



UNIVERSITÀ DELLA CALABRIA

DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA
PER L'AMBIENTE E IL TERRITORIO E
INGEGNERIA CHIMICA

Laurea Magistrale in Ingegneria Chimica

Tesi di Laurea

Simulazioni SPH-DEM di sistemi fluido-solido

Relatori

Prof. Francesco Paolo Di Maio

Ing. Alberto Di Renzo

Candidato

Giuseppe Raso

Matr. 146085

Anno Accademico 2013/2014

Sommario

INTRODUZIONE	1
SISTEMI FLUIDO-SOLIDO	6
1.1 – INTERAZIONE FLUIDO-PARTICELLA	7
1.2 - SISTEMI CON SOSPENSIONI DI PARTICELLE	9
1.3 - SISTEMI FLUIDIZZATI	19
MODELLI MATEMATICI E TECNICHE NUMERICHE	22
2.1- IL METODO SPH	22
2.1.1 – <i>La funzione kernel</i>	24
2.2 - CARATTERISTICHE DELL'APPROSSIMAZIONE	27
2.2.1 - <i>Kernel approximation</i>	27
2.2.2 - <i>Particle approximation</i>	30
2.3 - LUNGHEZZA DI SMOOTHING VARIABILE NELLO SPAZIO E NEL TEMPO	31
2.4 - EQUAZIONE DI NAVIER-STOKES MEDIATA (AVNS - AVERAGED NAVIER-STOKES)	32
2.5 – DISCRETE ELEMENT METHOD	33
2.6 - APPLICAZIONE DEL METODO SPH ALL'EQUAZIONE AVNS	37
2.6.1 <i>Determinazione delle interazioni fluido-solido</i>	41
2.6.2 – <i>Modelli di forza di drag</i>	43
IMPLEMENTAZIONE DEI METODI	47
3.1 - LIBRERIA SOFTWARE	47
3.1.1 - <i>La neighbour search</i>	47
3.2 L'ALGORITMO DI INTEGRAZIONE DI VERLET	50
3.3 – INTERVALLI DI INTEGRAZIONE E CONDIZIONI DI STABILITÀ	51
3.4- TECNICA DI SMOOTHING PER SISTEMI BIDISPERSI	54
TEST CASES E SIMULAZIONI	57
4.1 – PRESENTAZIONE DEI SISTEMI	57
4.2 - GEOMETRIA DELLA COLONNA	58
4.3 – PROPRIETÀ DEL FLUIDO	59
4.4-SEDIMENTAZIONE DI SINGOLA PARTICELLA	60
4.5 – BLOCCO A POROSITÀ COSTANTE - CPB	62
4.6 – SEDIMENTAZIONE BLOCCO DI POROSITÀ COSTANTE: CASO BIDISPERSO	64
4.7 - SEDIMENTAZIONE DI UNA SOSPENSIONE	65
RISULTATI E VALIDAZIONE DEL METODO	67

5.1 – SEDIMENTAZIONE DI SINGOLA PARTICELLA _____	67
5.1.1 - <i>Velocità terminale – SPS</i> _____	69
5.1.2 - <i>Influenza della risoluzione del fluido</i> _____	70
5.2 – BLOCCO A POROSITÀ COSTANTE: CASO MONODISPERSO _____	71
5.3 – BLOCCO A POROSITÀ COSTANTE: CASO BIDISPERSO _____	84
5.4 - SEDIMENTAZIONE DI UNA SOSPENSIONE DI SOLIDO MONODISPERSO _____	91
5.5 - SEDIMENTAZIONE DI UNA SOSPENSIONE DI SOLIDO MONODISPERSO DI DUE DENSITÀ _____	94
5.6 – SEDIMENTAZIONE DI UNA SOSPENSIONE BIDISPERSA _____	98
CONCLUSIONI _____	100
BIBLIOGRAFIA _____	103

Introduzione

I sistemi multifasici costituiti da fluidi e solidi granulari sono molto diffusi nell'industria di processo: si stima che circa l'80% delle materie processate nell'industria chimica si trovino sotto forma di solidi granulari.

È oltremodo semplice trovare esempi di fenomeni che coinvolgano l'interazione tra fluido e particelle solide anche nella vita quotidiana.



Fig.i.1 –Solidi granulari nella vita quotidiana: caffè in polvere e caffè in grani.

Nonostante siano così diffusi, la conoscenza che si ha dei solidi granulari e del loro comportamento meccanico è tutt'oggi una sfida aperta.

Questi materiali possono esibire un comportamento da solido o da liquido a seconda delle proprietà delle particelle stesse: dimensioni, coefficiente di attrito, forma, densità; ma

anche a causa di agenti esterni o condizioni al contorno: umidità, interazioni con i fluidi, pressione esercitata, sforzo di shear.

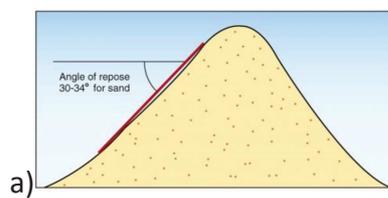


Fig.i.2 – a) angolo di riposo per una pila di sabbia; b) castello di sabbia.

Basti pensare ai castelli di sabbia che è possibile costruire se si aggiunge alla sabbia, la giusta quantità d'acqua: la sabbia, che asciutta forma pile con un certo angolo di riposo, è in grado di mantenere la forma di strutture con angoli superiori a 90° (Fig. i.2).

Nell'industria di processo i solidi granulari trovano applicazione perché costituiscono materie prime, ma allo stesso tempo gli ingegneri hanno trovato diversi modi per sfruttare alcune caratteristiche di questi materiali ed utilizzarli in soluzioni industriali. Si può far riferimento al reattore di cracking a letto fluido presente nelle raffinerie, ai decantatori e sedimentatori utilizzati per la separazione di sospensioni, ai letti fluidizzati a liquido, usati nell'industria dei minerali e ancora ai letti fluidi a gas usati come reattori per favorire il contatto tra le fasi, un migliore scambio termico, o ad esempio come unità di agglomerazione (fluidized bed spray agglomerator) ed in generale tutti i processi con catalizzatori solidi.

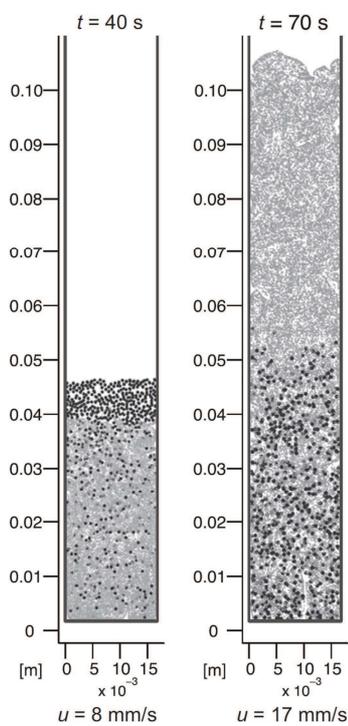


Fig.i.3 – Fenomeno di inversione degli strati (Di Renzo et al. (2011))

Le simulazioni numeriche sono uno strumento indispensabile per lo studio di complicati problemi dell'ingegneria e delle scienze in generale. La Computational Fluid Dynamic è un campo della fluido-meccanica nata nei primi decenni del '900 che ingegneri e scienziati hanno utilizzato per rendere possibili i viaggi nello spazio, studiare l'aerodinamica di prototipi per le corse automobilistiche e la simulazione e lo studio di complessi processi industriali e biologici.

Per sistemi multifasici non è possibile pensare di risolvere le equazioni della fluidodinamica per via analitica, se non per semplici casi, usando approcci continui che prevedono la definizione di uno pseudofluido.

Differenti metodi sono stati usati negli anni per la simulazione numerica: metodi alle differenze finite, metodi ai volumi finiti e metodi agli elementi finiti. Il metodo alle differenze finite è stato usato per più di un secolo per la soluzione delle equazioni differenziali che governano la fisica di fenomeni.

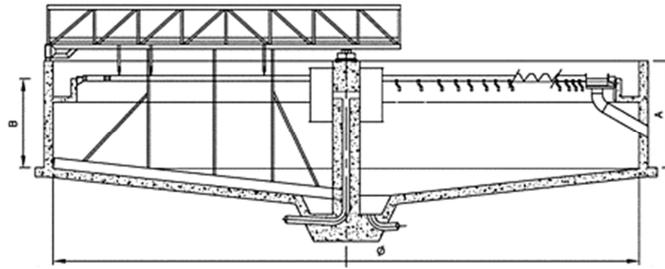


Fig.i.4 – Sedimentatore a flusso radiale.

La caratteristica comune di questi tre metodi è la presenza di una griglia: infatti si tratta di metodi grid-based. Il dominio geometrico del sistema è suddiviso in piccoli sottodomini discreti in un processo chiamato *discretizzazione*. I singoli sottodomini, detti anche punti di griglia o nodi, sono connessi a costituire una mappa topologica detta griglia o *mesh*. Le relazioni tra i nodi sono definite da equazioni ottenute dall'approssimazione delle equazioni differenziali che governano il processo. Questo metodo consente quindi di passare da un'equazione differenziale valida in tutto il dominio del problema ad un set di equazioni algebriche che definiscono le relazioni tra i punti di griglia e consentono di calcolare i valori delle variabili incognite in questi punti.

A dispetto del loro grande successo in CFD, i metodi “grid based” presentano diversi limiti di applicazione. L'uso di una griglia predefinita può costituire un problema inaggrabile quando si ha di fronte un sistema con condizioni al contorno deformabili, interfacce in movimento, deformazioni consistenti e propagazione di rottura

Il metodo usato per la simulazione del solido è il Discrete Element Method (DEM) (Cundall (1979)). Con questo metodo per ogni singola particella di solido viene integrata la seconda legge di Newton in forma lagrangiana. Il DEM è utilizzato anche per sistemi “monofasici” costituiti soltanto da solidi, o meglio, sistemi solido-gas, per i quali il gas non gioca alcun ruolo apprezzabile nel processo di interesse o ancora sistemi trifasici, o umidi, per i quali il contatto tra solido e gas è trascurato ed il contributo del liquido è tenuto in conto usando modelli di contatto che prevedono forze di interazione aggiuntive: ponti liquidi, adesione/coesione.

In letteratura è possibile trovare diversi esempi di simulazione in mesoscala di sistemi solido-fluido: per descrivere il moto del fluido si fa uso dall'AVNS equation, ovvero della formulazione mediata dell'equazione di Navier-Stokes derivata da Anderson and Jackson nel 1967. Lavori di particolare interesse sono: Di Renzo et al. (2011), Fries et al. (2011), Washino et al. (2013).

La formulazione mediata dell'equazione di Navier-Stokes è stata impiegata per la simulazione di letti fluidizzati e si ottengono ottimi risultati anche per fenomeni complessi come l'inversione degli strati.

I metodi CFD-DEM citati fanno uso di una formulazione grid-based per la fase fluida. Il metodo SPH è invece un metodo mesh-free e questo comporta grossi vantaggi. L'idea chiave di un metodo meshfree è la stessa di un qualunque metodo numerico: fornire una soluzione numerica stabile e accurata per equazioni differenziali usando un set di nodi, punti o particelle discrete.

Il metodo SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) è stato inventato alla fine degli anni 70' per applicazioni tridimensionali nel campo dell'astrofisica (Lucy (1977), Gingold e Monaghan (1977)), infatti il movimento di ammassi di atomi e particelle nello spazio aperto è modellato similmente al movimento di un fluido ed è governato dalle equazioni dell'idrodinamica classica: l'equazione di continuità e l'equazione di Navier-Stokes.

Lo stato di un sistema è rappresentato da un set di particelle che possiedono le proprietà locali del fluido. Queste particelle interagiscono le une con le altre entro un raggio di interazione ("smoothing length"). L'entità dell'interazione è definita da una funzione di smoothing. La formulazione delle equazioni che si ottiene è una formulazione basata sulle particelle discrete.

Con questo metodo il moto del fluido è rappresentato dal moto delle particelle e le interfacce fluido-fluido o il moto delle diverse fasi viene descritto in modo "naturale" dal moto delle particelle che rappresentano quella certa fase---

Oltre ad avere vantaggi... l'implementazione del metodo SPH è molto semplice ed in generale la formulazione è sempre la stessa anche per problemi complessi.

Obiettivo di questo lavoro di tesi sviluppare e validare un metodo SPH-DEM per simulazioni in “mesoscala” di sistemi multifasici. Il moto della fase fluida è descritto dall’equazione di Navier-Stokes che si presenta come un’equazione differenziale alle derivate parziali. È possibile ricavare soluzioni analitiche di questa equazione solo in casi molto semplici.

Il Capitolo 1 introduce l’interazione fluido-solido per sistemi con particelle isolate, sistemi multiparticelle e monodispersi e polidispersi.

Una spiegazione esaustiva del metodo SPH-DEM e la presentazione delle equazioni sarà data nel Capitolo 2. Una prima parte del lavoro si concentra sul debugging del software utilizzato Aboria che fornisce le funzioni necessarie alla simulazione di sistemi discreti, quali la ricerca dei vicini (“neighbour search”), la creazione delle strutture di dati. Altri software sono stati usati per il post-processing, quali Excel e Matlab per il plotting e la manipolazione dei dati, mentre Xballs e Paraview per la visualizzazione delle simulazioni. Per l’implementazione dei metodi si faccia riferimento al Capitolo 3.

Nel Capitolo 4 sono stati presentati i test case scelti per le simulazioni:

- Sedimentazione di una singola particella
- Sedimentazione di un blocco a porosità costante
- Sedimentazione di una sospensione di particelle monodisperse
- Sedimentazione di una sospensione di particelle monodisperse di diversa densità
- Sedimentazione di un blocco a porosità costante di particelle bidisperse
- Sedimentazione di una sospensione di particelle bidisperse

I risultati delle simulazioni ed il confronto dei dati sperimentali con i modelli teorici sono riportati nel Capitolo 5.

Capitolo 1

Sistemi fluido-solido

Molti processi nell'industria chimica coinvolgono il moto simultaneo di fluidi e di particelle solide. La caratterizzazione di sistemi multifasici fluido-solido comporta un enorme numero di problemi pratici. Il moto delle particelle solide in sistemi di questo tipo è di primaria importanza per problemi che coinvolgono trasferimento di calore e di materia, e reazioni chimiche. Per questi sistemi sono stati estensivamente studiati sia analiticamente che sperimentalmente. A dispetto degli sforzi spesi in questo studio, la conoscenza che si ha di questo tipo di sistemi è limitata: la maggior parte delle correlazioni utilizzate nei calcoli per la progettazione delle unità dell'industria sono di origine empirica, ed hanno un campo di applicazione molto specifico. Nella caratterizzazione dei sistemi fluido-particella si usa la distinzione tra fase primaria e fase secondaria: la prima è descritta come una fase continua ed è costituita dal fluido che "trasporta" le particelle. La fase secondaria è data dal materiale granulare distribuita nella fase fluida. Il moto delle due fasi ed il regime in cui si trovano danno luogo a differenti regimi di moto

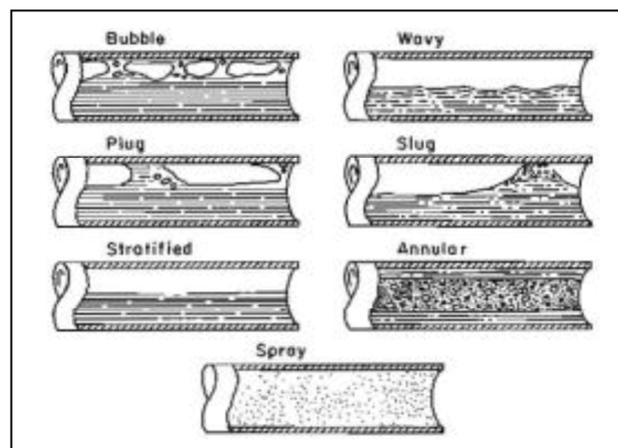


Fig.1.1 – Diversi regimi per sistemi fluido-solido: ogni regime di moto consiste di una combinazione specifica tra fase primaria e fase secondaria. (Tak et al. (2013)).

La velocità media del solido in una corrente fluida è detta velocità superficiale. Questo termine può essere scritto per il flusso in un tubo, immaginando che il tubo abbia un diametro abbastanza grande da consentire di trascurare gli effetti di parete.

Definendo A una superficie ortogonale al flusso, il flusso medio su un intervallo di tempo Δt , si può scrivere la velocità superficiale come il flusso volumetrico di particelle solide per unità di superficie:

$$v_s = \frac{Q}{A} = \frac{1}{A\Delta t} \int_{\Delta t} \int_A v_p dA dt \quad (1.1)$$

$Q \left[\frac{m^3}{s} \right]$ è il flusso volumetrico di particelle, $A [m^2]$ è la sezione perpendicolare al moto del fluido, v_p è la velocità attuale e locale delle particelle. Infine $\Delta t [s]$ è l'intervallo di tempo sul quale si sta mediando. Generalmente si considera un intervallo che possa racchiudere molte collisioni delle particelle solide.

1.1 – Interazione fluido-particella

In questa sezione saranno presentate le relazioni e le quantità necessarie per analizzare sistemi multifasici fluido-particelle.

Il caso più semplice di interazione fluido-solido è il moto di una singola particella in un fluido. Il fluido esercita una forza di drag sul solido che si oppone al moto della particella. Per un moto relativo fluido-particella, in regime di creeping flow, considerando un'estensione infinita del fluido, è possibile dividere la forza di drag in due contributi:

$$F_p = 2 \pi d_p \mu v_{rel} \quad (1.2)$$

$$F_s = \pi d_p \mu v_{rel} \quad (1.3)$$

Dove v_{rel} è la velocità relativa fluido-particella, F_p è il contributo di pressione ed F_s è il contributo relativo allo shear stress.

La forza di drag totale sarà:

$$F_d = 3 \pi d_p \mu v_{rel} \quad (1.4)$$

Sperimentalmente si trova che la legge di Stokes (eq. 1.4) è in accordo pressoché perfetto per regimi di moto con $Re_p < 0.1$, esibisce un errore di circa l'1% per $0.1 < Re_p < 0.3$, e per sistemi con $0.3 < Re_p < 1$ si ha un errore di circa il 9%.

$$Re_p = \frac{d_p v_{rel} \rho_f}{\mu} \quad (1.5)$$

Il coefficiente di drag C_D è definito come:

$$C_D = \frac{R'}{\frac{1}{2} \rho_f v_{rel}^2} \quad (1.6)$$

Dove R' è la forza per unità di area della particella, proiettata nella direzione ortogonale al moto. Per una sfera è data da

$$R' = \frac{F_D}{\frac{\pi d_p^2}{4}} \quad (1.7)$$

il coefficiente di drag secondo la legge di Stokes è:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (1.8)$$

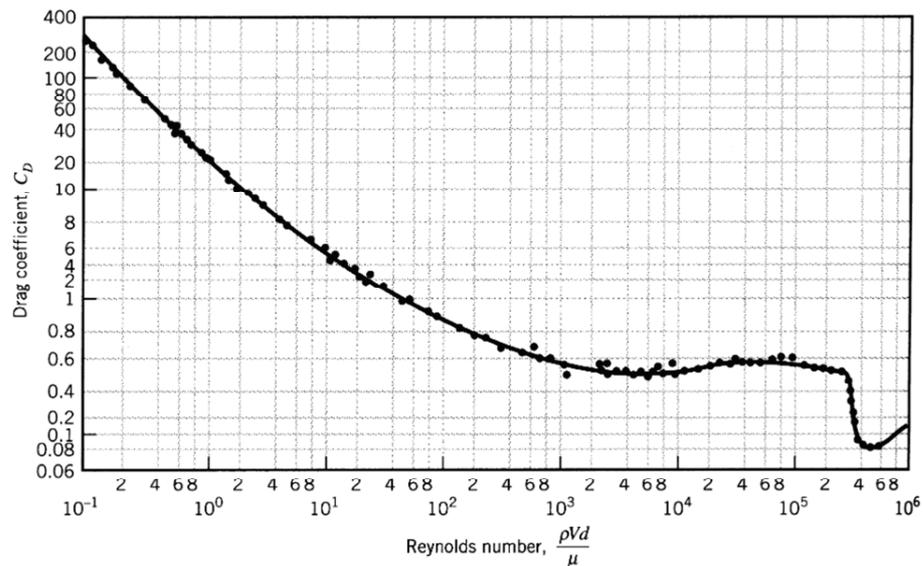


Fig.1.2 – Coefficiente di drag C_D contro il numero di Reynolds (Rhodes (1998)).

Per velocità relative maggiori, l'inerzia del fluido inizia a dare un contributo via via più importante e la legge di Stokes non è più valida.

Il processo è dominato dall'equazione di Navier-Stokes ma non è possibile integrare l'equazione per via analitica per ottenere una relazione tra il coefficiente di drag ed il numero di Reynolds. Tuttavia sono disponibili correlazioni empiriche tra il coefficiente di drag ed il numero di Reynolds (Dallavalle (1943)).

Il bilancio di forze su una particella di solido in moto relativo in un fluido, in stato stazionario, è data dalla seguente equazione:

$$\frac{\pi d_p^3}{6} \rho_p g - \frac{\pi d_p^3}{6} \rho_f g - R' \frac{\pi d_p^2}{4} = 0 \quad (1.9)$$

dove il primo termine rappresenta la forza di gravità agente sulla particella, il secondo termine la forza di galleggiamento ed il terzo termine la forza di drag, scritta facendo uso del termine R' .

Utilizzando l'espressione del coefficiente C_D eq 1.8, è possibile riscrivere l'equazione come:

$$\frac{\pi d_p^3}{6} (\rho_p - \rho_f) g - C_D \frac{1}{2} \rho_f v_\infty^2 \frac{\pi d_p^2}{4} = 0 \quad (1.10)$$

dove v_∞ è la velocità terminale della particella.

Nella regione di validità della legge di Stokes è possibile sostituire a $C_D = 24/Re_p$ ottenendo:

$$v_\infty = \frac{d_p^2 (\rho_p - \rho_f) g}{18 \mu} \quad (1.11)$$

1.2 - Sistemi con sospensioni di particelle

Quando un sistema è costituito da più particelle solide, il moto di ogni particella è influenzato dalla presenza delle altre, a causa delle collisioni tra le diverse particelle, ma anche perché la presenza delle particelle modifica il moto del fluido.

L'interazione fluido-particella in questo caso non può essere studiata come interazione tra le singole particelle ed il fluido ma deve essere adattata a modelli di sistemi multi particella.

Per una sospensione di particelle in un fluido si assume valida la legge di Stokes , ma si usano due quantità che rappresentano la viscosità effettiva e la densità effettiva della sospensione (Rhodes(1998)):

$$\rho_{av} = \varepsilon\rho_f + (1 - \varepsilon)\rho_s \quad (1.12)$$

$$\mu_e = \frac{\mu}{f(\varepsilon)} \quad (1.13)$$

dove ε è il grado di vuoto della sospensione. La viscosità effettiva è pari alla viscosità del fluido modificata da una funzione del grado di vuoto $f(\varepsilon)$. Ritenendo valida la legge di Stokes C_D è dato sempre dall'equazione 1.8. Ma nel caso della sospensione si ha:

$$C_D = \frac{24\mu_e}{d_p\rho_{ave}v_{relT}} \quad (1.14)$$

Imponendo un bilancio di forze allo stazionario, sulla particella in caduta sotto la forza di gravità in una sospensione di particelle l'equazione che si ottiene è la seguente:

$$\frac{\pi d_p^3}{6}(\rho_p - \rho_{ave})g = C_D \frac{1}{2} \rho_{ave} v_{relT}^2 \frac{\pi d_p^2}{4} \quad (1.15)$$

dalla quale è possibile ottenere l'espressione della velocità:

$$v_{relT} = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_{ave})g}{18 \mu_e} \quad (1.16)$$

Sostituendo le equazioni della densità media e della viscosità effettiva si ottiene:

$$v_{relT} = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_f)g}{18 \mu} \varepsilon f(\varepsilon) \quad (1.17)$$

Confrontando con l'equazione 1.11 per una singola particella si ha

$$v_{relT} = v_{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) \quad (1.18)$$

v_{relT} è definita come la velocità di sedimentazione in presenza di altre particelle.

Assumendo di trattare un fluido incompressibile, si può dire che i flussi volumetrici delle particelle e del fluido siano costanti. Si definiscono allora due quantità, la velocità superficiale del fluido e la velocità superficiale delle particelle:

$$v_{fs} = \frac{Q_f}{A} \quad (1.19)$$

$$v_{ps} = \frac{Q_p}{A} \quad (1.20)$$

dove A è la sezione trasversale del sistema che contiene la sospensione.

Considerando condizione isotropiche la sezione A occupata dal fluido sarà data da:

$$A_f = \varepsilon A \quad (1.21)$$

Mentre l'area occupata dalle particelle:

$$A_p = (1 - \varepsilon)A \quad (1.22)$$

Quindi per la condizione di continuità si ha:

$$Q_f = v_{fs}A = v_f A \varepsilon \quad (1.23)$$

$$Q_p = v_{ps}A_f = v_p A (1 - \varepsilon) \quad (1.24)$$

Pertanto la velocità del fluido e quella delle particelle sono date dalle seguenti espressioni:

$$v_f = \frac{v_{fs}}{\varepsilon} \quad (1.25)$$

$$v_s = \frac{v_{ps}}{(1 - \varepsilon)} \quad (1.26)$$

Per il caso di sedimentazione in discontinuo di una sospensione di particelle, non c'è flusso netto lungo la sezione trasversale del sistema, quindi si ha per continuità:

$$Q_f + Q_p = 0 \quad (1.27)$$

Riprendendo le equazioni 1.23 e 1.24 si ottiene

$$v_p(1 - \varepsilon) + v_f \varepsilon = 0 \quad (1.28)$$

e

$$v_f = -\frac{v_p(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \quad (1.29)$$

Combinando questa equazione con la 1.28 si ottiene

$$v_p = v_\infty \varepsilon^2 f(\varepsilon) \quad (1.30)$$

La dipendenza da ε della viscosità effettiva $f(\varepsilon)$ è stata ricavata teoricamente da Einstein (Rhodes (1998)). Per sospensione monodisperse di particelle sferiche e grado di vuoto pari o superiore a 0.9 si ha:

$$f(\varepsilon) = \varepsilon^{2.5} \quad (1.31)$$

Richardson e Zaki (1954) hanno dimostrato sperimentalmente che per $Re_p < 0.3$, in regime viscoso, la velocità delle particelle v_p è data dalla seguente equazione:

$$v_p = v_\infty \varepsilon^{4.65} \quad (1.32)$$

con $f(\varepsilon) = \varepsilon^{2.65}$

Per Re_p superiori a 500 (Rhodes (1998)) si ha:

$$v_p = v_\infty \varepsilon^{2.4} \quad (1.33)$$

Con $f(\varepsilon) = \varepsilon^{0.4}$.

In generale la relazione di Richardson-Zaki assume la forma:

$$v_p = v_\infty \varepsilon^n \quad (1.34)$$

In letteratura sono presenti diverse espressioni che legano l'esponente n alle condizioni di moto. Tra le altre ricordiamo:

Wallis (1969)

$$n = \frac{4.7 + 0.705 Re^{0.687}}{1 + 0.253 Re^{0.687}} \quad (1.35)$$

Garside e Al-Dibouni (1977)

$$n = \frac{5.1 + 0.27Re^{0.9}}{1 + 0.1Re^{0.9}} \quad (1.36)$$

Rowe e Henwood (1961)

$$n = \frac{4.7 + 0.41125Re^{0.75}}{1 + 0.175Re^{0.75}} \quad (1.37)$$

Khan e Richardson suggerirono la seguente espressione:

$$n = \frac{4.8 + 0.1032Ar^{0.57}}{1 + 0.043Ar^{0.57}} \quad (1.38)$$

dove $Ar = d_p^3 \rho_f (\rho_p - \rho_f) g / \mu^2$ è il numero di Archimede.

Esprimendo la velocità relativa delle particelle come in funzione della velocità terminale della singola particella nel fluido puro si ha:

$$v_{ps} = v_p(1 - \varepsilon) = v_\infty(1 - \varepsilon)\varepsilon^n \quad (1.39)$$

Si può definire il flusso adimensionale di sedimentazione delle particelle come:

$$\frac{v_{ps}}{v_\infty} = (1 - \varepsilon)\varepsilon^n \quad (1.40)$$

Riportando su un grafico il flusso adimensionale di sedimentazione contro la frazione volumetrica di solido $(1 - \varepsilon)$, si ha un massimo per $\varepsilon = \frac{n}{n+1}$ ed un flesso

per $\varepsilon = \frac{n-1}{n+1}$

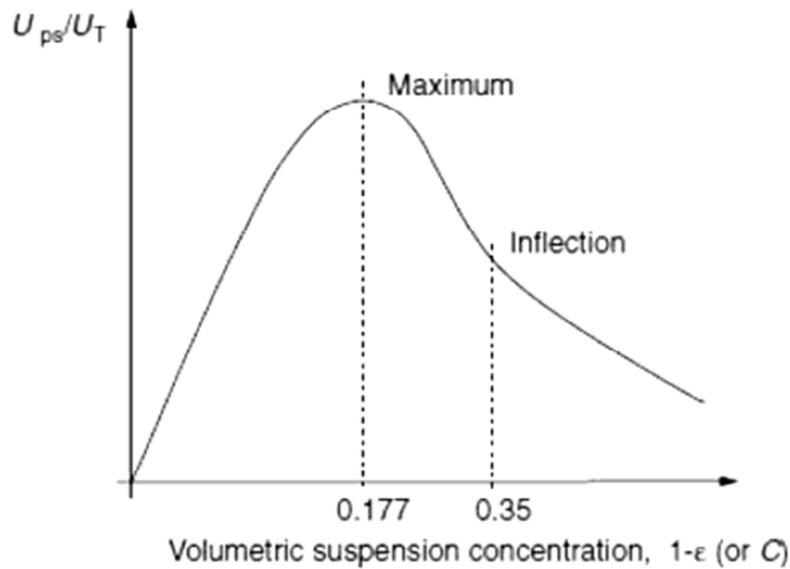


Fig.1.3 – Flusso adimensionale di sedimentazione contro concentrazione della sospensione (Rhodes (1998)).

Si consideri ora l'interfaccia tra una sospensione di concentrazione $C_1 = (1 - \varepsilon_1)$, ed una sospensione di concentrazione $C_2 = (1 - \varepsilon_2)$. La velocità di sedimentazione delle particelle solide nella sospensione C_1 è pari a U_{p1} mentre nella sospensione C_2 la velocità di sedimentazione è U_{p2} .

L'interfaccia tra le due sospensioni si muove con velocità U_{int} .

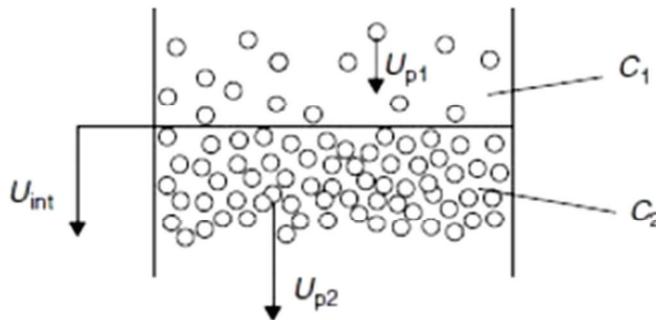


Fig.1.4 – Sezione dell'interfaccia tra due sospensioni di concentrazioni C_1 e C_2 , durante la sedimentazione (Rhodes (1998)).

È possibile scrivere un bilancio di massa assumendo fluido incompressibile:

$$(U_{p1} - U_{int})C_1 = (U_{p2} - U_{int})C_2 \quad (1.41)$$

E si ricava U_{int}

$$U_{int} = \frac{U_{p1}C_1 - U_{p2}C_2}{C_1 - C_2} \quad (1.42)$$

Ricordando che $C = (1 - \varepsilon)$, si può riscrivere l'eq. 1.42 come:

$$U_{int} = \frac{U_{ps1} - U_{ps2}}{C_1 - C_2} \quad (1.43)$$

Quindi

$$U_{int} = \frac{\Delta U_{ps}}{\Delta C} \quad (1.44)$$

Per $\Delta C \rightarrow 0$, $U_{int} = \frac{dU_{ps}}{dC}$. Quindi nel grafico U_{ps} contro C , la tangente alla curva in corrispondenza di una certa concentrazione è la velocità dell'interfaccia della sospensione con quella concentrazione.

La pendenza della retta passante per due punti di concentrazione C_1 e C_2 , è la velocità dell'interfaccia tra le due sospensioni:

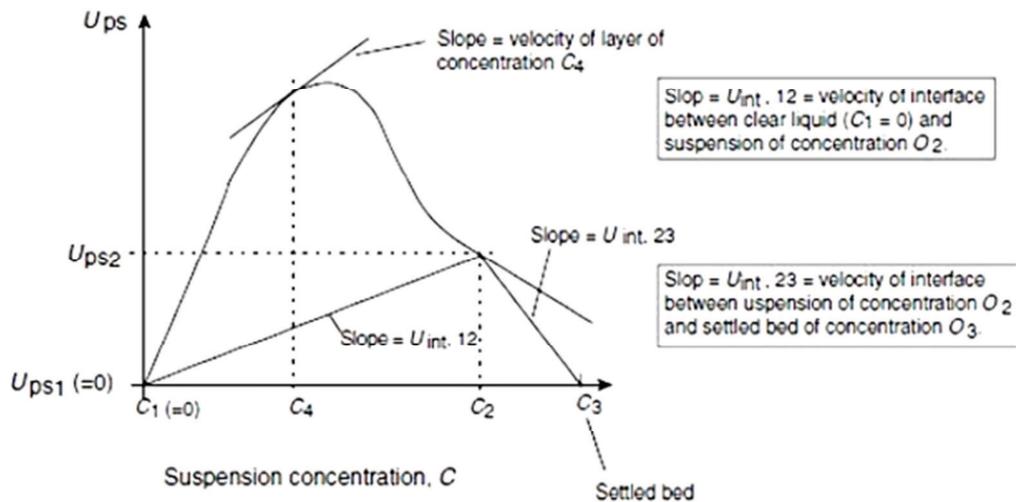


Fig.1.5 – Procedura grafica per determinare il flusso adimensionale di sedimentazione all'interfaccia di due sospensioni di concentrazioni C_1 e C_2 , (Rhodes (1998)).

In generale si possono avere due diversi regimi di sedimentazione che saranno indicati con sedimentazione di tipo 1 e sedimentazione di tipo 2.

In sedimentazioni di tipo 1 si osservano 3 zone: una zona di liquido chiarificato A, una zona con sospensione a concentrazione costante B ed una zona di solido depositato S (Fig. 1.6). La caratteristica principale di questo regime di sedimenta-

zione è che l'interfaccia si muove con velocità costante pari alla velocità delle particelle nella sospensione.

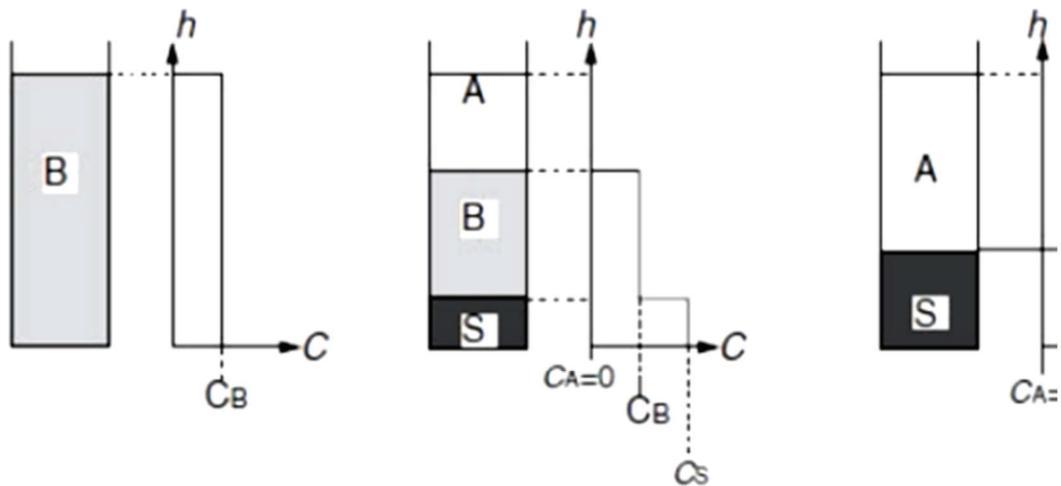


Fig.1.6 – Processo di sedimentazione di tipo 1, (Rhodes (1998)).

La sedimentazione di tipo 2 prevede la presenza di più zone che sono indicate con A, B, S ed E. In questo caso la zona E è una zona a concentrazione variabile.

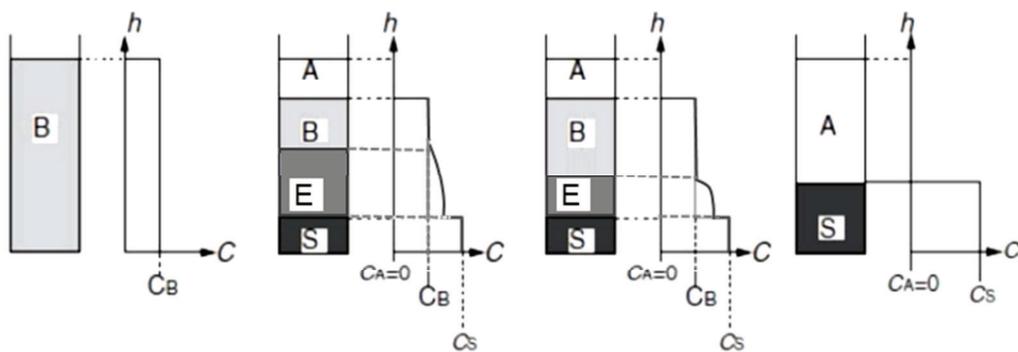


Fig.1.7 – Processo di sedimentazione di tipo 2.

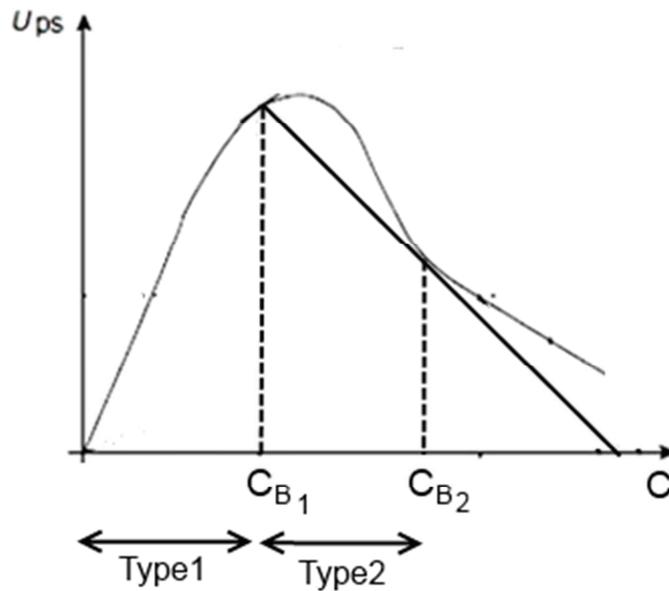


Fig.1.8 – Procedura grafica per determinare se la sospensione darà luogo ad una sedimentazione di Tipo 1 o di Tipo 2.

Il regime che incorre durante la sedimentazione dipende dalla concentrazione iniziale della sospensione (Fig. 1.8). Se il valore iniziale si trova tra 0 e C_{B1} si verificherà la sedimentazione di Tipo 1, se si trova tra C_{B1} e C_{B2} si avrà la sedimentazione di Tipo 2.

Per la sedimentazione di Tipo 1 si ha un andamento dell'altezza dell'interfaccia contro il tempo del tipo riportato in Fig. 1.9.

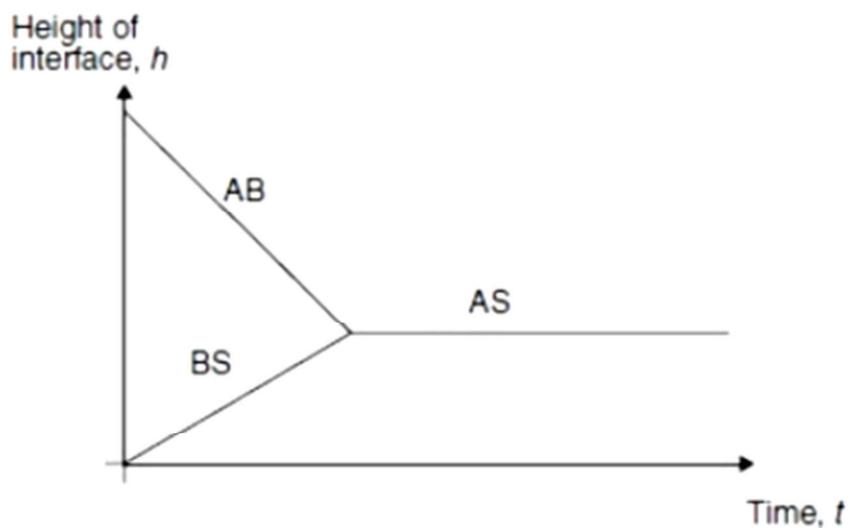


Fig.1.9 – Andamento dell'altezza dell'interfaccia contro il tempo per una sospensione di Tipo 1. Le lettere indicano le interfacce tra le fasi.

Per sedimentazione di tipo 2 si ha una variazione della velocità di sedimentazione. La concentrazione E varia durante la sedimentazione ma è possibile individuare E_{min} ed E_{max}

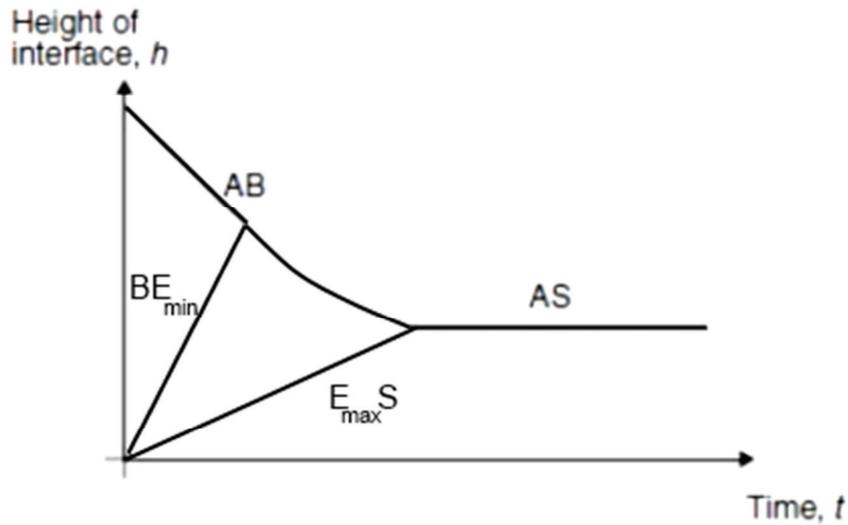


Fig.1.10 – Andamento dell'altezza dell'interfaccia contro il tempo per una sospensione di Tipo 2.

Una sospensione bidispersa dà luogo a 4 zone in corso di sedimentazione: liquido chiarificato, sospensione di particelle piccole, sospensione di particelle di entrambe le dimensioni con concentrazione pari alla concentrazione iniziale e sedimentazione.

u_s , u_c , u_0 e u_F sono le velocità relative tra particelle e fluido, la velocità assoluta, intesa come velocità rispetto alle pareti del contenitore, la velocità terminale e la velocità di risalita del fluido. Con S si indica small e con L large. L'equazione di flusso di sedimentazione delle particelle può essere riscritta come

$$u_F + u_{cL} = u_{sL} = u_{0L}e^{n_L^{-1}} \quad (1.45)$$

$$u_F + u_{cS} = u_{sS} = u_{0S}e^{n_S^{-1}} \quad (1.46)$$

Per continuità

$$u_F e = u_{cL} C_L + u_{cS} C_S \quad (1.47)$$

quindi

$$u_F e = (u_{sL} - u_F) C_L + (u_{sS} - u_F) C_S \quad (1.48)$$

e

$$u_F = u_{sL} C_L + u_{sS} C_S \quad (1.49)$$

E giacché $e = 1 - C_L - C_S$

$$u_{cL} = u_{sL} - (u_{sL} C_L + u_{sS} C_S) = u_{0L} e^{n_L^{-1}} (1 - C_L) - u_{0S} e^{n_S^{-1}} C_S \quad (1.50)$$

Allo stesso modo

$$u_{cL} = u_{0S} e^{n_S^{-1}} (1 - C_S) - u_{0L} e^{n_L^{-1}} C_L \quad (1.51)$$

1.3 - Sistemi fluidizzati

La fluidizzazione liquido-solido è una tecnica utilizzata per la classificazione delle dimensioni delle particelle nell'industria dei minerali. Questo processo di fluidizzazione consiste nel mantenere in sospensione un solido ad opera di una corrente liquida. La fluidizzazione è utilizzata in molti processi di separazione per i quali i parametri del sistema sono ottimizzati in modo da ottenere diversi stati di segregazione: perfetta segregazione, perfetta miscelazione, separazione per dimensione e separazione per densità (Di Felice (1995)).

Alcuni sistemi presentano una certa sensibilità alle condizioni di processo e presentano processi di inversione degli strati, dove il solido con densità maggiore forma una sospensione al di sopra di uno strato di particelle più leggere in sospensione.

In letteratura la segregazione in letti fluidi liquido-solido è stata studiata per sistemi bidispersi (Juma e Richardson (1983), Galvin(1999), Di Maio et al. (2013)). Questi studi hanno stabilito quali sono i parametri ad influenzare il fenomeno della inversione degli strati: rapporto tra le dimensioni delle particelle, rapporto di densità, rapporto volumetrico tra i due solidi, velocità del fluido. L'effetto combinato di questi parametri sullo stato di segregazione del sistema è stato de-

scritto usando modelli fisici (Di Renzo et al. (2011), Gibilaro et al. (1985), Yang e Renken (2003)). Infatti ogni stato di segregazione durante la fluidizzazione può essere descritto analizzando le forze agenti sulle particelle: forza peso, forza di galleggiamento e forza di drag. Mentre la forza peso e la forza di galleggiamento dipendono dal volume e dalla densità delle particelle, la forza di drag è funzione del grado di vuoto e della velocità del fluido. La velocità del fluido ha anche un effetto sul grado di vuoto in quanto all'aumentare di essa si verifica un'espansione del letto. La forza sulla particella determina lo stato dinamico e lo stato di segregazione del sistema.

Epstein e Le Clair (1985) sono stati pionieri nella separazione di solidi utilizzando la fluidizzazione liquido-solido, fornendo uno studio sul fenomeno dell'inversione degli strati. Di Renzo et al. (2011) hanno simulato sistemi fluidizzati studiati sperimentalmente da altri gruppi, utilizzando simulazioni CFD-DEM.

1.3.1 - Considerazioni teoriche

Lo stesso bilancio di forze operato per la sedimentazione si ritrova qui per la fluidizzazione liquido-solido:

$$V_p \rho_p g = F_{drag} + F_{buoyancy} \quad (1.52)$$

e

$$\frac{\pi d_p^3}{6} \rho_p g = C_D \frac{1}{2} \rho_f v_\infty^2 \frac{\pi d_p^2}{4} + \frac{\pi d_p^3}{6} \rho_f g \quad (1.53)$$

Seguendo la stessa procedura illustrata per la sedimentazione si ottiene l'espressione valida per sistemi monodispersi:

$$v_p = v_\infty \varepsilon^{4.65} = \frac{4 d_p g}{3 C_D} \left(\frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_f} \right) \varepsilon^{4.65} \quad (1.54)$$

Per sistemi bidispersi l'approccio è sempre quello di scrivere un bilancio di forze per le particelle all'interno della sospensione. Van Duijn e Rietema (1982) proposero un bilancio di forze per sistemi costituiti da N tipi di particelle:

$$F_{gi} - F_{bi} = F_{Di} \quad (1.55)$$

dove F_{gi} è la forza di gravità, F_{bi} è la forza di galleggiamento dovuta alla sospensione di densità ρ_b e F_{Di} è la forza di drag. L'espressione di F_{gi} e F_{bi} è data:

$$F_{gi} = \frac{\pi d_{pi}^3}{6} \rho_{pi} g \quad (1.56)$$

$$F_{bi} = \frac{\pi d_{pi}^3}{6} \rho_b g \quad (1.57)$$

La densità di bulk si può esprimere come:

$$\rho_b = \sum \rho_{pi} f_i + \rho_f \left(1 - \sum f_i\right) \quad (1.58)$$

Dove f_i sono la frazione volumetrica di particelle i nella sospensione.

Per la descrizione della forza di drag possono essere utilizzati i modelli per sistemi bidispersi che saranno presentate più avanti.

Capitolo 2

Modelli matematici e tecniche numeriche

2.1- Il metodo SPH

Il metodo SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) è una tecnica numerica utilizzata per ottenere soluzioni delle equazioni della fluidodinamica, immaginando di rappresentare il fluido attraverso un insieme di particelle interagenti.

Dal punto di vista matematico le particelle sono punti di interpolazione, sui quali le proprietà del fluido sono calcolate. Dal punto di vista fisico, le particelle SPH sono particelle di materiale che possono essere considerate come entità discrete.

Il metodo SPH ha una serie di caratteristiche che risultano vantaggiose in diverse applicazioni.

Lo sviluppo di questa tecnica numerica risale al 1977 (Gingold e Monaghan(1977), Lucy(1977)) quando il metodo SPH venne proposto per la prima volta come tecnica per la soluzione di una classe di problemi astrofici, fino ad allora impossibili da risolvere. Una curiosità sta nel fatto che il metodo venne proposto contemporaneamente in due lavori di ricerca diversi svolti in Università che si trovano agli antipodi del globo terrestre: Gingold e Monaghan in Australia, Lucy in Inghilterra.

La prima formulazione del metodo non prevedeva la conservazione del momento lineare e angolare. Furono Gingold e Monaghan (1982) a fornire un nuovo algoritmo che consentisse la conservazione del momento lineare e angolare. Negli anni successivi, Monaghan ha dedicato gran parte della sua attività di ricerca nel miglioramento del metodo: in collaborazione con Robinson (Robinson e Monaghan (2012)) e Price (Price e Monaghan(2004), Price (2012)) utilizzò il metodo per applicazioni in presenza di turbolenze.

Il metodo SPH è stato sviluppato per risolvere problemi di fluidodinamica per i quali le equazioni che governano il moto sono equazioni differenziali alle derivate parziali. L'equazione di Navier-Stokes, nella formulazione Lagrangiana, assume una forma del tipo:

$$\frac{DA}{Dt} = f(A, \nabla A, \mathbf{r}) \quad (2.1)$$

dove $\frac{D}{Dt}$ è la derivata lagrangiana:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \quad (2.2)$$

mentre \mathbf{r} è il vettore posizione $\mathbf{r} = (x, y, z)$.

L'aspetto principale sul quale si basano i metodi di fluidodinamica computazionale o i metodi numerici per la soluzione di problemi della fluidodinamica è l'approssimazione delle proprietà del fluido usando informazioni disponibili su un numero finito di punti. Nei metodi alle differenze finite, questi punti sono i vertici di una griglia (o *mesh*), nel metodo SPH i punti di interpolazione sono particelle che si muovono in modo solidale al fluido, e l'interpolazione si basa su una funzione statistica, detta *kernel* o *smoothing function*.

Il calcolo di una quantità A , funzione delle coordinate spaziali, si basa sull'integrazione interpolare data dalla seguente equazione:

$$A(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (2.3)$$

dove W è la funzione kernel e $d\mathbf{r}'$ è un elemento di volume infinitesimo. h è l'intervallo entro il quale viene operato lo smoothing, quindi l'interpolazione. Questa interpolazione riproduce la quantità A in maniera esatta se la funzione kernel è una funzione delta, e questo si verifica per h che tende a 0.

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.4)$$

Avere lunghezza di smoothing che tende a 0 vorrebbe dire discretizzare il fluido con un numero di particelle che tende ad infinito.

2.1.1 – La funzione kernel

Una delle caratteristiche principali per un metodo mesh-free è il modo in cui viene effettuata l'approssimazione basata su un set di particelle. Le particelle, nel caso di una formulazione Lagrangiana, si muovono in modo solidale al fluido, pertanto non è possibile conoscere preliminarmente le loro posizioni: risulta impossibile usare una disposizione predefinita che consenta di stabilire le relazioni tra i punti.

Nel metodo SPH è la funzione kernel a determinare il dominio dell'interpolazione e le interazioni tra i diversi punti, in questo caso particelle. Il dominio di interpolazione è definito attraverso la distanza di smoothing; le interazioni tra le particelle sono definite dalla funzione stessa che andrà a pesare le diverse quantità in base alla distanza che si ha tra le particelle.

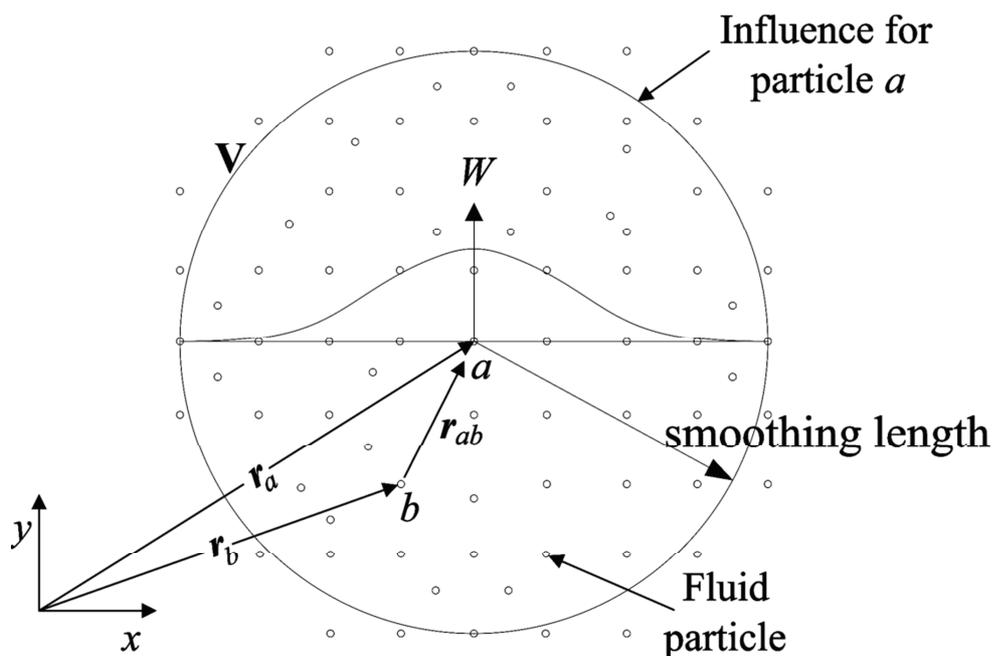


Fig.2.1 – Rappresentazione della funzione kernel – Tark et al. (2013).

Diversi studiosi hanno investigato la funzione kernel ed hanno fornito diverse formulazioni: Swegle et al. (1995) contribuì a dimostrare che alcuni fenomeni di instabilità del metodo erano legati alla funzione kernel; Morris e Fox (1997) studiò le performance di diverse funzioni kernel e fornì una descrizione riguardo all'accuratezza e alla stabilità del metodo in relazione a diverse funzioni kernel.

Omang et al. (2005) si interessò alla formulazione della funzione kernel per sistemi in coordinate cilindriche; altri suggerirono criteri e nuove formulazioni per la funzione kernel (Gingold R. A. e Monaghan J. J. (1982), Colagrossi e Landrini (2003)). In letteratura sono disponibili diverse funzioni kernel; che godono di proprietà comuni:

- La funzione kernel deve essere normalizzata sul suo dominio compatto:

$$\int W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' = 1 \quad (2.5)$$

Questa proprietà è detta *Unità* ed assicura che l'integrale della funzione kernel sul dominio compatto sia pari all'unità.

- La funzione kernel deve avere supporto compatto:

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0, \quad \text{for } |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > kh \quad (2.6)$$

La dimensione del supporto compatto è definita dalla lunghezza di smoothing h e da un fattore di scala k generalmente pari a 2. Questa proprietà trasforma l'approssimazione SPH da un'operazione globale ad una operazione locale, limitata entro un certo raggio kh nell'intorno del punto r .

- La funzione W è positiva:

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \geq 0 \quad \forall \mathbf{r}' : |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leq kh \quad (2.7)$$

È stato verificato che per funzioni kernel che presentano valori negativi nel dominio, l'applicazione in simulazioni di fluidodinamica porta a valori completamente errati fisicamente, come ad esempio valori negativi per la densità.

- La funzione kernel è monotona decrescente all'aumentare della distanza dal punto \mathbf{r} . Questa proprietà si basa sulla considerazione fisica che una particella (\mathbf{r}') debba avere un'influenza tanto maggiore quanto più è vicina alla particella (\mathbf{r}) che si sta considerando.
- Al tendere della lunghezza di smoothing a 0, la funzione kernel deve soddisfare la condizione di funzione delta di Dirac:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.8)$$

Questa condizione assicura che per $h \rightarrow 0$

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = f(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

dove $\langle f(\mathbf{r}) \rangle$ è la funzione approssimata. In altre parole, $h \rightarrow 0$ vuole dire avere un numero di particelle che tende ad infinito.

- La funzione kernel è una funzione pari, pertanto è una funzione simmetrica rispetto al punto \mathbf{r} . Questo vuol dire che particelle che occupano posizioni diverse ma hanno la stessa distanza dal punto \mathbf{r} hanno la stessa influenza sulla particella nel punto \mathbf{r} . Eccezioni a questa condizione sono le formulazioni che tengono conto delle condizioni al contorno del dominio del sistema fluido.

Alcuni esempi di funzione kernel sono i seguenti:

$$W(r, h) = \frac{1}{h\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r^2}{h^2}\right) \quad (2.10)$$

$$W(r, h) = \frac{105}{16 \pi h^3} \begin{cases} (1 - r/h)^3 (1 + 3r/h), & 0 < r \leq h \\ 0, & r > h \end{cases} \quad (2.11)$$

L'equazione 2.11 è la funzione di Wendland (Wendland (2010)) ed è stata utilizzata per le simulazioni effettuate nel presente lavoro. In figura 2.2 è riportata la forma della funzione:

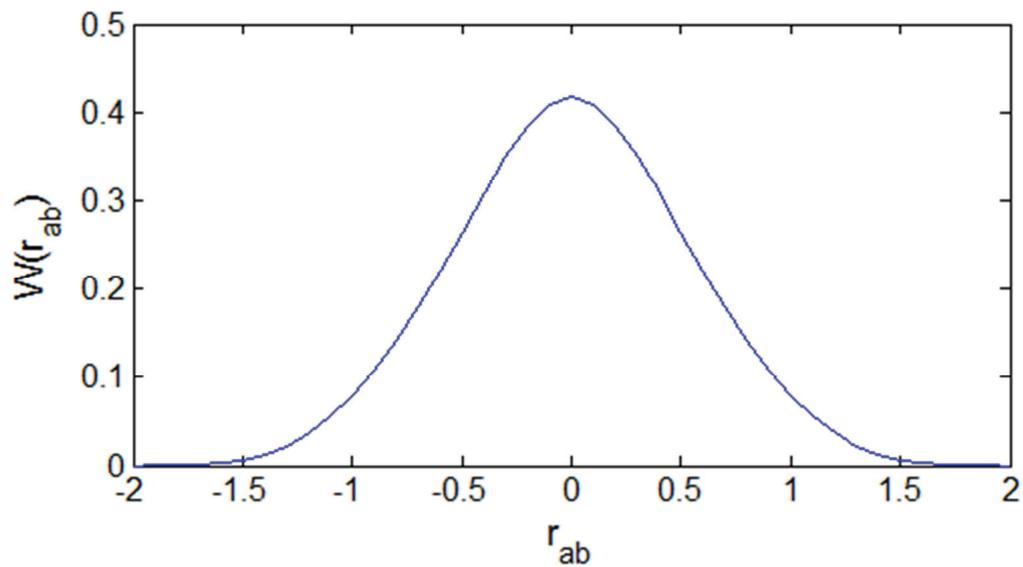


Fig.2.2 – Grafico della funzione di Wendland contro la distanza dal centro della particella.

2.2 - Caratteristiche dell'approssimazione

Il metodo SPH prevede due step di approssimazione:

1. il primo step consiste nella determinazione delle proprietà di un punto continuo utilizzando un integrale di interpolazione basato sulla funzione kernel; questo step è noto come “Kernel approximation”.
2. Il secondo step di approssimazione è detto “particle approximation” e consiste nel processo di discretizzazione del dominio fluido in un set di particelle.

2.2.1 - Kernel approximation

Il livello di approssimazione kernel coinvolge la funzione introdotta nell'equazione 2.3. È possibile dimostrare che questa tecnica di approssimazione consente di ottenere un'accuratezza del secondo ordine.

Essa è riscritta nella seguente forma:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (2.12)$$

dove $\langle f(\mathbf{r}) \rangle$ è la funzione approssimata.

È possibile scomporre la funzione $f(\mathbf{r}')$ in serie di Taylor:

$$f(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}) + f'(\mathbf{r})(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + \Phi((\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2) \quad (2.13)$$

Sostituendo nella 2.12 si ottiene

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\Omega} [f(\mathbf{r}) + f'(\mathbf{r})(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + \Phi((\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2)] \\ \times W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.14)$$

dove Φ rappresenta l'errore residuo ed $f(\mathbf{r})$ e $f'(\mathbf{r})$ sono ovviamente costanti in quanto si sta integrando sul volume intorno al punto \mathbf{r} . Pertanto l'equazione precedente può essere riscritta:

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}) \rangle = f(\mathbf{r}) \int_{\Omega} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' + \\ f'(\mathbf{r}) \int_{\Omega} (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \times W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' + \Phi(h^2) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Per quanto riguarda l'errore residuo:

$$\int_{\Omega} \Phi((\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2) \times W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (2.16)$$

$(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ può assumere valore massimo pari ad h , in quanto per valori maggiori la funzione kernel è pari a 0, quindi il prodotto tra i due termini sarà nullo. Pertanto il termine $\Phi((\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2)$ può essere sostituito con $\Phi(h^2)$.

La funzione kernel è una funzione pari, mentre $(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ è una funzione dispari. Il prodotto di una funzione pari e una funzione dispari è una funzione dispari. Quindi il seguente integrale, presente nell'equazione 2.15, è pari a 0:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \times W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' = 0 \quad (2.17)$$

L'approssimazione di derivate spaziali $\nabla \cdot f(\mathbf{r})$ si ottiene semplicemente sostituendo $\nabla \cdot f(\mathbf{r})$ a $f(\mathbf{r})$:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (2.18)$$

dove il termine dentro l'integrale può essere riscritto come

$$\begin{aligned} \nabla \cdot f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \\ = \nabla \cdot [f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)] - f(\mathbf{r}') \cdot \nabla [W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Sostituendo nella 2.18:

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot f(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)] d\mathbf{r}' + \\ - \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') \cdot \nabla [W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)] d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.20)$$

Il primo termine a destra dell'uguale può essere trasformato utilizzando il teorema della divergenza, in un integrale sulla superficie di contorno S del dominio di integrazione Ω :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot f(\mathbf{r}) \rangle = \int_S f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \vec{\mathbf{n}} dS + \\ - \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.21)$$

dove $\vec{\mathbf{n}}$ è il versore normale alla superficie S . Giacché la funzione kernel è una funzione a supporto compatto, il valore di W sulla superficie di S è 0.

$$\int_S f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \vec{\mathbf{n}} dS = 0 \quad (2.22)$$

L'equazione 2.20 assume la seguente forma:

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{r}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (2.23)$$

È dimostrato, quindi, che l'operazione di differenziazione della funzione $f(\mathbf{r})$ è trasformato in un'operazione di differenziazione della funzione di smoothing.

L'approssimazione di derivate di ordine superiore può essere ricondotta al calcolo di derivate successive. Inoltre applicando un'analisi simile a quella usata nelle equazioni 2.12-17 è possibile dimostrare che l'approssimazione kernel di derivate di ordine superiore ha accuratezza del secondo ordine.

2.2.2 - Particle approximation

Il dominio del fluido viene discretizzato in particelle che avranno massa costante per l'intera durata della simulazione. Ogni particella avrà delle proprietà calcolate mediante l'approssimazione kernel in quel punto. Queste particelle non sono usate solo per l'integrazione delle equazioni, ma costituiscono una rappresentazione del fluido ed essendo quella SPH una formulazione lagrangiana, il moto delle particelle corrisponde al moto del fluido.

Una particella i è associata ad un volume di fluido ΔV_i , di massa m_i e densità ρ_i . Dopo aver rappresentato il dominio del fluido con un numero finito di particelle, è possibile riscrivere la forma continua dell'equazione 2.12 nella sua forma discretizzata:

$$\langle f(\mathbf{r}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{r}_j) W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h) \quad (2.24)$$

dove N è il numero di particelle che si trovano all'interno del raggio di interazione, cioè della *smoothing length*, della particella i . Il termine $d\mathbf{r}'$ corrisponde al volume infinitesimo ed è stato sostituito con il volume della particella j :

$$V_j = \frac{m_j}{\rho_j} \quad (2.25)$$

Il valore della funzione f , in corrispondenza della particella i , può essere approssimato operando la media dei valori che la funzione f assume in corrispondenza delle particelle che si trovano all'interno del raggio di *smoothing* della particella i , utilizzando la funzione kernel per pesare i diversi contributi.

2.3 - Lunghezza di smoothing variabile nello spazio e nel tempo

Il metodo SPH venne applicato inizialmente a problemi di gasdinamica, e la formulazione per fluidi incompressibili prevede un'equazione di stato che descrive il fluido come leggermente compressibile. La formulazione per fluidi incompressibili è ancora argomento di ricerca, pertanto per la simulazione di flussi incompressibili si applica un'equazione di stato del fluido che prevede una variazione di densità limitata (paragrafo 2.6 – equazione 2.58).

Il metodo, nella forma proposta da Gingold e Monaghan (1977 e 197), utilizzava una lunghezza di smoothing h che veniva calcolata in base ad una media pesata sulla massa delle particelle nell'intorno della particella \mathbf{r} .

Successivamente Gingold e Monaghan (Gingold e Monaghan (1978), (1979), (1980)) suggerirono una formulazione che consentisse ad h di variare in base alla densità della particella; ad esempio per una particella a :

$$h = \sigma \left(\frac{m_a}{\rho_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (2.26)$$

dove d è il numero di dimensioni del sistema e σ è una costante compresa tra 1.3 e 1.5, valori suggeriti dagli stessi autori.

Tipicamente il dominio del fluido si suddivide in elementi cubici di volume ΔV , che sono rappresentati nelle simulazioni utilizzando elementi sferici ma imponendo che la massa sia uguale alla massa del volume cubico ΔV . Come detto, la densità del fluido varia leggermente anche per fluidi incompressibili, poiché una formulazione del metodo SPH per fluidi incompressibili è ancora oggetto di ricerca.

Se m_a è la massa del volume ΔV , e rimane ovviamente costante, si può considerare il lato del cubo ΔV pari a:

$$l = \left(\frac{m_a}{\rho_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (2.27)$$

La variazione di densità si ripercuote sulla variazione di volume e quindi sulla dimensione l delle particelle. Questa variazione è tenuta in conto variando la lun-

ghezza di smoothing in accordo con la variazione di densità. Questa tecnica si è dimostrata molto robusta ed è la formulazione più utilizzata all'interno delle simulazioni SPH.

2.4 - Equazione di Navier-Stokes mediata (AVNS - Averaged Navier-Stokes)

L'equazione di Navier-Stokes mediata è stata presentata da Anderson e Jackson (1967). Questa equazione è stata ampiamente usata per modellare le interazioni tra fluido e solido in complessi sistemi come i letti fluidizzati. Anderson e Jackson hanno definito un operatore di smoothing, che gode delle stesse proprietà della funzione kernel del metodo SPH, ed hanno riformulato l'equazione di Navier-Stokes in termini di variabili mediate e di grado di vuoto locale.

La formulazione tiene conto che la media locale di un campo a' definito sul dominio del fluido può essere ottenuta per convoluzione con la funzione di smoothing:

$$\varepsilon(\mathbf{r})a(\mathbf{r}) = \int_{V_f} a'(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.28)$$

dove \mathbf{r} è il punto intorno al quale si effettua la media, ed \mathbf{r}' è un punto del volume di fluido interstiziale V_f ed $\varepsilon(\mathbf{r})$ è la porosità definita come:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 - \int_{V_s} g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.29)$$

dove V_s è il volume delle particelle di solido.

Con la stessa logica, la media locale di un campo $a'(\mathbf{r})$ definito sul dominio del solido è dato da:

$$(1 - \varepsilon(\mathbf{r})) a(\mathbf{r}) = \int_{V_s} a'(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.30)$$

Applicando questa tecnica all'equazione di Navier-Stokes, Anderson e Jackson hanno derivato la formulazione dell'equazione di continuità in termini di variabili mediate:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f \mathbf{u}) = 0 \quad (2.31)$$

ρ_f è la densità del fluido ed \mathbf{u} è il vettore velocità del fluido.

L'equazione di conservazione della quantità di moto che si ottiene è la seguente:

$$\varepsilon\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \varepsilon\rho_f \mathbf{g} - \mathbf{f} \quad (2.32)$$

P è la pressione del fluido, $\boldsymbol{\tau}$ è il tensore degli sforzi viscosi ed \mathbf{f} è la forza di interazione con il solido. In questa trattazione si assume che il fluido sia incompressibile e newtoniano, pertanto il tensore degli sforzi assumerà la seguente espressione:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.33)$$

L'equazione non considera possibili turbolenze. Per quanto riguarda il termine di interazione tra fluido e solido, i dettagli saranno riportati nel paragrafo 2.6.

2.5 – Discrete Element Method

L'alternativa ad un modello continuo per la trattazione di solidi granulari è quella di vedere il materiale come un insieme di particelle discrete. Nel Discrete Element Method (Cundall (1979)) ogni particella solida di un sistema è rappresentata come una sfera. Ogni sfera costituisce un elemento discreto che può interagire con le altre sfere. Da queste interazioni si generano delle forze. Per quantificare queste forze è necessario considerare dei modelli di contatto. L'equazione del moto di Newton è integrata per ogni particella solida.

Data una particella i con posizione \mathbf{r}_i , l'equazione del moto assume la forma:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_j \mathbf{c}_{ij} + m_i \mathbf{g} \quad (2.34)$$

dove m_i è la massa della particella, \mathbf{c}_{ij} è la forza di contatto tra la particella i e la particella j , \mathbf{g} è l'accelerazione di gravità.

Per sistemi in cui è presente un fluido, deve essere aggiunto all'equazione il termine di interazione fluido-particella:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_j \mathbf{c}_{ij} + \mathbf{f}_i + m_i \mathbf{g} \quad (2.35)$$

\mathbf{f}_i è la forza esercitata dal fluido sulla particella.

Per determinare le forze di contatto, si specificano le interazioni binarie, cioè i modelli considerano l'interazione tra due particelle, assumendo che le interazioni tra più corpi possano essere considerate come il risultato di più interazioni binarie. Nelle simulazioni, le particelle solide sono rappresentate come sfere rigide: non cambiano dimensione e non si deformano. Allo stesso tempo, le particelle DEM sono elementi in grado di sovrapporsi leggermente e di generare overlap. Il modello di contatto fornisce le equazioni che legano gli overlap alle forze dovute agli urti tra particelle. Le particelle sono, da questo punto di vista, elementi deformabili (approccio "soft sphere").

Diversi modelli di contatto sono presenti in letteratura. Il più semplice è il Linear Spring Dashpot Model (Luding, 1998):

$$\mathbf{c}_{ij} = -(k\delta - \beta\dot{\delta}) \mathbf{n}_{ij} \quad (2.36)$$

dove δ è l'overlap tra le due particelle e \mathbf{n}_{ij} è il versore normale alla superficie di contatto. k e β sono i parametri del modello di contatto.

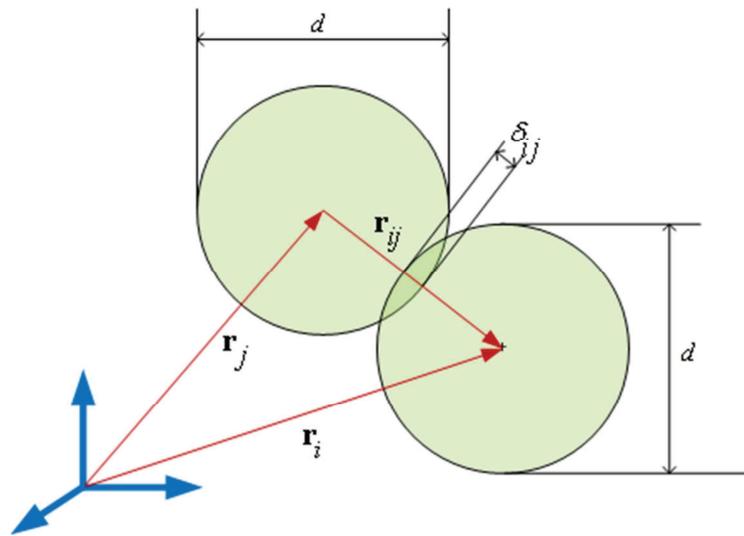


Fig. 2.3 – Rappresentazione del contatto tra particelle DEM.

Quando due particelle entrano in contatto, la forza repulsiva che si genera sulla particella i quando entra in contatto con la particella j è rappresentata come la forza di restituzione di una molla con costante k ; la deformazione della molla è l'overlap tra le due particelle. La direzione di applicazione della forza è la normale alla superficie di contatto e per due corpi sferici, coincide con la direzione congiungente i centri delle sfere.

$$f_{el} = k\delta \tag{2.37}$$

La forza è attiva solo quando l'overlap è positivo.

Un termine dissipativo è previsto dal modello LSD: questo termine è modellato come uno smorzatore viscoso e dipende dalla velocità di relativa tra le particelle:

$$f_{diss} = \beta\dot{\delta} \tag{2.38}$$

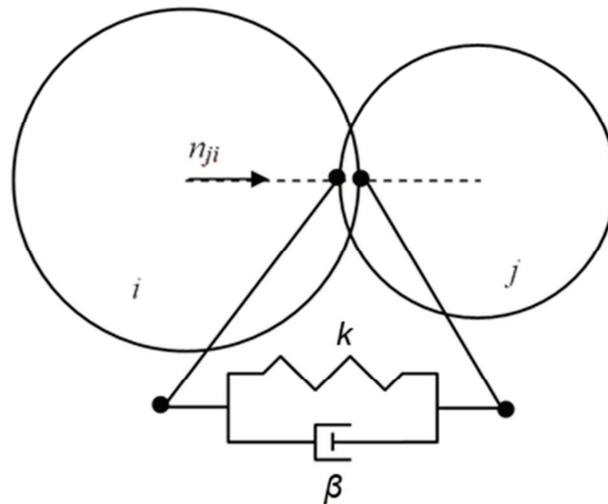


Fig.2.4 – Schematizzazione del modello LSD.

Considerando la terza legge di Newton, è possibile ricavare le relazioni (Luding (1998)):

$$\ddot{\delta} = -\frac{1}{m_{12}} f_1^{(n)} \quad (2.39)$$

Le forze normali agenti sulla particella 1 sono f_{el} e f_{diss} .

Sostituendo in quest'ultima si ha

$$\ddot{\delta} + \frac{1}{m_{12}} \beta \dot{\delta} + \frac{1}{m_{12}} k \delta = 0 \quad (2.40)$$

Si definiscono due quantità: $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_{12}}}$ e $\eta = \frac{\beta}{2 m_{12}}$

Sostituendo nell'equazione si ottiene l'espressione di un oscillatore armonico smorzato:

$$\ddot{\delta} + 2\eta \dot{\delta} + \omega_0^2 \delta = 0 \quad (2.41)$$

La soluzione di questa equazione differenziale è data da

$$\delta(t) = \left(\frac{v_0}{\omega}\right) \exp(-\eta t) \sin(\omega t) \quad (2.42)$$

mentre per la velocità si ha:

$$\dot{\delta}(t) = \left(\frac{v_0}{\omega}\right) \exp(-\eta t) [-\eta \sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)] \quad (2.43)$$

dove $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \eta^2}$ e $v_0 = \dot{\delta}(0)$

Fin tanto che $\eta < \omega_0$ la durata del contatto tra le due particelle è:

$$t_c = \pi/\omega \quad (2.44)$$

Si possono inoltre calcolare altre quantità di interesse:

coefficiente di restituzione

$$e_n = -\frac{v'_i}{v_i} \quad (2.45)$$

dove v_i è la velocità della particella i prima del contatto, e v'_i è la velocità al termine del contatto.

$$e_n = \exp(-\pi\eta/\omega) \quad (2.46)$$

L'overlap massimo δ_{max} , che si verifica al tempo $t = t_{max}$, può essere calcolato dalla condizione $\dot{\delta}(t_{max}) = 0$. È possibile ottenere l'espressione seguente:

$$\delta_{max} = \left(\frac{v_0}{\omega_0}\right) \exp\left[\left(-\frac{\eta}{\omega}\right) \arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)\right] \quad (2.47)$$

2.6 - Applicazione del metodo SPH all'equazione AVNS

La notazione utilizzata nei paragrafi 2.1-4 risulta pesante per l'applicazione del metodo all'equazione AVNS. Sarà di seguito utilizzata una simbologia diversa, che sarà spiegata nella presentazione delle equazioni.

L'equazione seguente è del tutto analoga all'equazione 2.24 e viene riscritta per introdurre la nuova simbologia:

$$A_a = \sum_b A_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}(h_a) \quad (2.48)$$

dove con la lettera b si indicano le particelle all'interno del dominio del supporto della funzione kernel, mentre con la lettera a si indica la particella sulla quale si sta calcolando la proprietà A . La funzione kernel $W_{ab}(h)$ è una contrazione della formula:

$$W_{ab}(h) = W(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h) \quad (2.49)$$

Il calcolo della porosità in corrispondenza di una particella SPH a può essere effettuato convertendo l'equazione 2.29 in una sommatoria dei volumi sulle particelle di solido che si trovano entro la lunghezza di *smoothing*, pesati considerando la funzione kernel:

$$\varepsilon_a = 1 - \sum_j V_j W_{aj}(h_a) \quad (2.50)$$

V_j è il volume della particella solida, mentre

$$W_{aj}(h) = W(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_j, h) \quad (2.51)$$

dove \mathbf{r}_j individua la posizione della particella solida.

In altre parole, con l'equazione 2.50 viene calcolato il grado di vuoto di una particella fluida SPH, andando a considerare i volumi delle particelle solide (DEM) che occupano posizioni comprese entro una lunghezza di *smoothing* kh_a .

La definizione di questo metodo comporta che attraverso lunghezza di *smoothing* si debba considerare un volume che permetta di ottenere un valore di grado di vuoto rappresentativo del sistema. Essendo la lunghezza di *smoothing* legata alla dimensione delle particelle SPH, la dimensione delle particelle SPH deve essere maggiore della dimensione delle particelle solide DEM, altrimenti si potrebbe verificare la completa sovrapposizione di una particella solida e una fluida, determinando così un grado di vuoto unitario o comunque non rappresentativo della sospensione: verrebbe così meno il concetto di "media" introdotto con l'equazione AVNS. Si tenga per ora presente che la dimensione delle particelle SPH è un argomento meritevole di attenzione; si ritornerà su questo punto nei capitoli successivi.

Il metodo SPH descritto verrà applicato all'equazioni di Anderson e Jackson 2.31 e 2.32. Il fluido sarà considerato leggermente compressibile come specificato (Robinson e Monaghan (2012)), mentre un modello per il calcolo della forza di drag è necessario per la determinazione delle forze di interazione liquido-solido.

Si introduce ora la densità superficiale del fluido e sarà indicata con ρ :

$$\rho = \varepsilon \rho_f \quad (2.52)$$

Per la particella SPH a la variazione della densità superficiale è calcolata usando l'equazione fornita da Price (2012):

$$\frac{D\rho_a}{Dt} = \frac{1}{\Omega_a} \sum_b m_b \mathbf{u}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}(h_a) \quad (2.53)$$

dove $\mathbf{u}_{ab} = \mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b$. L'equazione (2.53) fornisce la variazione della densità superficiale nel tempo e nello spazio.

Il termine Ω_a è un termine correttivo introdotto da Monaghan (Monaghan (2005)) per tener conto del gradiente della lunghezza di *smoothing* h_a :

$$\Omega_a = 1 - \frac{\partial h_a}{\partial \rho_a} \sum_b m_b \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial h_a} \quad (2.54)$$

L'accelerazione delle particelle SPH è data dalla seguente equazione:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}_a}{dt} = & - \sum_b m_b \left[\left(\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab}(h_a) \right. \\ & \left. + \left(\frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab}(h_b) \right] + \frac{\mathbf{f}_a + \mathbf{f}_g}{m_a} \end{aligned} \quad (2.55)$$

dove \mathbf{f}_a è la forza di interazione fluido-solido e sarà esplicitata in seguito in questo capitolo.

Π_{ab} è un termine viscoso usato per tener conto della divergenza del tensore degli sforzi dell'equazione 2.32. Questo termine è stato introdotto da Monaghan (1997) e consente di introdurre una certa dissipazione energetica in presenza di onde d'urto:

$$\Pi_{ab} = -\alpha \frac{u_{sig} u_n}{2 \bar{\rho}_{ab} |\mathbf{r}_{ab}|} \quad (2.56)$$

La quantità $u_{sig} = c_s + u_n/|\mathbf{r}_{ab}|$ rappresenta una velocità di propagazione delle informazioni tra due particelle. c_s è la velocità del suono e sarà definita in seguito (eq. 2.59), u_n è la differenza di velocità tra le due particelle nella direzione

$r_{ab} = r_a - r_b$. α è una costante che può essere calcolata dalla viscosità del fluido (Monaghan 2005):

$$\mu = \frac{\rho_f \alpha h c_s}{S} \quad (2.57)$$

dove S è una costante che per sistemi in tre dimensioni vale 10.

Per motivi legati alla stabilità numerica del metodo si aggiunge ad α un contributo detto viscosità artificiale $\alpha_{art} = 0.1$. Questo termine fornisce contributi solo quando due particelle fluide SPH si stanno avvicinando, cioè se $u_n < 0$.

Per calcolare la pressione del fluido nell'equazione 2.55 è necessaria un'equazione di stato (Li e Yuan-Hui (1967)):

$$P_a = B \left(\left(\frac{\rho_a}{\varepsilon_a \rho_0} \right)^\gamma - 1 \right) \quad (2.58)$$

Questa equazione di stato definisce una densità di riferimento del fluido, ρ_0 , per la quale la pressione P_a è uguale a 0. γ è il fattore di compressibilità posto pari a 7 (Monaghan (2005)).

Il fattore B è definito in modo da mantenere la variazione di densità inferiore all'1%, in modo da poter considerare il fluido leggermente compressibile. La velocità locale del suono c_s è

$$c_s^2 = \left. \frac{\partial P}{\partial \bar{\rho}} \right|_{\bar{\rho} = \varepsilon_a \rho_0} = \frac{\gamma B}{\varepsilon_a \rho_0} \quad (2.59)$$

Le variazioni di densità possono essere calcolate in funzione della velocità del fluido e della velocità del suono:

$$\frac{|\delta \rho|}{\rho} = \frac{u^2}{c_s^2} \quad (2.60)$$

Come riportato sopra, si assume che le fluttuazioni di densità debbano essere minori dell'1%:

$$\delta \rho = \rho - \rho_0 \quad (2.61)$$

$$\frac{|\delta\rho|}{\rho} < 0.01 \quad (2.62)$$

Questo deve essere verificato nelle condizioni in cui la velocità del fluido sia massima (u_m) e la porosità sia anch'essa massima, cioè pari ad 1.

Pertanto dall'eq. 2.60 si ottiene:

$$c_s^2 = 100 u^2 \quad (2.63)$$

Considerando $u = u_m$ e $\varepsilon = 1$ e sostituendo nella 2.59 si ottiene:

$$B = 100 \frac{\rho_0 u_m^2}{\gamma} \quad (2.64)$$

Riprendendo l'equazione 2.26:

$$h_a = \sigma \left(\frac{m_a}{\rho_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (2.65)$$

$$\rho_a = \varepsilon_a \rho_f \quad (1.66)$$

Trascurando la variazione di densità, h_a è inversamente proporzionale a $\varepsilon_a^{1/d}$.

$$h_a \propto \left(\frac{1}{\varepsilon_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (2.67)$$

2.6.1 Determinazione delle interazioni fluido-solido

La forza su una particella solida esercitata dal liquido è data (Anderson e Jackson (1967))

$$\mathbf{f}_i = V_i(-\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})_i + \mathbf{f}_d(\varepsilon_i, \mathbf{u}_s) \quad (2.68)$$

Dove V_i è il volume della particella solida i . Il primo termine a destra dell'uguale rappresenta la spinta idrostatica e il contributo del tensore degli sforzi. Il termine \mathbf{f}_d è la forza di drag, per definire la quale è necessario introdurre un modello di forza di drag.

Il gradiente di pressione ed il tensore degli sforzi sono calcolati per la particella solida utilizzando un'interpolazione che prevede la correzione di Shepard (1968).

Per ogni particella solida (DEM) il contributo $(-\nabla P - \nabla \cdot \tau)$ è dato da un'interpolazione di tutti i contributi $(-\nabla P - \nabla \cdot \tau)_b$ delle particelle fluide che si trovano entro la distanza di *smoothing*. L'interpolazione è effettuata attraverso la funzione kernel. L'espressione che si ottiene è la seguente:

$$(-\nabla P - \nabla \cdot \tau)_i = \frac{1}{\sum_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}(h_a)} \sum_b m_b \theta_b W_{ab}(h_a) \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} \theta_a = - \sum_b m_b & \left[\left(\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab}(h_a) \right. \\ & \left. + \left(\frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab}(h_b) \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

Per soddisfare la terza legge di Newton, la forza esercitata dalle particelle solide sul fluido deve essere uguale e contraria alla forza esercitata dal fluido sulle particelle solide. Il termine calcolato su una particella DEM è il risultato dell'interpolazione dei contributi di diverse particelle fluide che si trovano all'interno del raggio di interazione. Allo stesso tempo, per ogni particella fluida SPH si possono trovare diverse particelle DEM all'interno della distanza di *smoothing*.

La forza che viene esercitata dal solido su una particella SPH α è determinata attraverso una media pesata delle forze di interazione tra fluido e solido \mathbf{f}_i (2.68) delle particelle DEM all'interno del raggio di interazione della particella SPH. Il contributo di ogni particella DEM è pesato secondo il valore della funzione kernel:

$$\mathbf{f}_\alpha = - \frac{m_\alpha}{\rho_\alpha} \sum_j \frac{1}{S_j} \mathbf{f}_j W_{\alpha j}(h_\alpha) \quad (2.71)$$

dove \mathbf{f}_α è la forza che il solido esercita sul fluido, \mathbf{f}_j è la forza calcolata sulla particella DEM, utilizzando l'equazione 2.68. Il termine S_j garantisce che la forza esercitata dal solido sul fluido sia uguale alla forza esercitata dal fluido sul solido, rispettando la terza legge di Newton:

$$S_j = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{jb}(h_b) \quad (2.72)$$

2.6.2 – Modelli di forza di drag

Sono di seguito presentati diversi modelli per il calcolo della forza di drag. La necessità di più modelli deriva dal fatto che in seguito verranno considerato sistemi diversi.

Il modello più semplice è rappresentato dalla legge di Stokes:

$$\mathbf{f}_d = 3\pi\mu d\mathbf{u}_s \quad (2.73)$$

μ è la viscosità del fluido e d è il diametro della particella. La forza di drag dipenderà dalla velocità superficiale relativa fluido-particella \mathbf{u}_s , data dalla relazione:

$$\mathbf{u}_s = \varepsilon_i(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_i) \quad (2.74)$$

dove \mathbf{u}_f è la velocità locale del fluido ed \mathbf{u}_i è la velocità locale della particella solida.

La legge di Stokes è valida per una singola particella solida in moto laminare in un fluido. Coulson and Richardson (1994) proposero un modello di forza di drag valido per singola particella in un ampio range di numeri di Reynolds $Re_p = \rho_f|\mathbf{u}_s|d/\mu$:

$$\mathbf{f}_d = \frac{\pi}{4}d^2\rho_f|\mathbf{u}_s|(1.84 Re_p^{-0.31} + 0.293Re_p^{0.06})^{3.45} \quad (2.75)$$

La presenza di molte particelle solide comporta che la forza di drag \mathbf{f}_d sia funzione del grado di vuoto del sistema.

$$\mathbf{f}_d = \frac{1}{8}C_d f(\varepsilon_i)\pi d^2\rho_f|\mathbf{u}_s|\mathbf{u}_s \quad (2.76)$$

Un'espressione per il calcolo del coefficiente di drag C_d , è stata fornita da Dallavalle (1948):

$$C_d = \left[0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_p}} \right]^2 \quad (2.77)$$

Di Felice (1994) propose una correlazione per calcolare la dipendenza dal grado di vuoto:

$$f(\varepsilon_i) = \varepsilon_i^{-\xi} \quad (2.78)$$

$$\xi = 3.7 - 0.65 \exp \left[-\frac{(1.5 - \log_{10} Re_p)^2}{2} \right] \quad (2.79)$$

I modelli presentati sono stati ricavati per solidi monodispersi. Tuttavia, la presenza di una distribuzione delle dimensioni delle particelle influenza la forza di drag. Pertanto è necessario considerare modelli per sospensioni polidisperse.

In letteratura diversi gruppi di ricerca hanno fornito contributi significativi nello sviluppo di modelli di drag per sistemi polidispersi. Alcuni dei lavori che hanno fornito riscontri molto positivi all'interno della comunità scientifica sono: van der Hoef et al. (2005), Yin e Sundaresan (2009), Kawaguchi et al. (2006).

Altri autori hanno apportato modifiche e miglioramenti a questi metodi: Beetstra et al. (2007), Cello et al. (2010). Durante il presente lavoro di tesi, è stato implementato un modello basato sull'approccio adottato da Yin e Sundaresan (2009).

Il modello prevede che la sospensione bidispersa sia omogenea e costituita da due solidi monodispersi ed è ottenuto da un approccio semiempirico utilizzando dati sperimentali: la forza esercitata dal fluido sul solido può essere correlata alle perdite di carico attraverso un letto di particelle. Tuttavia, non essendo possibile conoscere la forza di drag esercitata separatamente sulle singole particelle, il modello assume che la forza di drag esercitata sulle particelle sia omogenea all'interno del letto di particelle e non dipenda dalla posizione.

Saranno usate di seguito le seguenti definizioni.

Diametro medio di Sauter:

$$\langle d \rangle = \left(\sum_i \frac{x_i}{d_i} \right)^{-1} \quad (2.80)$$

dove x_i è la frazione volumetrica di solido della specie i rispetto al solido totale.

Numero di Reynolds medio:

$$\langle Re_p \rangle = \frac{\langle d \rangle \rho_f |\mathbf{u}_s|}{\mu} \quad (2.81)$$

Indice di polidispersione:

$$y_i = \frac{d_i}{\langle d \rangle} \quad (2.82)$$

Forza di Stokes:

$$St_i = 3\pi\mu d_i \mathbf{u}_s \quad (2.83)$$

La forza di drag che agisce su una particella i nella sospensione è calcolata come una funzione di una forza di drag di riferimento, assunta pari alla forza alla quale la stessa particella sarebbe soggetta se si trovasse in una sospensione monodispersa dello stesso solido, $F_{i,mono}$. La seguente espressione, fornita da Beetstra et al. (2007), consente di calcolare tale termine:

$$F_{i,mono} = f_{i,mono} \cdot St_i \quad (2.84)$$

dove $f_{i,mono}$ è

$$\begin{aligned} f_{i,mono} &= f_{i,mono}(\varepsilon, \langle Re \rangle) = \\ &= \left[\frac{10(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \varepsilon^2(1 + 1.5\sqrt{1-\varepsilon}) \right] (1 + \chi_{BVK}) \end{aligned} \quad (2.85)$$

mentre χ_{BVK} :

$$\begin{aligned} \chi_{BVK} &= \chi_{BVK}(\varepsilon, \langle Re \rangle) = \\ &= \frac{0.413\langle Re \rangle}{240(1-\varepsilon) + 24\varepsilon^4(1 + 1.5\sqrt{1-\varepsilon})} \\ &\cdot \frac{\varepsilon^{-1} + 3\varepsilon(1-\varepsilon) + 8.4\langle Re \rangle^{-0.343}}{1 + 10^{3(1-\varepsilon)}\langle Re \rangle^{-\frac{1+4(1-\varepsilon)}{2}}} \end{aligned} \quad (2.86)$$

Quest'ultima equazione consiste in un termine correttivo per regimi di moto non laminare.

La forza di drag su una particella i sarà quindi pari alla forza $F_{i,mono}$ moltiplicata per un coefficiente β_i :

$$F_i = \beta_i \cdot F_{i,mono} \quad (2.87)$$

$$\beta_i = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{1}{f_{i,mono}} + \left(\frac{3\varepsilon - 1}{2} - \frac{1}{f_{i,mono}} \right) y_i + \frac{1}{2} (1 - \varepsilon) y_i^2 \right] \quad (2.88)$$

β_i tiene conto della composizione del sistema attraverso y_i .

La formulazione del coefficiente β_i assicura che il modello sia valido anche per situazioni che degenerano in sistemi monodispersi, particelle isolate e per il limite del rapporto di dimensioni tendente ad infinito.

Capitolo 3

Implementazione dei metodi

3.1 - Libreria software

Le simulazioni SPH-DEM sono state effettuate in ambiente LINUX, utilizzando Aboria, una libreria software sviluppata da Martin Robinson. Il software è in *alfa release*, è open-source ed è disponibile al seguente link:

<https://github.com/martinjrobins/Aboria>

Le simulazioni sono implementate in linguaggio C++ Aboria consente di:

- creare e gestire in memoria *oggetti* in uno spazio 3D;
- assegnare ad ogni oggetto un numero di variabili e di parametri;
- sfruttare un algoritmo di ricerca dei contatti (*Linked Cell*);
- impostare condizioni al contorno periodiche;
- utilizzare la libreria VTK per la generazione di output per le visualizzazioni dei risultati;
- formattare file di output *.data* per rendere agevole il post-processing, ad esempio utilizzando Matlab;
- eseguire le simulazioni in parallelo su cluster multiprocessore o su computer multicore.

3.1.1 - La neighbour search

L'algoritmo di *neighbour search* implementato in Aboria sfrutta la tecnica *Linked Cell* (Domínguez e Crespo (2011), Mattson e Rice (1999)). Quando si parla di dinamica molecolare questo algoritmo è indicato come *ricerca dei contatti*, mentre per quanto riguarda il metodo SPH, sarebbe più corretto parlare di ricerca dei vicini (*neighbour search*) in quanto la funzione kernel fa uso di informazioni relative a

particelle che non si trovano in contatto ma stanno all'interno del raggio di *smoothing*.

Tra i processi di calcolo coinvolti nel metodo SPH-DEM, (ma anche per simulazioni che coinvolgono il solo metodo DEM o SPH), la *neighbour search* è l'attività più onerosa in termini computazionali, e grande attenzione è dedicata alla ricerca di algoritmi più efficienti. Per poter eseguire simulazioni che coinvolgano migliaia di particelle, l'algoritmo deve essere ben implementato. Pertanto questa attività è generalmente affidata a programmatori esperti.

L'idea di fondo è quella di individuare per ogni particella le particelle che si trovano entro una certa distanza dal centro della particella considerata. Senza questo metodo, per ogni particella bisognerebbe verificare il contatto con tutte le altre particelle del sistema e questo risulterebbe inefficiente e nella maggior parte dei casi renderebbe la simulazione irrealizzabile.

Con questo metodo si suddivide il dominio della simulazione in celle di grandezza che nel caso della ricerca dei contatti per il solo metodo DEM è pari al diametro delle particelle (casi di sistemi polidispersi sono più complicati e sono previsti metodi diversi per aumentare l'efficienza dell'algoritmo (Ogarko et al. (2012))). Nel caso del metodo SPH la grandezza delle celle è imposta pari alla lunghezza effettiva di interazione (la lunghezza oltre la quale la funzione kernel è nulla).

La ricerca dei contatti e le interazioni tra particelle sono calcolate solo per particelle che stanno nella stessa cella del dominio o in celle vicine.

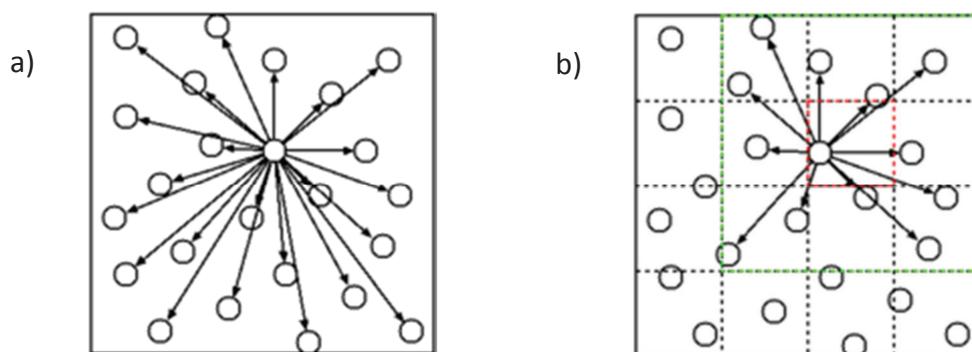


Fig. 3.1 – Rappresentazione della *neighbour search*: a) senza Linked Cell; b) suddivisione del dominio utilizzando l'algoritmo Linked Cell.

Dalle figure è ben visibile il guadagno in termini di “confronti inutili”.

Un’ulteriore complicazione è data dalla presenza di condizioni al contorno periodiche.

Per sistemi molto estesi, ed in ogni caso per ridurre i tempi di calcolo, si sceglie di simulare il bulk di un sistema utilizzando una piccola parte e tralasciando gli effetti di bordo. Ad esempio il bulk di una sospensione può essere simulato come una piccola parte del sistema immaginando che questo punto si ripeta identicamente lungo tutti gli assi (condizioni periodiche).

In questo caso l’algoritmo di *neighbour search* per le celle che stanno sul bordo del dominio, deve essere in grado di considerare come celle “vicine” quelle celle che stanno all’estremo opposto del dominio.

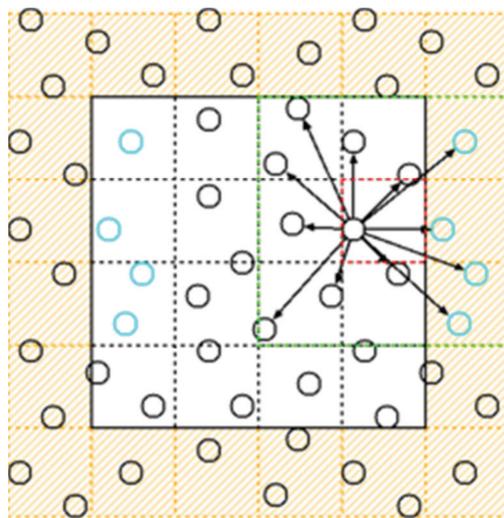


Fig. 3.2 – neighbour search per il caso di condizioni al contorno periodiche.

La *neighbour search* implementata in Aboria suddivide il dominio in intervalli equispaziati. È possibile modificare la distanza in base alla funzione che si esegue, ad esempio:

- per il calcolo del grado di vuoto di una particella SPH, la distanza entro le particelle DEM contribuiscono al grado di vuoto, è pari a k volte h_a , dove k è imposta pari a 2 per tutte le simulazioni. L’intervallo di suddivisione della neighbour search è settata pari a $2 h_a$.

- quando si integra l'equazione del moto per le particelle solide DEM, per determinare le forze generate dal contatto con altre particelle solide è necessario ricercare i possibili contatti in un intorno pari al diametro della particella stessa (per sistemi polidispersi, questo diametro è preso pari alla particella più grande).

Pertanto, durante le simulazioni, la *neighbour search* sarà resettata imponendo diversi intervalli di suddivisione.

3.2 L'algoritmo di integrazione di Verlet

L'integrazione nel tempo delle equazioni riportate nel capitolo 1 è effettuata utilizzando un algoritmo di Verlet (Verlet (1967)).

Il metodo è stato sviluppato ed utilizzato per la prima volta nel 1791 da Delambre, poi fu riscoperto da Verlet ed ha avuto particolare successo in applicazioni di dinamica molecolare, dove viene usata per integrare l'equazione del moto di Newton.

L'integrazione di Verlet fornisce un'ottima stabilità numerica e benefici dal punto di vista della memorizzazione dei dati per calcoli che prevedono grossi flussi in memoria.

L'idea di partenza è quella di operare due espansioni in serie di Taylor del terzo ordine per la funzione posizione $\mathbf{r}(t)$, una con formulazione forward ed una backward nel tempo:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\mathbf{b}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\mathbf{b}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.2)$$

dove con \mathbf{v} si indica il vettore velocità, con \mathbf{a} l'accelerazione \mathbf{b} è la derivata terza di \mathbf{r} rispetto al tempo t .

Sommando le due equazioni si ottiene:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \mathbf{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.3)$$

Questa è la forma base dell'algoritmo di Verlet. Come è possibile osservare dall'equazione precedente, questa tecnica consente di ottenere un'accuratezza del quarto ordine, senza che la derivata di \mathbf{r} di terzo ordine compaia esplicitamente nella formula.

Nell'equazione 3.3 non compare alcuna velocità, cosa che consente di integrare l'equazione del moto senza aver bisogno del calcolo della velocità. La velocità può essere calcolata utilizzando la posizione $\mathbf{r}(t)$:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.4)$$

Questa equazione è ricavata utilizzando le differenze finite in formulazione centrata, ed ha pertanto un'accuratezza del secondo ordine.

Saranno presentate ora alcune considerazioni sulle scale temporali coinvolte nel processo fisico di contatto fluido-solido. Inoltre bisognerà tener conto di questi aspetti anche nel momento della definizione dei criteri di stabilità del metodo.

3.3 – Intervalli di integrazione e condizioni di stabilità

Lo step di integrazione per il metodo SPH, che sarà indicato con Δt_{SPH} , è stabilito basandosi sulla condizione di stabilità di Courant-Friedrichs-Lewy (CFL):

$$\Delta t_{SPH} \leq \min_a \left(0.6 \frac{h_a}{u_{sig}} \right) \quad (3.5)$$

dove \min_a indica che il minimo è valutato considerando tutte le particelle SPH. Generalmente questo passo d'integrazione (time step) è molto più grande (almeno di un ordine di grandezza) del tempo di contatto tra particelle DEM, (Eq. 1.44).

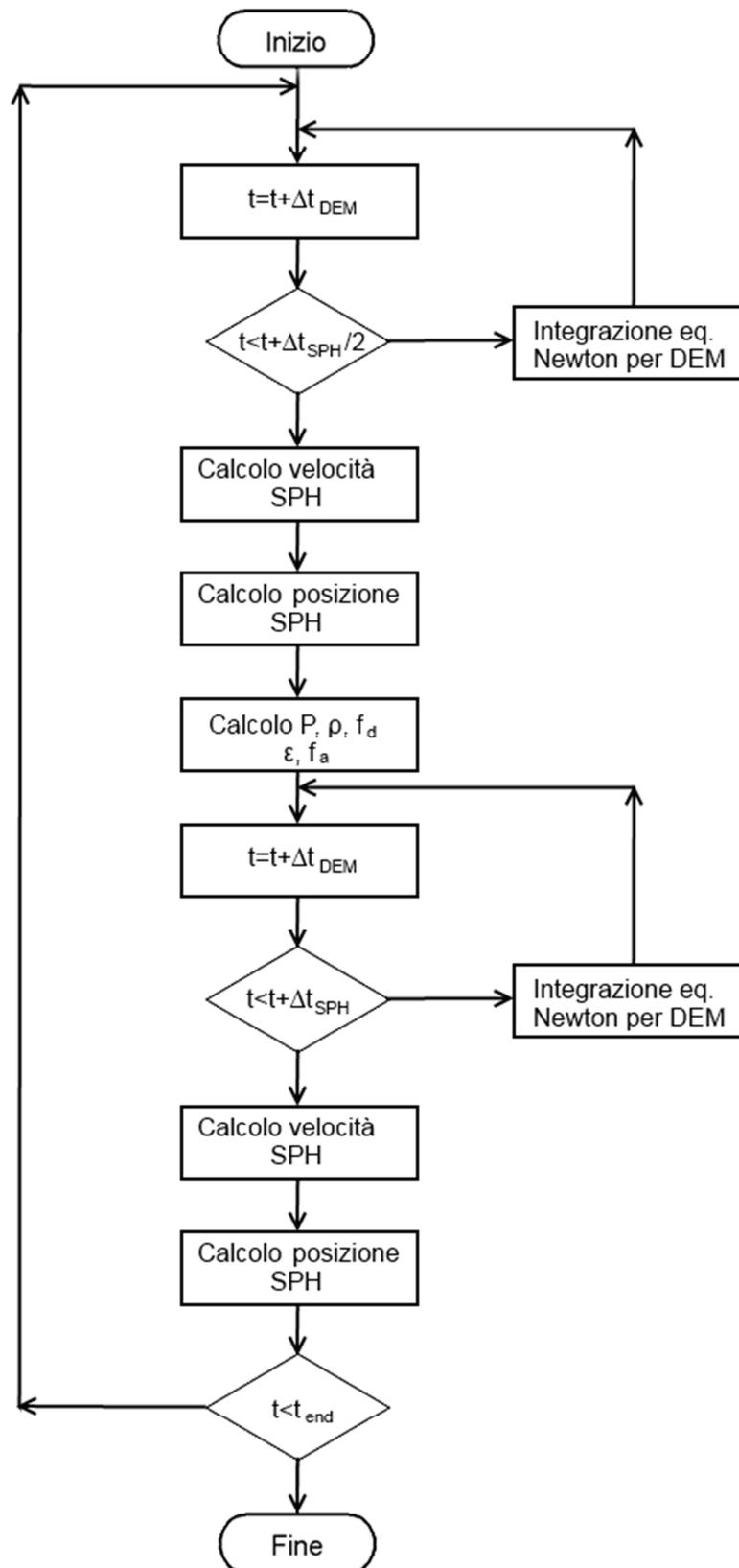
$$t_c = \frac{\pi}{\sqrt{\frac{k}{m_{12}} - \frac{\beta}{2 m_{12}}}} \quad (3.6)$$

Il time step di integrazione per le particelle DEM è fissato come una frazione del tempo di contatto, generalmente compreso tra $\frac{1}{50}$ e $\frac{1}{20}$:

$$\Delta t_{DEM} \leq \frac{1}{20} t_c \quad (3.7)$$

L'integrazione delle equazioni del metodo SPH ha un onere computazionale superiore rispetto al metodo DEM. Valutare le equazioni che governano il moto del fluido per ogni time step Δt_{DEM} sarebbe superfluo e andrebbe a compromettere l'efficienza del metodo. Tenendo conto di ciò l'algoritmo suddivide un time step Δt_{SPH} in due $\frac{\Delta t_{SPH}}{2}$ ed all'interno di ogni semi-intervallo integra l'equazione del moto delle particelle DEM un certo numero di volte, rispettando la condizione 3.7.

L'algorithmo può essere rappresentato con il seguente *flowchart*:



3.4- Tecnica di smoothing per sistemi bidispersi

Più volte nei capitoli precedenti è stata sottolineata l'importanza della dimensione delle particelle SPH. Infatti, le variabili del sistema sono calcolate su un volume di fluido che è determinato dalla dimensione delle particelle SPH. Ad esempio, per calcolare il grado di vuoto non si può considerare un volume minore o comparabile al volume delle particelle solide, altrimenti si otterrebbe un grado di vuoto pressoché nullo, e questo sarà usato nell'equazione AVNS.

Tuttavia, anche se il rapporto tra il diametro delle particelle SPH ed il diametro delle particelle solide è maggiore di 2 (Robinson et al. (2013)), il grado di vuoto non è rappresentativo della condizione locale, pertanto si introduce un errore. Questo errore è maggiore in presenza di elevati gradienti del grado di vuoto.

I risultati riportati da Robinson et al. riguardano sistemi monodispersi di particelle (Robinson et al. (2014)). Nel caso di sistemi polidispersi non si conosce come l'errore sia affetto dalla risoluzione del fluido, tanto meno è stato proposto un metodo per minimizzare l'errore.

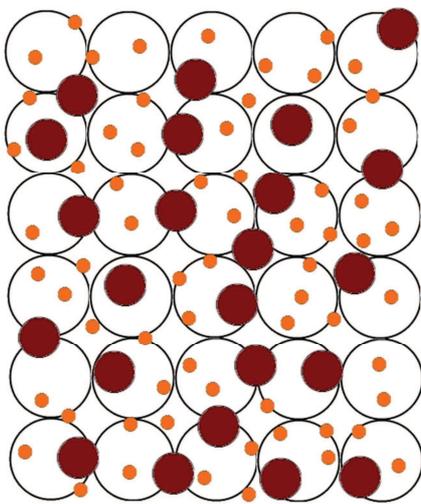


Fig. 3.3 – Rappresentazione della sospensione bidispersa, (particelle solide di colore marrone ed arancio) e della discretizzazione SPH.

Di seguito è presentata la tecnica alternativa sviluppata in questo lavoro di Tesi per il calcolo del grado di vuoto per sistemi bidispersi utilizzando l'interpolazione kernel.

Si consideri un sistema bidisperso, come quello in figura 3.3: le particelle marroni rappresentano le particelle solide di diametro maggiore, mentre quelle di colore arancio sono solidi di diametro più piccolo.

Applicando il metodo SPH per dividere il dominio del fluido in particelle, si ottiene la discretizzazione del fluido, che in questo caso è rappresentato dalle particelle bianche.

In figura 3.3 la dimensione delle

particelle SPH è pari a due volte la dimensione delle particelle di solido con diametro maggiore, ossia $\frac{h}{d_{BIG}} = 2$.

Nel caso di sistema monodisperso questo consentirebbe di minimizzare l'errore se tutte le particelle solide avessero diametro d_{BIG} .

Per le particelle di diametro più piccolo l'errore sarebbe comunque maggiore, e si può osservare che l'errore cresce rapidamente all'aumentare del rapporto $\frac{h}{d}$.

Se si considerasse una risoluzione tale da minimizzare l'errore per le particelle di solido con diametro minore, come in figura 3.4, questo causerebbe problemi per le particelle di diametro maggiore. Infatti essendo la dimensione delle particelle SPH paragonabile a quella del solido con diametro maggiore, la sovrapposizione di una particella di fluido ed una di solido causerebbe un valore di grado di vuoto nullo o comunque non rappresentativo del sistema. In questo caso l'applicazione dell'equazione AVNS non avrebbe alcun senso, poiché la definizione del grado di vuoto secondo l'equazione 2.29 viene meno.

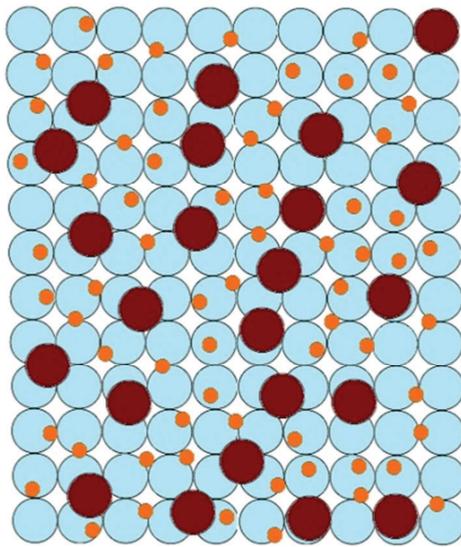


Fig. 3.4 – Rappresentazione della sospensione bidispersa, (particelle solide di colore marrone ed arancio) e della discretizzazione SPH (in azzurro).

Il metodo proposto evita che si calcolino gradi di vuoto nulli a causa della sovrapposizione di particelle SPH e di particelle solide con diametro d_{BIG} : la risoluzione del fluido è effettuata usando un rapporto $\frac{h}{d_{small}} = 2$, ma il grado di vuoto è ottenuto dividendo il calcolo in due contributi: uno relativo alle particelle di diametro grande, e un altro relativo alle particelle di diametro piccolo. Per fare ciò si utilizzano due lunghezze di smoothing differenti: la prima pari a due volte la dimensione delle particelle SPH, la seconda pari a due volte la dimensione delle particelle solide grandi.

Riprendendo l'equazione 2.50, si riscrive considerando le sole particelle di diametro minore:

$$\varepsilon_s = 1 - \sum_i^{small} V_{small} W_{si}(h_s) \tag{3.8}$$

mentre per il contributo dato dalle particelle grandi si ha:

$$\varepsilon_b = 1 - \sum_j^{BIG} V_{BIG} W_{bj}(h_b) \tag{3.9}$$

La porosità totale del sistema sarà data da:

$$\varepsilon_t = \varepsilon_s - \sum_b V_{BIG} (1 - \varepsilon_b) W_{sb}(h_s) \tag{3.10}$$

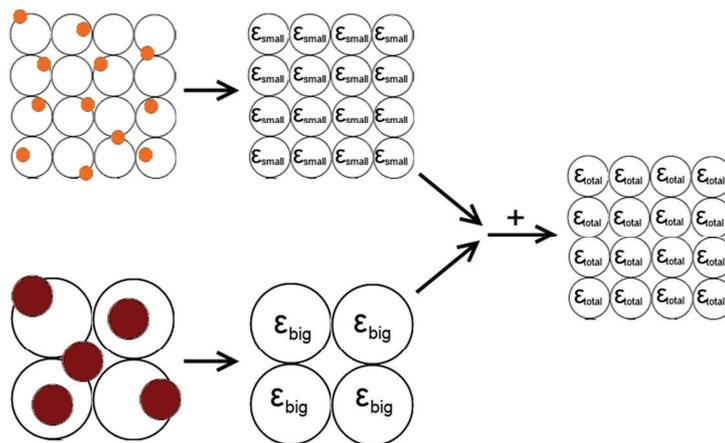


Fig. 3.5 – Somma dei contributi al calcolo del grado di vuoto relativi alle particelle di diametro piccolo (arancione) e a quelle di diametro grande (marrone).

Capitolo 4

Test cases e simulazioni

4.1 – Presentazione dei sistemi

In questo capitolo vengono presentati i sistemi scelti come test case per le simulazioni. L'obiettivo è quello di dimostrare che il metodo di modellazione fornisce risultati validi per simulazioni in mesoscala di sistemi multifasici fluido-solido.

La scelta è effettuata in modo da facilitare la successiva validazione del metodo. I sistemi scelti sono ampiamente trattati in letteratura, per tanto sarà possibile ottenere un confronto tra le predizioni dei modelli teorici ed i risultati delle simulazioni. Questo consentirà di verificare la validità del metodo SPH-DEM e la corretta implementazione in Aboria.

I test case simulano la sedimentazione batch di diversi sistemi. In ordine di complessità crescente, saranno presentati:

- Sedimentazione di una singola particella
- Sedimentazione di un blocco a porosità costante
- Sedimentazione di una sospensione di particelle monodisperse
- Sedimentazione di una sospensione di particelle monodisperse di diversa densità
- Sedimentazione di un blocco a porosità costante di particelle bidisperse
- Sedimentazione di una sospensione di particelle bidisperse

Per primi due test case, sono disponibili i risultati di simulazioni numeriche SPH-DEM riportati in un lavoro di Robinson et al. (2014). Per tali simulazioni gli autori hanno usato codici creati ad hoc, mentre per il presente lavoro i diversi test case sono stati implementati completamente in Aboria. I primi due test case sono stati utilizzati per verificare la corretta implementazione del software Aboria ed

operare una calibrazione dei parametri della simulazione, quali la viscosità artificiale, il fattore di smoothing e gli intervalli di integrazione. Il software Aboria è un progetto del tutto nuovo, ed essendo impiegato per la prima volta è stato necessario operare un debugging approfondito.

L'operazione di debugging ha portato via diverso tempo. In particolare un bug nell'integrazione dell'equazione del moto delle particelle DEM.

Il test case 5 consente di verificare la validità del metodo per sistemi di solidi bidispersi e di verificare la corretta implementazione del modello di drag per solidi polidispersi (eq. 2.87).

I test case 3, 4 e 6, riguardano dinamiche più complesse, poiché le particelle solide sono libere di muoversi e gli urti tra particelle solide saranno frequenti.

4.2 - Geometria della colonna

La geometria utilizzata per le diverse simulazione è un parallelepipedo di altezza $H = 0.006 \text{ m}$, mentre le altre due dimensioni sono pari a $W = 0.004 \text{ m}$.

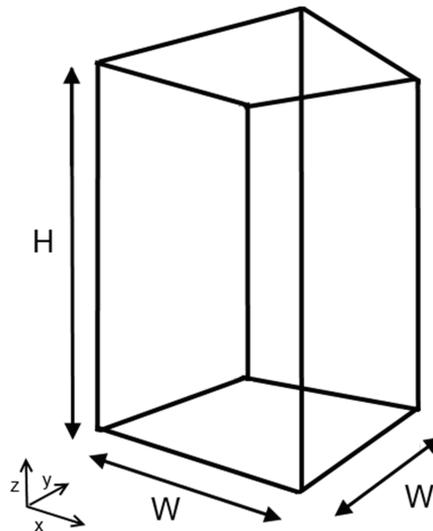


Fig. 3.1 – geometria della colonna.

Le condizioni al contorno sono periodiche nelle direzioni x e y , mentre nella direzione z si hanno condizioni diverse per le particelle SPH e per le particelle

DEM: il lato superiore della colonna è aperto ($z = H$), quindi costituisce una superficie libera, mentre al lato inferiore ($z = 0$) si trova una superficie fissa che rappresenta il suolo. Per le particelle DEM questa condizione è realizzata definendo una distanza tra la particella e la superficie: quando una particella DEM si avvicina al fondo del parallelepipedo si genererà un overlap ed una forza repulsiva agirà sulla particella secondo il modello LSD. Per le particelle SPH il fondo è simulato ponendo tre strati di particelle SPH con posizione fissata. Questa è una delle tecniche più semplici usate per la simulazione della condizione di parete fissa per il metodo SPH.

4.3 – Proprietà del fluido

Il fluido scelto per le simulazioni è l'acqua. Le proprietà del fluido e le dimensioni della colonna sono mantenuti costanti, pari ai valori riportati in tabella:

Tab. 4.1 – Geometria della colonna e proprietà del fluido.

Dimensioni della colonna	$W \times W \times H$	4 x 4 x 6 mm
Densità del fluido	ρ_f	1000 kg/m ³
Viscosità	μ	8.9e-4 Pa s

Un importante aspetto delle simulazioni numeriche sono gli intervalli di integrazione. Le due tecniche, SPH e DEM, hanno tempi caratteristici che sono profondamente diversi e questo si ripercuote sulle condizioni di stabilità che vengono assunte per i due metodi: per le particelle solide a definire un tempo caratteristico è la durata del contatto solido-solido, mentre per le particelle di fluido si adotta una condizione di stabilità CFL (eq. 3.5).

Il tempo di contatto solido-solido è dato dall'equazione (eq. 3.6) ed è profondamente influenzato dalla costante di elasticità k del modello LSD. Per evitare di avere intervalli di integrazione troppo piccoli e quindi tempi di simulazione molto lunghi, si è scelto di limitare il valore di k a 10 per i sistemi nei quali non si ha contatto tra particelle solide: sedimentazione di particella singola e sedimentazione di blocco a porosità costante. Invece nel caso della sedimentazione di sospensione è stato necessario aumentare il valore di k valore a 10000 N/m in

quanto durante l'ispessimento dello strato di particelle depositate sul fondo della colonna, la forza agente sugli strati inferiori di particelle fa sì che l'overlap generato sia maggiore del raggio delle particelle: questo, oltre ad essere un'assurdità fisica, causa problemi di instabilità numerica.

L'inizio della simulazione non coincide con la caduta delle particelle; infatti bisogna imporre un certo intervallo di tempo, intorno a 1000 intervalli di integrazione delle particelle SPH, per consentire al fluido di raggiungere l'equilibrio idrostatico. Il fluido è inizializzato come un lattice di particelle equispaziate, con grado di vuoto arbitrario, ed è necessario che esso si disponga in una posizione di equilibrio dettata dalla soluzione delle equazioni che governano la fisica del sistema.

4.4-Sedimentazione di singola particella

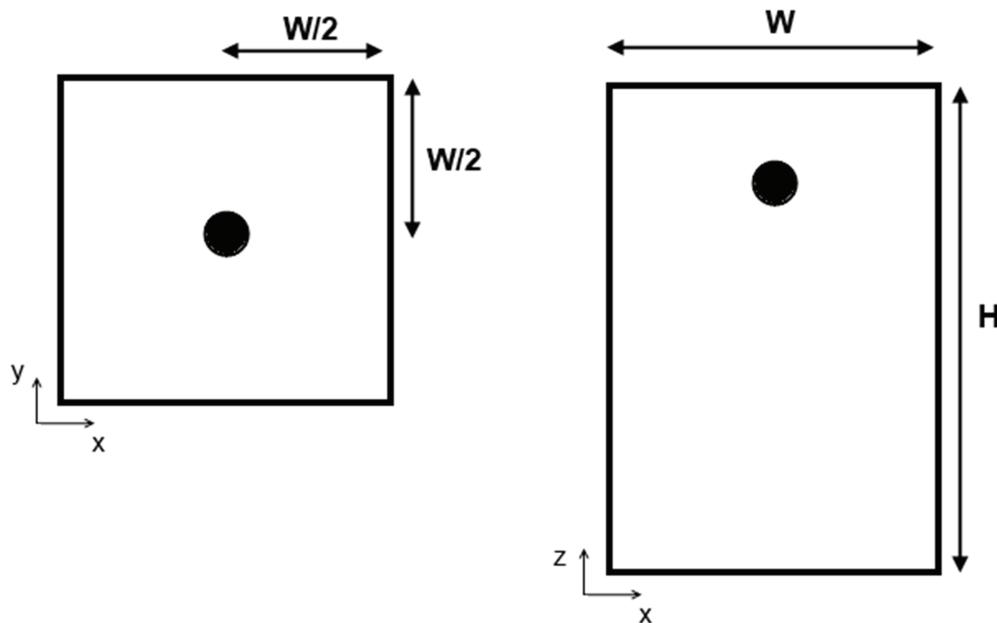


Fig. 4.2 – Posizione iniziale della singola particella nella colonna al momento.

In questo test case, una singola particella sedimenta per effetto della gravità, in una colonna di acqua in quiete. La particella solida ha diametro pari a $d_p = 100 \mu m$. La particella è inizialmente posizionata ad una quota $z = 0.8 H$.

La posizione della particella DEM è inizialmente mantenuta fissa ed al fluido è consentito di raggiungere l'equilibrio idrostatico. Il momento in cui la particella DEM è rilasciata corrisponde all'istante della simulazione $t = 0$ s. Per questo sistema la forza di drag può essere calcolata usando la legge di Stokes eq.2.73. Imponendo un bilancio delle forze allo stazionario, si ha che la spinta idrostatica e la forza di drag sono in grado di bilanciare la forza di gravità, in modo tale che la velocità di caduta della particella nel fluido sia costante. È così possibile calcolare la velocità terminale della particella nel fluido in ogni istante t :

$$v(t) = \frac{(\rho_p - \rho)Vg}{b} \left(1 - e^{-\frac{t}{t_d}} \right) \quad (4.1)$$

dove $b = 3\pi\mu d$ e $t_d = \frac{m}{b}$, mentre m e V sono la massa ed il volume della particella, d il diametro della particella e g l'accelerazione di gravità.

4.5 – Blocco a porosità costante - CPB

In questo test case un blocco di porosità costante di particelle identiche, stesse dimensioni e stessa densità, è posto all'interno di una regione occupata dal fluido. La distanza tra le particelle è uguale in ogni direzione e si mantiene costante durante la sedimentazione del blocco. Questo consente anche di avere un grado di vuoto costante nel blocco.

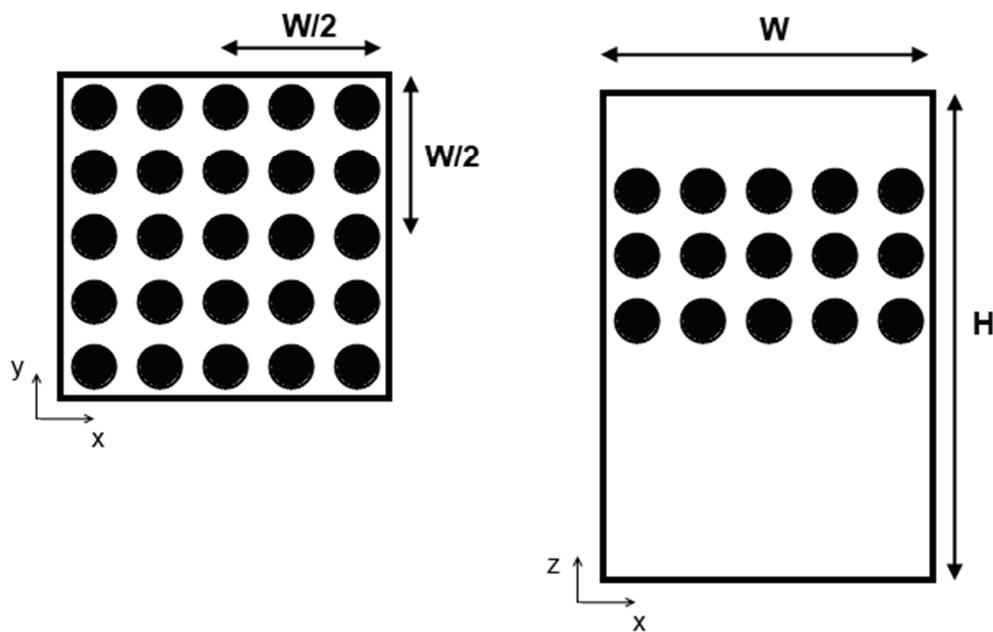


Fig. 4.3 – disposizione iniziale delle particelle per il blocco a porosità costante.

Per realizzare questa condizione, nella concezione fisica, dovrebbe esistere un campo di forze in grado di mantenere costante la distanza tra le particelle; nella simulazione questa condizione è stata realizzata ripartendo equamente su ogni particella la forza totale agente sull'intero blocco. Essendo l'accelerazione uguale su ogni particella, saranno uguali le velocità e quindi gli spostamenti. Questo genera un effetto per il quale il moto di ogni particella sarà uguale. In questo caso per il calcolo della forza di drag sarà usato il modello di Di Felice-Dallavalle, equazioni 2.76-79.

A differenza del caso precedente, qui la presenza delle particelle solide ha una forte influenza sulla dinamica del moto delle particelle, sia solide che di fluido. Il

calcolo del grado di vuoto è affidato alla simulazione, attraverso l'impiego dell'equazione 2.29 e quindi della funzione kernel.

Per la verifica dei risultati della simulazione è stato impiegato un bilancio di forze: utilizzando il modello di drag dato dalle equazioni Di Felice – Dallavalle.

$$(\rho_p - \rho_{av})V_p g = \frac{1}{8} \varepsilon^{-\xi} \pi d_p^2 v_\infty^2 \left[0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_p}} \right]^2 \quad (4.2)$$

dove v_∞ è la velocità relativa fluido-particella e

$$\rho_{av} = \varepsilon \rho_f + (1 - \varepsilon) \rho_p \quad (4.3)$$

L'equazione che si ottiene è la seguente:

$$0.392 Re_p^2 + 6.048 Re_p^{1.5} + 23.04 Re_p - \frac{4}{3} Ar \varepsilon^{1+\xi} = 0 \quad (4.4)$$

Risolviendo numericamente l'equazione 3.4 si ottiene la velocità terminale del blocco.

4.6 – Sedimentazione blocco di porosità costante: caso bidisperso

Nel caso di blocco bidisperso, il blocco è costituito da due tipi di particelle con diametro $d_{p_{small}}$ e $d_{p_{BIG}}$.

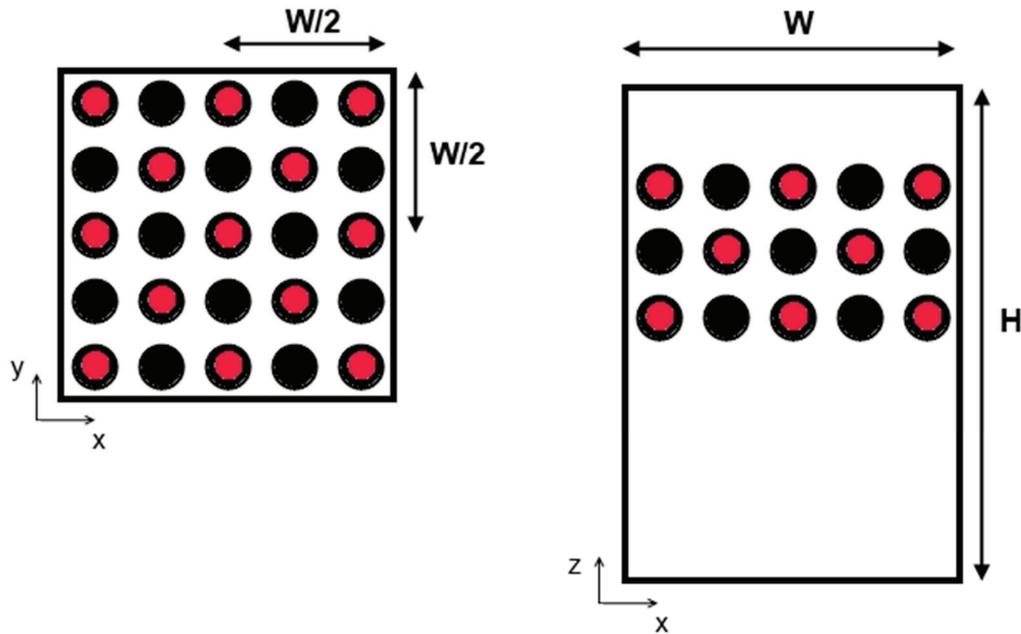


Fig. 4.5 – Blocco bidisperso: in rosso particelle di diametro $d_{p_{small}}$, in nero le particelle con $d_{p_{BIG}}$.

La procedura è del tutto uguale al blocco di porosità costante del paragrafo precedente, tuttavia in questo caso il diametro delle particelle non è più una costante del sistema ma diventa una proprietà di ciascuna particella. Allo stesso tempo per l'implementazione del modello di drag al paragrafo 3.4 è necessario definire il calcolo della composizione locale del sistema dato dall'indice di polidispersione, equazione 2.81.

Seguendo la stessa procedura utilizzata al paragrafo 4.5 per la determinazione della velocità terminale del blocco monodisperso, è stata ricavata l'espressione della velocità terminale per il blocco bidisperso:

$$u_T = \frac{\rho g \langle d \rangle^2}{18\mu \left[\frac{f_{mono}}{\varepsilon} + \frac{\Sigma - 1}{\varepsilon^2} \right]} \quad (4.5)$$

dove f_{mono} è dato dell'equazione 1.85 e $\Sigma = \frac{x_1}{y_1^2} + \frac{x_2}{y_2^2}$.

4.7 - Sedimentazione di una sospensione

Nella terza tipologia di simulazioni il sistema è inizializzato come una sospensione omogenea di particelle di porosità costante. I test case considerati sono due: sospensione monodispersa e sospensione bidispersa.

Le particelle solide sedimenteranno costituendo uno strato di particelle depositate mentre l'altezza della sospensione si abbassa, lasciando al di sopra di essa uno strato di liquido chiarificato.

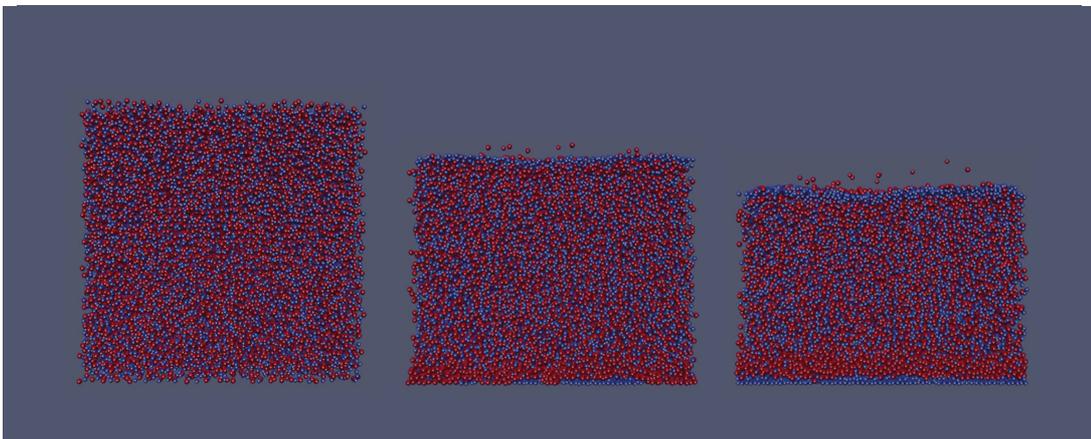


Fig. 4.6 – sedimentazione della sospensione di solido bidisperso: screenshot di tre istanti di tempo diversi.

Per creare la sospensione omogenea l'intero sistema è stato inizializzato come un blocco di porosità costante. All'inizio della simulazione le particelle solide sono mantenute nelle loro posizioni ed al fluido è lasciato il tempo per raggiungere l'equilibrio idrodinamico. Ad un certo istante viene assegnata una velocità casuale alle particelle solide, viene impostata pari a zero la forza di gravità e vengono rilasciate le particelle; dopo un certo numero di intervalli di integrazione, la posizione delle particelle viene fissata nuovamente, il fluido raggiunge nuovamente l'equilibrio dopodiché le particelle sono nuovamente rilasciate e sedimenteranno sotto l'effetto della gravità che è stata posta nuovamente pari a 9.81 m/s^2 : questo istante corrisponderà al tempo $t = 0 \text{ s}$.

Questo metodo è inefficiente, perché una grossa parte del tempo di calcolo per la simulazione (4-7 giorni), circa 1/5 è destinato all'inizializzazione della sospen-

sione. Tuttavia non è stato possibile usare altre tecniche per creare una sospensione omogenea, senza incorrere in instabilità numerica ed avere strani comportamenti delle particelle SPH: questo è dovuto soprattutto alle caratteristiche tecniche del software, che sono ancora limitate.

Per la validazione dei test case di sedimentazione è stata utilizzata la teoria di Kynch (1952) che lega l'altezza z dell'interfaccia sospensione-liquido chiarificato, e la velocità terminale v_∞ delle particelle nella sospensione:

$$\frac{dz}{dt} = v_\infty \quad (4.6)$$

Capitolo 5

Risultati e validazione del metodo

I test case Sedimentazione di singola particella (Single Particle Sedimentation – SPS) e Blocco di porosità costante (Constant Porosity Block –CPB) sono stati usati per verificare la corretta implementazione del metodo e per effettuare una calibrazione dei parametri delle simulazioni.

Simulazioni SPH-DEM relative a questi sistemi sono già state effettuate da Robinson et al. (2013).

Robinson et al. non hanno investigato come variano i risultati per differenti parametri quali l'h-factor, ovvero il parametro k (paragrafo 2.6), e la viscosità artificiale. L'influenza di questi parametri sul risultato finale è stata considerata per il test case SPS. I risultati di questo test case e degli altri illustrati nel Capitolo 4, sono riportati di seguito. È stata effettuata una validazione del metodo utilizzando predizioni di modelli teorici è stata effettuata caso per caso.

5.1 – Sedimentazione di singola particella

Per il primo test case sono stati utilizzati i seguenti parametri:

Tab. 5.1 – Dati della simulazione.

Dimensioni della colonna	$W \times W \times H$	4 x 4 x 6 mm
Densità del fluido	ρ_f	1000 kg/m ³
Viscosità	μ	8.9e-4 Pa s
Densità del solido	ρ_p	2500 kg/m ³
Diametro delle particelle	d	100 μ m
Costante elastica (LSD)	k	10 kg/s ²
Costante dissipazione (LSD)	β	0 kg/s

Una prima serie di simulazioni sono state utilizzate per la calibrazione dei parametri; di seguito sono riportate le diverse curve velocità contro numeri di passi nel tempo.

In questa fase, si sta indagando sull'influenza dei parametri numerici α ed h sul risultato finale; si è scelto quindi di basare lo studio considerando in ascissa il numero di istanti di tempo anziché una grandezza fisica come il tempo.

È bene osservare che la forma della curva è influenzata fortemente dai parametri della simulazione.

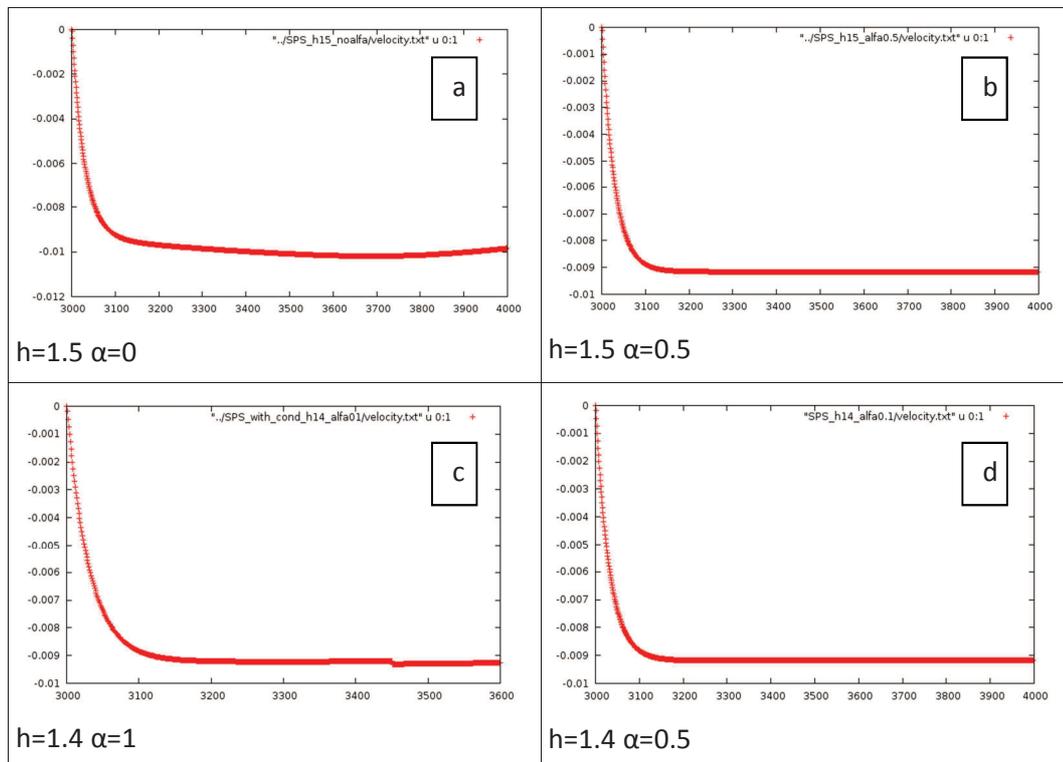


Fig. 5.1 – Grafici velocità particella DEM contro numero di intervalli di integrazione per diversi parametri del sistema.

Sono state riportate solo alcune delle curve ottenute, per dimostrare che la viscosità artificiale influenza non solo il valore della velocità terminale ma anche la forma della curva: si osservi l'overshoot della figura 5.1(a) e le oscillazioni che si hanno in figura 5.1(c), nell'intervallo 3400 e 3600.

Il set di parametri che consente di ottenere il minimo errore è $h = 1.5$ e $\alpha = 0.5$.

Questi parametri saranno mantenuti costanti per tutte le simulazioni.

5.1.1 - Velocità terminale – SPS

Come risultato della simulazione, è riportato il grafico velocità della particella solida contro il tempo adimensionale t/t_d , t_d essendo il tempo di rilassamento tra fluido e particella, che compare nell'equazione 4.1.

La risoluzione del fluido è posta pari a $h/d = 2$: questo sta a significare che una particella di fluido, SPH, avrà diametro doppio rispetto ad una particella solida DEM.

Altri tempi caratteristici del processo sono stati introdotti dalle equazioni 3.6 (t_c) e 3.4 (t_f) e per questa simulazione assumono i seguenti valori:

Tab. 5.2 – Tempi caratteristici della simulazione.

Tempo di contatto	t_c	$2.54 \times 10^{-5} \text{ s}$
Condizione di CFL	t_f	$1.97 - 7.87 \times 10^{-5} \text{ s}$

Nel grafico seguente, i punti segnati da una [X] sono i risultati della simulazione, mentre la linea in rosso è data dall'equazione 4.1.

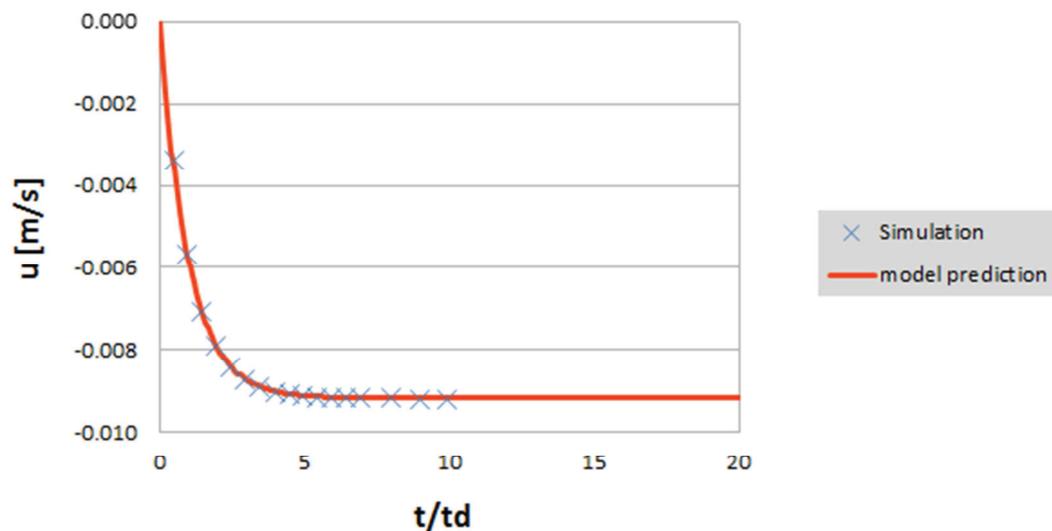


Fig. 5.2 – Confronto tra i dati della simulazione e la legge di Stokes.

L'accelerazione sulla particella solida, dovuta all'azione del fluido, contro il tempo adimensionale t/t_d , è riportata nel grafico seguente.

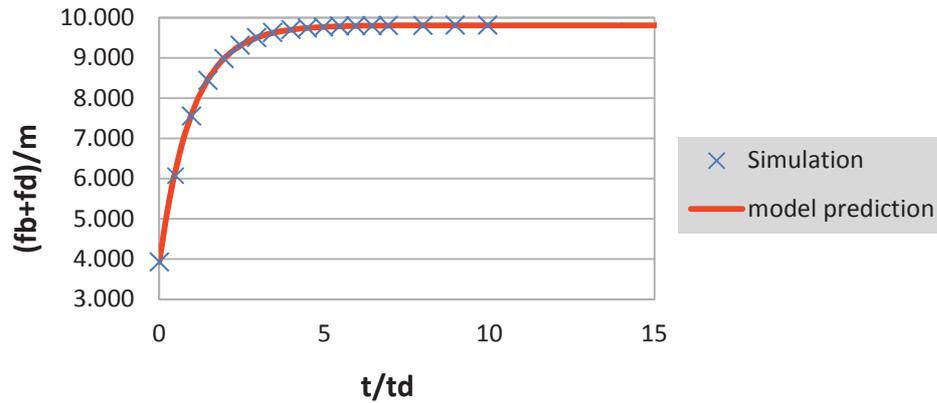


Fig. 5.3 – Accelerazione dovuta alla forza di galleggiamento e di drag: confronto dei risultati.

Si può osservare un ottimo accordo tra le predizioni del modello ed i risultati delle simulazioni. Una stima dell'errore sarà data nel paragrafo seguente.

5.1.2 - Influenza della risoluzione del fluido

Uno dei parametri della simulazione da tenere in considerazione è la risoluzione del fluido h/d , la quale ha un'influenza diretta sulla determinazione del grado di vuoto; quest'ultimo entra direttamente in gioco nell'equazione AVNS (equazione 2.32).

Di seguito sono riportati in un grafico l'errore percentuale, inteso come:

$$|\%ERR| = \left| \frac{v_{\infty\text{modello}} - v_{\infty\text{simulazione}}}{v_{\infty\text{modello}}} \right| \cdot 100 \quad (5.1)$$

contro la risoluzione del fluido.

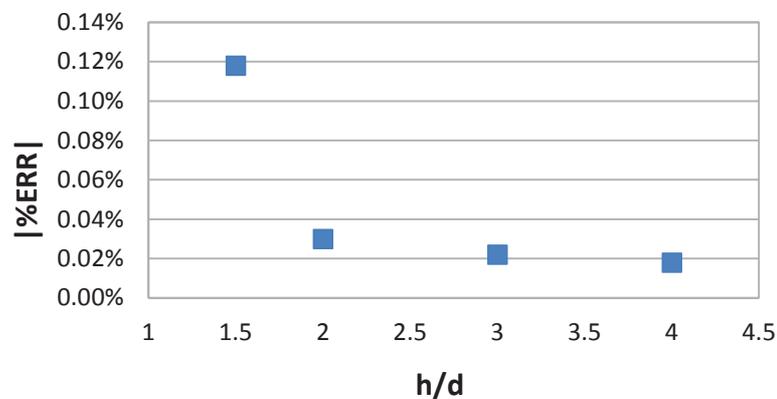


Fig. 5.4 – Andamento dell'errore percentuale contro il parametro di risoluzione h/d

5.2 – Blocco a porosità costante: caso monodisperso

In questo caso il blocco è costituito da particelle con diametro $d = 100 \mu\text{m}$. Le particelle DEM sono disposte su una griglia equispaziata come illustrato nel capitolo precedente (fig. 4.5).

La spaziatura tra una particella dipende dal grado di vuoto del blocco. Per una risoluzione $h/d = 2$ si ha un sistema di dimensioni $0.004 \times 0.004 \times 0.006$ m. Il numero di particelle SPH per lato è rispettivamente: $20 \times 20 \times 30$. Quindi la dimensione delle particelle SPH è data da $0.004 \text{ mm} / 20$ pari a $200 \mu\text{m}$, mentre le particelle DEM hanno diametro $100 \mu\text{m}$. Quindi la risoluzione secondo il rapporto h/d è pari a 2.

La tabella seguente riassume i parametri della simulazione:

Tabella 5.3 – Dati della simulazione.

Dimensioni della colonna	L x W x H	4 x 4 x 6 mm
Densità del fluido	ρ_f	1000 kg/m ³
Viscosità	μ	8.9×10^{-4} Pa s
Densità del solido	ρ_p	2500 kg/m ³
Diametro delle particelle	d_p	100 μm
Porosità del blocco	eps	0.807
Costante elastica (LSD)	k	10 kg/s ²
Costante dissipazione (LSD)	β	0 kg/s
Risoluzione del fluido	h/d	2
SPH h-factor	σ	1.5
Viscosità artificiale	α	0.1

Elaborando i risultati della simulazione è stato prodotto il seguente grafico della velocità del blocco contro il tempo t [s].

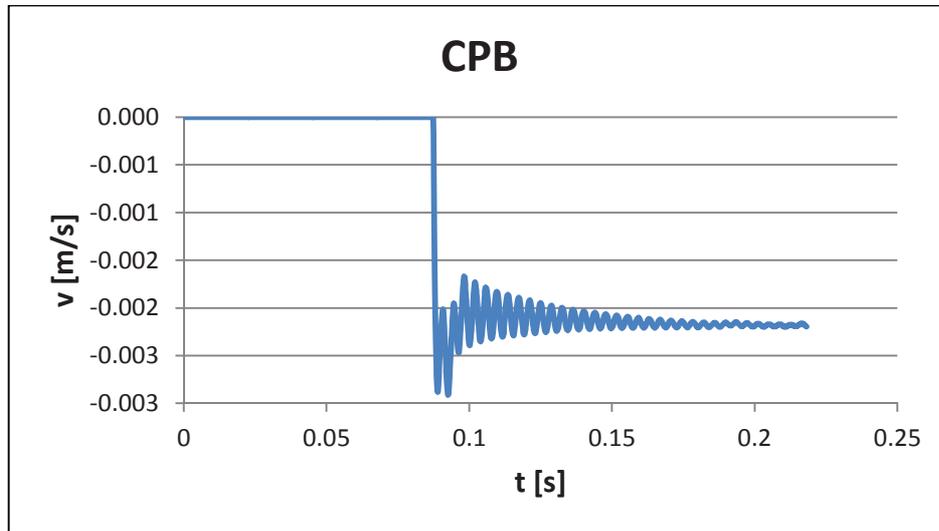


Fig. 5.5 – Velocità del blocco di porosità 0.807 contro il tempo. Il liquido ha risoluzione $h/d = 2$.

Il blocco di particelle, durante la sua caduta, induce il moto del fluido all'interno della colonna. Nel grafico seguente sono riportati i vettori di velocità del fluido per due diversi istanti di tempo durante la caduta del blocco.

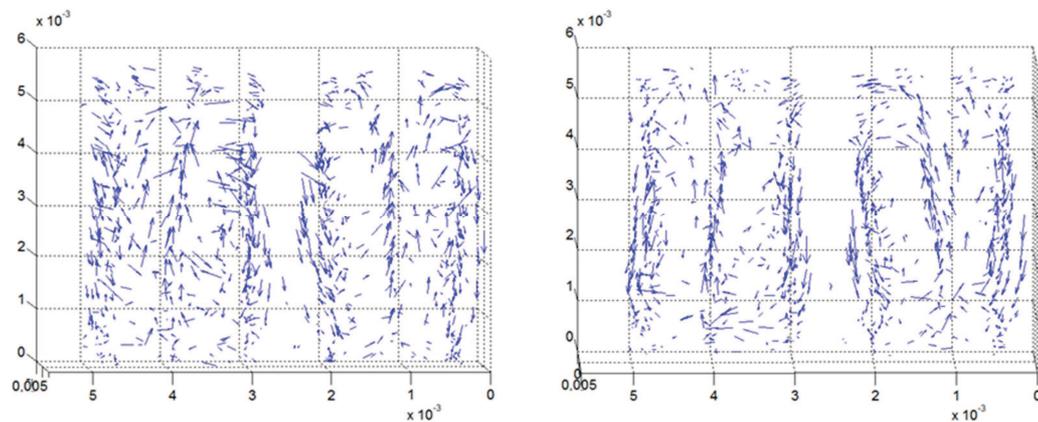


Fig. 5.6 – vettori velocità del fluido all'interno della colonna per due istanti durante la caduta del blocco.

Da questo risultato si evince che in realtà il fluido non si trova in quiete, è solo “mediamente” fermo. Il termine di velocità all'interno del modello dell'equazione 4.2 è una velocità relativa che corrisponde alla velocità delle par-

ticelle solide solo nel caso in cui il fluido sia in quiete. In questo caso bisogna tener conto della velocità relativa tra fluido e solido.

La soluzione analitica andrà comparata con la velocità relativa “media” fluido-particella. Occorre mediare la velocità relativa fluido-solido in quanto essa non è costante ma dipende dalla posizione delle particelle solide nel blocco.

Le fluttuazioni nella velocità del blocco sono dovute al fatto che il fluido si trova in un volume confinato ed il moto del blocco influenza il moto del fluido provocando dei vortici di cui si è già parlato nel paragrafo 4.5.

Un ulteriore risultato di questa simulazione è il grado di vuoto all’interno del sistema: il grado di vuoto è calcolato utilizzando l’equazione 2.50. È possibile notare l’introduzione di un certo grado di smoothing, essendo il blocco essendo a porosità costante, la corretta rappresentazione del grado di vuoto contro l’altezza z è quella data dalla linea verde nel grafico seguente.

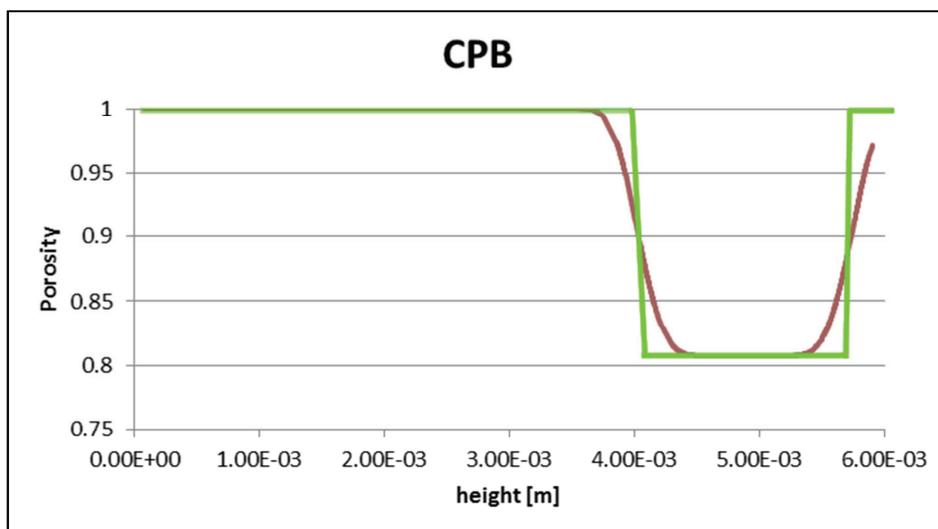


Fig. 5.7 – Confronto tra il grado di vuoto reale lungo l’altezza della colonna (in verde) e il risultato dovuto all’approssimazione kernel (in rosso).

L’andamento del grado di vuoto contro l’altezza della colonna per un blocco a porosità pari a 0.9 è riportato nel grafico seguente. Tutti gli altri parametri sono imposti uguali alla simulazione precedente.

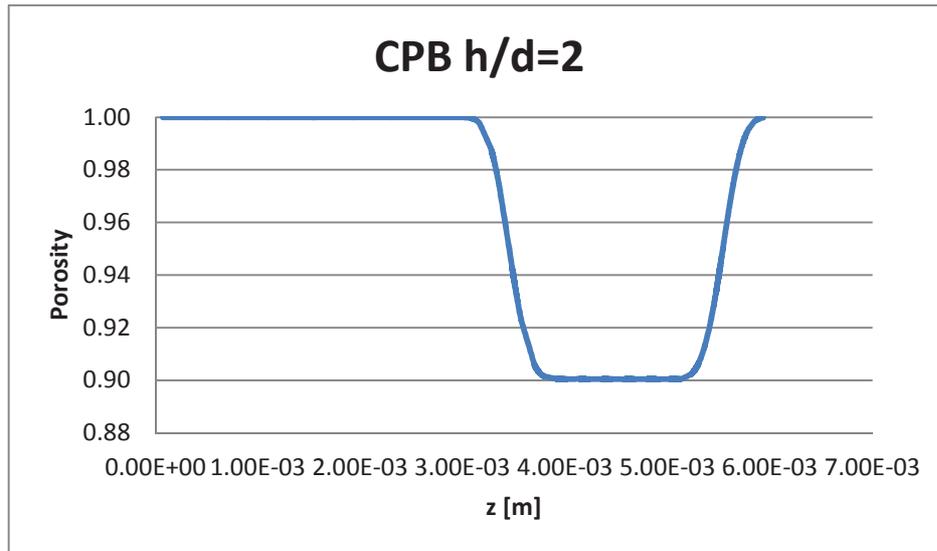


Fig. 5.8 – Grado di vuoto contro l'altezza della colonna: risultato della simulazione di sedimentazione del blocco di porosità 0.9.

5.2.1 - Confronto con la velocità relativa fluido particella

Secondo quanto riportato nel paragrafo 4.5, il confronto tra predizioni del modello e risultato delle simulazioni in termini di velocità terminale va operato considerando per le simulazioni la velocità relativa fluido-particella. Quest'ultima è una quantità locale. Per ottenere ulteriori informazione relative al contatto fluido-particella sono stati riportati i seguenti grafici:

- Valore di ε locale contro il tempo;
- Numero di Reynolds locale contro tempo;
- Accelerazione dovuta all'azione del fluido contro il tempo;
- Velocità relativa fluido-particella contro il tempo;
- Velocità assoluta della particella DEM contro il tempo;
- Forza di drag locale contro il tempo;
- Accelerazione idrostatica $(-\nabla P + \nabla \cdot \tau)/\text{massa particella}$ contro il tempo.

Essendo questi valori locali relativi alle particelle, sono state scelte particelle posizionate in 4 diversi punti del blocco: una sul bordo del blocco (*edge*) e tre all'interno del blocco (*bulk*).

I grafici sono relativi alla simulazione CPB con grado di vuoto 0.9 e risoluzione del fluido $h/d=2$.

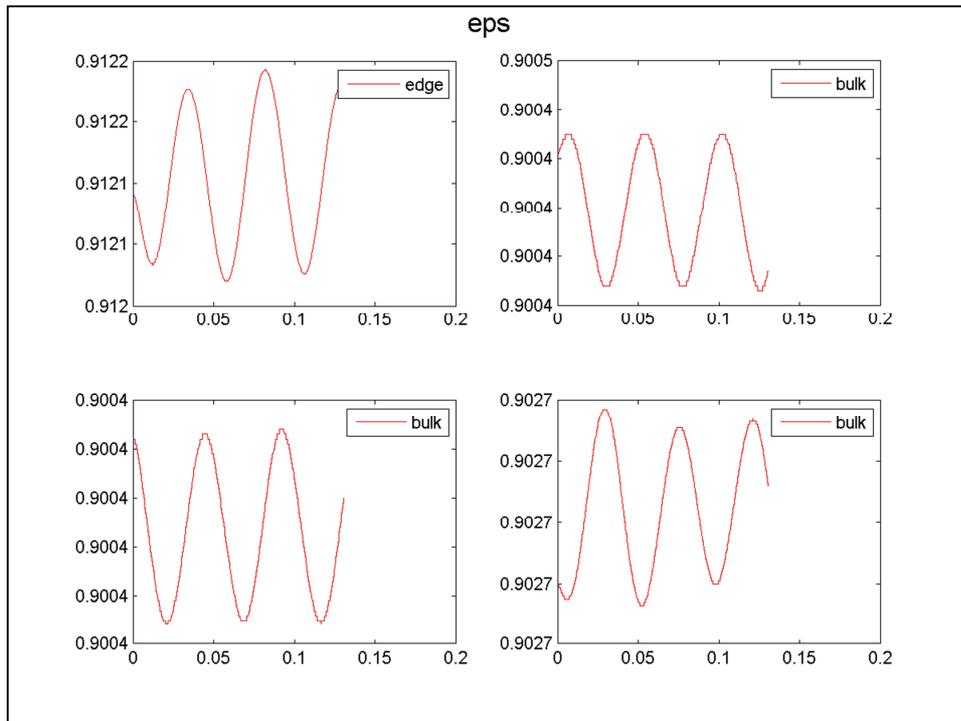


Fig. 5.9 – Grado di vuoto locale per diversi punti del blocco: 3 interni (bulk) ed uno esterno (edge). Il liquido ha risoluzione $h/d = 2$.

Il grado di vuoto calcolato nell'intorno delle 4 particelle DEM risulta essere molto vicino al grado di vuoto del blocco. Uno scostamento di circa il 10% si ha in corrispondenza del bordo (*edge*).

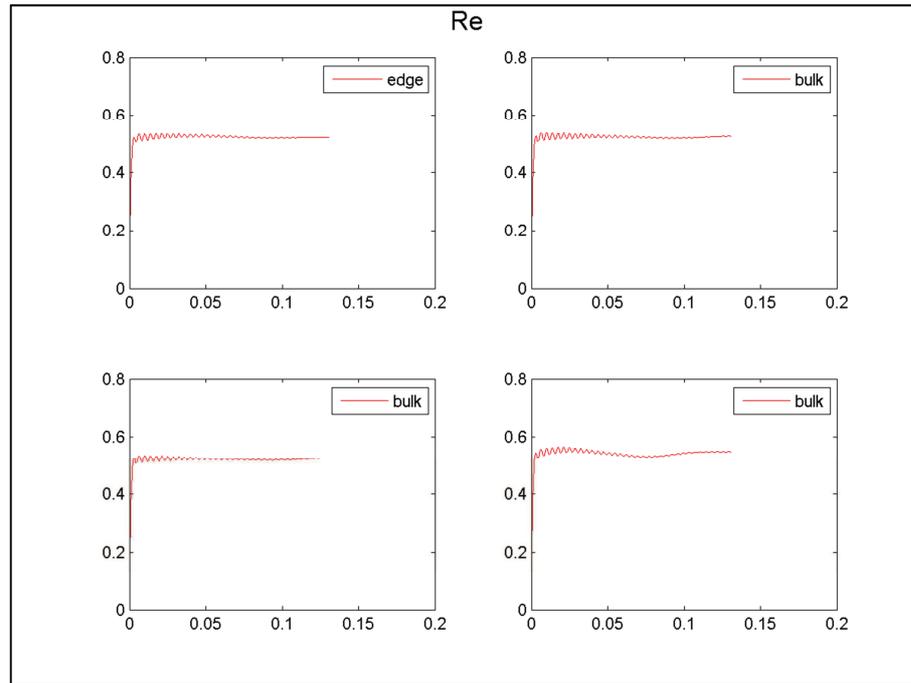


Fig. 5.10 – Grado di vuoto locale per diversi punti del blocco: 3 interni (bulk) ed uno esterno (edge). Il liquido ha risoluzione $h/d = 2$.

La retta di colore verde rappresentata nei grafici *total accel vs t* rappresenta l'accelerazione di gravità: all'equilibrio l'accelerazione dovuta al fluido e l'accelerazione di gravità devono essere uguali.

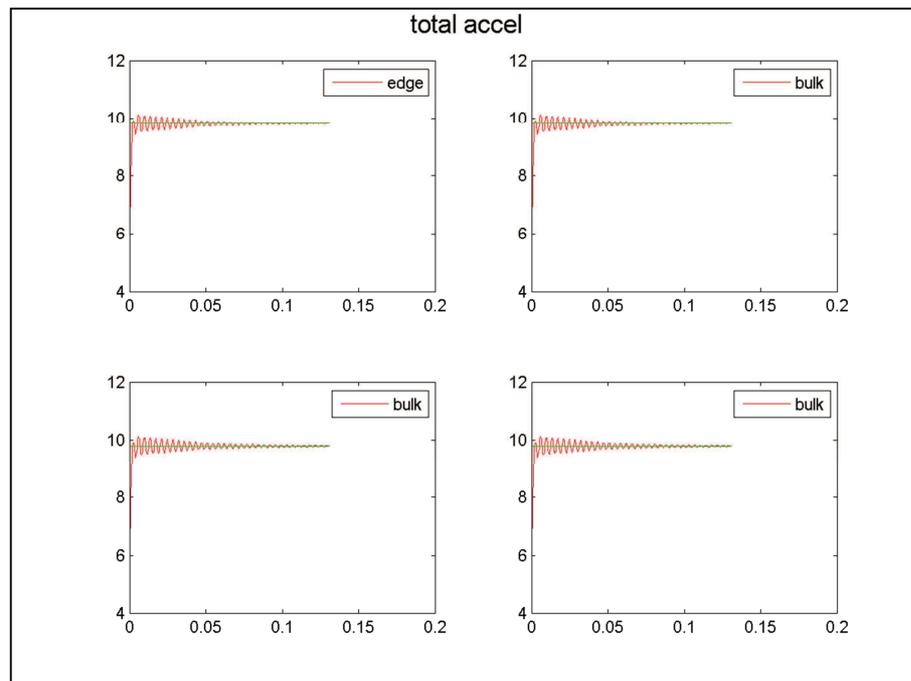


Fig. 5.11 – Accelerazione dovuta all'azione del fluido: questa è pari all'accelerazione di gravità quando il blocco raggiunge la velocità terminale.

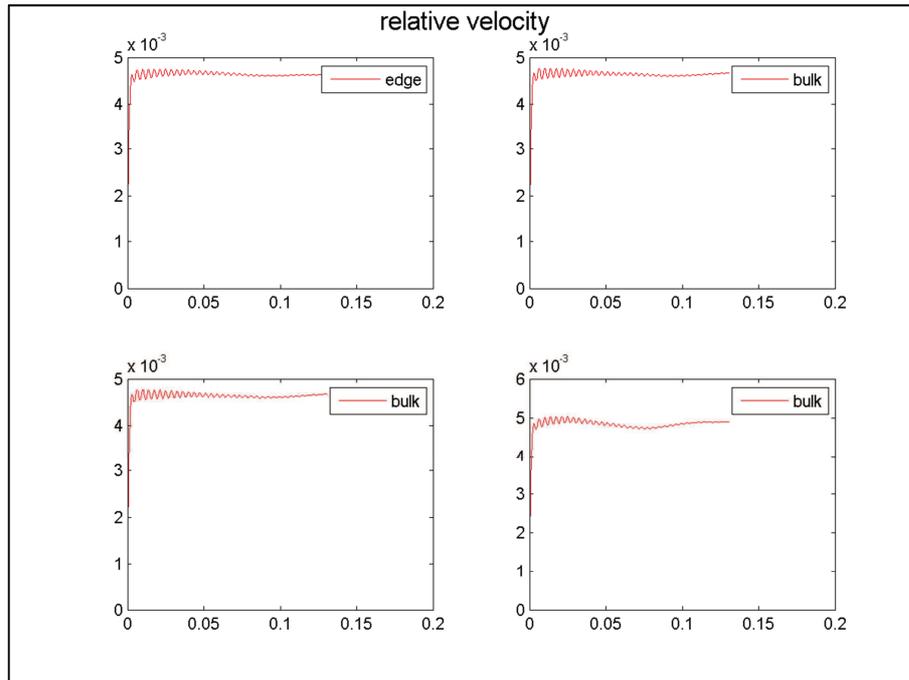


Fig. 5.12 – Velocità relativa fluido-particella in diversi punti del blocco.

Il grafico della velocità relativa va confrontato con quello della velocità assoluta. Se il fluido si trovasse in quiete, i due valori coinciderebbero. Il risultato di questa analisi dimostra che la velocità relativa fluido-particella è diversa dalla velocità assoluta.

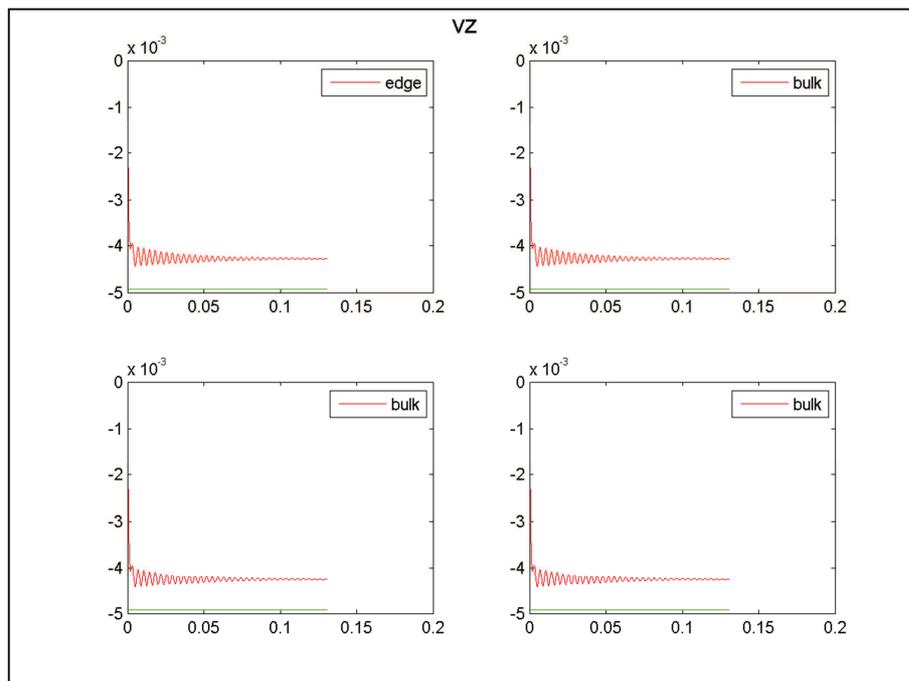


Fig. 5.13 – Velocità assoluta delle particelle in diversi punti del blocco: le quattro curve sono identiche in quanto tutte le particelle del blocco si muovono in modo solidale.

Nei grafici precedenti è presente una linea verde che rappresenta il valore di velocità terminale predetto dalla 4.4 è $v_{\infty} = 0.004924 \text{ m/s}$.

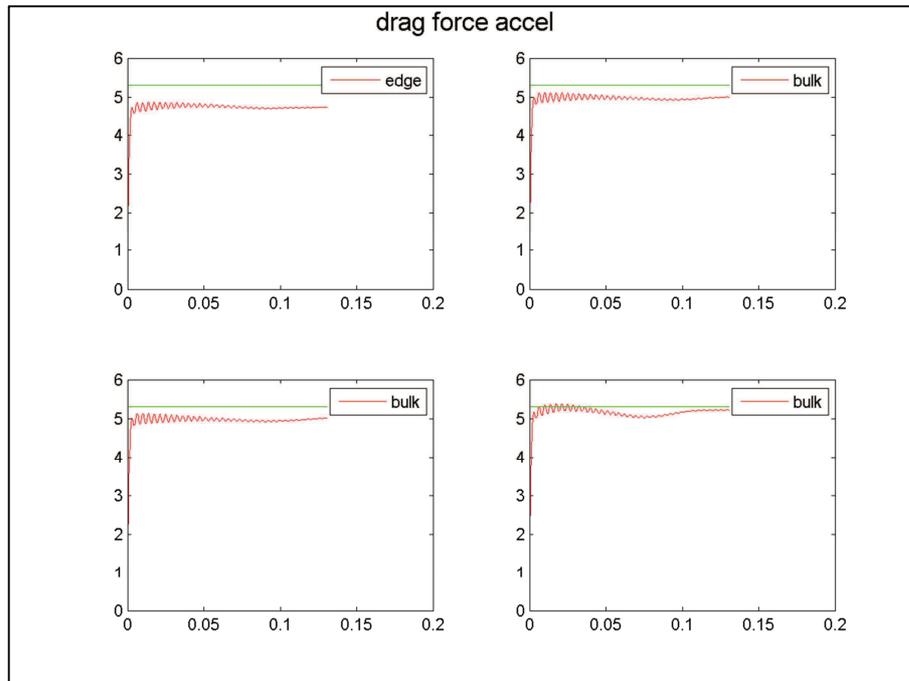


Fig. 5.14 – Forza di drag locale; le linee di colore verde rappresentano il valore di forza di drag calcolato con la relazione di Di Felice-Dallavalle.

È possibile predire anche la forza di drag che il fluido eserciterà in condizioni di equilibrio. Questo valore è riportato nel grafico precedente con una linea verde.

Nel grafico seguente, è riportato il contributo idrostatico all'accelerazione:

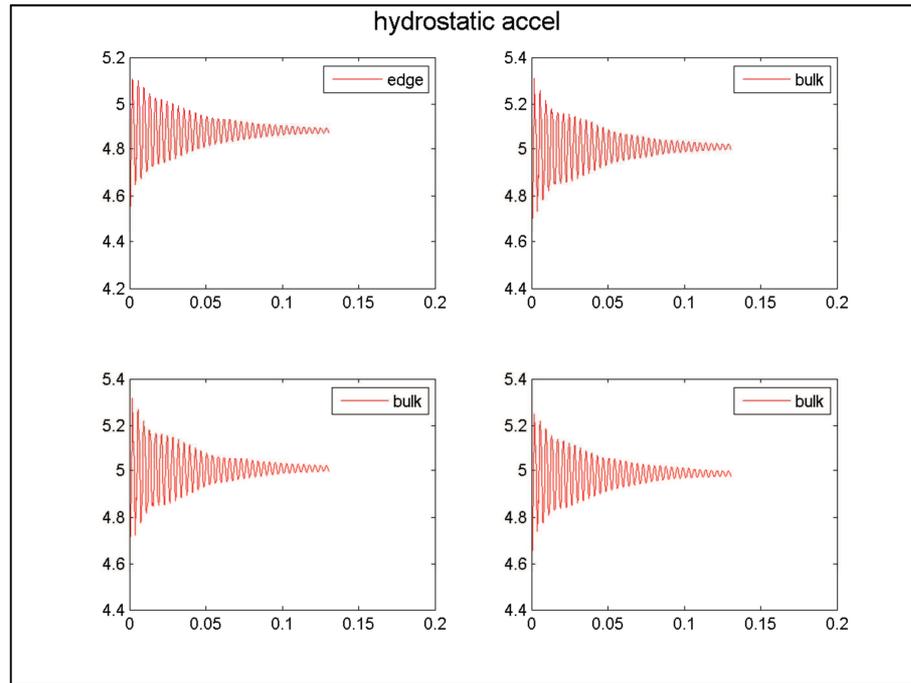


Fig. 5.15 – Accelerazione dovuta al contributo $-\nabla P + \nabla \cdot \tau$; sono riportati i grafici per quattro punti diversi del blocco.

La velocità relativa fluido-particella è stata riportata in funzione del tempo adimensionale t/t_f dove t_f è il tempo finale della simulazione. La linea verde è il valore di velocità terminale ottenuto con l'equazione 4.4.

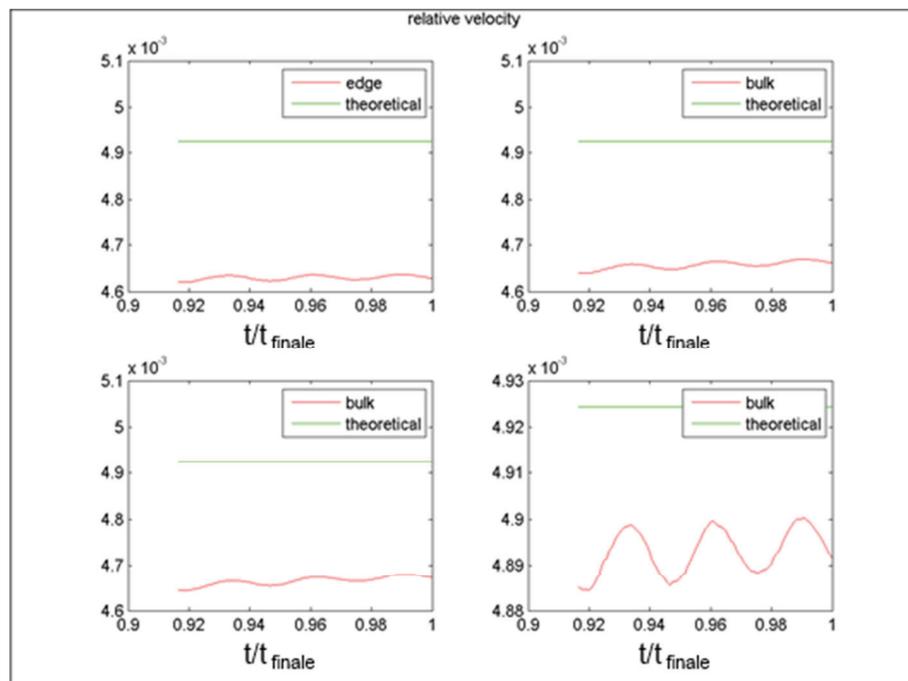


Fig. 5.16 – Velocità relativa terminale del blocco di porosità 0.9. La risoluzione del fluido è $h/d = 2$; le linee di colore verde rappresentano il valore di velocità calcolato con l'eq. 4.4.

La stessa analisi è stata applicata al caso $h/d = 6$. In questo caso, per avere un diametro delle particelle SPH pari a $600 \mu m$, è stato necessario modificare le dimensioni della colonna, poste a $5.4 \times 5.4 \times 6.0$ mm. Pertanto il numero di particelle SPH nelle tre direzioni $9 \times 9 \times 10$.

I risultati per il caso $h/d = 6$ non hanno dato informazioni aggiuntive, quindi si è scelto di riportare soltanto i risultati relativi alla velocità terminale contro il tempo adimensionale t/t_f .

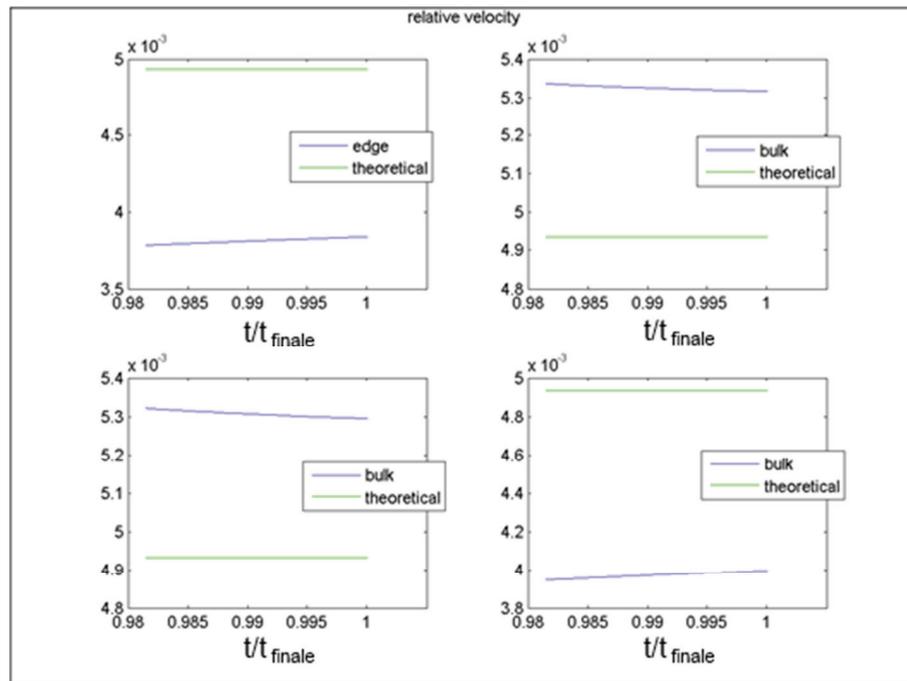


Fig. 5.17 – Velocità relativa terminale del blocco di porosità 0.9. La risoluzione del fluido è $h/d = 6$; le linee di colore verde rappresentano il valore di velocità calcolato con l’eq. 4.4.

Usando la velocità relativa per il confronto con i risultati del modello si hanno i seguenti valori:

$h/d = 2$	$h/d = 6$
$ \%ERR = 4.3\%$	$ \%ERR = 14.0\%$

Sono state ottenute diverse simulazioni ed è stato ottenuto un andamento dell’errore contro la risoluzione del fluido è stato ottenuto. I sistemi simulati hanno grado di vuoto pari a 0.9 e 0.8.

Per ottenere le diverse risoluzioni del fluido, sono state modificate le dimensioni della colonna caso per caso. Per definire la distanza tra le particelle DEM che costituiscono il blocco di porosità costante, si utilizza la seguente equazione:

$$\Delta r = \left(\frac{V_p}{1 - \varepsilon} \right)^{1/3} \quad (5.2)$$

dove V_p è il diametro della singola particella ed ε il grado di vuoto del blocco. Si suddivide così il volume occupato dal blocco in modo da ottenere un numero intero di particelle DEM. Modificando le dimensioni della colonna si ottiene un numero di particelle diverso, quindi gradi di vuoto che si discostano leggermente da 0.9 o 0.8.

I valori di grado di vuoto per le diverse simulazioni sono riportati in tabella:

Tab. 5.4 – Gradi di vuoto del blocco per le diverse risoluzioni del fluido.

Blocco di porosità 0.9		Blocco di porosità 0.8	
h/d	ε	h/d	ε
1.5	0.8990	2	0.8006
2	0.9005	3	0.8093
3	0.9023	4	0.8006
4	0.9005	6	0.7936
6	0.9009		

I risultati per i diversi casi sono riassunti nel seguente grafico che riporta l'errore percentuale contro la risoluzione del fluido. Il primo grafico è relativo al blocco con grado di vuoto 0.9.

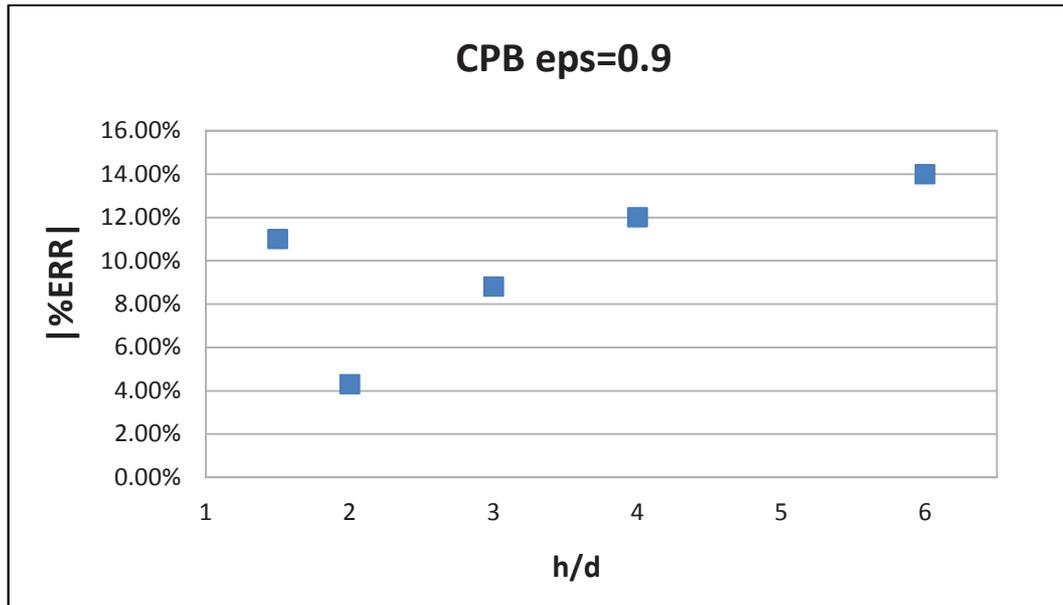


Fig. 5.18 – Andamento dell'errore contro la risoluzione del fluido h/d nel caso del blocco di porosità 0.9.

In Fig. 5.19 è riportato l'andamento dell'errore percentuale contro la risoluzione h/d per il blocco di porosità 0.8.

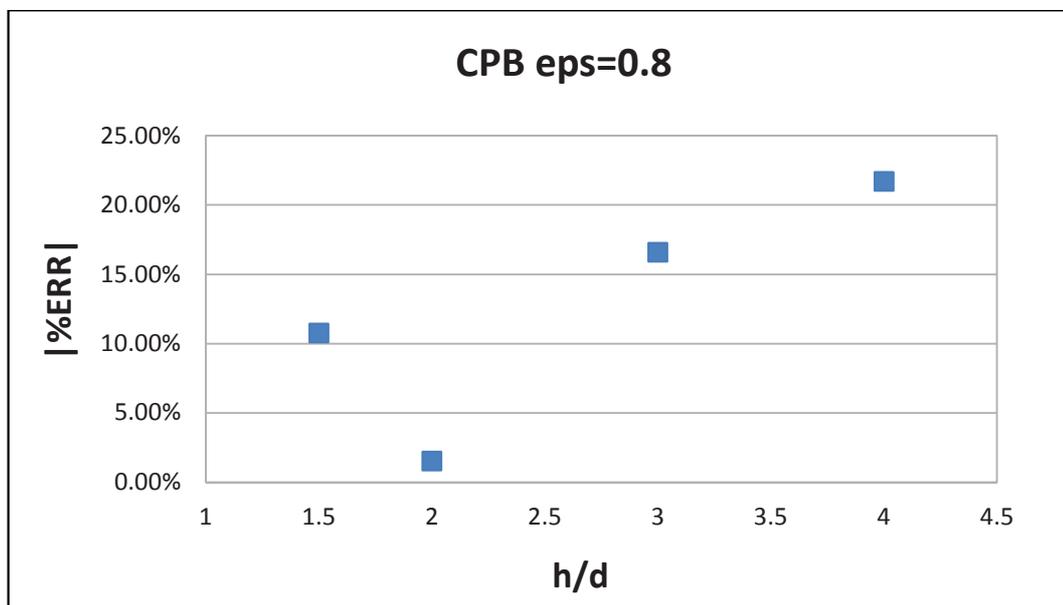


Fig. 5.19 – Andamento dell'errore contro la risoluzione del fluido h/d nel caso del blocco di porosità 0.8.

In entrambi i casi si ottiene un andamento dell'errore non monotono, con un minimo in corrispondenza della risoluzione $\frac{h}{d} = 2$. Questo stabilisce l'importante risultato che per sistemi monodispersi è possibile minimizzare l'errore commesso dal metodo impostando una dimensione delle particelle SPH pari a due volte la dimensione delle particelle di solido DEM.

5.3 – Blocco a porosità costante: caso bidisperso

Il blocco a porosità costante bidisperso è costituito da due tipi di particelle che hanno diametro diverso. La metà delle particelle totali è di tipo 1, di diametro maggiore, mentre le altre sono di tipo 2, di diametro minore.

Dal paragrafo precedente è evidente come per un sistema monodisperso l'errore commesso dal metodo SPH-DEM possa essere minimizzato utilizzando una risoluzione del fluido pari a $\frac{h}{d} = 2$. Quando nel sistema sono presenti particelle con diametri diversi si hanno i problemi esposti nel paragrafo 3.4.

Sono riportati i risultati ed il confronto tra il metodo classico di smoothing ed il metodo di doppio smoothing proposto in questo lavoro di Tesi. Le prime due simulazioni riguardano un blocco di porosità 0.9 con diametri delle particelle $d_{p1} = 150 \mu m$ e $d_{p2} = 100 \mu m$. In questa prima simulazione è stato impiegato il metodo classico con risoluzione del fluido pari a $h = 2d_{p1}$.

Tab. 5.5 – Dati della simulazione.

Risoluzione del fluido	h/d_{p1}	2
Porosità del blocco	Eps	0.900
Diametro delle particelle 1	d_{p1}	150 μm
Diametro delle particelle 2	d_{p2}	100 μm

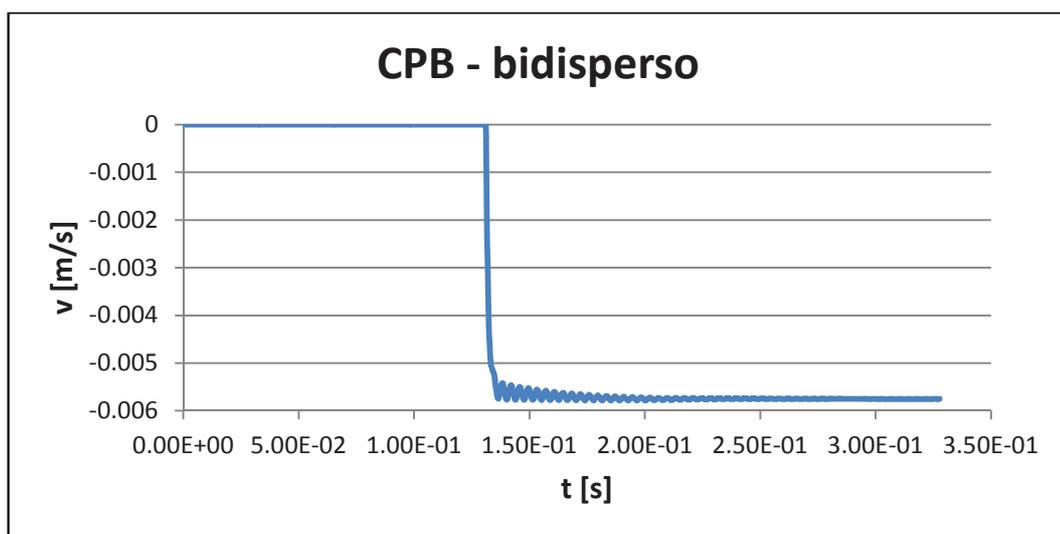


Fig. 5.20 – Velocità del blocco contro il tempo.

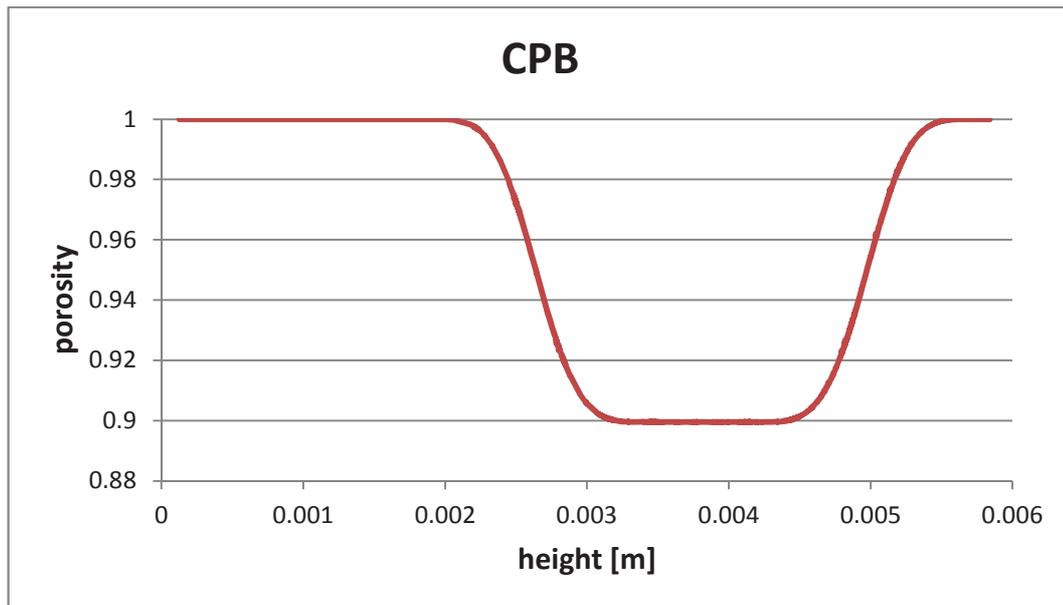


Fig. 5.21 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

Nella simulazione seguente è stato impiegato il metodo di doppio smoothing: la risoluzione del fluido è pari a $h = 2d_{p2}$ ma il calcolo del grado di vuoto segue la procedura illustrata al paragrafo 3.4. I dati della simulazione sono riportati in tabella.

Tab. 5.6 – Dati della simulazione.

Risoluzione del fluido	h/d_{p2}	2
Porosità del blocco	Eps	0.901
Diametro delle particelle 1	d_{p1}	150 μm
Diametro delle particelle 2	d_{p2}	100 μm

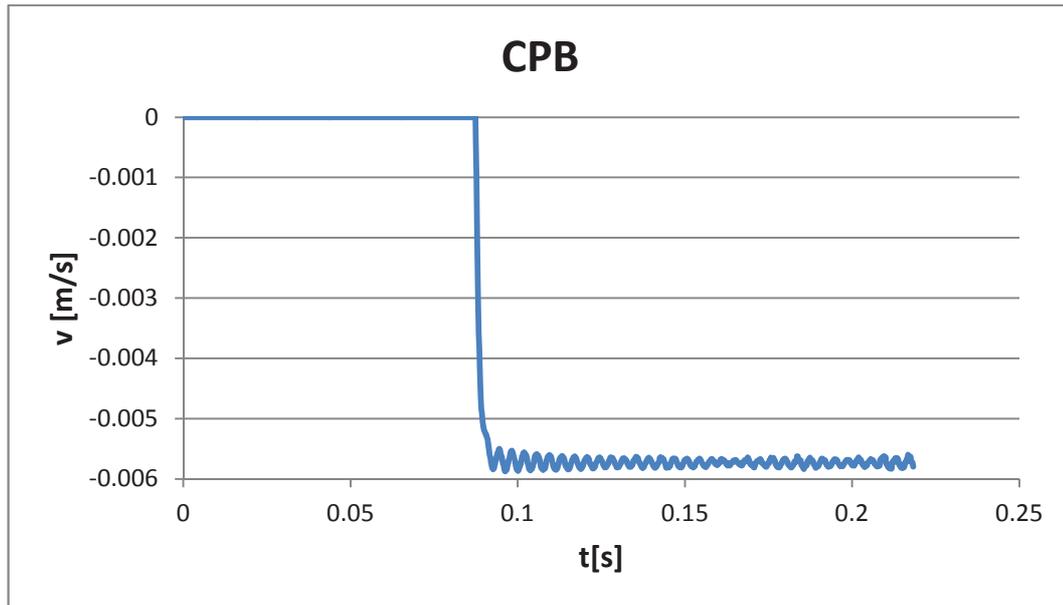


Fig. 5.22 – Velocità del blocco contro il tempo.

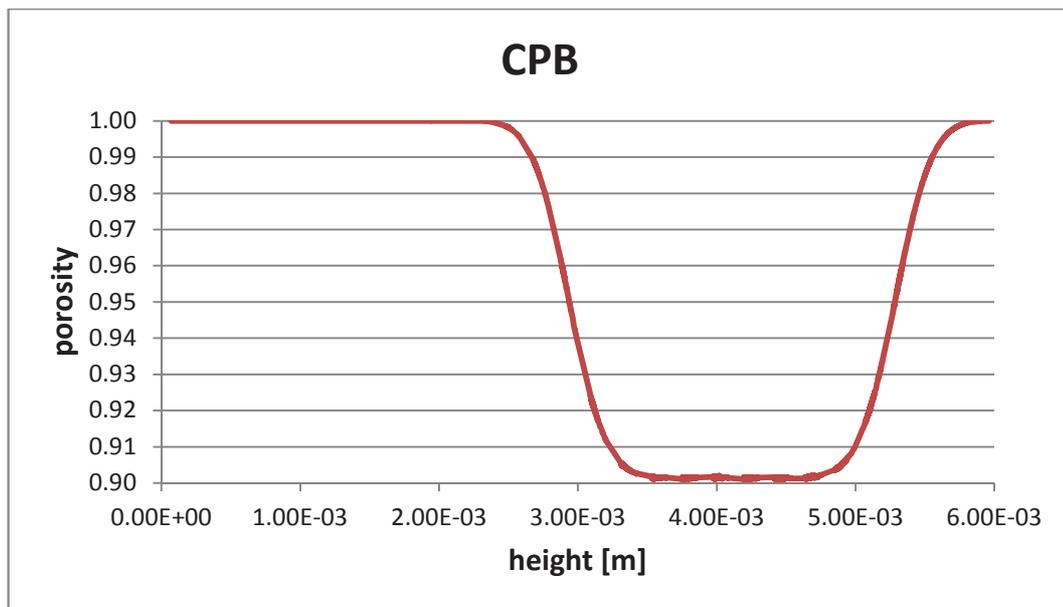


Fig. 5.23 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

Confrontando i grafici in Fig. 5.21 e 5.23 della porosità contro l'altezza della colonna e quelli della velocità del blocco contro il tempo per i due casi precedenti, si ottengono risultati del tutto simili. Il confronto dei risultati della simulazione operata con il nuovo metodo con quelli ottenuti con un metodo già impiegato diverse volte, ha consentito di verificare la corretta implementazione.

Per un secondo blocco, con $d_{p1} = 200 \mu\text{m}$ e $d_{p2} = 100 \mu\text{m}$ sono state eseguite tre simulazioni:

1. con risoluzione del fluido pari a $h/d_{p1} = 2$ (quindi $h/d_{p2} = 4$);
2. con risoluzione del fluido pari a $h/d_{p2} = 2$ (quindi $h/d_{p1} = 1$);
3. con risoluzione del fluido pari a $h/d_{p2} = 2$ impiegando la tecnica di doppio smoothing.

I dati della prima simulazione sono riassunti nella tabella seguente.

Tab. 5.7 – Dati della simulazione.

Risoluzione del fluido	h/d_{p1}	2
Porosità del blocco	Eps	0.906
Diametro delle particelle 1	d_{p1}	200 μm
Diametro delle particelle 2	d_{p2}	100 μm

Il grafico del grado di vuoto lungo l'altezza della colonna, contro il tempo è riportato in Fig. 5.24.

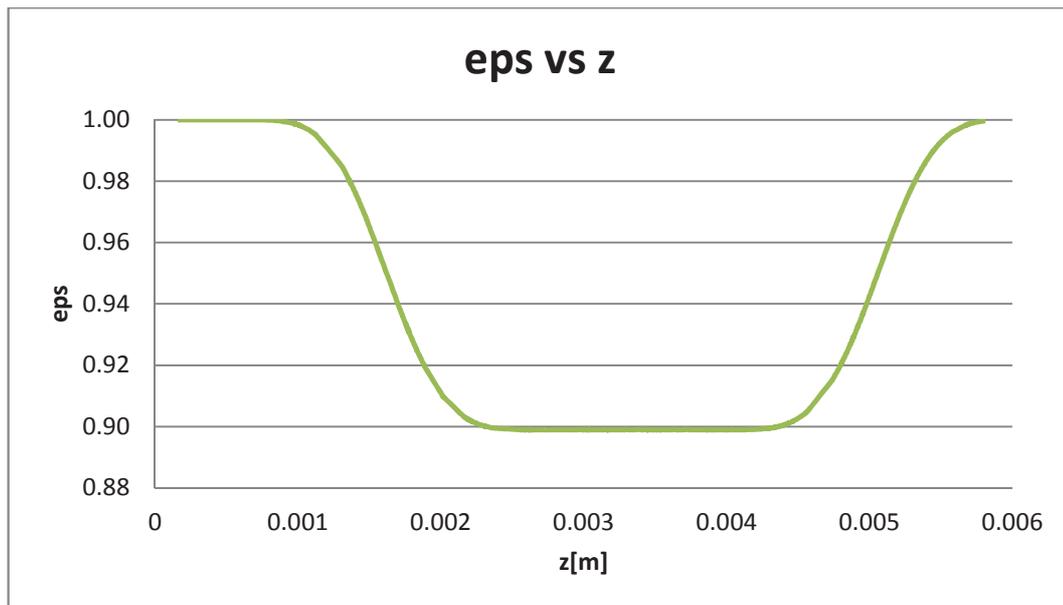


Fig. 5.24 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

Per la seconda simulazione i dati utilizzati sono presenti in tabella.

Tab. 5.8 – Dati della simulazione.

Risoluzione del fluido	h/d_{p2}	2
Porosità del blocco	Eps	0.906
Diametro delle particelle 1	d_{p1}	200 μm
Diametro delle particelle 2	d_{p2}	100 μm

Il grado di vuoto lungo l'altezza della colonna contro il tempo è riportato nel grafico seguente (FIG 5.25).

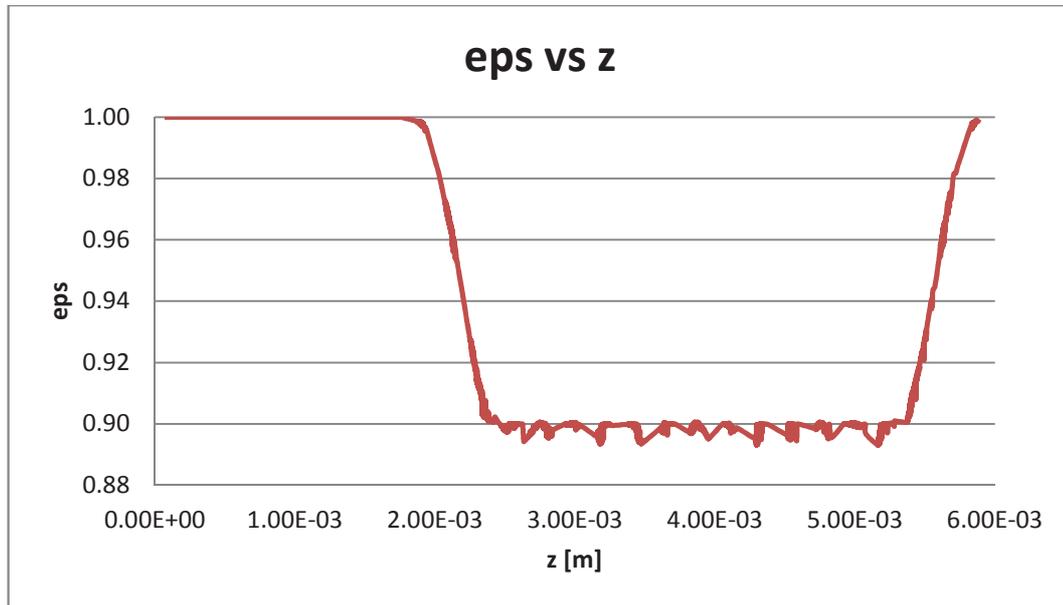


Fig. 5.25 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

I dati impiegati nella terza simulazione sono presenti in tabella 5.9, il metodo di doppio smoothing è stato impiegato in questo caso.

Tab. 5.9 – Dati della simulazione.

Risoluzione del fluido	h/d_{p2}	2
Porosità del blocco	Eps	0.906
Diametro delle particelle 1	d_{p1}	200 μm
Diametro delle particelle 2	d_{p2}	100 μm

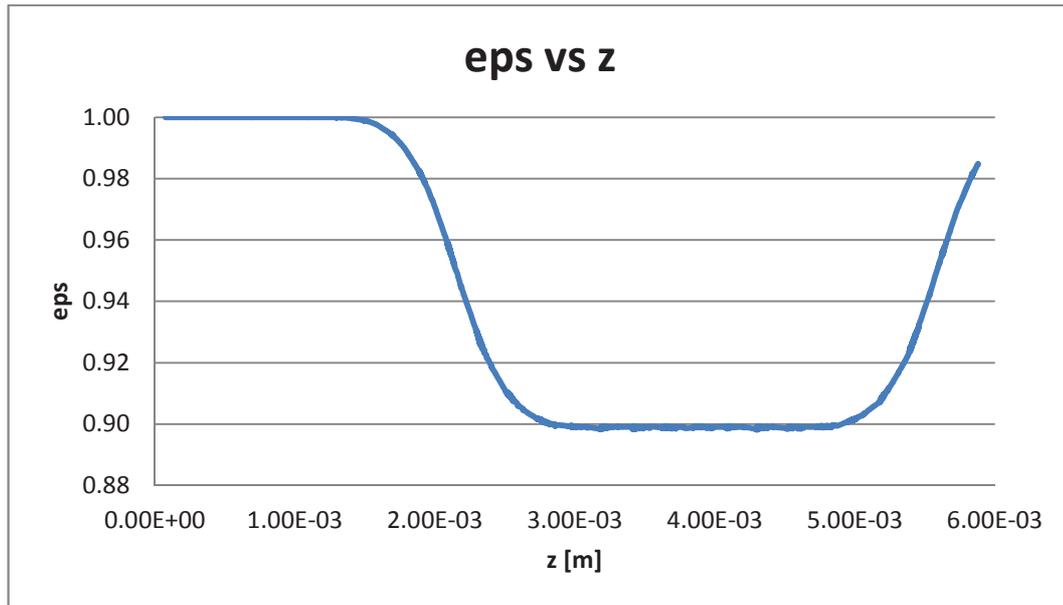


Fig. 5.26 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

Le tre simulazioni riguardano tre blocchi di geometria identica. Impiegando diversi metodi si ottengono localmente valori del grado di vuoto differenti. Un confronto dei tre grafici è riportato in Fig. 5.27.

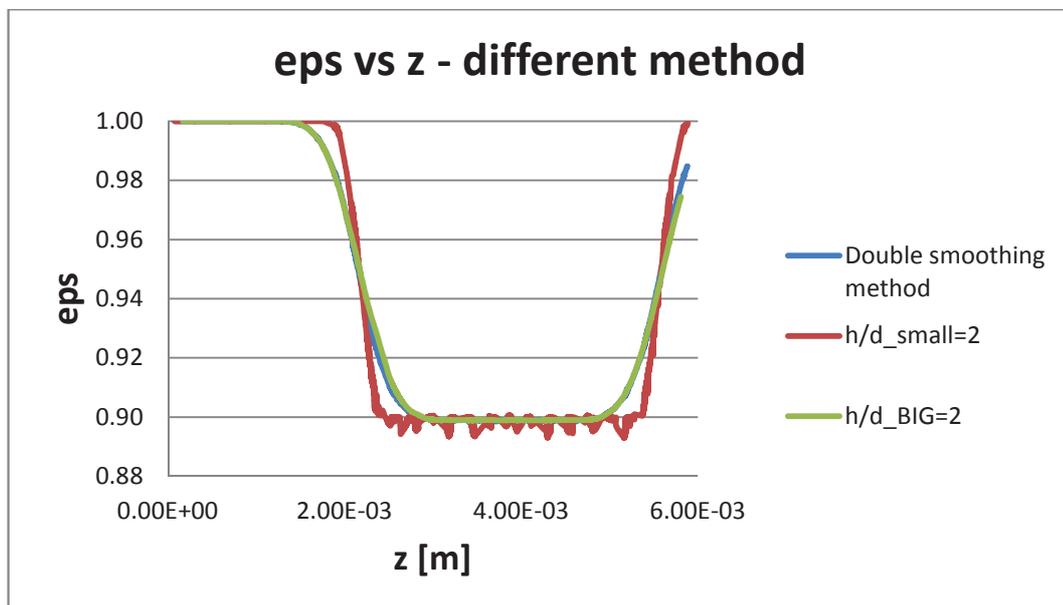


Fig. 5.27 – Porosità del blocco lungo l'altezza della colonna.

È possibile osservare come, utilizzando una risoluzione del fluido maggiore, quindi minore rapporto h/d , si riesca a rendere meno “smussato” il grado di vuoto del blocco (linea rossa). Tuttavia questo introduce delle oscillazioni nel grado di vuoto che potrebbero generare grado di vuoto nulli all'interno della simulazio-

ne. Introdurre il metodo di doppio smoothing consente di avere una risoluzione maggiore del fluido ed evitare i problemi connessi al caso precedente. Il grado di vuoto lungo l'altezza della colonna per le simulazioni 1 (risoluzione $h/d_{BIG} = 2$) e 3 (risoluzione $h/d_{BIG} = 1$) sono identici.

5.4 - Sedimentazione di una sospensione di solido monodisperso

Tab. 5.10 – Dati della simulazione.

Dimensioni della colonna	L x W x H	4 x 4 x 6 mm
Densità del fluido	ρ_f	1000 kg/m ³
Viscosità	μ	8.9×10^{-4} Pa s
Densità del solido	ρ_p	2500 kg/m ³
Diametro delle particelle	d_p	100 μ m
Grado di vuoto iniziale	Eps	0.900
Costante elastica (LSD)	k	10000 kg/s ²
Costante dissipazione (LSD)	β	0 kg/s
Risoluzione del fluido	h/d	2
SPH h-factor	σ	1.5
Viscosità artificiale	α	0.1

Il grafico di seguito riporta il grado di vuoto della sospensione lungo l'altezza della colonna contro il tempo. Il valore del grado di vuoto è fornito dalla color bar.

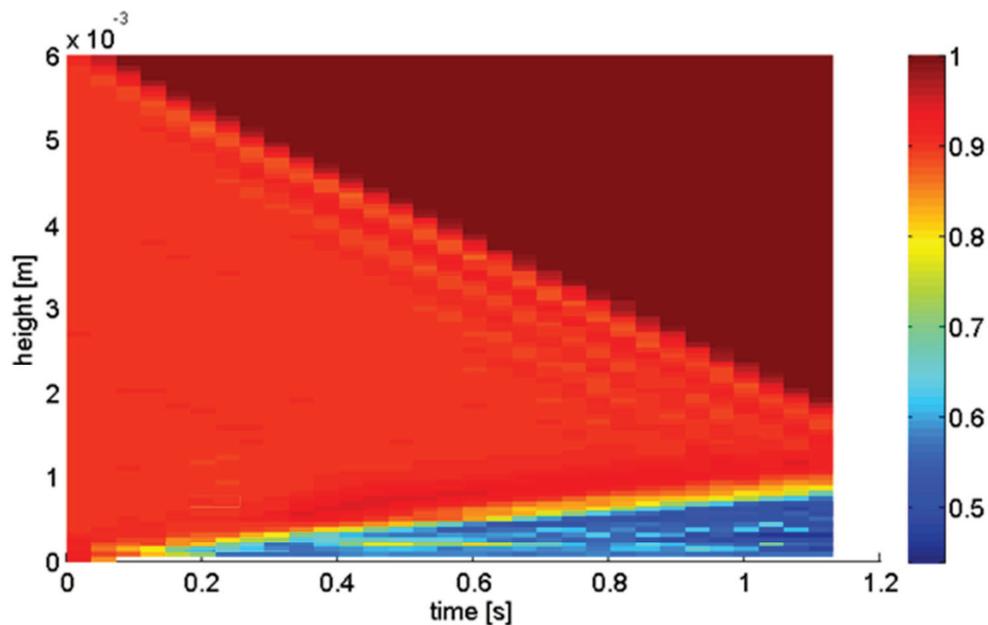


Fig. 5.28 – Grado di vuoto della sospensione lungo l'altezza della colonna contro il tempo.

È possibile osservare come qualitativamente la simulazione abbia dato buoni risultati: il grado di vuoto iniziale è pari a 0.9 lungo tutta l'altezza della colonna, mentre

all'aumentare del tempo si crea uno strato superiore di liquido chiarificato, con grado di vuoto unitario, e uno strato di solido depositato con grado di vuoto pari a circa 0.5.

Può essere riportato in un grafico l'altezza dell'interfaccia "liquido chiarificato-sospensione" e verificare il risultato utilizzando la teoria di Kynch (1952). Il grafico in Fig. 5.29 è ottenuto con una procedura di post processing implementata in Matlab con la quale si individuano le 600 particelle DEM con coordinata z maggiore e si fa una media per determinare l'altezza media dell'interfaccia.

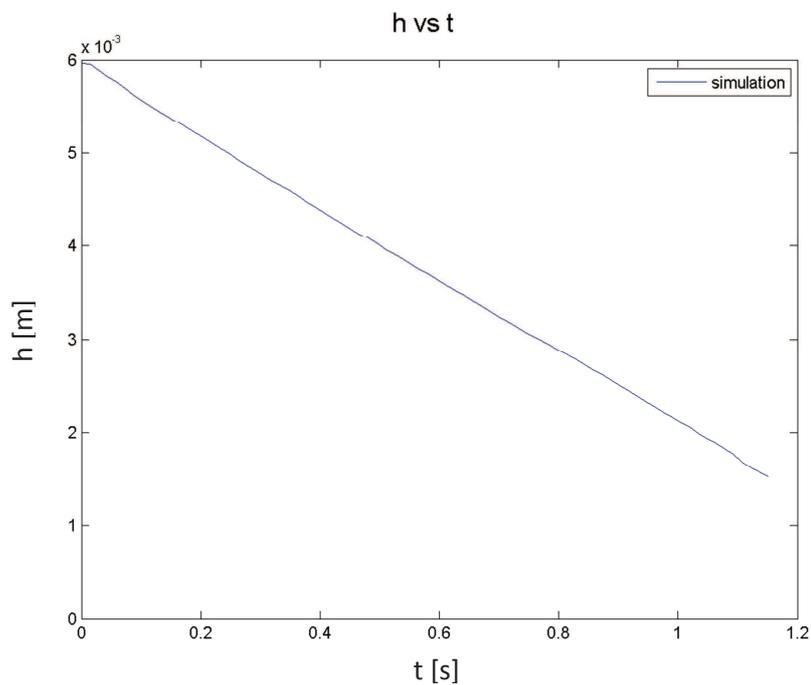


Fig. 5.29 – Altezza dell'interfaccia "liquido chiarificato-sospensione" contro il tempo.

È stato verificato che la retta tracciata nel grafico in Fig. 5.29 corrisponde alla retta tracciata dall'interfaccia della sospensione nel grafico *height vs t*.

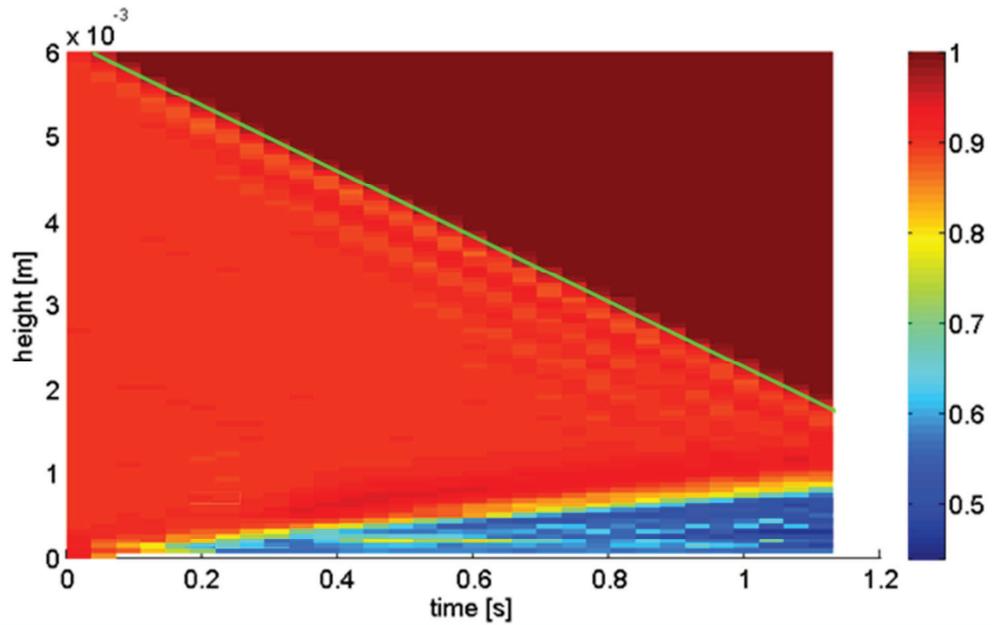


Fig. 5.30 – Grado di vuoto della sospensione lungo l'altezza della colonna contro il tempo.

Secondo la teoria di Kynch, eq 4.6:

$$\frac{dz}{dt} = v_{\infty}$$

Il modello di drag utilizzato in questa simulazione è quello Di Felice-Dallavalle, così la velocità terminale delle particelle nella sospensione è data dall'equazione 4.4.

La velocità terminale ottenuta è $u_p = 4.4 \text{ mm/s}$. Mentre la velocità terminale ottenuta come pendenza della retta nel grafico z vs t è pari a 3.9 mm/s .

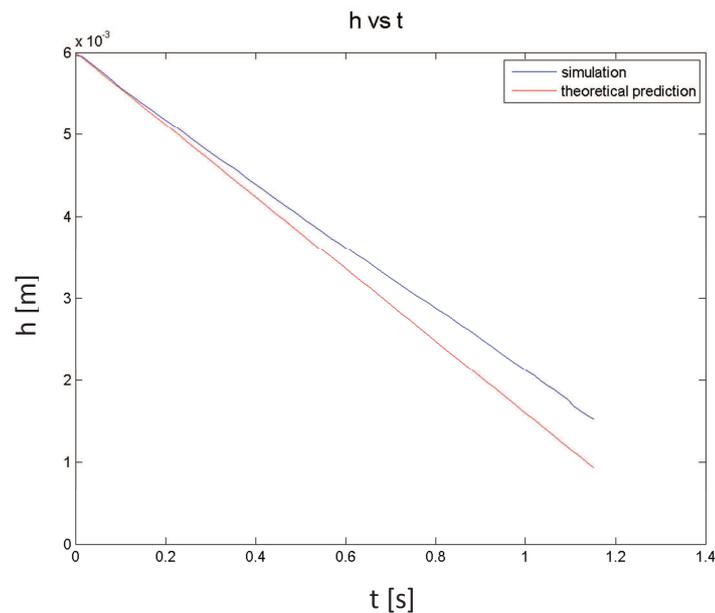


Fig. 5.31 – Altezza dell'interfaccia "liquido chiarificato-sospensione" contro il tempo.

5.5 - Sedimentazione di una sospensione di solido monodisperso di due densità

I solidi presenti in sospensione sono questa volta di due tipi: tipo 1 con densità ρ_{p1} pari a 2450 kg/m^3 e di tipo 2 con densità ρ_{p2} pari a 1500 kg/m^3 . La sospensione iniziale è omogenea e con grado di vuoto pari a 0.9.

Tab. 5.11 – Dati della simulazione.

Dimensioni della colonna	L x W x H	4 x 4 x 6 mm
Densità del fluido	ρ_f	1000 kg/m^3
Viscosità	μ	$8.9 \times 10^{-4} \text{ Pa s}$
Densità del solido 1	ρ_{p1}	2450 kg/m^3
Densità del solido 2	ρ_{p2}	1500 kg/m^3
Diametro delle particelle	d_p	100 μm
Grado di vuoto iniziale	Eps	0.900
Costante elastica (LSD)	k	100000 kg/s^2
Costante dissipazione (LSD)	β	0 kg/s
Risoluzione del fluido	h/d	2
SPH h-factor	σ	1.5
Viscosità artificiale	α	0.1

È stato riportato il grado di vuoto della sospensione lungo l'altezza della colonna contro il tempo. Il valore del grado di vuoto è fornito dalla color bar.

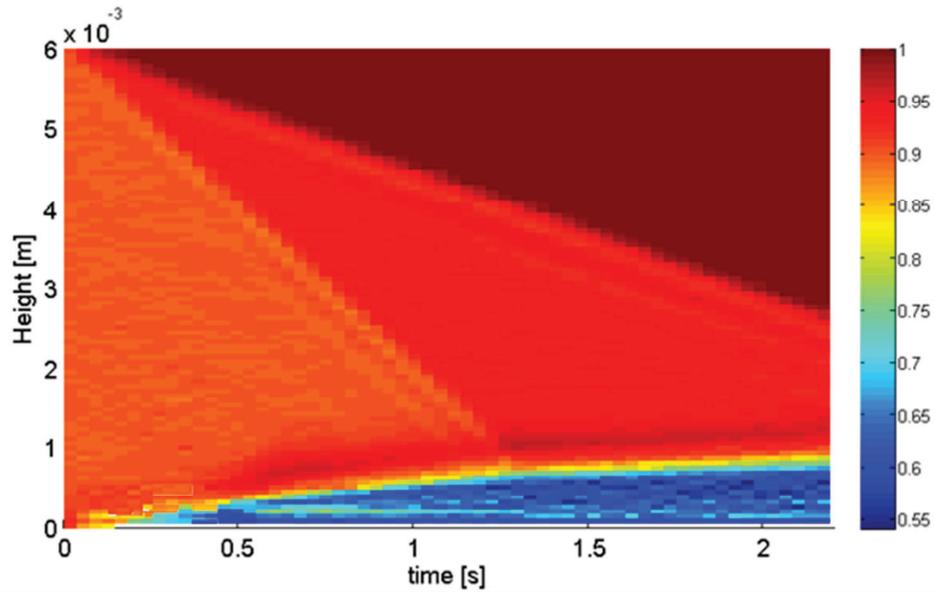


Fig. 5.32 – Grado di vuoto della sospensione lungo l’altezza della colonna contro il tempo.

È possibile osservare la presenza di due interfacce: la prima tra il liquido chiarificato e la sospensione di solido leggero, la seconda tra la sospensione di solido leggero e la sospensione iniziale.

Nella figura 5.33 è riportata l’altezza dell’interfaccia tra la sospensione iniziale e la sospensione di solido “pesante” (tipo 1) contro il tempo. Nella stessa figura è riportato anche l’andamento teorico ricavato applicando la teoria di Kynch (1952).

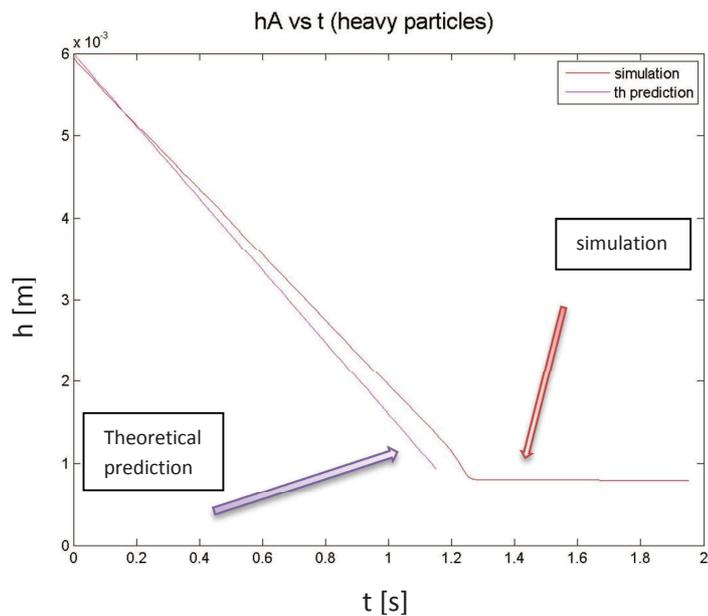


Fig. 5.33 – Altezza dell'interfaccia “sospensione di solido leggero-sospensione iniziale” contro il tempo.

Lo stesso tipo di grafico, relativo al solido leggero (tipo 2), è riportato in figura 5.34. La pendenza della retta nel grafico ottenuta dalle simulazioni è pari a 4.1 mm/s quindi la velocità terminale delle particelle nella sospensione è pari a questo valore. Utilizzando l'equazione si ottiene che la velocità terminale è pari a -0.0048 m/s . L'errore in questo caso è pari al 15%.

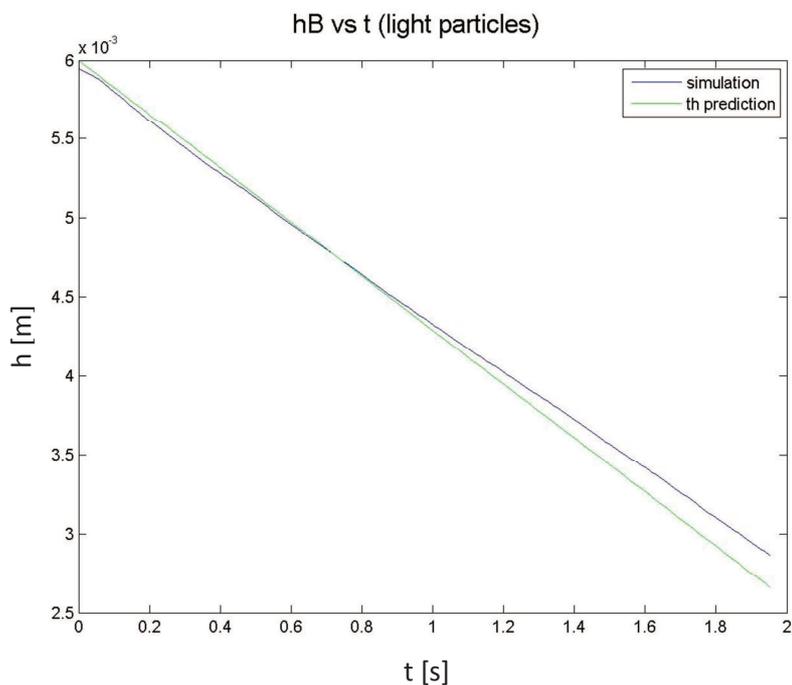


Fig. 5.34 – Altezza dell'interfaccia “sospensione di solido leggero-sospensione iniziale” contro il tempo.

La pendenza della retta nel grafico precedente è pari a 1.6 mm/s , mentre utilizzando l'equazione 4.4 la velocità terminale delle particelle di solido con densità 1500 kg/m^3 in una sospensione di grado di vuoto 0.95 è 2.1 mm/s . L'errore in questo caso è pari al 31%.

Il metodo di simulazione è in grado di dare risultati riguardanti il fenomeno di segregazione dei due solidi. È stato riportato nel grafico in Fig. 5.35 il centro di massa (COM) della sospensione (linea blu), del solido pesante (linea verde) e del solido leggero (linea rossa) contro il tempo.

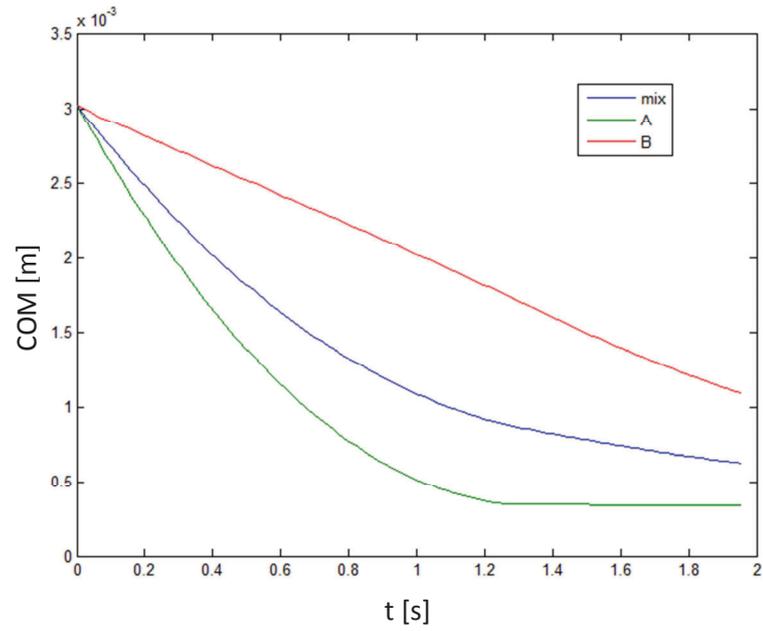


Fig. 5.35 – Andamento del centro di massa della sospensione (blu), del solido “leggero” (rosso) e del solido “pesante” (verde) contro il tempo.

5.6 – Sedimentazione di una sospensione bidispersa

Questo caso riguarda la sedimentazione di una sospensione omogenea di porosità 0.87, costituita da solidi con diametro $d_{pA} = 100\mu\text{m}$ e solido di tipo B con diametro $d_{p2} = 100\mu\text{m}$.

Tab. 5.12 – Dati della simulazione.

Box dimensions	L x W x H	4 x 4 x 6 mm
Fluid density	ρ_f	1000 kg/m ³
Viscosity	M	8.9e-4 Pa s
Particle density	ρ_p	2500 kg/m ³
Particle A diameter	d_{p1}	120 μm
Particle B diameter	d_{p2}	100 μm
Spring stiffness	k	10000 kg/s ²
Spring damping	β	0 kg/s
Risoluzione del fluido	h/d_{p1}	1.5
SPH h-factor	σ	1.5
Artificial viscosity	α	0.1

I risultati in termini di porosità lungo l'altezza della colonna contro il tempo sono riportati nella figura 5.36.

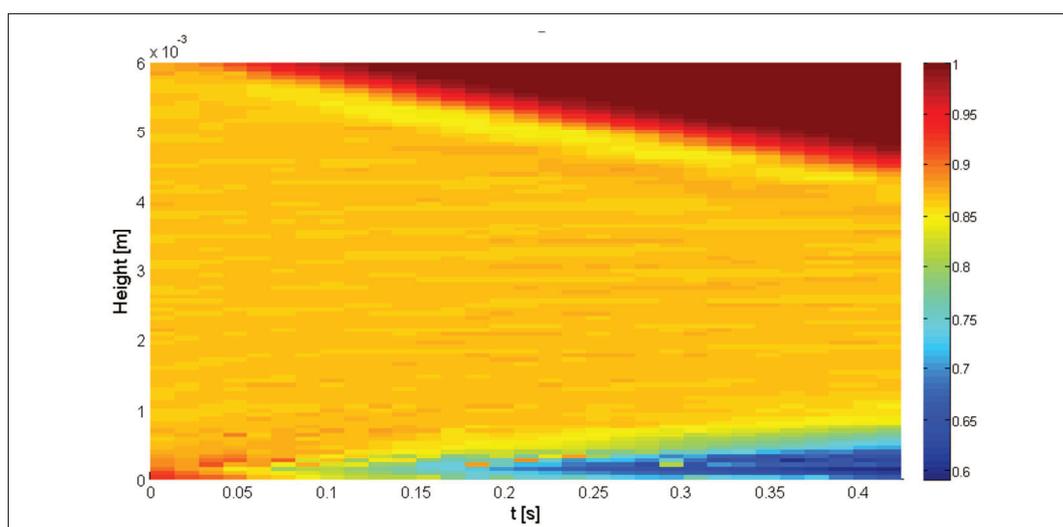


Fig. 5.36 – Grado di vuoto della sospensione lungo l'altezza della colonna contro il tempo.

Anche in questo caso le simulazioni sono capaci di dare risultati del fenomeno di

sedimentazione in accordo, almeno qualitativamente con quelli sperimentali. Simulazioni per tempi più lunghi è stato reso impossibile dai tempi di calcolo necessari per la simulazione. Pertanto questo test case rimane una controprova qualitativa del metodo.

Dal grafico precedente non è possibile osservare la presenza netta di due interfacce, ma la prova che la segregazione è coinvolta nel processo è visibile dal grafico del centro di massa (COM) della sospensione (linea blu), del solido con diametro maggiore (linea verde) e del solido con diametro minore (linea rossa) contro il tempo.

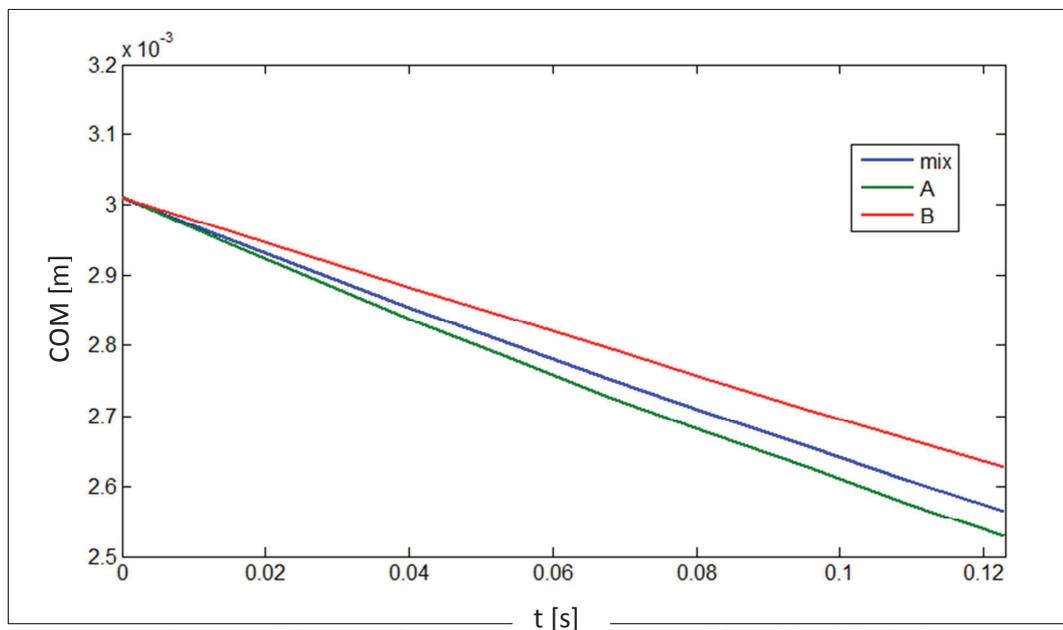


Fig. 5.37 – Andamento del centro di massa della sospensione (blu), del solido di dimensioni più piccole (rosso) e del solido con dimensioni più grandi (verde) contro il tempo.

Dalla Fig. 5.36 si nota un certo grado di segregazione. Il centro di massa del solido di diametro maggiore è spostato verso il basso rispetto al centro di massa della sospensione (linea blu).

Conclusioni

Durante il presente lavoro di Tesi sono state analizzate le diverse tecniche di simulazione di sistemi particellari bifasici. La tecnica SPH-DEM, ancora non molto diffusa, è stata individuata come la tecnica più promettente per la simulazione di questo tipo di sistemi.

Per questo un codice di calcolo open-source per la dinamica molecolare disponibile in versione alfa è stato modificato per aggiungere la capacità di simulazione con la tecnica SPH-DEM di sistemi con solidi monodispersi e polidispersi interagenti con un fluido.

L'analisi della metodologia SPH ha permesso di evidenziare l'importanza della scelta del parametro di risoluzione h/d e di formulare una sua stima ottimale per il caso di sistemi polidispersi. In particolare la tecnica proposta consiste nel valutare il parametro per mezzo di due valutazioni successive, la prima applicata al solido di dimensione minore e la seconda al solido più grande.

Per validare il codice implementato sono state eseguite diverse simulazioni di sistemi che coinvolgono l'interazione fluido-solido. L'implementazione dei test case con la presenza di sospensioni bidisperse ha reso necessario l'implementazione di nuove funzioni di Aboria ed un contributo è stato dato allo sviluppo di questo software. Il processo finale di confronto tra risultati delle simulazioni e modelli matematici ha portato alla verifica della tecnica di modellazione SPH-DEM per simulazioni in mesoscala.

I risultati ottenuti sono incoraggianti ed evidenziano la capacità di questa tecnica di produrre risultati quantitativamente significativi. I test case simulati sono molto semplici, ma le simulazioni sono in grado di predire con una certa accuratezza le velocità terminali e qualitativamente descrivono fenomeni di segregazione di particelle con diverse dimensioni e/o con diverse densità.

Il metodo di doppio smoothing ha evidenziato che l'errore commesso dal metodo è principalmente legato all'approssimazione kernel, che non è in grado di riprodurre in modo accurato sistemi con elevati gradienti nel grado di vuoto, come ad esempio un blocco di porosità costante.

Il test case di sedimentazione di sospensione di particelle di densità diverse ha evidenziato errori significativi tra i risultati della simulazione e le predizioni del modello matematico. Tuttavia la simulazione ha riprodotto la presenza di segregazione della sospensione.

Il test case di sedimentazione delle sospensioni di particelle di due diametri diversi ha mostrato qualitativamente la sedimentazione e la segregazione della sospensione. Simulare tempi più lunghi comporta tempi di calcolo proibitivi (la simulazione di 0.4 s è durata 3 settimane).

Tecniche di simulazione CFD-DEM di diversa natura sono più efficienti e richiedono tempi di calcolo di ordini di grandezza minori (si pensi che un metodo agli elementi finiti è in grado di simulare il test case di Sedimentazione di una sospensione in tempi dell'ordine dei minuti, contro i giorni della simulazione SPH-DEM con il software Aboria). Sicuramente questi tempi potrebbero essere ridotti con l'impiego di un software più avanzato, in grado di sfruttare la potenza di calcolo delle GPU. In ogni caso l'obiettivo di questo lavoro è quello di suscitare interesse nella tecnica SPH-DEM ancora poco impiegata, e vuole indicarla come uno strumento potentissimo per simulazioni di sistemi molto complessi.

La tecnica SPH-DEM richiede in primo luogo un software molto efficiente, Aboria è una libreria robusta, con delle funzioni base, quali la neighbour search molto efficienti. Tuttavia il suo sviluppo è ancora molto limitato.

La caratteristica principale del metodo SPH risiede nel fatto di essere una tecnica *meshfree* di semplice implementazione, l'esperienza data da questo lavoro suggerisce che questa affermazione deve essere rivista. Il senso del "semplice da implementare" sta a significare che *una volta ottenuto un metodo robusto* diventa estremamente semplice complicare il problema con geometrie complesse o implementando altri modelli di forze di drag, per lo scambio termico o reazioni chimiche.

Questo lavoro di tesi può essere un punto di partenza per l'implementazione di simulazioni più complesse, ad esempio un letto fluidizzato, o lo studio di feno-

meni come l'inversione degli strati, o ancora lo scambio termico con oggetti sommersi in letti fluidi.

A titolo di esempio, si pensi alla simulazione di un sistema che preveda scambio termico con oggetti sommersi in un letto fluidizzato. Aggiungere alla simulazione di un letto fluidizzato quella dello scambio termico con un oggetto sarebbe molto complesso con una tecnica agli elementi finiti, ma estremamente semplice con un modello SPH-DEM.

In definitiva, la grande potenzialità di questa tecnica non è la sua efficienza per sistemi banali o poco complicati, ma la capacità di passare da sistemi banali a sistemi molto complicati, proibitivi da simulare con altri metodi, con uno sforzo minimo.

Bibliografia

Anderson T. B. , Jackson R., (1967). Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6 (4), 527–539.

Beetstra R., van der Hoef M.A., Kuipers J.A.M. (2007) Drag force of intermediate Reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres, *AIChE Journal* 53 (2), 489-501.

Cello F., Di Renzo A., Di Maio F.P. (2010). A semi-empirical model for the drag force and fluid–particle interaction in polydisperse suspensions. *Chemical Engineering Science* 65 (10), 3128-3139.

Colagrossi A., Landrini M., (2003). Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 191 (2), 448–475.

Coulson J., Richardson J., (1993). *Chemical Engineering*, vol. 2. VI ed.

Cundall P. A, Strack O. D. L., (1979). A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, Volume 29 (1), pages 47–65.

Dallavalle J. M., (1943). *Micromeritics: The Technology of Fine Particles*, New York and Chicago: Pitman Publishing Corporation.

Di Felice R., (1994). The voidage function for fluid-particle interaction systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 20 (1), 153–159.

Di Felice R., (1995). Hydrodynamics of liquid fluidisation, *Chemical Engineering Science*, 50 (8), 1213-1245.

Di Maio F.P., Di Renzo A., Vivacqua V., (2013). Extension and validation of the particle segregation model for bubbling gas-fluidized beds of binary mixtures. *Chemical Engineering Science* 97, 139-151.

Di Renzo A., Cello F., Di Maio F. P., (2011). Simulation of the layer inversion phenomenon in binary liquid-fluidized beds by DEM-CFD with a drag law for polydisperse systems, *Chemical Engineering Science* 66, 2945–2958.

Domínguez J. M., Crespo A. J. C., (2011). Neighbour lists in smoothed particle hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 67 (12), 2026–2042.

Epstein N., (2005) The Voidage Function for the Drag Force Ratio in a Liquid-Fluidized Bed, *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 83, 3, 566–572.

Epstein, N., LeClair, B.P., 1985. Liquid fluidization of binary particle mixtures—II. Bed inversion. *Chemical Engineering Science* 40, 1517–1526.

Fries L., Antonyuk S., Heinrich S., Palzer S., (2011). DEM-CFD modeling of a fluidized bed spray granulator, *Chemical Engineering Science*, 66 (11), 2340-2355.

Galvin K.P., Pratten S.J., Nicol S.K., (1999). Dense medium separation using a teetered bed separator, *Minerals Engineering* 12, 1059–1081.

Garside J., Al-Dibouni M.R., (1977). Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation, *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 16, 206.

Gibilaro L. G., Di Felice R., Waldram S. P., Foscolo P. U., (1985). A predictive model for the equilibrium composition and inversion of binary-solid liquid fluidized beds. *Canadian Journal of Chemical Engineering* 64, 931-938.

Gingold R. A., Monaghan J. J., (1977). Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181, 375-89.

Gingold R. A., Monaghan J. J., (1978). Binary fission in damped rotating polytropes. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 184, 481-99

Gingold R. A., Monaghan J. J., (1979). A numerical study of the Roche and Darwin problems for polytropic stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 188, 45-58

Gingold R. A., Monaghan J. J., (1980). The Roche problem for polytropes in central orbits. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 191, 897-924

Gingold R. A. and Monaghan J. J., (1982). Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 46, 429-53.

Holdich R. G., Butt G., (1997). Experimental and numerical analysis of a sedimentation forming compressible compacts. *Separation Science Technology* 32, pp. 2149-2171.

Juma A. K. A., Richardson J. F., (1983). Segregation and mixing in liquid fluidized beds, *Chemical Engineering Science*, 38, 955-967.

Kawaguchi T., Doi A., Tanaka T., Tsuji Y., (2006). Drag Force Model for Fluidized Bed with Poly-Dispersed Particles, *Progress in Multiphase Flow Research*, Vol.I, 87-94

Khan A.R., Richardson J.F., (1989). Fluid-particle interactions and flow characteristics of fluidized beds and settling suspensions of spherical particles, *Chemical Engineering Communication* 78 111–130.

Kynch, G. J. (1952) A theory of sedimentation, *Trans Faraday Soc*, 48, 166-176. *Transactions of the Faraday Society*.

Li, Yuan-Hui, (1967). Equation of State of Water and Sea Water. *Journal of Geophysical Research* 72 (10): 2665.

Lucy L. B., (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomic Journal* 82, 1013–24.

Luding S., (1998). *Collisions & Contacts between two particles*. Physics of dry granular Media, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

Mattson W., Rice B. M., (1999). Near-neighbor calculations using a modified cell-linked list method. *Computer Physics Communications* 119, 135-148.

Monaghan J. J., (1992). Smoothed Particle Hydrodynamics - Annual Reviews. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 30, 543-574.

Monaghan J. J., (1997). SPH and Riemann Solvers. *Journal of Computational Physics* 136, 298–307.

Monaghan J. J., (2005). Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics* 68, 1703-59.

Monaghan J. J., R. A. Gingold, (1983). A Shock Switch for SPH. *Journal of Computational Physics* 52, 374.

Morris J. P., Fox P. J., (1997). Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. *Journal of Computational Physics*, Volume 136, Issue 1, p. 214-226.

Ogarko V., Luding S., (2012). A fast multilevel algorithm for contact detection of arbitrarily polydisperse objects. *Computer Physics Communications* 183 (4), 931–936.

Omang M., Borge S., Trulsen J., (2005) Alternative kernel functions for smoothed particle hydrodynamics in cylindrical symmetry. *Shock Waves* 14(4), 293–298.

Price D. J., Monaghan J. J., (2004). Smoothed particle magnetohydrodynamics: I. Algorithms and tests in one dimension. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 348, 123–38.

Price D., (2012). Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 231, 759–794.

Rhodes M. J., (1998). *Introduction to Particle Technology*, 2nd Edition, Wiley.

Richardson J.F., Zaki W.N., (1954). Sedimentation and fluidization: Part I. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 32, 35–53.

Robinson M., Monaghan J.J., (2012). Direct numerical simulation of decaying two-dimensional turbulence in a no-slip square box using smoothed particle hydrodynamics. *International Journal For Numerical Methods In Fluids* 70, 37–55.

Robinson, M., Luding, S., Ramaioli, M., (2013). SPH-DEM simulations of grain dispersion by liquid injection. *Powders and Grains 2013, AIP Conference Proceedings* vol. 1542, 1122–1125.

Robinson M., Ramaioli M., Luding S., (2014). Fluid–particle flow simulations using two-way-coupled mesoscale SPH–DEM and validation. *International Journal of Multiphase Flow* 59, 121–134.

Rowe P. N., Henwood G. A., (1961). Drag Forces in a Hydraulic Model of a Fluidized Bed-Part I, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 39, pp 43-5.

Shepard, D., (1968). A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. *Proceedings of the 1968 23rd ACM National Conference*. ACM, 517–524.

Swegle J., Hicks J., Attaway S., (1995). Smoothed particle hydrodynamics stability analysis. *Journal of Computational Physics* 116, 123–34.

Tak M, Park D, Park T, (2013). Computational Coupled Method for Multiscale and Phase Analysis. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 135.

Van der Hoef M.A., Beetstra R., Kuipers J.A.M. (2005). Lattice-Boltzmann simulations of low-Reynolds-number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres: results for the permeability and drag force. *Journal of Fluid Mechanics* 528, 233-254.

Verlet L., (1967). Computer "Experiments" on Classical Fluids. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review Letters*, *Physical Review*, and *Reviews of Modern Physics* 159, 98.

Wallis G. B., (1969). *One-Dimensional Two-phase Flow*, McGraw-Hill.

Washino K., Tan H.S., Hounslow M. J., Salman A. D., (2013). A new capillary force model implemented in micro-scale CFD–DEM coupling for wet granulation, *Chemical Engineering Science*, 93, 197-205

Wendland H. H., (2010). Scattered Data Approximation. Part of Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. February 2010.

Yang J., Renken A., (2003). A generalized correlation for equilibrium of forces in liquid–solid fluidized beds, *Chemical Engineering Journal* 92, 7–14.

Yin X., Sundaresan S., (2009). Fluid-particle drag in low-Reynolds-number polydisperse gas-solid suspensions, *AIChE Journal* 55 (6), 1352-1368.

Acknowledge

I am using this opportunity to express my gratitude to everyone who supported me throughout the course of this project. I am sincerely grateful to them for sharing their truthful and illuminating views on a number of issues related to the project.

It is my radiant sentiment to give an evidence of my best regards, deepest sense of gratitude to Dr. Di Renzo and Prof. Di Maio, my supervisors in Università della Calabria, Dr. Ramaioli who created the connections for this group and gave periodic support to this project, Dr. Robinson for the constant support with the software Abovia and the great opportunity of visiting the University of Oxford. The last but not the least Prof. Luding and Dr. Magnanimo for their daily answers, and the whole MultiScale Mechanics group for the hospitality in the University of Twente.

I perceive as this opportunity as a big milestone in my career and my whole life.

Hope to continue cooperation with all of you in the future.

Thank you,

Giuseppe