'intersezione dei raggi laser rendendo difficoltosa l'acquisizione dei dati, che è già relativamente difficile per un flusso monofase. Allo stesso modo, il riflusso dalla superficie della bolla corrompe il segnale originale aggiungendo del rumore nel segnale. Kulkarni *et al.* (2001) hanno discusso questo problema in dettaglio. In alcuni casi era impossibile mantenere il più alto tasso di acquisizione dei dati, pertanto i dati sono stati persino acquisiti a tassi di acquisizione più bassi (~90 Hz) senza compromettere la convalida come stimata dalla rispettiva BSA. In considerazione di ciò, nella maggior parte dei casi, dopo l'acquisizione dei dati, il rumore è stato rimosso usando un robusto algoritmo di denoising come discusso nel lavoro di Kulkarni *et al.* (2001a). Nel lavoro di Kulkarni *et al.* (2006) è stato inoltre formulato un modello matematico per simulare il comportamento fluidodinamico della colonna, le cui equazioni sono state risolte numericamente con i seguenti passaggi logici:

- (i) generazione di un'adeguata griglia di mesh ;
- (ii) conversione delle equazioni di trasporto alle derivate parziali in equazioni algebriche risolvibili numericamente;
- (iii) selezione della discretizzazione schemi;
- (iv) formulazione dell'equazione discretizzata ad ogni posizione della griglia;
- (v) formulazione dell'equazione della pressione;
- (vi) sviluppo di uno schema di iterazione adatto per ottenere la soluzione finale.

Le equazioni di continuità e di trasporto di quantità di moto sono state risolte (insieme alle equazioni del modello $k-\varepsilon$) per ottenere un modello in grado di predire la distribuzione di gas e velocità del liquido e hold-up di gas. È stata impiegata una griglia con $22 \times 62 \times 42$ celle. Alcune delle simulazioni sono state ripetute con una griglia più fine, con $30 \times 75 \times 60$ celle. Per la discretizzazione delle equazioni di governo è stato utilizzato lo schema di legge di potenza. L'algoritmo di accoppiamento pressione-velocità utilizzato è il SIMPLE. L'insieme delle equazioni algebriche ottenute dopo la discretizzazione sono state risolte da TDMA. Gli autori non hanno utilizzato un codice CFD preesistente, ma ne hanno scritto uno per risolvere questo particolare test case. Complessivamente, la previsione CFD dà un buon accordo nella regione centrale della colonna, ma tuttavia qualche deviazione è stata riscontrata nella zona vicino allo sparger e di uscita. Un forte movimento tangenziale nella regione vicina alla parete necessita di ulteriori analisi per capire il movimento di strutture di turbolenza su larga scala. Un'analisi dettagliata dei profili di stress, ottenuti misurando le componenti individuali di velocità dai dati sperimentali e utilizzate per calcolare il tensore normale delle tensioni (sforzi di taglio nelle tre componenti spaziali), mostra che i profili sono qualitativamente paragonabili a quelli in letteratura. I profili di stress per il caso di single point sparger necessita di un'ulteriore attenta analisi per come capire l'effetto del pennacchio sul flusso nel vicino alla regione di sparger in modo quantitativo. Poiché i valori di stress in questo caso sono superiori ai profili di stress osservati nel multipoint sparger, la stima è indipendente dallo sforzo di taglio della turbolenza indotta e la turbolenza indotta da bolle può essere trascurabile. Nel lavoro di Buffo *et al.* (2016) è stato fatto un paragone tra il comportamento fluidodinamico in colonne quadrate (Deen e Zhang) e rettangolari (Diaz) con le colonne circolari (Kulkarni). Il comportamento delle colonne cilindriche a bolle è normalmente diverso da quello dei sistemi rettangolari o quadrati finora studiati. Il modello proposto da Buffo *et al.* (2016) è in grado di prevedere con precisione il comportamento fluidodinamico del sistema: il liquido sale nella parte centrale e discende lungo le pareti delle colonne visualizzate negli esperimenti. Viene inoltre mostrato il confronto della velocità di dissipazione di energia cinetica turbolenta previsto e misurato sperimentalmente lungo la distanza radiale all'altezza delle colonne. Come si può vedere chiaramente, i risultati numerici hanno lo stesso ordine di grandezza dei risultati sperimentali, ad eccezione delle pareti in cui la dissipazione di energia turbolenta è più alta. Ciò significa non solo che buone previsioni possono essere ottenute utilizzando un modello approssimativo di turbolenza, ma anche il valore locale della velocità di dissipazione turbolenta ε usato in tutti i modelli di mesoscala (cioè, i kernel di coalescenza e rottura, modello di trasferimento di massa, legge di drag proposta in questo lavoro) non è lontano dalla realtà fisica. Le uniche informazioni segnalati nel lavoro di Kulkarni *et al.* (2006) sulle proprietà delle bolle sono rappresentati dai profili locali di hold-up di gas. In questo caso, i profili radiali di hold-up del gas previsti presentano una leggera deviazione dai dati sperimentali, specialmente per la misura effettuata vicino alla superficie liquida libera. Tuttavia, nell'assenza di misurazioni dirette per l'hold-up di gas globale, è impossibile trarre conclusioni definitive. Per stimare attentamente questo valore sono state adottate diverse correlazioni empiriche disponibili in letteratura. Sebbene queste correlazioni siano formulate per colonne più alte con diametri maggiori e geometrie differenti, l'hold-up di gas globale previsto sembra realistico. A causa delle incertezze relative alla strumentazione utilizzata per misurare la dimensione della bolla, cioè la dimensione della bolla estratta dai dati LDA invece di essere misurata direttamente, il confronto dovrebbe essere inteso come qualitativo piuttosto che quantitativo. Tuttavia, le previsioni risultano nello stesso ordine di grandezza e anche la curva sperimentale con il raggio della colonna, con bolle più grandi vicino al centro della colonna e bolle più piccole nei percorsi di ricircolazione vicino al muro, è ben catturata dalla simulazione. Come si può vedere dai risultati, la gamma di diametri di Sauter medi da 4 a 9 mm, che giustifica l'uso del bilancio di popolazione e di una relazione di drag che dipende dalla distribuzione locale di bolle. Inoltre l'uso delle correzioni proposte per l'affollamento di bolle e gli effetti di turbolenza di micro scala produce variazioni molto piccole in termini di profili locali, il che significa che, in questo caso particolare, una colonna a bolle cilindrica a velocità moderata di gas in ingresso, l'impatto delle correzioni sulle previsioni è modesto a causa

di una bassa intensità di turbolenza. Tuttavia il valore di hold-up globale del gas aumenta di circa il 10% quando viene applicata la relazione di resistenza proposta, che è in linea con la variazione della velocità terminale delle bolle rispetto alla risalita di una singola bolla in una fase di liquido stagnante.

4.4.2 Descrizione della mesh e obiettivi delle simulazioni

Essendo la colonna di Kulkarni una colonna a base circolare, è stata fatta una particolare discretizzazione della base, detta O-grid, costituita da 980 celle, la cui disposizione forma appunto una O. L'altezza invece è suddivisa in 320 celle. Lo sparger è costituito da una serie di anelli concentrici in cui il gas viene insufflato nella colonna. Nella simulazione effettuata sono stati utilizzati alcuni anelli concentrici di celle per simulare lo sparger. La figura 4.11 mostra in dettaglio la struttura della O-grid che discretizza la base della colonna di Kulkarni in un'istantanea catturata all'interno della colonna, mentre la figura 4.12 mostra la struttura dello sparger. Nelle figure 4.13a-b invece è possibile vedere la mesh della colonna frontalmente e dall'alto. Per questo caso si effettua un'unica simulazione con la sola forza di Drag in gioco. Pertanto lift, turbulent dispersion e wall lubrication non vengono considerate. Ci sarà un confronto con i dati sperimentali e con i risultati ottenuti da Buffo *et al.* (2016) dei risultati ottenuti dalla simulazione effettuata in questo lavoro. La durata della simulazione è di 180 secondi contro i 120 secondi della simulazione di Buffo *et al.* (2016), pertanto il tempo di studio della colonna sarà maggiore di un minuto.

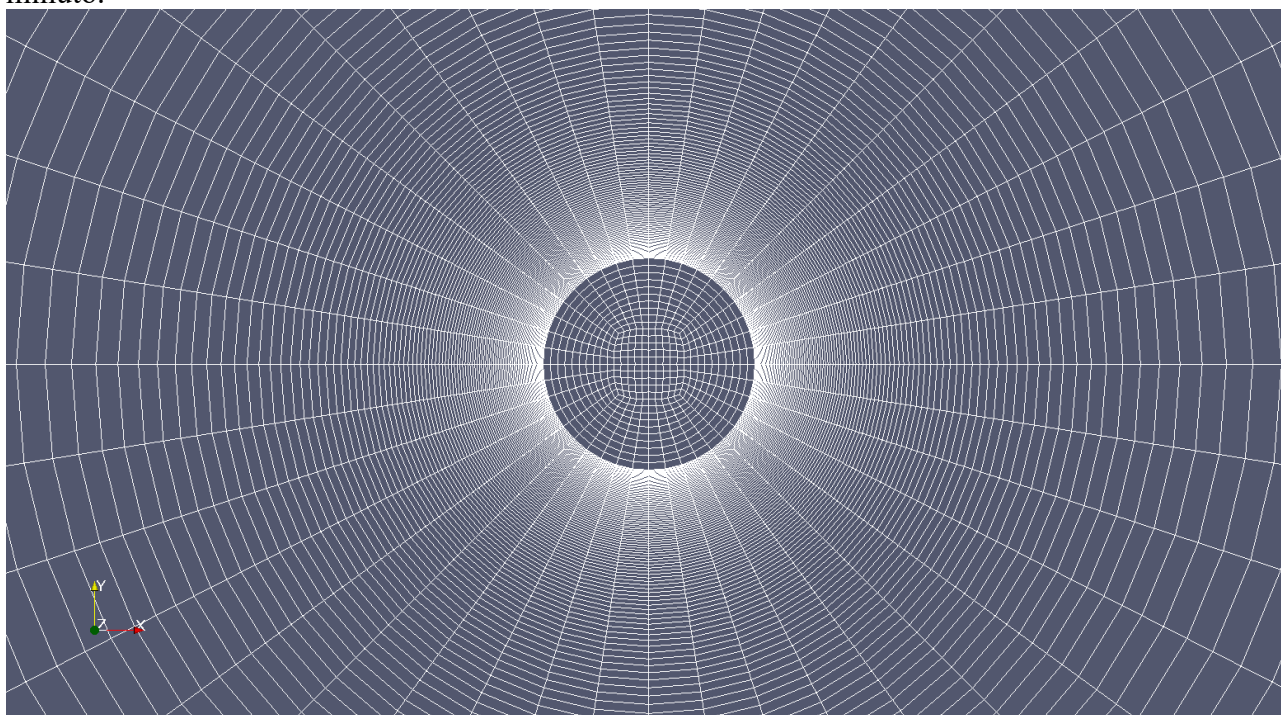


Figura 4.11: Interno della colonna di Kulkarni e struttura O-grid (Paraview)

Nel prossimo capitolo saranno illustrati in dettaglio i risultati delle simulazioni effettuate in questo lavoro. Ci saranno confronti numerici e grafici come già anticipato nella descrizione della mesh e negli obiettivi delle simulazioni ed infine verranno illustrate le osservazioni conclusive.



Figura 4.12: Forma dello sparger della colonna di Kulkarni nelle simulazioni effettuate (Paraview)

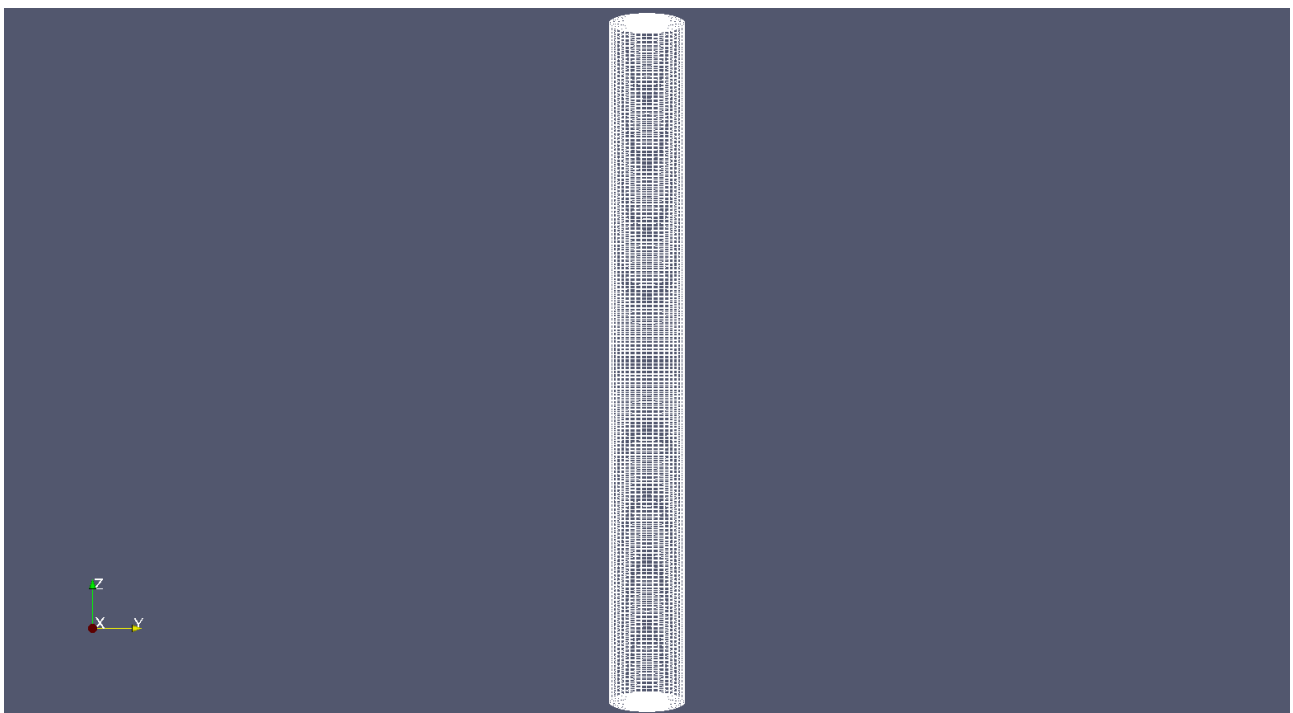


Figura 4.13a: Vista frontale della mesh della colonna di Kulkarni (Paraview)

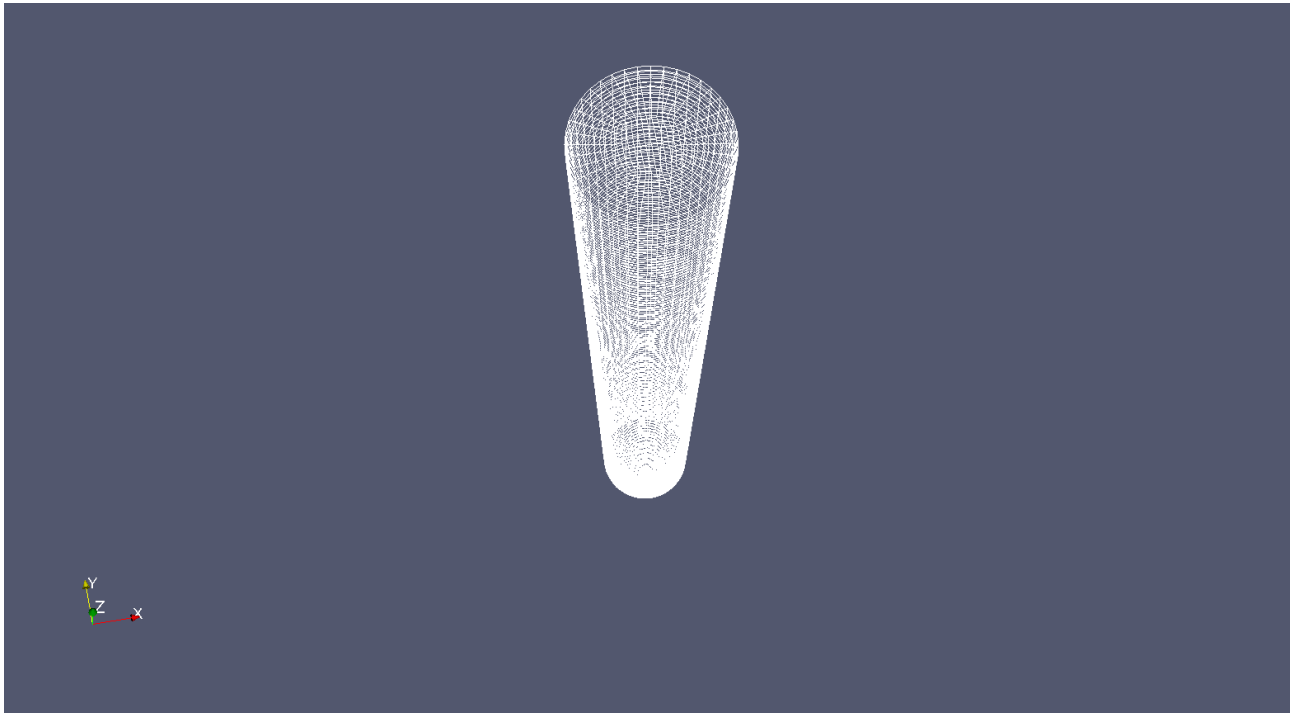


Figura 4.13b: Vista dall'alto della mesh della colonna di Kulkarni (Paraview)

Capitolo 5

Analisi dei risultati ottenuti

In questo capitolo verranno confrontati e discussi i risultati ottenuti dei casi analizzati, con i dati sperimentali e con i lavori di Buffo *et al.*, (2013, 2016). Il capitolo verrà suddiviso in quattro paragrafi, uno per ogni caso studiato. Prima di esporli è bene ricordare che nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016), la sola forza considerata in questo modello è quella di trascinamento (Drag), con modifiche per tenere conto dell'effetto di affollamento delle bolle e della turbolenza di microscala sulla velocità di risalita delle bolle. In questo lavoro è stato utilizzato un approccio alternativo in cui altre forze interfacciali sono state considerate, ad eccezione della forza di massa virtuale. Viene pertanto considerato il contributo della forza di dispersione turbolenta, che tiene conto dell'effetto della turbolenza, sul movimento delle bolle, mentre l'effetto di affollamento non viene considerato.

5.1 Colonna di Diaz

Per questa colonna sono state effettuate diverse simulazioni con lo scopo di monitorare l'andamento nel tempo dell'hold-up di gas, del plume oscillation period e del diametro medio di Sauter delle bolle. Nel primo set di simulazioni la portata è stata mantenuta costante e pari a 2.4mm/s ed è stata fatta entrare in gioco una forza alla volta al fine di studiarne il singolo contributo. Nella tabella 5.1 sono riportati i risultati con un confronto con i dati sperimentali ed i risultati ottenuti nel modello di Buffo *et al.*, (2013). I calcoli sono stati effettuati senza considerare la fase transitoria, sono pertanto stati eliminati i primi 40 secondi. Nel caso del valore del diametro medio di Sauter, il contributo di ogni forza fa diminuire l'errore tra il valore ottenuto e quello sperimentale, anche se in valore assoluto non cambia molto introducendo le forze interfacciali. Questa proprietà è di carattere locale ed è stata valutata in un volume ridotto intorno al punto centrale della colonna. Inoltre si può vedere dalla tabella come il contributo delle diverse forze facciano diminuire la velocità di risalita delle bolle, aumentando così la frazione volumica di gas nella fase liquida della colonna, favorendo così la coalescenza ed un conseguente aumento del diametro. Le altre due proprietà, POP e Hold-up di gas sono proprietà globali che riguardano l'intero volume della fase liquida. Per quanto riguarda il POP la situazione è esattamente opposta al caso del diametro medio di Sauter: esso tende a diminuire, partendo già da un valore ben più basso rispetto sia a quello ottenuto da Buffo *et al.*, (2013), che di quello sperimentale.

Forze in gioco	Hold-up	POP	Diametro di Sauter
Drag	0.607%	9.433s	6.48mm
Drag e Lift	0.624%	9.357s	6.50mm
Drag e Turbulent dispersion	0.782%	9.300s	6.55mm
Drag, Lift, Turbulent dispersion	0.771%	9.267s	6.53mm
Drag, Lift, Turbulent dispersion e Wall lubrication	0.909%	8.906s	6.56mm
Dati sperimentali	0.690%	11.370s	6.83mm
Risultati di Buffo et al., (2013)	0.620%	10.170s	6.22mm

Tabella 5.1 confronto numerico dei valori di hold-up, POP e diametro medio di Sauter per la portata di 2.4mm/s

Come per un aumento di dimensione media, l'aumento di velocità causato dall'assenza del fattore correttivo fa diminuire il valore del POP: l'oscillazione diventa più frequente. Anche qui entrano in gioco i meccanismi di coalescenza e rottura: le forze aumentano l'interazione tra le bolle, accrescendone il diametro e la frequenza di oscillazione del pennacchio. Questo fenomeno è molto importante a basse portate. Per il valore di Hold-up, parametro importante di interesse ingegneristico, invece si parte da una percentuale leggermente inferiore di quelle di confronto, per avvicinarsi notevolmente al valore sperimentale (nel caso di Drag, Lift e Turbulent dispersion), ed infine ottenere un valore molto più elevato considerando anche la forza di Wall lubrication. Inoltre da un confronto tra gli andamenti nel tempo di Hold-up di gas si è visto un andamento crescente del valore medio nella simulazione del modello completo. Ciò è coerente con la simulazione effettuata in cui si osservano zone di concentrazione di aria molto elevate sul pelo libero dell'acqua e ai lati che fanno crescere l'effetto di Wall lubrication. Questo significa che il pelo di liquido è rimasto alla stessa altezza per tutta la simulazione. Infatti calcolando il valore di Hold-up considerando un'altezza di 43.5 cm contro i 45 cm di altezza della colonna d'acqua si ottiene un valore di Hold-up medio percentuale più in accordo con i dati sperimentali, ossia pari a 0.601%. Nella figura 5.3 è proposto un confronto dei grafici di Hold-up calcolati con un'altezza di 45cm (in rosso) e con un'altezza di 43.5cm (in blu). Si tratta di un valore leggermente inferiore a quello ottenuto da Buffo *et al.*, (2013). Questo perché l'assenza del fattore correttivo della forza di Drag e la forza di Lift aumentano la velocità di risalita delle bolle, facendo diminuire la concentrazione di gas nella fase liquida. La Turbulent dispersion la abbassa, aumentando la concentrazione del gas. Nella figura 5.1 viene mostrato un grafico che confronta gli andamenti di Hold-up delle simulazioni effettuate nel primo set.

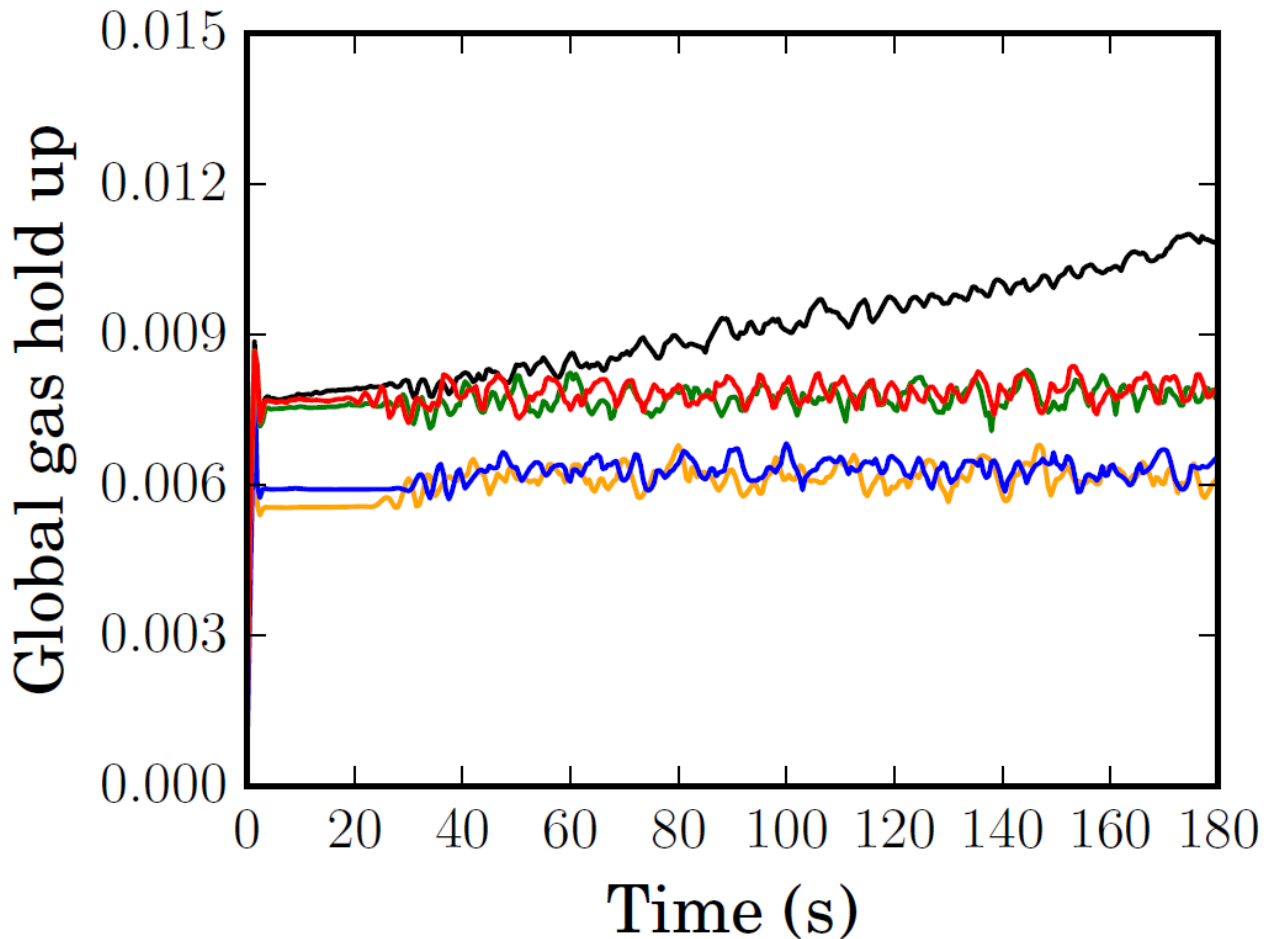


Figura 5.1: confronto dell'andamento di Hold-up di gas alla portata di 2.4mm/s. I colori fanno riferimento alle simulazioni come segue: in arancione Drag, in blu Drag e Lift, in verde Drag, Lift e Turbulent dispersion, in rosso Drag e Turbulent dispersion, e in nero il modello completo (il valore è calcolato sul volume globale del sistema considerando un'altezza di 0.45cm)

Si può vedere che non c'è un grafico che mostra l'andamento nel tempo del POP. Esso infatti si ricava misurando le distanze tra i massimi di velocità orizzontale della fase liquida. Pertanto viene monitorato l'andamento nel tempo della velocità orizzontale della fase liquida. Successivamente è stato effettuato un set di simulazioni analogo al primo, ma alla massima portata, ossia pari a 21.3mm/s, in cui, come per il caso della portata minima sono stati analizzati gli effetti di ogni singola forza. È curioso osservare in questo caso che l'Hold-up di liquido non aumenta più nel tempo se si considera l'intero volume della colonna. Questo perché il pelo libero di liquido si innalza di una quota significativa, eliminando così accumuli anomali di gas alla parete e permettendo così una valutazione del valore globale di Hold-up di gas più in accordo con i valori sperimentali.

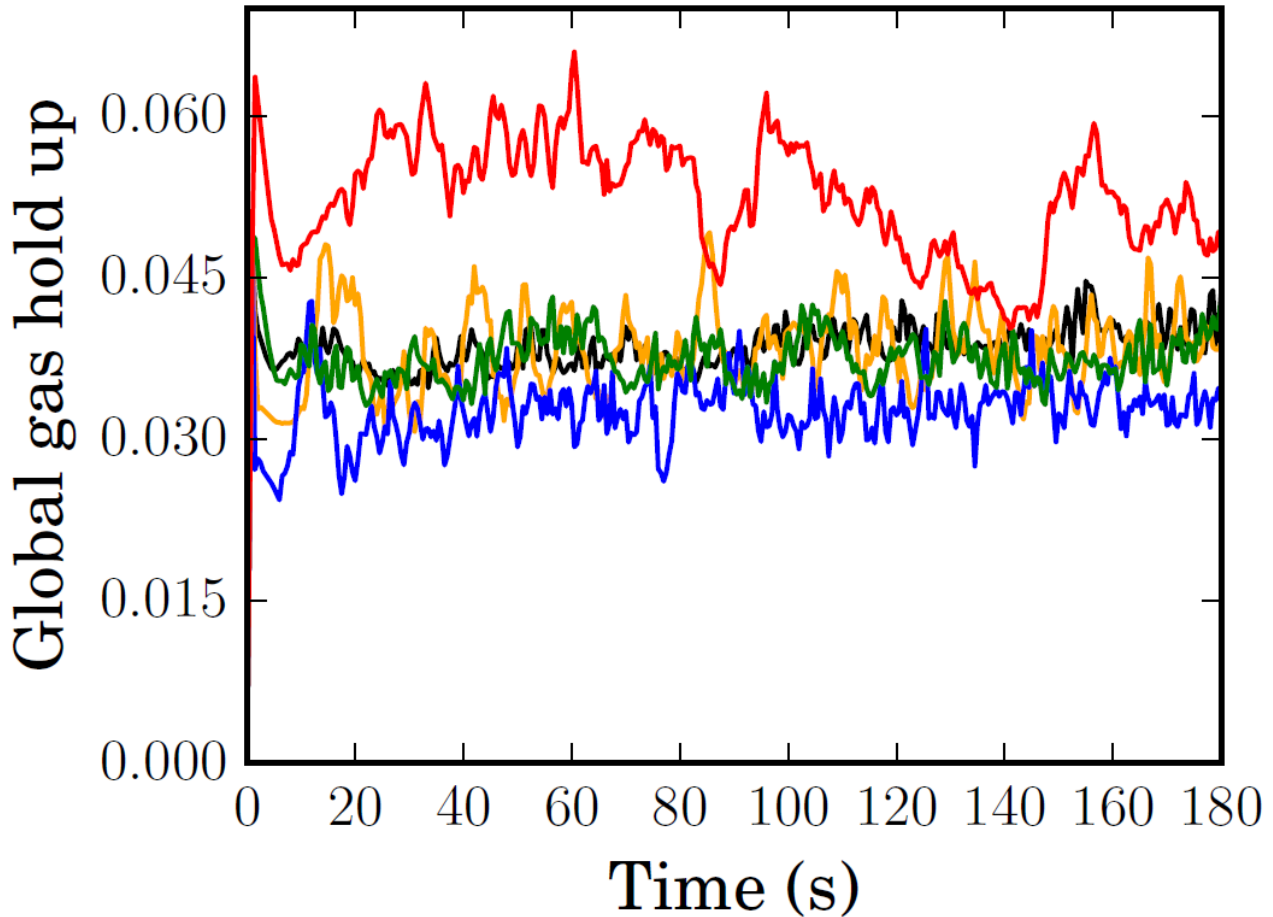


Figura 5.2: confronto dell'andamento di Hold-up di gas alla portata di 21.3mm/s. I colori fanno riferimento alle simulazioni come segue: in arancione Drag, in blu Drag e Lift, in verde Drag, Lift e Turbulent dispersion, in rosso Drag e Turbulent dispersion, e in nero il modello completo (il valore è calcolato sul volume globale del sistema considerando un'altezza di 0.45cm)

Nella figura 5.2 viene mostrato un confronto degli andamenti di Hold-up di gas alla portata di 21.3mm/s. I risultati di queste simulazioni sono illustrati nella tabella 5.2 in cui, come per il caso precedente, ci sarà un confronto con il modello di Buffo *et al.*, (2013) e con i dati sperimentali. Per quanto riguarda il POP e il diametro medio di Sauter, si riscontra un eccellente accordo del modello completo con i dati sperimentali per la prima proprietà, mentre per la seconda si ha un accordo minore. Rispetto al set di simulazioni precedenti la velocità del gas in ingresso è aumentata. Vengono così favoriti fenomeni di coalescenza e rottura che permettono alle bolle di raggiungere dimensioni maggiori e l'oscillazione del pennacchio è più frequente. È interessante notare come il contributo delle forze di Lift e Turbulent dispersion siano importanti a questa velocità: la prima è proporzionale al gradiente di velocità della fase fluida, pertanto fa sì che le bolle si muovano verso zone in cui la velocità del fluido è inferiore. Questo fa aumentare il periodo di oscillazione del pennacchio. La seconda invece è proporzionale al gradiente di concentrazione del gas, pertanto spinge le bolle verso zone a bassa concentrazione di gas.

Forze in gioco	Hold-up	POP	Diametro di Sauter
Drag	3.82%	2.783s	8.05mm
Drag e Lift	3.26%	3.606s	7.97mm
Drag e Turbulent dispersion	5.25%	2.469s	8.30mm
Drag, Lift, Turbulent dispersion	3.74%	2.308s	8.25mm
Drag, Lift, Turbulent dispersion e Wall lubrication	3.86%	2.817s	8.25mm
Dati sperimentali	4.10%	2.840s	7.73mm
Risultati di Buffo et al., (2013)	4.06%	3.200s	8.21mm

Tabella 5.2 confronto numerico dei valori di hold-up, POP e diametro medio di Sauter per la portata di 21.3mm/s

La conseguenza di questo effetto è un aumento di Hold up globale. Questo effetto è visibile nella figura 5.2 in cui vengono confrontati gli andamenti nel tempo di Hold-up di gas per tutte le simulazioni a questa portata. Si nota chiaramente che la Turbulent dispersion fa innalzare molto il valore di Hold-up ad alte velocità. Nella simulazione in cui si studia l'azione combinata di questi due effetti si nota come la componente di abbassamento di Hold-up dovuta al Lift prevalga sull'innalzamento dovuto alla Turbulent dispersion, e viceversa per quanto riguarda il valore del POP. L'effetto di Wall lubrication fa innalzare leggermente il valore di Hold-up ed è praticamente ininfluenza per la dimensione delle bolle che rimane invariata. Considerando però anche questa forza nel modello si ottiene un ottimo riscontro con i dati sperimentali per quanto riguarda il POP. Il motivo di questo accordo risiede nel fatto che, essendo la colonna di Diaz una colonna pseudo bidimensionale, le pareti si trovano molto vicino al flusso delle bolle e influiscono sul moto delle bolle, a causa dell'ipotesi no-slip. Questo si riscontra anche in un leggero aumento di Hold-up di gas rispetto alla simulazione in cui questa forza era la sola ad essere trascurata.

L'ultimo set di simulazioni prevede un'analisi della variazione di Hold-up, POP e diametro medio di Sauter al variare della portata di gas in ingresso. Sono state fatte tre simulazioni in aggiunta alle due già eseguite nei primi due set in cui si considerava il contributo di tutte le forze, in cui si considera il contributo di tutte le forze alla portata di 7.1mm/s, 11.9mm/s e 16.6mm/s. Nella tabella 5.3 vengono riportati i risultati confrontati con i dati sperimentali e con risultati ottenuti nel lavoro di Buffo *et al.*, (2013).

Portata	Hold-up	POP	Diametro di Sauter
2.4 mm/s	0.909%	8.906s	6.56mm
Dati sperimentali	0.690%	11.370s	6.83mm
Buffo <i>et al.</i> , (2013)	0.620%	10.170s	6.22mm
7.1 mm/s	1.75%	5.767s	6.77mm
Dati sperimentali	1.81%	5.690s	7.05mm
Buffo <i>et al.</i> , (2013)	1.49%	7.560s	6.52mm
11.9 mm/s	2.41%	4.500s	7.17mm
Dati sperimentali	2.63%	4.270s	6.50mm
Buffo <i>et al.</i> , (2013)	2.27%	5.830s	6.96mm
16.6 mm/s	3.07%	3.740s	7.59mm
Dati sperimentali	3.36%	3.010s	6.40mm
Buffo <i>et al.</i> , (2013)	3.20%	3.930s	7.66mm
21.3 mm/s	3.86%	2.817s	8.25mm
Dati sperimentali	4.10%	2.840s	7.73mm
Buffo <i>et al.</i> , (2013)	4.06%	3.200s	8.21mm

Tabella 5.3: confronto dei risultati ottenuti con tutte le forze in gioco al variare della portata di gas in ingresso con i dati sperimentali ed il lavoro di Buffo *et al.*, (2013)

Alla portata corrispondente alla velocità superficiale di gas pari a 2.4mm/s, c'è un grosso disaccordo sia con i dati sperimentali che con il lavoro di Buffo *et al.*, (2013), per quanto riguarda il POP, questo a causa di un eccesso d'aria considerando il pelo libero dell'acqua. La forza di Turbulent dispersion dipende dalla velocità relativa del gas rispetto al liquido, pertanto solo per le portate superiori alla prima il suo contributo diventa importante. Questo è dovuto all'aumento della differenza di velocità tra liquido e gas, a sua volta dovuto da un moto di ricircolo che porta il liquido verso il basso, mentre il gas sale verso l'alto. In effetti aumentando la portata di gas il disaccordo si riduce fino alla portata di 21.3mm/s in cui è pari a pochi millesimi di secondo. Tuttavia la diminuzione dell'errore di POP non è lineare, questo per via del moto caotico di turbolenza a cui si tende all'interno della colonna aumentando la portata di gas in ingresso. A basse portate c'è un ottimo accordo con i dati sperimentali per il valore del diametro medio di Sauter, il quale purtroppo non si mantiene a portate più alte. L'impatto turbolento tra le bolle favorisce la rottura e parrebbe che il bilancio di popolazione non riesca a descrivere con la giusta efficacia questo fenomeno. Il risultato sono bolle di dimensioni superiori rispetto a quelle osservate negli esperimenti. Tuttavia non è chiara la posizione della moda negli esperimenti e questo riduce la possibilità di effettuare una convalida dettagliata dal punto di vista qualitativo. Per quanto riguarda il valore di Hold-up medio di gas c'è un ottimo accordo con i dati sperimentali alle portate intermedie, ma alla portata minima e massima non si ha un buon accordo. Il disaccordo alla portata minima, già precedentemente spiegato, risiede nella presenza di un'elevata quantità di aria nella parte superiore del volume considerato, infatti, campionando il volume ad un'altezza leggermente inferiore rispetto a quella effettiva della colonna, si ottiene un valore di Hold-up ragionevole. Per evidenziare questa differenza è stato fatto un grafico con un confronto dell'andamento dell'Hold-up dei cinque casi considerati nella tabella 5.3, in cui si analizza l'intero volume (nel grafico rappresentato dalla linea rossa) ed una parte del volume (nel grafico rappresentato dalla linea blu), ossia fermandosi ad un valore di altezza pari a 43.5cm. Com'è possibile vedere alla portata in ingresso di 2.4mm/s c'è una netta differenza fin dall'inizio tra i due andamenti. È stato inoltre catturato un profilo grafico della concentrazione di aria all'altezza di 45cm. Nell'istantanea scattata a 90s è possibile vedere un accumulo di aria che conferma il valore di Hold-up nettamente superiore ai dati sperimentali. Man mano che si aumenta la portata di gas in ingresso questa differenza, oltre al profilo crescente inerente all'intero volume, tende a diminuire, arrivando sempre più ad un accordo con i risultati raccolti su tutto il volume. La figura 5.3 mostra questo confronto per tutte e cinque le portate analizzate con il modello completo.

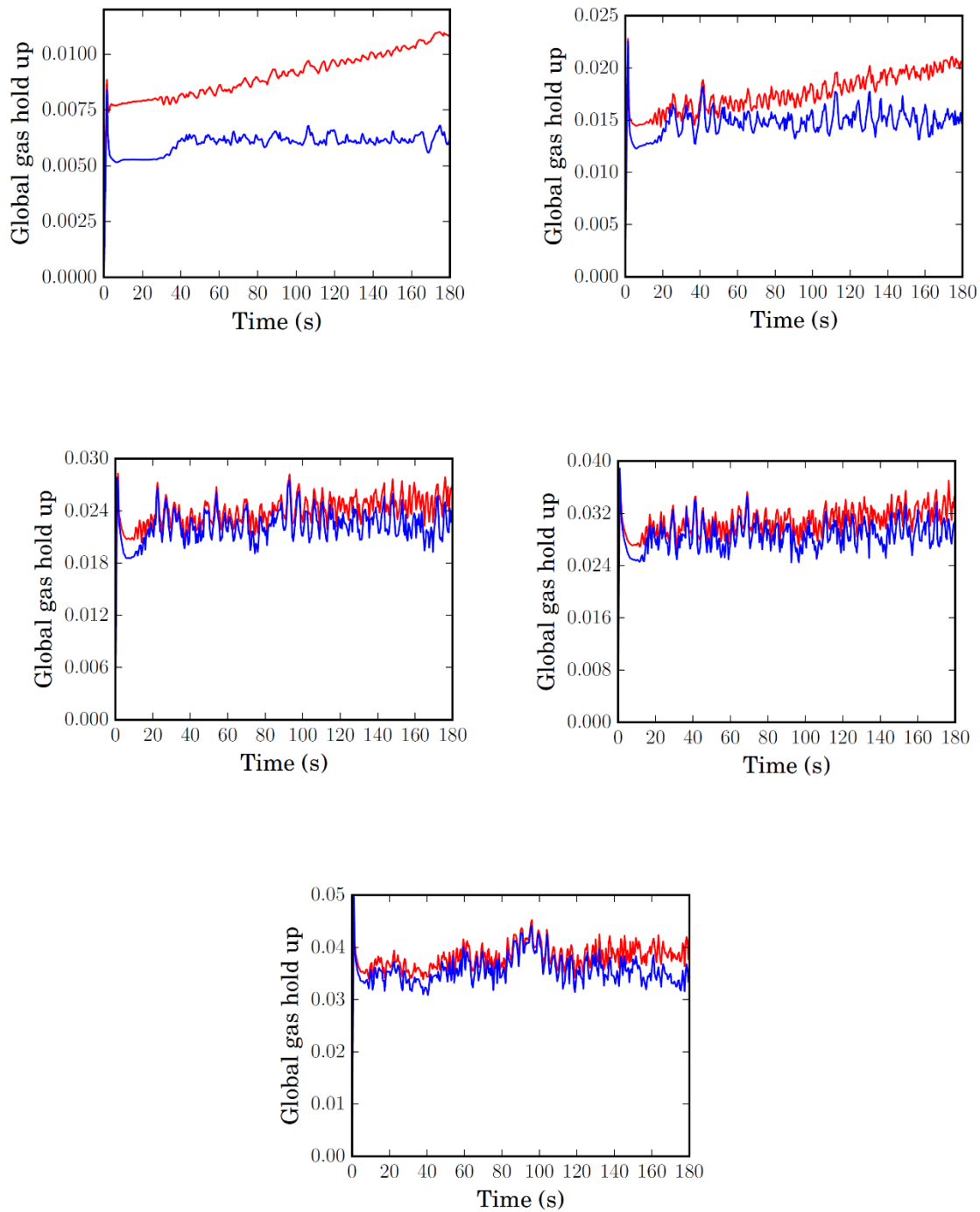


Figura 5.3: confronto dell'andamento di Hold-up delle simulazioni del modello completo per ognuna delle cinque portate. In alto a sinistra la portata è di 2.4mm/s, a destra 7.1mm/s, al centro a sinistra 11.9mm/s, a destra 16.6mm/s ed in basso 21.3mm/s

Ci si può aspettare questo risultato in quanto all'aumentare della portata di gas in ingresso aumenta anche l'aumento di altezza della colonna di liquido. Pertanto in questo caso togliendo una piccola quantità di volume dal calcolo di una proprietà globale il risultato finale non presenta grossi cambiamenti.

5.2 Colonna di Deen

Per questa colonna sono state eseguite cinque simulazioni ad un'unica velocità di gas, pari a 4.9mm/s con lo stesso approccio del primo e del secondo set di simulazioni per la colonna di Diaz: si valuta il contributo di ogni singola forza, facendo entrare in gioco una forza per ciascuna simulazione, arrivando al modello completo. Sono state studiate la velocità assiale di liquido e gas, le fluttuazioni di velocità di liquido lungo le coordinate x e z, e l'energia cinetica turbolenta. Nei grafici verranno confrontati i risultati di questo lavoro (in nero) con i dati sperimentali (pallini) ed il lavoro di Buffo *et al.*, (2016) (in rosso). Vale la pena ricordare che nel lavoro sperimentale è stato aggiunto NaCl per impedire la coalescenza e la rottura delle bolle, fissando come dato il diametro delle bolle pari a 4mm. Nelle simulazioni è stato disattivato il bilancio di popolazione, in quanto il termine sorgente viene forzato a zero. Viene quindi risolto il bilancio di quantità di moto da cui si ricava la velocità di gas e liquido, le fluttuazioni della velocità di liquido e l'energia cinetica turbolenta. Inoltre i risultati sono stati mediati nel tempo e le misurazioni sperimentali sono di tipo PIV (Particle Image Velocimetry), operate ad un'altezza di 25cm dalla base inferiore della colonna. Le simulazioni di questo caso hanno un elevato costo computazionale. A causa di ciò il tempo di simulazione è stato ridotto a 180 secondi. Nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016) le simulazioni hanno avuto una durata notevolmente maggiore: il tempo di simulazione è stato pari a 5000 secondi, quantità non possibile per questo lavoro. Inoltre nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016), grazie al tempo di simulazione elevato, è stato possibile osservare il pennacchio di gas oscillare in modo casuale lungo la colonna. Essendo le grandezze monitorate funzione della lunghezza normalizzata della colonna, ossia funzione della coordinata adimensionale x/L che va da 0 a 1, ed essendo mediate nel tempo, i risultati saranno profili che indicano l'andamento medio nel tempo delle grandezze a 25 cm di altezza. Sono anche stati ottenuti dei grafici che mostrano l'andamento delle grandezze lungo tutta la superficie parallela alla base inferiore della colonna a 25 cm di altezza, effettuando una slice istantanea con il programma Paraview.

5.2.1 Simulazione con la forza di Drag

In questa simulazione è stata considerata la forza di Drag, trascurando tutte le altre. Vale la pena ricordare che nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016) il coefficiente di Drag è stato corretto con un fattore che tiene conto dell'effetto di affollamento delle bolle e della turbolenza di microscala, ottenendo una velocità di risalita più piccola di circa 8% rispetto alla velocità di risalita di una singola bolla in un liquido stagnante. In questa simulazione il coefficiente di Drag è privo di correzioni in quanto nel modello questi effetti sono considerati tramite la forza di dispersione turbolenta. All'inizio il pennacchio è al centro della colonna, ma entro il primo minuto della simulazione si sposta vicino alla parete, rimanendo in tale posizione per il resto della simulazione. Pertanto il profilo di velocità di liquido e gas è sfalsato rispetto al centro, a differenza dei dati sperimentali e del lavoro di Buffo *et al.*, (2016) in cui il pennacchio non era fisso ma si muoveva su tutta la sezione della colonna. Nella figura 5.4 è possibile vedere i risultati di questa simulazione. I profili di velocità di gas e liquido rispecchiano esattamente la posizione del pennacchio, infatti il picco corrisponde alla posizione assunta dal pennacchio a transitorio esaurito. La posizione fissa del pennacchio inoltre giustifica il picco di velocità di gas molto superiore in valore assoluto a quello sperimentale e di Buffo *et al.*, (2016). Una spiegazione analoga vale anche per la velocità del liquido, in cui il profilo negativo è dovuto alla zona di ricircolo in cui il liquido scende per poi risalire in colonna con il gas.

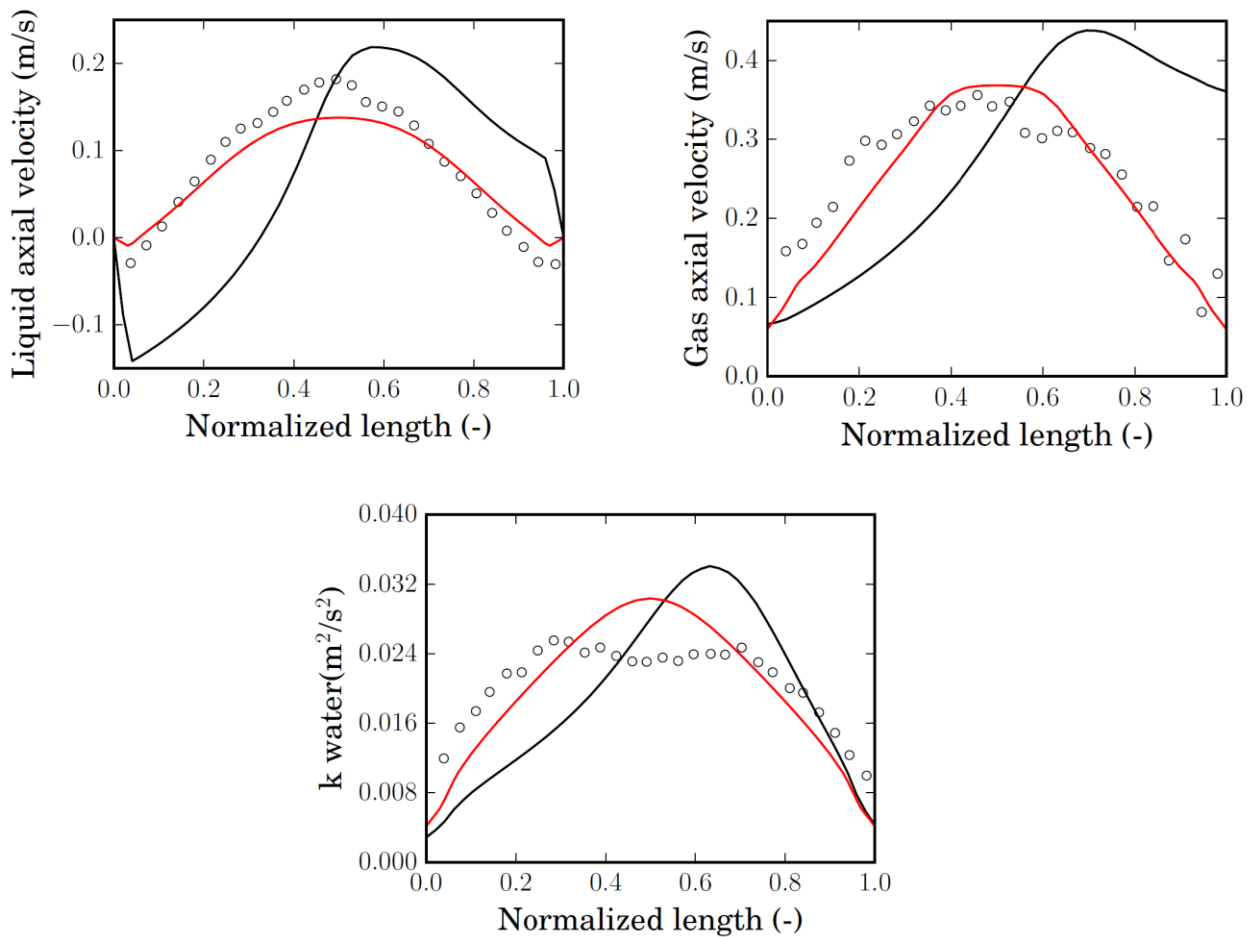


Figura 5.4: risultati della simulazione della colonna di Deen considerando la sola forza di Drag

Anche per l'energia cinetica il discorso è analogo: il picco di energia, superiore in modulo al valore sia sperimentale sia di Buffo *et al.*, (2016), si trova in corrispondenza della posizione del pennacchio. Quanto alle fluttuazioni esse sono differenze di velocità assiale (z) e laterale (x). L'andamento di queste fluttuazioni è sempre spiegato dalla posizione del pennacchio: esso non si muove, pertanto la componente assiale ha due picchi in buon accordo con la media sperimentale, legati dal moto del liquido ascendente nella zona del pennacchio e discendente nella zona di ricircolo; la componente laterale ha valori molto bassi perché non c'è movimento del pennacchio. In figura 5.5 è possibile vedere la posizione del pennacchio durante la simulazione tramite il profilo grafico di velocità di gas, mentre in figura 5.6 è possibile vedere la distinzione tra zona di ricircolo (blu scuro) e la zona di risalita del liquido (rosso).

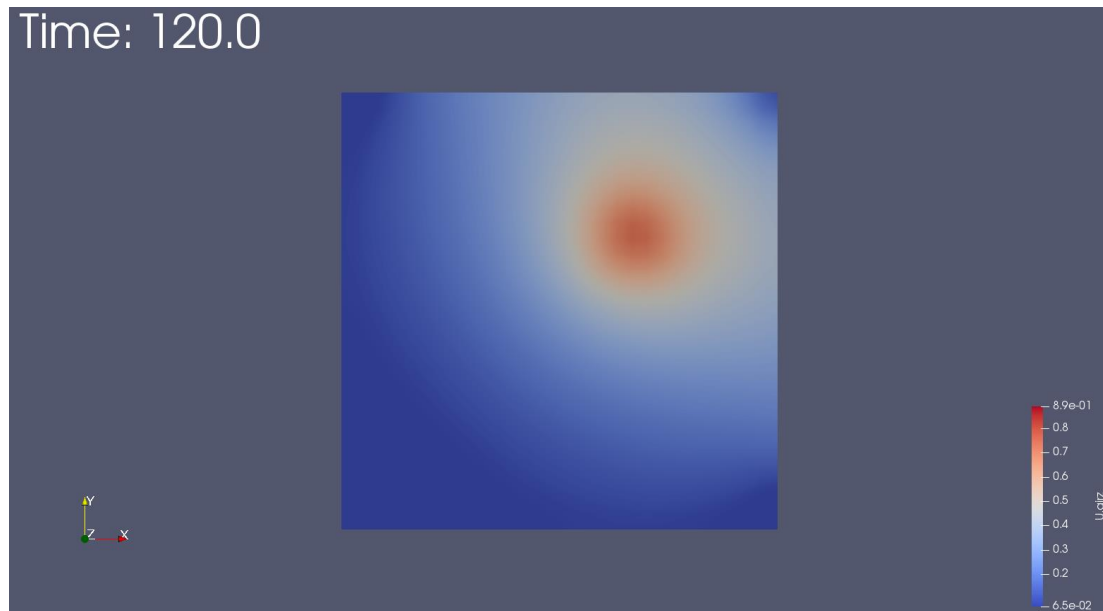


Figura 5.5: profilo di velocità di gas

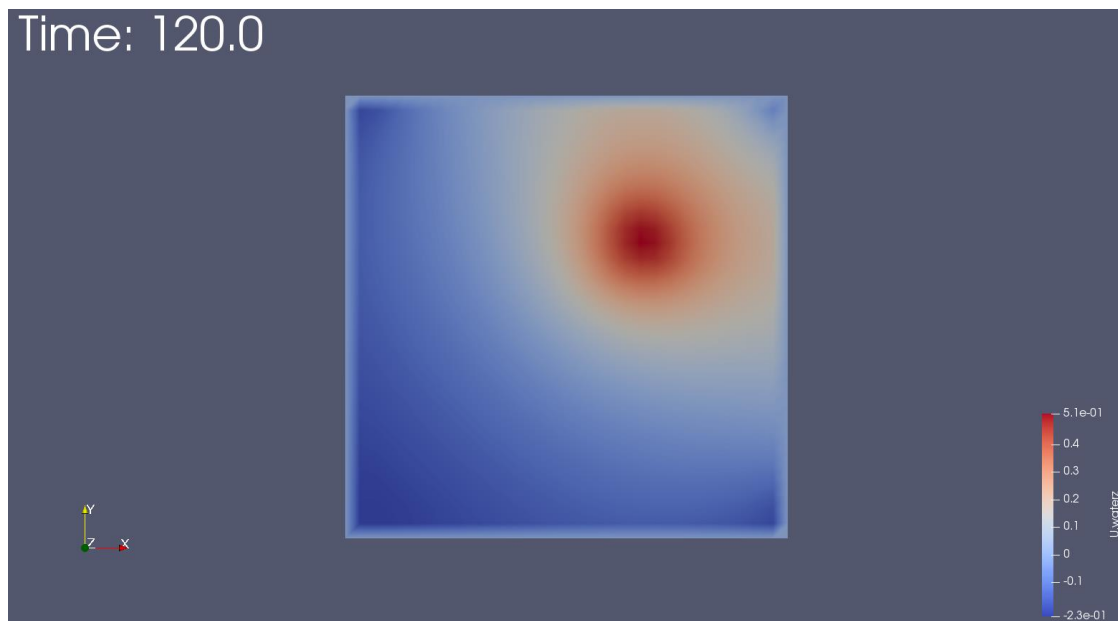


Figura 5.6: profilo di velocità di liquido

Per un riscontro più coerente dei risultati ottenuti è stato effettuato un confronto con l'analisi dei profili di velocità ed energia cinetica turbolenta con i primi 180 secondi della simulazione del lavoro di Buffo *et al.*, (2016). Essendo il moto del pennacchio puramente casuale sono stati ottenuti andamenti quasi simmetrici delle velocità di liquido e gas. Il profilo ottenuto dalle simulazioni di questo lavoro (in nero) presenta un valore di picco più elevato di velocità rispetto al lavoro di Buffo *et al.*, (2016)(in rosso). Questo a causa dell'assenza del fattore correttivo del coefficiente di Drag. In figura 5.7 sono mostrati questi confronti. È vero che c'è una differenza nei valori di picco, però questa differenza non è significativa. Inoltre questo comportamento prova che la simulazione effettuata in questo lavoro non è errata da un punto di vista fisico, ma semplicemente il tempo simulato non è sufficiente per calcolare una media temporale realistica.

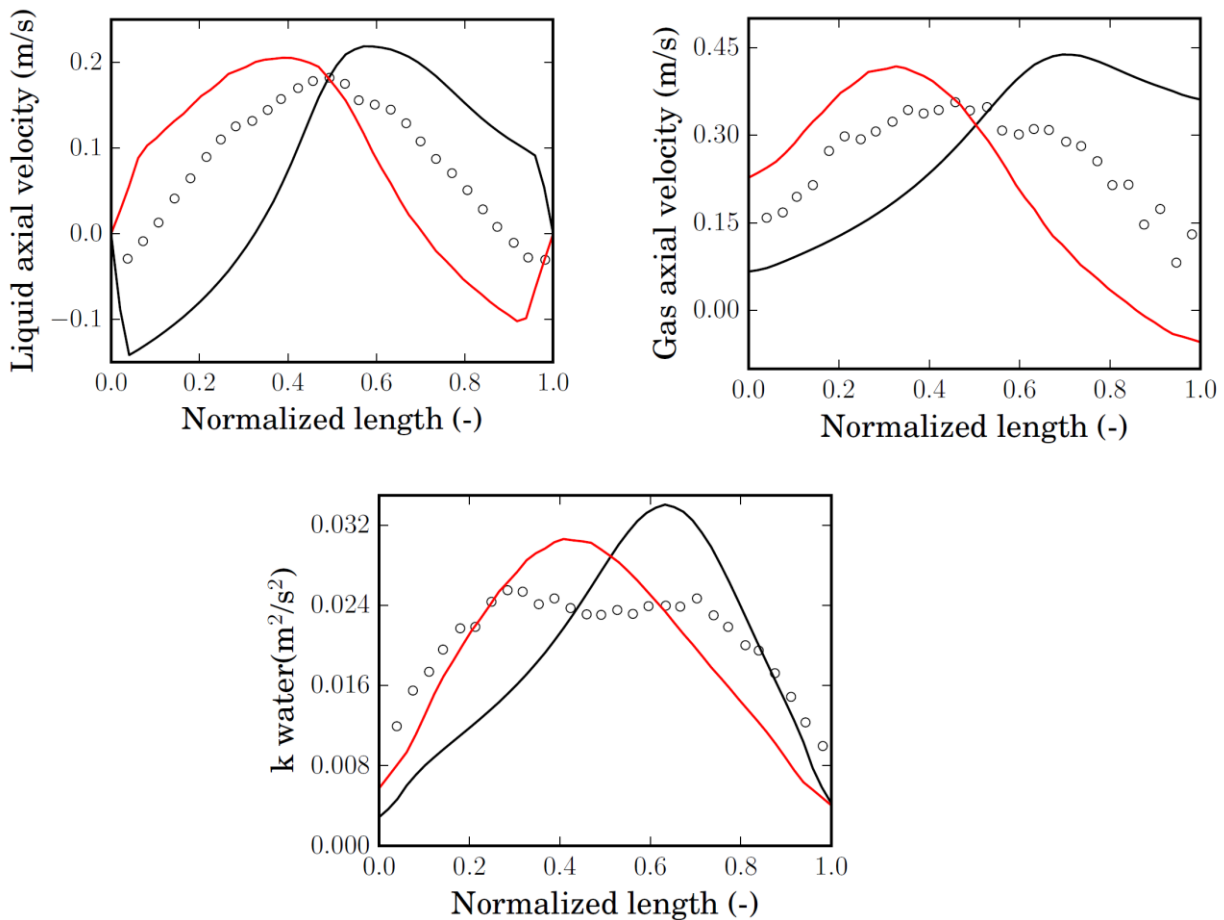


Figura 5.7: confronto dei profili di velocità di liquido, gas ed energia cinetica turbolenta per la simulazione con la sola forza di Drag con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo et al., (2016)

5.2.2 Simulazione con Drag e Lift

In questa simulazione viene aggiunta la forza di Lift che, come già visto per la colonna di Diaz, fa aumentare la velocità delle bolle. Questa componente si aggiunge all'assenza del fattore correttivo del coefficiente di Drag, enfatizzando il livello di picco già presente nella figura 5.6. Anche in questo caso il pennacchio si è posizionato in una posizione fissa. Pertanto i grafici di confronto (inerenti ai primi 180 secondi) mostrano un andamento simile a quelli ottenuti per il Drag e sono proposti in figura 5.8. Si può notare che, come anticipato in precedenza, la forza di Lift fa aumentare la velocità e pertanto i picchi sono più elevati. Aumentando la velocità di gas, aumenta di conseguenza la velocità di liquido circostante, quindi a sua volta aumenta la velocità discendente (di segno negativo) e l'energia cinetica, come si può vedere dalla figura 5.8.

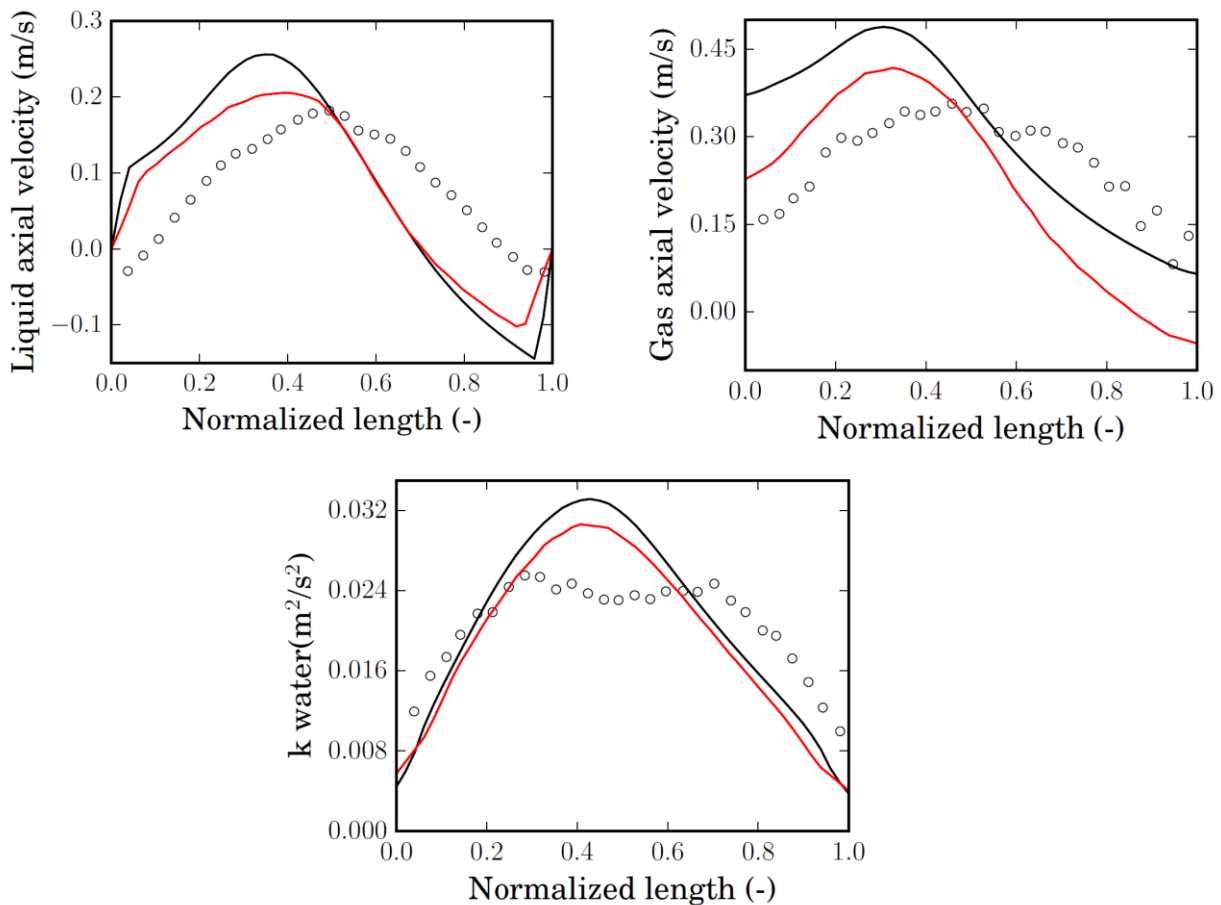


Figura 5.8: confronto dei profili di velocità di liquido, gas ed energia cinetica turbolenta per la simulazione che include le forze di Drag e Lift con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016)

Per quanto riguarda le fluttuazioni della velocità assiale (z) di liquido il profilo è analogo al caso della simulazione senza la forza di Lift: ci sono due picchi in corrispondenza della posizione del pennacchio e nella posizione opposta in cui è massima la velocità di ricircolo, mentre per la velocità laterale (x) ha valori molto bassi per l'assenza di moto del pennacchio.

5.2.3 Simulazione con Drag e Turbulent dispersion

I profili grafici ottenuti per questo caso mostrano un buon accordo con i dati sperimentali, nonostante il tempo di simulazione ridotto a 180 secondi. In particolare si può notare un profilo simmetrico per la velocità di liquido e gas e per l'energia cinetica turbolenta. Questo perché il gas fin da subito si muove verso zone in cui la concentrazione è inferiore. Una conferma di questo è visibile dai due picchi laterali di velocità del gas, in quanto lo sparger è in una posizione centrale alla base della colonna. Il solo contributo della forza di dispersione turbolenta, in aggiunta al drag, fa sì che il pennacchio rimanga centrale senza oscillazioni e che sviluppi una forma a “cono rovesciato” (figura 5.9a). In altre parole, se il gas nella sua risalita si muove verso zone in cui la concentrazione è inferiore, ossia verso le zone laterali, lontane dal pennacchio, il suo moto complessivo fa sì che il pennacchio si sviluppi verso l'alto, ma anche lateralmente, assumendo una forma simile ad un cono rovesciato. Tuttavia questo spostamento così accentuato di gas dovuto all'effetto di dispersione turbolenta non sembrerebbe essere fisico. La posizione fissa del pennacchio fa sì che i profili di velocità e di energia cinetica siano simmetrici. Negli esperimenti e nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016)

il picco si trova in posizione centrale a causa di una fluttuazione caotica del pennacchio, la cui velocità e la cui energia mediate nel tempo presentano massimi in posizione centrale. Il confronto con questa simulazione mostra un ottimo accordo con i dati sperimentali per la posizione centrale fissa del pennacchio ed il suo sviluppo lungo l'altezza della colonna. Questo confronto viene mostrato in figura 5.9b in cui in nero si ha il risultato di questo lavoro, in rosso i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016) e i cerchi bianchi rappresentano i dati sperimentali.

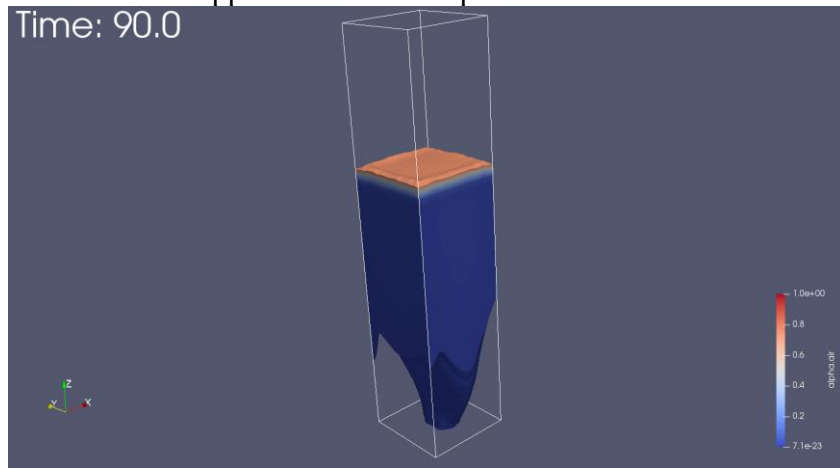


Figura 5.9a: forma del pennacchio nella simulazione con le forze di Drag e Turbulent dispersion

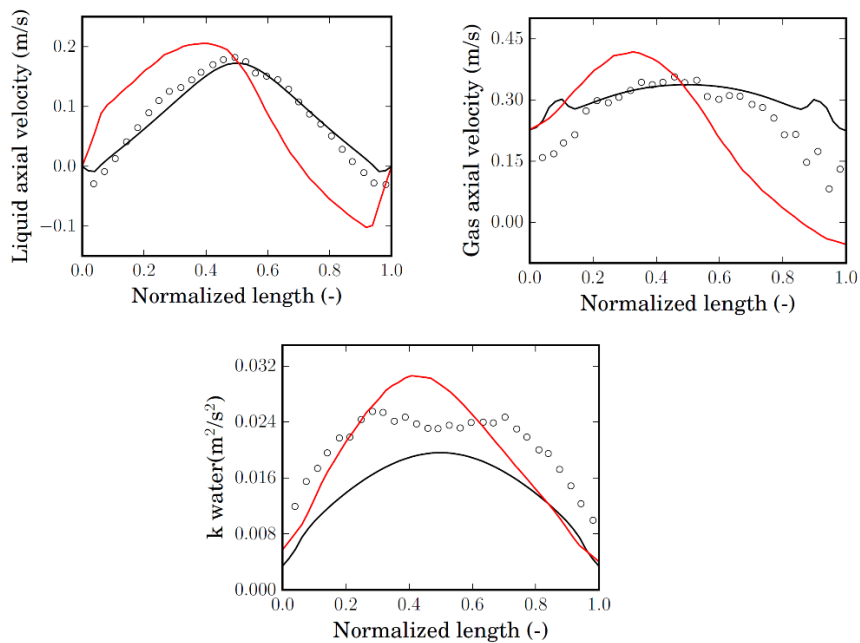


Figura 5.9b: confronto dei profili di velocità di liquido, gas ed energia cinetica turbolenta con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016)

A causa di questo sviluppo del pennacchio anche la velocità di liquido presenta un andamento simmetrico con un eccellente accordo con i dati sperimentali. Questo perché la risalita del liquido è centrale, mentre la zona di ricircolo si trova nelle fasce laterali, compensata dal moto di gas verso i lati in cui la concentrazione è minore. Pertanto i valori laterali della velocità di liquido sono prossimi a zero senza un importante picco negativo. L'energia cinetica turbolenta presenta un valore inferiore ai dati sperimentali a causa del moto delle bolle: l'effetto di dispersione turbolenta genera una componente laterale di velocità che rallenta la risalita nelle bolle. Per questo stesso principio nella colonna di Diaz si verifica un aumento di Hold-up.

5.2.4 Effetto combinato di Drag, Lift e Turbulent Dispersion

In questa simulazione è stata valutata l'azione combinata di queste tre forze sulle bolle. È stato visto che per la velocità di risalita dell'aria prevale l'effetto di Lift sulla Turbulent dispersion nella posizione del pennacchio, mentre rimane un picco nella posizione opposta. Anche in questo caso è dovuto dalla Turbulent dispersion che spinge le bolle di gas verso il lato opposto. Inoltre la componente di Turbulent dispersion abbassando la velocità di gas, abbassa anche quella del liquido. Infatti l'andamento nel grafico, in figura 5.10, lo conferma con un profilo simile a quello ottenuto nei primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016). Il risultato è un profilo simmetrico di velocità di liquido.

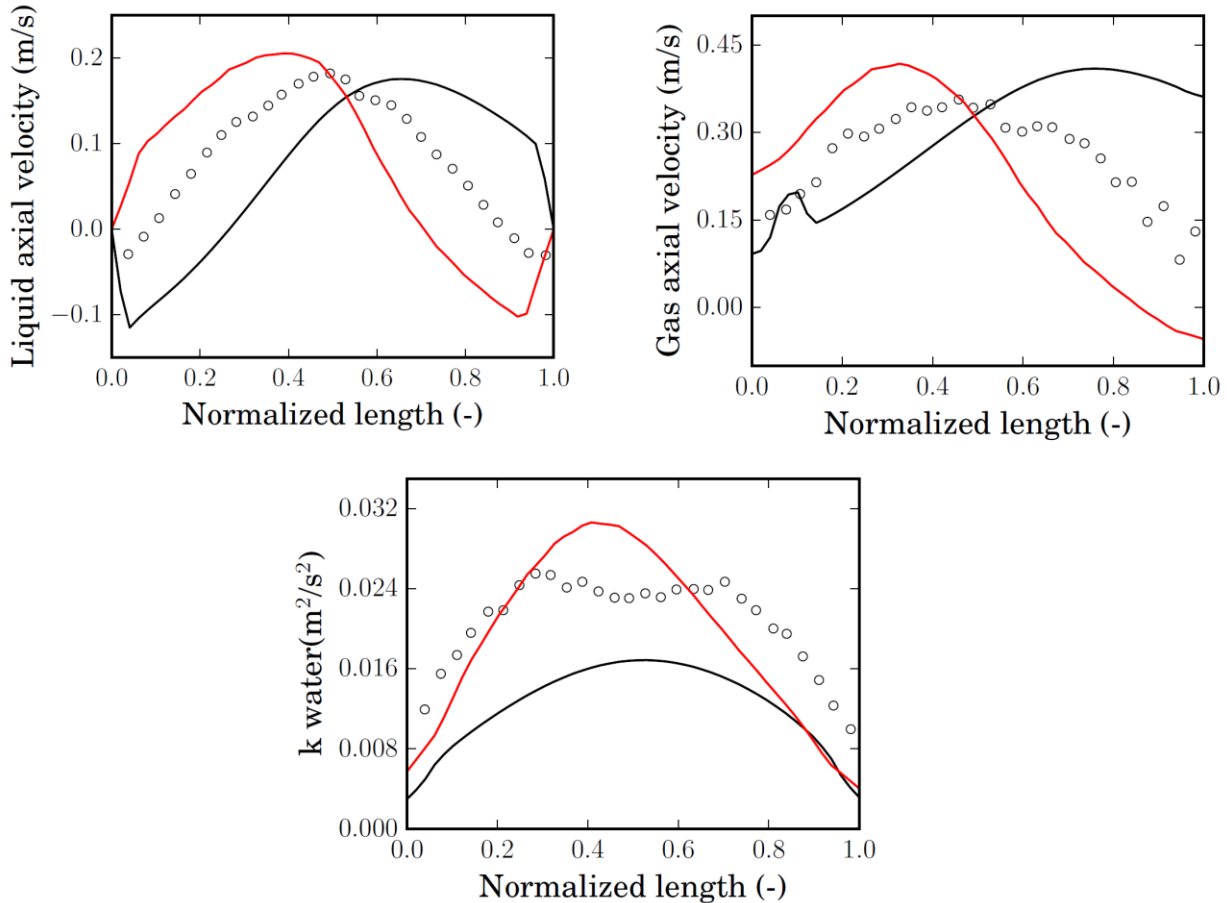


Figura 5.10: confronto dei profili di velocità di liquido, gas ed energia cinetica turbolenta con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016)

Questo profilo è stato ottenuto perché il Lift dà un contributo importante nel bilancio, così come la Turbulent dispersion. Quest'ultimo contributo è ben visibile nel grafico dell'energia cinetica turbolenta, in cui, come per la simulazione con la sola Turbulent dispersion, c'è un valore inferiore ai dati sperimentali.

5.2.5 Simulazione del modello completo

Nell'ultima simulazione di questo caso viene testato il modello completo, includendo il contributo di Wall lubrication, trascurato in tutte le simulazioni precedenti. Il suo contributo fa oscillare il

pennacchio a destra ed in basso senza una posizione stabile. Per questo le proprietà mediate nel tempo presentano un picco centrale e un discreto accordo con i dati sperimentali. Si nota il contributo della Turbulent dispersion con la presenza di due picchi laterali nel profilo di velocità del gas. In questo caso la Wall lubrication contrasta l'effetto del Lift. Infatti si può notare un leggero rilievo nella posizione mediata nel tempo del pennacchio nel profilo di velocità di gas. La differenza di velocità tra i filetti fluidi in prossimità delle pareti (su cui è stata assunta l'ipotesi no-slip) crea una differenza di pressione che genera un effetto di lubrificazione che rallenta il moto delle bolle. Questo effetto viene osservato anche nel profilo di velocità di liquido: l'andamento presenta un massimo al centro ed ha un valore inferiore a quello sperimentale. Tuttavia questi profili hanno un buon accordo con i dati sperimentali, rispetto ai primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016), confronto mostrato in figura 5.11a. Nella figura 5.11b è mostrato un confronto completo del modello simulato per 180 secondi e del modello di Buffo *et al.*, (2016) analizzando i dati lungo tutto il tempo di simulazione (5000s), e i dati sperimentali. Anche per quanto riguarda l'energia cinetica turbolenta del liquido il discorso è molto simile al grafico della velocità: c'è un picco centrale ad un valore inferiore a quello ottenuto da Buffo *et al.*, (2016) e dei dati sperimentali.

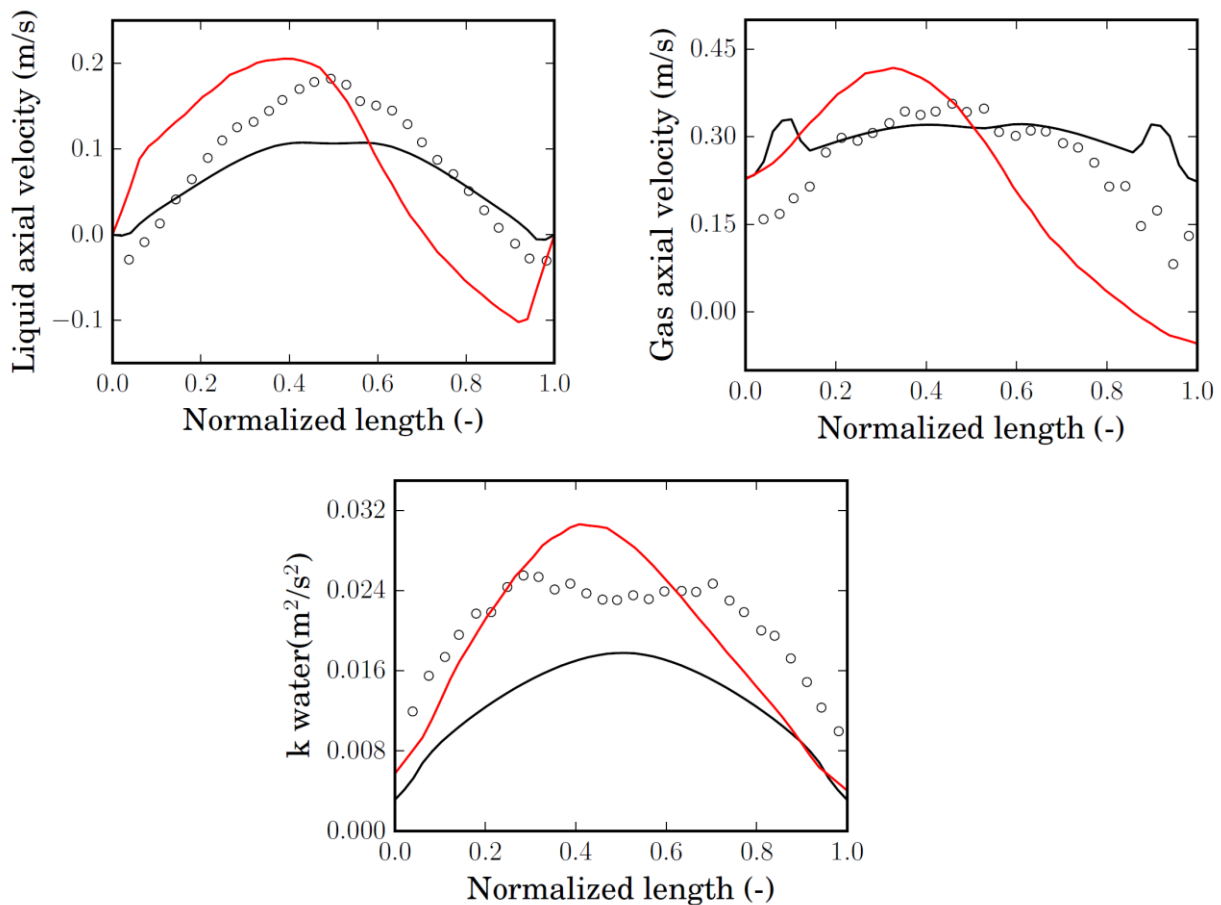


Figura 5.11a: confronto dei profili di velocità di liquido, gas ed energia cinetica turbolenta con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016)

Nella figura 5.12 è mostrata un'istantanea della colonna in cui si vede la posizione del pennacchio a 25 cm di altezza dallo sparger per tre istanti: 60s, 120s, 180s ordinati rispettivamente dall'alto verso il basso. Si nota la posizione instabile del pennacchio in quanto oscilla tra il lato destro ed il lato inferiore della base. La figura mostra il profilo della velocità dell'aria. L'area chiara rappresenta la posizione del pennacchio in movimento, mentre si possono osservare zone isolate ad alte concentrazioni di gas. Questo conferma i picchi presenti ai lati del profilo grafico della velocità di

gas: la forza di Turbulent dispersion spinge le bolle verso zone a basse concentrazioni di gas, ossia lontano dal pennacchio.

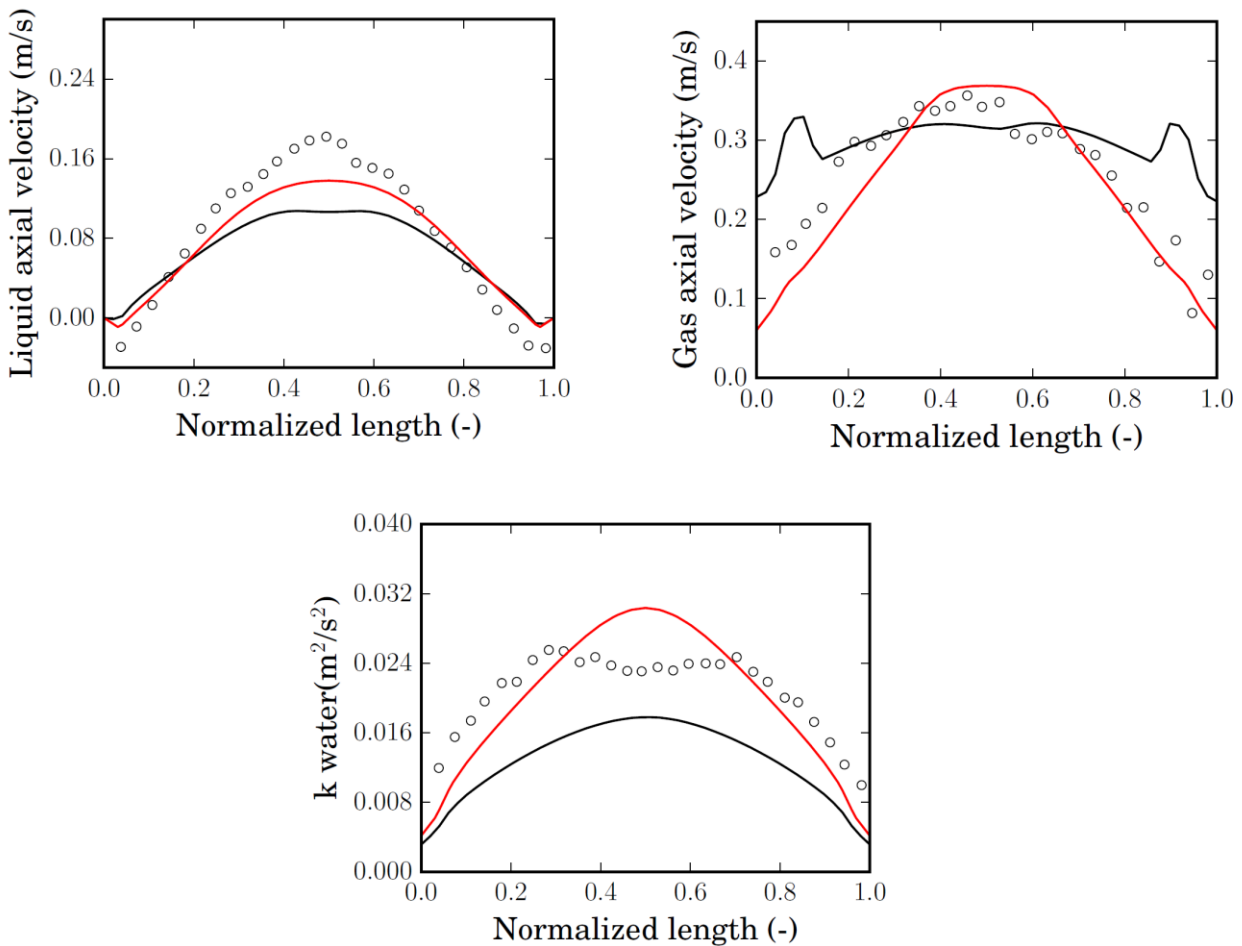


Figura 5.11b: risultati della simulazione della colonna di Deen con il modello completo

Ciò che viene mostrato in figura 5.12 conferma il fatto che i picchi laterali del profilo di velocità di gas, ottenuto nelle simulazioni effettuate includendo nel bilancio la dispersione turbolenta, non abbia un significato del tutto fisico: non ha senso che ci siano dei punti in cui le bolle risalgano a velocità di circa 1,7m/s accanto a punti in cui la velocità di risalita è circa 1,4m/s. Lo scarto di velocità tra celle limitrofe è eccessivo ed è sintomo di qualche problema che si genera quando questa forza viene considerata nel bilancio.

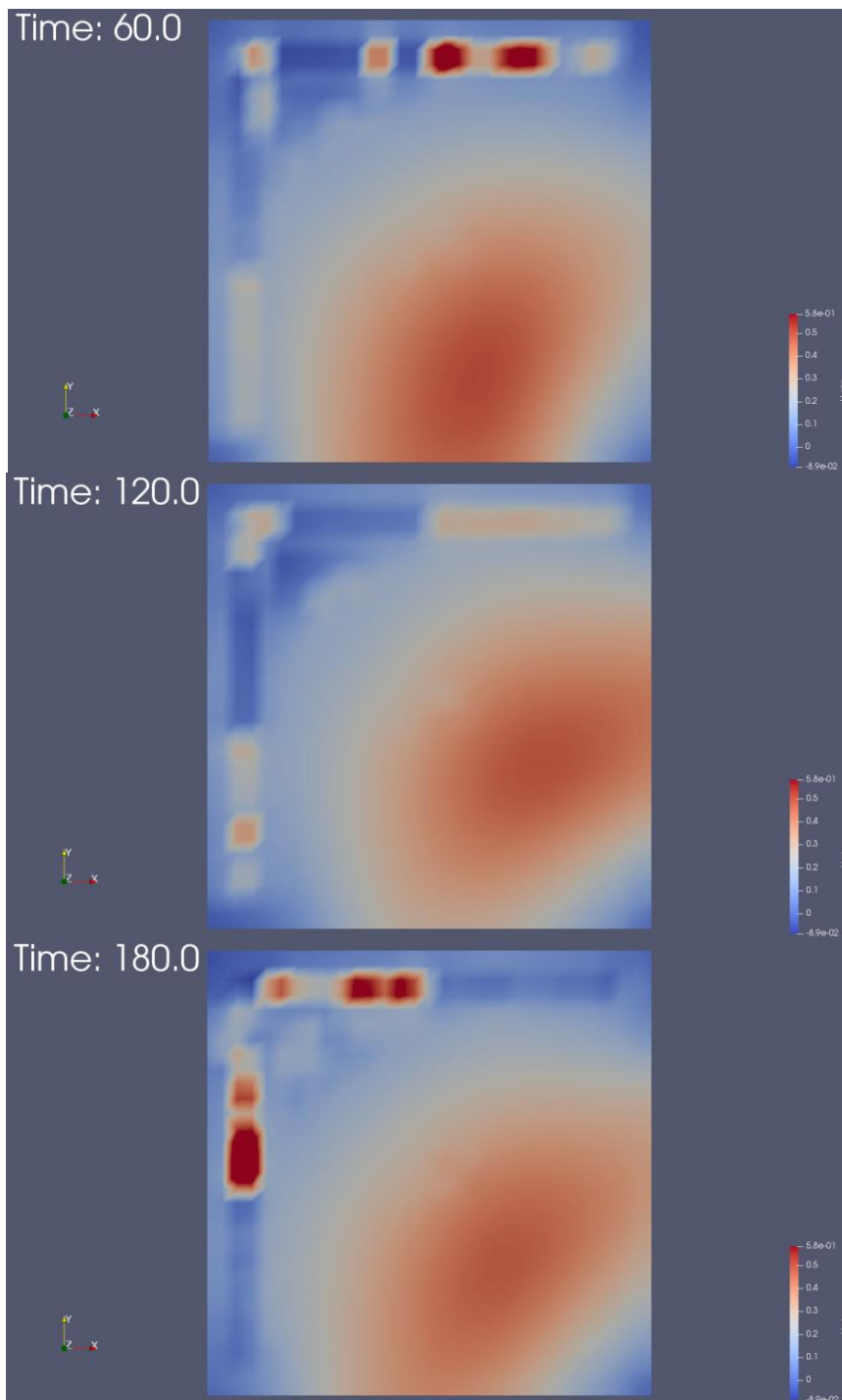


Figura 5.12: istantanee della colonna dell'andamento di velocità dell'aria (dall'alto verso il basso a 60, 120 e 180 secondi)

5.3 Colonna di Zhang

Per questa colonna sono state effettuate due simulazioni: la prima con la sola forza di Drag, mentre la seconda con il modello completo. Anche per le simulazioni inerenti a questa colonna il costo computazionale è molto elevato, pertanto anche per questo caso lo studio fatto in questo lavoro è stato su un tempo di 180 secondi. Nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016), invece, il sistema è stato studiato per un tempo di 2000 secondi, un tempo più di undici volte superiore a quello di questo lavoro. Tuttavia è stato fatto un confronto delle grandezze monitorate, ossia velocità assiale di liquido e gas in funzione della lunghezza normalizzata, con i primi 180 secondi del lavoro di Buffo *et al.*, (2016) eliminando i primi 60 secondi di transitorio. Vale la pena ricordare che il sistema è del tutto simile a quello trovato nella colonna di Deen, ossia viene aggiunto NaCl per forzare a zero il termine sorgente del bilancio di popolazione annullando i fenomeni di coalescenza e rottura. Nella geometria del sistema l'unico parametro diverso dalla colonna di Deen è l'altezza che raddoppia (0.9m). l'analisi dei risultati viene pertanto effettuata a due diverse altezze, ossia per il rapporto $z/H=0.57$ e $z/H=0.73$.

5.3.1 Simulazione con la sola forza di Drag

In questa simulazione è presente la sola forza di trascinamento, senza la correzione del coefficiente di Drag. Si ottiene un risultato che non differisce molto dal lavoro di Buffo *et al.*, (2016), proprio perché l'unica differenza è l'assenza di queste correzioni che modificano la velocità di risalita delle bolle.

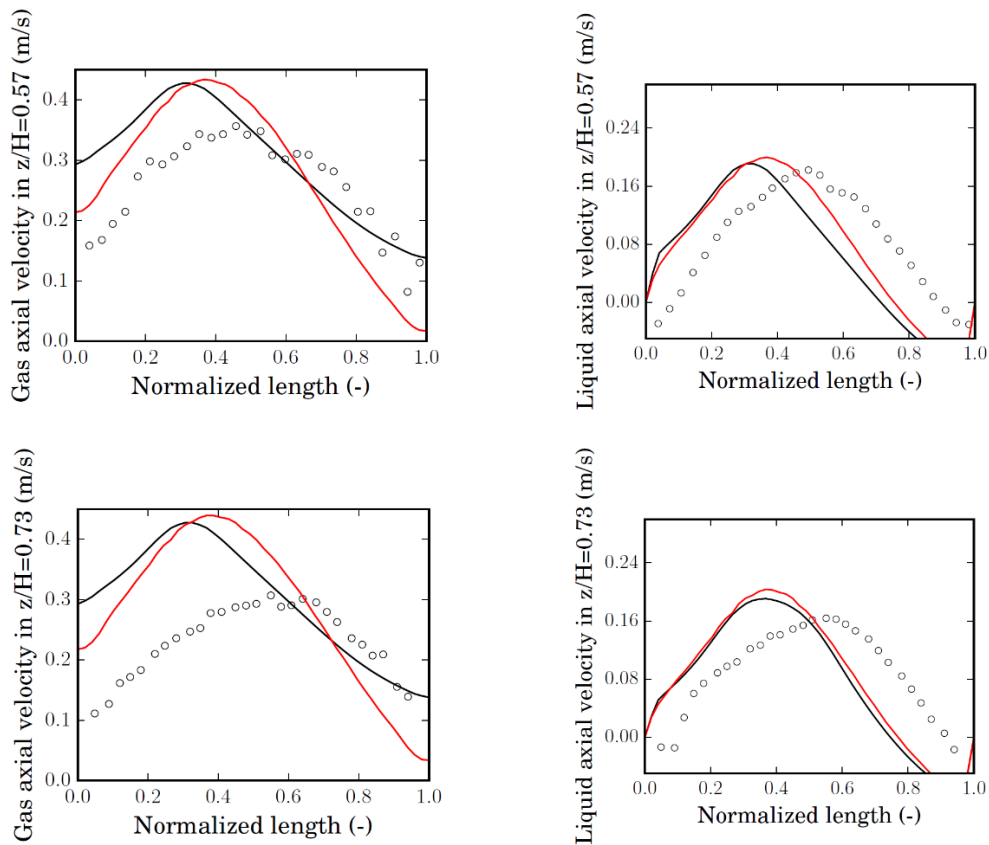


Figura 5.13: risultati della simulazione della colonna di Zhang con la sola forza di Drag

Il confronto è stato fatto (figura 5.13) con i primi 180 secondi della simulazione del lavoro di Buffo *et al.*, (2016), pertanto è giustificato un disaccordo con i dati sperimentali, raccolti su un tempo maggiore.

5.3.2 Simulazione completa

È stata effettuata una simulazione di questo caso con il modello completo. La simulazione è giunta a convergenza e sono stati ottenuti dei risultati che sembrano non corrispondere esattamente ad una descrizione accurata del sistema fisico reale. Il pennacchio si divide in due lasciando uno spazio in cui è presente solo liquido e totale assenza di bolle. Questo effetto è visibile in figura 5.14. L'effetto di Turbulent dispersion fa tendere le bolle verso le pareti in cui il gas è in concentrazione minore, ma l'assenza di bolle al centro del pennacchio non sembra avere una spiegazione fisica. Pertanto pare che il modello elaborato necessiti di miglioramenti per lo studio di questo sistema.

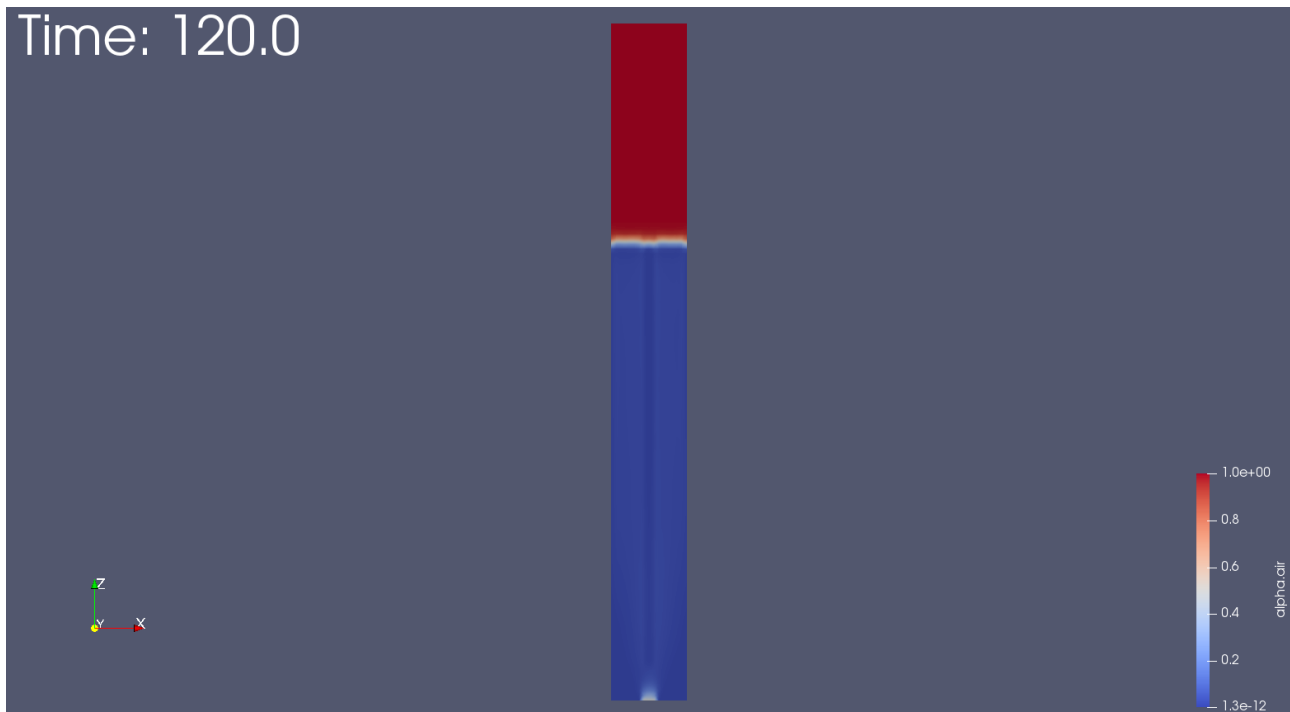


Figura 5.14: profilo grafico istantaneo di concentrazione dell'aria effettuato al tempo di 120s

I grafici mostrati in figura 5.15 dimostrano l'assenza di significato fisico dei risultati ottenuti.

5.4 Colonna di Kulkarni

Per questo caso è stata effettuata una sola simulazione e il modello include la sola forza di Drag, trascurando tutte le altre. Inoltre, come per gli altri casi esaminati, il coefficiente di Drag non viene moltiplicato per il fattore correttivo. Anche per questa simulazione il tempo è di 180 secondi. In questa simulazione viene studiato il comportamento di una colonna di forma cilindrica. Si ha un comportamento diverso da quello delle colonne a base quadrata o rettangolare, in quanto la geometria del sistema influenza il comportamento fluidodinamico. Le misurazioni sperimentali sono state fatte con la tecnica LDA (Laser Doppler Anemometry) a quattro differenti altezze della colonna, ossia, in valore adimensionale dato dal rapporto altezza/diametro, pari a 1.4, 2.6, 3.9, 5.0, e la portata del gas è di 20mm/s, la stessa della simulazione effettuata nel lavoro di Buffo *et al.*, (2016), e adottata anche in questo lavoro. In questa simulazione sono stati analizzati i profili radiali di velocità assiale di liquido, Hold-up di gas, Diametro medio di Sauter e velocità di dissipazione della turbolenza.

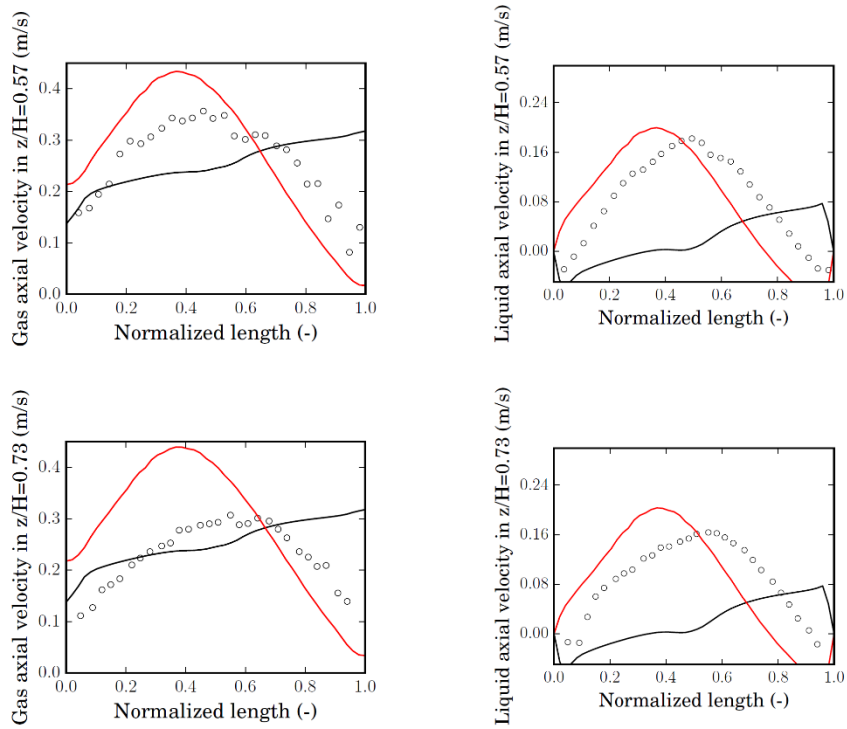


Figura 5.15: grafici dei profili di velocità di gas e liquido ottenuti dalla simulazione del modello completo per la colonna di Zhang

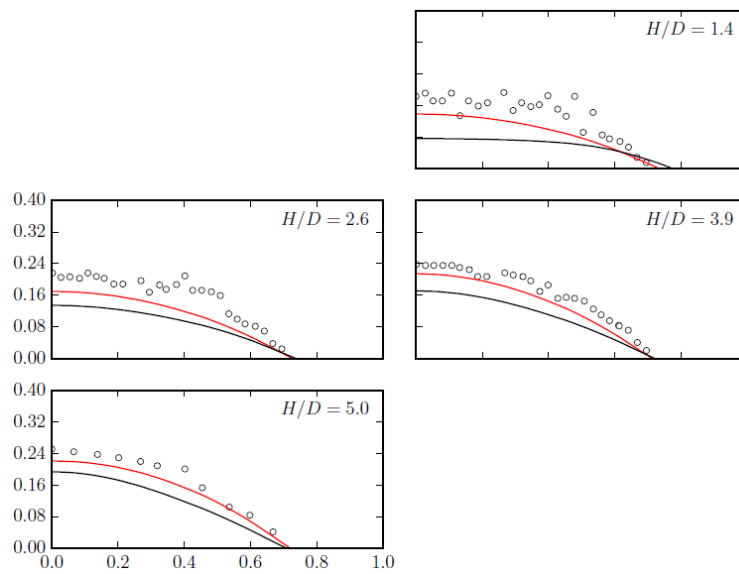


Figura 5.16: profili radiali di velocità assiale di liquido ottenuti per la colonna di Kulkarni

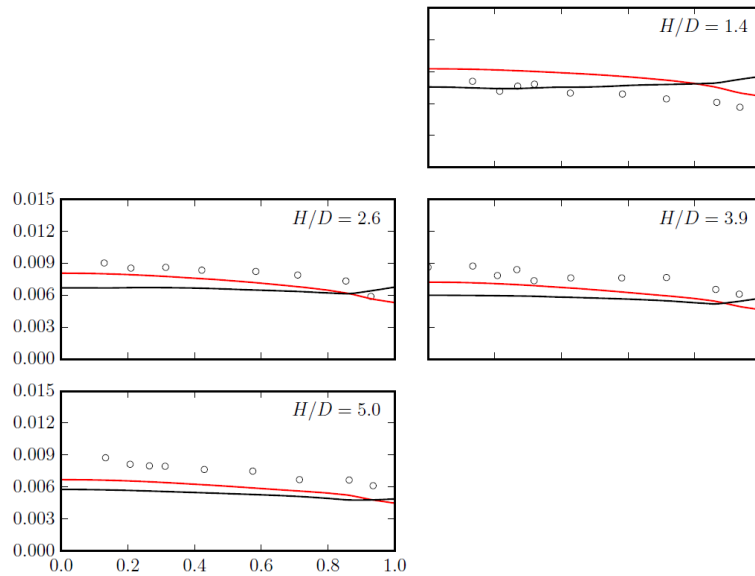


Figura 5.17: profili radiali di Diametro medio di Sauter delle bolle ottenuti per la colonna di Kulkarni

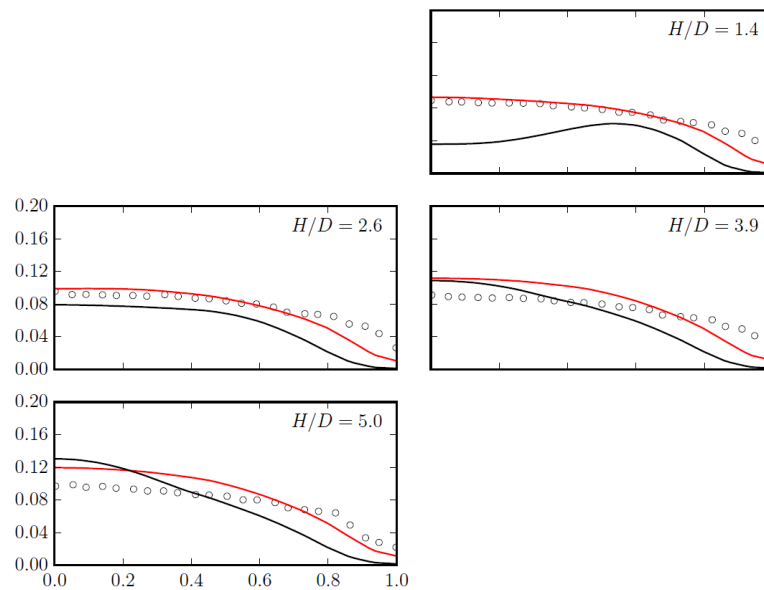


Figura 5.18: profili radiali di Hold-up di gas ottenuti per la colonna di Kulkarni

Anche per questo caso i risultati sono stati mediati nel tempo e confrontati con i dati sperimentali (cerchi bianchi), e con i risultati di Buffo *et al.*, (2016). Dai risultati ottenuti sembra esserci un accordo leggermente inferiore con i risultati sperimentali, in quanto non è stata fatta nessuna correzione al coefficiente di Drag, e pertanto, come per i casi precedenti, la velocità è aumentata. Questo spiega un valore di Hold-up complessivamente minore in colonna e il massimo alle altezze superiori alla prima indica la posizione mediamente centrale nel tempo del pennacchio. Per il diametro medio di Sauter i grafici presentano il valore massimo in prossimità della parete. Osservando ciò potrebbe sembrare che in prossimità del pennacchio c'è molta turbolenza e i fenomeni di impatto turbolento tra le bolle che provocano rottura prevalgono sui fenomeni di coalescenza, i quali sono predominanti a velocità inferiori. Infine la velocità del liquido è più bassa e presenta una componente negativa ai lati in quanto essendo una zona di ricircolo, il liquido si muove verso il basso.

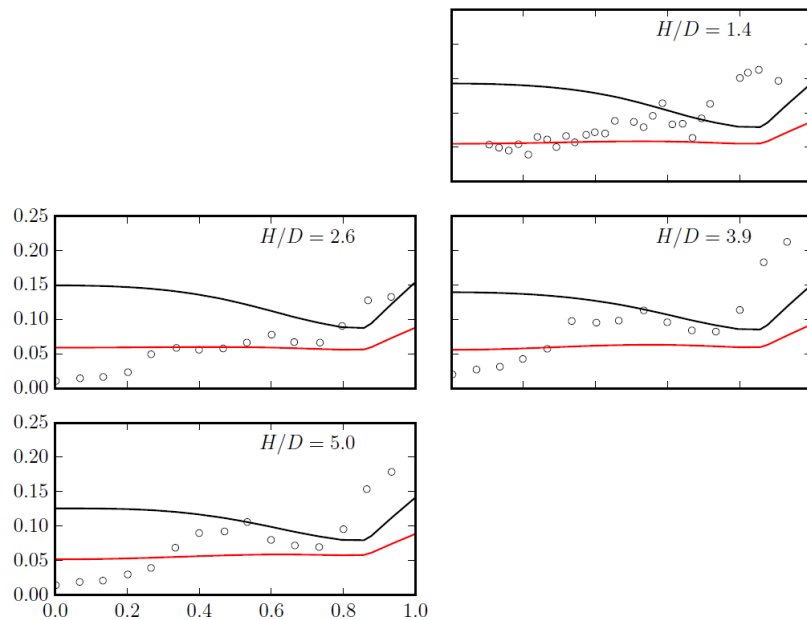


Figura 5.19: profili radiali della velocità di dissipazione della turbolenza ottenuti per la colonna di Kulkarni

In figura 5.19 è mostrato il profilo di velocità di dissipazione della turbolenza. Anche qui si può notare il cambiamento di profilo dovuto all'assenza di correzioni del coefficiente di Drag: il profilo non è piatto e la dissipazione ai lati è più marcata, con un maggior accordo rispetto ai dati sperimentali, mentre al centro si hanno valori più elevati, in disaccordo con i dati sperimentali. In questa simulazione non è stata considerata la Turbulent dispersion. Tuttavia il suo contributo avrebbe probabilmente potuto avvicinare il profilo ai dati sperimentali.

Capitolo 6

Conclusioni

L'equazione di bilancio di popolazione generalizzato (GBPE) descrive l'evoluzione della popolazione di particelle in diversi sistemi multifase. Questo lavoro si è focalizzato sui sistemi gas-liquido, in particolare sullo studio dell'effetto delle forze interfacciali tra le bolle sulla loro fluidodinamica. Sono stati studiati quattro sistemi gas-liquido, in particolare quattro colonne con quattro geometrie differenti, con un nuovo modello che tiene conto delle forze interfacciali di Drag, Lift, Turbulent dispersion e Wall lubrication. Queste forze servono per calcolare il valore di velocità delle bolle da inserire nel bilancio di popolazione generalizzato (GBPE), da cui è possibile ottenere e studiare la distribuzione dimensionale delle bolle. Con il software OpenFOAM è stato possibile simulare questi sistemi, e calcolare l'andamento nel tempo dei valori delle proprietà analizzate per tutti i 180 secondi delle simulazioni. Per ogni sistema è stato studiato il contributo di ogni singola forza simulando il sistema tenendo conto di un contributo alla volta, fino ad arrivare a tutte le forze considerate in questo lavoro. Per il primo sistema, ossia la colonna di Diaz, questo nuovo modello ha migliorato l'accordo con i dati sperimentali per alcune proprietà. Lo studio è stato effettuato a cinque diverse portate di gas comprese tra 2.4mm/s e 21.3mm/s e le tre proprietà in esame sono Hold-up di gas, Plume oscillation period (POP) e Diametro medio di Sauter. A basse portate è stato ottenuto un accordo migliore per il Diametro medio di Sauter, a valori intermedi è stato migliorato l'accordo per Hold-up e POP. Il miglioramento dell'accordo con i dati sperimentali per il POP è stato massimo alla portata di 21.3mm/s con un disaccordo inferiore all'1%. Quanto al secondo caso, ossia la colonna di Deen, il costo computazionale si è rivelato troppo elevato per effettuare un confronto con il medesimo tempo di simulazione del lavoro di Buffo *et al.*, (2016) e con i dati sperimentali. È stato osservato il pennacchio fermo, pertanto i profili ottenuti non hanno rispecchiato l'andamento medio osservato da Buffo *et al.*, (2016), le cui simulazioni sono durate 5000s. Sono stati tuttavia confrontati i grafici con i primi 180s della simulazione di Buffo *et al.*, (2016), e dai confronti è possibile prevedere un miglioramento degli accordi con i dati sperimentali, se le simulazioni con il modello studiato in questo lavoro avessero avuto la stessa durata. Per questa colonna sono stati studiati i profili di velocità assiale di liquido e gas, le fluttuazioni di velocità lungo le coordinate x e z per il liquido, ed infine il profilo di energia cinetica turbolenta. Per il terzo caso, ossia la colonna di Zhang, sono stati studiati i profili di velocità assiali di gas e liquido a due altezze differenti, essendo la colonna di altezza doppia rispetto al secondo caso. La simulazione con il modello completo è giunta a convergenza ma con dei risultati che sembrano privi di significato fisico, rivelando così limiti del modello che deve essere migliorato. Infine per l'ultimo caso, ossia la colonna cilindrica di Kulkarni, è stato simulato solo il contributo della forza di Drag, eliminando il fattore correttivo del coefficiente di Drag che tiene conto delle turbolenze del sistema. Sono stati studiati i profili radiali di Hold-up, Velocità di dissipazione della turbolenza, Velocità assiale del liquido e Diametro medio di Sauter. L'accordo in questo caso non è migliorato ma non è stata fatta una simulazione con il modello completo. Pertanto non è possibile dire se per questo caso il modello migliora l'accordo o presenta dei limiti.

Bibliografia

- Alopaeus, V., Koskinen, J., Keskinen, K., Majander, J., 2002. Simulation of the population balances for liquid–liquid systems in a non ideal stirred tank. Part 2: parameter fitting and the use of the multiblock model for dense dispersions. *Chem. Eng. Sci.* 57, 1815–1825.
- Anderson, J., Quinn, J., 1970. Bubble columns: flow transitions in the presence of trace contaminants, *Chem. Eng. Sci.* 25, 373–380.
- Antal, S., Lahey, R., Flaherty, J., 1991. Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow* 17, 635–652.
- Bakker, A., Van den Akker, H.E.A., 1994. Gas–liquid contacting with axial flow impellers. *Chem. Eng. Res. Des.* 72, 573–582.
- Bashiri, H., Bertrand, F., Chaouki, J., 2016. Development of a multiscale model for the design and scale-up of gas/liquid stirred tank reactors. *Chem. Eng. J.* 297, 277–294.
- Becker, S., Sokolichin, A., Eigenberger, G., 1994. Gas–liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chemical Engineering Science* 49, 5747–5762.
- Bothe, D., Schmidtke, M., Warnecke, H.-J., 2007. Direct numerical computation of the lift force acting on single bubbles. In: 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007, 09–13.07.2007, Leipzig, Germany.
- Brucato, A., Grisafi, F., Montante, G., 1998. Particle drag coefficients in turbulent fluids. *Chem. Eng. Sci.* 53, 3295–3314.
- Buffo, A., Vanni, M., Marchisio, D.L., 2012. Multidimensional population balance model for the simulation of turbulent gas–liquid systems in stirred tank reactors. *Chem. Eng. Sci.* 70, 31–44.
- Buffo, A., Marchisio, D.L., Vanni, M., Renze, P., 2013a. Simulation of polydisperse multiphase systems using population balances and example application to bubbly flows. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 1859–1875.
- Buffo, A., Vanni, M., Marchisio, D.L., Fox, R.O., 2013b. Multivariate quadrature-based moments methods for turbulent polydisperse gas–liquid systems. *Int. J. Multiphase Flow* 50, 41–57.
- Buffo, A., Marchisio, D.L., 2014. Modeling and simulation of turbulent polydisperse gas–liquid systems via the generalized population balance equation. *Rev. Chem. Eng.* 30, 73–126.
- Buffo, A., Vanni, M., Renze, P., Marchisio, D. L., 2016. Empirical drag closure for polydisperse gas liquid systems in bubbly flow regime: bubble swarm and micro-scale turbulence, *Chem. Eng. Res. Des.* 113, 284–303 .
- Buffo, A., Vanni, M., Marchisio, D.L., 2016. On the implementation of moment transport equations in openfoam: Boundedness and realizability, *Int. J. Multiph. Flow* 85, 223–235 .

- Cheng, H., Hills, J.H., Azzopardi, B.J., 1998. A study of the bubble-to-slug transition in vertical gas–liquid flow in columns of different diameters, *Int. J. Multiphase Flow* 24, 431–452.
- Clift, R., Grace, J.R., Weber, M.E., 1978. *Bubbles, Drops, and Particles*. Dover Publications.
- Collins, R., 1967. The effect of a containing cylindrical boundary on the velocity of a large gas bubble in a liquid, *J. Fluid Mech.* 28, 97–112.
- Colombo, M., Fairweather, M., 2015. Multiphase turbulence in bubbly flows: RANS simulations. *Int. J. Multiphase Flow* 77, 222–243.
- Colombo, M., Fairweather, M., 2016 Rans simulations of bubble coalescence and break-up in bubbly two-phase flows. *Chem. Eng. Sci.* 146, 207-255.
- Coroneo, M., Montante, G., Paglianti, A., Magelli, F., 2011. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: numerical issues about the RANS simulations. *Comput. Chem. Eng.* 35,1959–1968.
- Coulaloglou, C.A., Tavlarides, L.L., 1977. Description of interaction processes in agitated liquid–liquid dispersions. *Chem. Eng.Sci.* 32, 1289–1297.
- Deen, N.G., Solberg, T., Hjertager, B.H., 2001. Large eddysimulation of the gas–liquid flow in a square cross-section ed bubble column. *Chem. Eng. Sci.* 56, 6341–6349.
- Deglon, D., Meyer, C., 2006. CFD modelling of stirred tanks: numerical considerations. *Miner. Eng.* 19, 1059–1068.
- Diaz, M.E., Iranzo, A., Cuadra, D., Barbero, R., Montes, F.J., Galan,M.A., 2008. Numerical simulation of the gas–liquid flow in a laboratory scale bubble column influence of bubble size distribution and non-drag forces. *Chem. Eng. J.* 139, 363–379.
- Drew, D.A.; Passman, S.L. *Theory of Multicomponent Fluids*; Springer-Verlag: New York, NY, USA, 1998.
- Drew D, Lahey R Jr. The virtual mass and lift force on a sphere in rotating and straining inviscid flow. *Int J Multiphase Flow* 1987; 13: 113–121.
- Ervin, E.A., Tryggvason, G., 1997. The rise of bubbles in a vertical shear flow. *J. Fluids Eng.* 119, 443–449.
- Feng, J., Bolotnov, I.A., 2017. Interfacial force study on a single bubble in laminar and turbulent flows. *Nucl. Eng. Sci.* 313,345-360.
- Gao, Z., Li, D., Buffo, A., Podgórska, W., Marchisio, D.L., 2016. Simulation of droplet breakage in turbulent liquid-liquid dispersions with CFD-PBM: comparison of breakage kernels.*Chem. Eng. Sci.* 142, 277–288.
- Geary, N.W., Rice, R.G., 1991. Bubble size prediction for rigid and flexible spargers. *AIChE J.* 37, 161–168.
- Groen, J.S., *Scales and Structures in Bubbly Flows*, Ph.D. Thesis, Technical University of Delft,

2004.

Grossetete, C., 1995. Experimental investigation of void profile development in a vertical cylindrical pipe. In: Serizawa, A., Fukano, T., Bataille, J. (Eds.), *Advances in Multiphase Flow*, pp. 333–346.

Hibiki, T. , Ishii, M. , 2000. One-group interfacial area transport of bubbly flows in vertical round tubes. *Int. J. Heat Mass Transfer* 43, 2711–2726.

Hibiki, T. , Ishii, M. , 2002. Development of one-group interfacial area transport equation in bubbly flow system. *Int. J. Heat Mass Transfer* 45 (11), 2351–2372 .

Hill, D.P. , 1998. *The Computer Simulation of Dispersed Two-phase Flows*. University of London, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, UK (Ph. d. thesis) .

Hulburt, H.M., Katz, S., 1964. Some problems in particletechnology: a statistical mechanical formulation. *Chem. Eng.Sci.* 19, 555–574.

Icardi, M., 2012. *Computational models for the simulation of turbulent poly-dispersed flows: Large Eddy Simulation and Quadrature- Based Moment Method*. Politecnico di Torino, Italy (Ph.D. thesis)

Ishii, M., Zuber, N., 1979. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE J.* 25,843–855.

Jiao, H., Podowski, M., 2012. An analysis of multidimensional models of gas/liquid flows. *Trans. Am. Nucl. Soc.* 107, 1393.

Kazakis, N.A., Mouza, A.A., Paras, S.V., 2008. Experimental study of bubble formation at metal porous spargers: Effect of liquidproperties and sparger characteristics on the initial bubble size distribution. *Chem. Eng. J.* 137, 265–281.

Kim, S. , 1999. *Interfacial area transport equation and measurement of local interfacial characteristics* Ph.D. Thesis. Purdue University, West Lafayette, IN, USA .

Kocamustafaogullari, G. , Ishii, M. , 1995. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. *Int. J. Heat Mass Transfer* 38 (3), 4 81–4 93 .

Krishna, R., Ellenberger, J., 1996. Gas holdup in bubble column reactors operating in the churn-turbulent flow regime, *AIChE J.* 42, 2627–2634.

Kulkarni, A.A., Joshi, J.B., Ravikumar, V., Kulkarni, B.D., 2001a. Application of multiresolution analysis for simultaneous measurement of gas and liquid velocities and fractional gas hold-up in bubble column using LDA. *Chemical Engineering Science* 56 (17), 5037–5048.

Kulkarni, A., Joshi, J.B., Ravikumar, V., Kulkarni, B.D., 2001b. Simultaneous measurement of hold-up profiles and interfacial area using LDA in bubble column: predictions by time series analysis and comparison with experiments. *Chemical Engineering Science* 56 (19), 6437–6445.

Kulkarni, A.A., Joshi, J.B., 2005. Measurement of eddy diffusivity in bubble column and validation based on the intermittency models. *Chemical Engineering Science* 60 (22), 6146–6159.

- Kulkarni, A.A., Ekembara, K., Joshi, J.B., 2007. On the development of flow pattern in a bubble column reactor: experiments and CFD. *Chem. Eng. Sci.* 62, 1049–1072.
- Laakkonen, M., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2006. Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas–liquid dispersion in agitated vessel. *Chem. Eng. Sci.* 61, 218–228.
- Laakkonen, M., Moilanen, P., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2007. Modelling local bubble size distributions in agitated vessels. *Chem. Eng. Sci.* 62, 721–740.
- Lahey, R.T., Lopez de Bertodano, M., Jones, O.C., 1993. Phase distribution in complex geometry conduits. *Nucl. Eng. Des.* 141, 177–201.
- Lance, M., Bataille, J., 1991. Turbulence in the liquid phase of a uniform bubbly air–water flow. *J. Fluid Mech.* 222, 95–118.
- Letzel, H.M., Schouten, J.C., Krishna, R., Van den Bleek, C.M., 1999. Gas holdup and mass transfer in bubble column reactors operated at elevated pressure. *Chem. Eng. Sci.* 54, 2237–2246.
- Liao, Y., Rzehak, R., Dirk, L., Krepper, E., 2015. Baseline closure model for dispersed bubbly flow: Bubble coalescence and breakup. *Chem. Eng. Sci.* 122, 336–349.
- Lucas, D., Krepper, E., Prasser, H.M., 2001. Prediction of radial gas profiles in vertical pipe flow on basis of the bubble size distribution. *Int. J. Therm. Sci.* 40, 217–225.
- Lucas, D., Krepper, E., Prasser, H.-M., 2007. Use of models for lift, wall and turbulent dispersion forces acting on bubbles for poly-disperse flows. *Chem. Eng. Sci.* 62, 4146–4157.
- Lucas, D., Tomiyama, A., 2011. On the role of the lateral lift force in poly-dispersed bubbly flows. *Int. J. Multiphase Flow* 37 (9), 1178–1190.
- Marchisio, D.L., Fox, R.O., 2005. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *J. Aerosol Sci.* 36, 43–73.
- Marchisio, D.L., Fox, R.O., 2013. *Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Montante, G., Lee, K.C., Brucato, A., Yianneskis, M., 2001. Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels. *Chem. Eng. Sci.* 56, 3751–3770.
- Mudde, R.F., Harteveld, W.K., Van den Akker, H.E.A., 2009. Uniform flow in bubble columns, *Ind. Eng. Chem. Res.* 48, 148–158.
- Nguyen, V.T., Song, C.H., Bae, B.U., Euh, D.J., 2013. Modeling of bubble coalescence and break-up considering turbulent suppression phenomena in bubbly two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow* 54, 31–42.
- OpenFOAM Foundation Ltd., 2015b. *OpenFOAM —the open source CFD toolbox —User’s guide*.
- Passalacqua, A., Fox, R.O., 2011. Implementation of an iterative solution procedure for multi-fluid gas-particle flow models on unstructured grids. *Powder Technol.* 213, 174–187.

- Patankar, S.V., 1981. Numerical Heat Transfer and Fluid flow. McGraw-Hill, New York.
- Patankar, S.V., Spalding, D.B., 1972. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15, 126–129.
- Paul, E.L., Atiemo-Obeng, V.A., Kresta, S.M., 2004. Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice. John Wiley & Sons, Hoboken (NJ), USA.
- Petitti, M., Nasuti, A., Marchisio, D.L., Vanni, M., Baldi, G., Mancini, N., Podenzani, F., 2010. Bubble size distribution modeling in stirred gas–liquid reactors with QMOM augmented by a new correction algorithm. *AIChE J.* 56, 36–53.
- Petitti, M., Vanni, M., Marchisio, D.L., Buffo, A., Podenzani, F., 2013. Simulation of coalescence, break-up and mass transfer in a gas–liquid stirred tank with CQMOM. *Chem. Eng. J.* 228, 1182–1194.
- Pourtousi, M., Sahu, J., Ganesan, P., 2014. Effect of interfacial forces and turbulence models on predicting flow pattern inside the bubble column. *Chem. Eng. Process.* 75, 38–47.
- Prasser, H.-M., Böttger, A., Zschau, J., 1998. A new electrode-mesh tomograph for gas–liquid flows. *Flow Meas. Instrum.* 9, 111–119.
- Prasser, H.-M., Scholz, D., Zippe, C., 2001. Bubble size measurement using wiremesh sensors. *Flow Meas. Instrum.* 12, 299–312.
- Prasser, H.-M., Krepper, E., Lucas, D., 2002. Evolution of the two-phase flow in a vertical tube – decomposition of gas fraction profiles according to bubble size classes using wire-mesh sensors. *Int. J. Therm. Sci.* 41, 17–28.
- Rabha, S.S., Buwa, V.V., 2010. Volume-of-fluid (VOF) simulations of rise of single/multiple bubbles in sheared liquids. *Chem. Eng. Sci.* 65, 527–537.
- Ribeiro, C.P., Mewes, D., 2007. The influence of electrolytes on gas hold-up and regime transition in bubble columns, *Chem. Eng. Sci.* 62, 4501–4509.
- Richardson, J.F., Zaki, W.N. 1954. Sedimentation and fluidization: part I, *Trans. Inst. Chem. Eng.* 32, 35–53.
- Roghair, I., Lau, Y., Deen, N., Slagter, H., Baltussen, M., Van Sint Annaland, M., Kuipers, J., 2011. On the drag force of bubbles in bubble swarms at intermediate and high Reynolds numbers. *Chem. Eng. Sci.* 66, 3204–3211.
- Roghair, I., Van Sint Annaland, M., Kuipers, H.J.A.M., 2013b. Drag force and clustering in bubble swarms. *AIChE J.* 59, 1791–1800.
- Rusche, H., 2002. Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions. University of London, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, UK (Ph. D. thesis).
- Saffman P.G., 1965. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *J Fluid Mech* 22, 385–400.

- Sakaguchi, T., Ijiri, H., Tabasaki, M., Shakutsui, H., 1996. Radial distribution of volume fraction of gas phase in gas–liquid two-phase bubbly flow in a vertical pipe. *Jap. J. Multiphase Flow* 10, 389–396, in Japanese.
- Sharaf, S., Zednikova, M., Ruzicka, M. C., Azzopardi, B.J., 2016. Global and local hydrodynamics of bubble columns – Effect of gas distributor, *Chem. Eng. Sci.* 288, 489-504.
- Shaver, D.R., Podowski, M.Z., 2015. Modeling of Interfacial Forces for Bubbly Flows in Subcooled Boiling Conditions, vol. 113, pp. 1368–1371.
- Shen, X., Hibiki, T., 2018. Bubble coalescence and breakup model evaluation and development for two-phase bubbly flows, *Int. J. of Multiph. Flow* 000, 1-19.
- Simonnet, M., Gentric, C., Olmos, E., Midoux, N., 2007. Experimental determination of the drag coefficient in a swarm of bubbles. *Chem. Eng. Sci.* 62 (3), 858–866.
- Simonnet, M., Gentric, C., Olmos, E., Midoux, N., 2008. CFD simulation of the flow field in a bubble column reactor: Importance of the drag force formulation to describe regime transitions. *Chem. Eng. Process.: Process Intens.* 47, 1726–1737.
- Smith, T.R., Schlegel, J.P., Hibiki, T., Ishii, M., 2012b. Two-phase flow structure in large diameter pipes. *Int. J. Heat Fluid Flow* 33, 156–167.
- Sun, X., Kim, S., Ishii, M., Beus, S.G., 2004a. Modeling of bubble coalescence and disintegration in confined upward two-phase flow. *Nucl. Eng. Des.* 230 (1–3), 3–26.
- Tomiyaama, A., Sou, A., Zun, I., Kanami, N., Sakaguchi, T., 1995. Effects of Eötvös number and dimensionless liquid volumetric flux on lateral motion of a bubble in a laminar duct flow. *Adv. Multiphase Flow*, 3–15.
- Tomiyaama, A., Celata, G.P., Hosokawa, S., Yoshida, S., 2002. Terminal velocity of single bubbles in surface tension forced dominant regime. *Int. J. Multiphase Flow* 28, 1497–1519.
- Tomiyaama, A., Tamai, H., Zun, I., Hosokawa, S., 2002. Transverse migration of single bubbles in simple shear flows. *Chem. Eng. Sci.* 57, 1849–1858.
- Tomiyaama, A., 2004. Drag lift and virtual mass forces acting on a single bubble. *Third International Symposium on Two-Phase Flow Modeling and Experimentation, Pisa, Italy, 22–24 September.*
- Van den Hengel, E.I.V., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M., 2005. Application of coalescence and breakup models in a discrete bubble model for bubble columns. *Industrial Engineering Chemistry and Research* 44, 5233–5245.
- Vikas, V., Wang, Z.J., Passalacqua, A., Fox, R.O., 2011. Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moment methods. *J. Comput. Phys.* 230, 5328–5352.
- Wallis, G.B., 1969. *One Dimensional Two-phase Flow*, McGraw-Hill.
- Wellek RM, Arawal AK, Skelland AHP., 1966. Shapes of liquid drops moving in liquid media. *AIChE J* 12, 854–862.

Weller, H.G. , 2002. Derivation, Modelling and Solution of the Conditionally Averaged Two-phase Flow Equations. Technical Report. Nabla Ltd. . TR/HGW/02

Wen, C.Y., Yu, Y.H., 1966. Mechanics of fluidization. Chem. Eng. Progress Symp. Ser. 62, 100–111.

Wijngaarden LV, Jeffrey DJ. Hydrodynamic interaction between gas bubbles in liquid. J Fluid Mech 1976; 77: 27–44.

Wu, Q. , Kim, S. , Ishii, M. , Beus, S.G. , 1998. One-group interfacial area transport in vertical bubbly flow. Int. J. Heat Mass Transf. 41 (8–9), 1103–1112 .

Yao, W. , Morel, C. , 2004. Volumetric interfacial area prediction in upward bubbly two-phase flow. Int. J. Heat Mass Transf. 47, 307–328.

Zhang, D., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M., 2006. Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: a study of closures for turbulence and interface forces. Chem. Eng. Sci. 61, 7593–7608.

Zuber, N. Findlay, J.A., 1965. Average volumetric concentrations in two-phase flow systems, J. Heat Trans. 87, 453–468.

Zun I., 1980. Transverse migration of bubbles influenced by walls in vertical bubbly flow. Int J Multiphase Flow 6, 583–588.