

# Progetto di Ricerca

Titolo della ricerca: *Simulazioni multi-scala di reattori tri-fase industriali*

Struttura di Ricerca: DIN

## Basi Scientifiche

Le reazioni che coinvolgono le fasi gas-liquido-solido svolgono un ruolo cruciale in vari settori industriali, tra cui petrolchimica, chimica sintetica, applicazioni biotecnologiche e trattamento delle acque reflue. Per tali applicazioni industriali risulta fondamentale lo sviluppo di una metodologia di simulazione implementata in un codice CFD, che consenta una migliore comprensione dei reattori agitati trifase e la previsione degli effetti di scala sulla fluidodinamica e sul trasferimento di massa. Inoltre, esso risulta essere uno strumento essenziale per la scalabilità di tali reattori, contribuendo così al trasferimento tecnologico di strumenti computazionali multi-scala per l'ingegneria, al fine di rafforzare la competitività dell'industria.

Le sfide principali nella modellazione dei reattori agitati trifase includono le interazioni tra la fluidodinamica delle fasi continue e disperse di gas e solidi, la distribuzione dimensionale della fase gassosa, il trasferimento di massa interfase e la reazione chimica che avviene nelle geometrie complesse e grandi necessarie per la produzione industriale. Lo sviluppo di una metodologia di modellazione multi-scala di reattori chimici agitati trifase ha come obiettivo finale l'individuazione di una strategia di simulazione completamente predittiva dei reattori industriali basata su un solido insieme di modelli che descrivono i meccanismi fisici e chimici prevalenti e la loro interazione con le caratteristiche geometriche e le condizioni operative dei reattori. Inoltre, è importante sottolineare l'esigenza di concepire una strategia di simulazione industrialmente valida da adottare per l'ottimizzazione del progetto del reattore e per la selezione delle variabili operative che garantiscano prestazioni di processo soddisfacenti con il cambio di scala del reattore.

La metodologia in applicazioni industriali si basa sulle equazioni di Navier-Stokes mediate da Reynolds (RANS) e sui relativi modelli di chiusura implementati in codici CFD a volume finito di uso generale. A tal fine, la robustezza dei risultati viene spesso valutata con dati sperimentali e numerici già disponibili nella letteratura scientifica. Inoltre, aspetti fondamentali specifici riguardanti la modellazione del campo di flusso turbolento in fase continua e l'effetto della turbolenza sulla distribuzione dimensionale delle bolle di gas sono integrati con informazioni tratte da simulazioni numeriche dirette (DNS). Tali simulazioni considerano i due fluidi come un continuum con densità e viscosità diverse, separati da un'interfaccia netta che determina un cambiamento improvviso delle caratteristiche del fluido. Con questo approccio, i due fluidi devono essere risolti fino alla più piccola scala turbolenta, cioè la scala di Kolmogorov.

## Progetto di ricerca:

Le principali attività assegnate di ricerca riguardano simulazioni numeriche dirette (DNS) di flussi di bolle in flussi canonici, fornendo una visione fisica e una valutazione modellistica della dinamica dell'interazione tra le fasi liquide e gassose, con l'obiettivo

di migliorare la capacità dei modelli di prevedere la rottura e la coalescenza delle bolle nel contesto di RANS.

Inoltre, verranno identificate le condizioni che saranno implementate nella DNS al fine di massimizzare l'impatto di miglioramento sui modelli CFD. Una delle questioni fisiche è legata all'interazione tra le forzature su larga scala e il galleggiamento. Il moto di risalita delle bolle crea un regime pseudo-turbolento, noto come Bubble-Induced-Agitation (BIA). Questo moto fortemente anisotropo si verifica spesso in una turbolenza preesistente, che nella sua forma più semplice può essere assunta come turbolenza omogenea e isotropa (HIT). Nella maggior parte delle applicazioni, BIA e HIT coesistono e l'interazione tra il flusso di fluido disperso (bolle) e il flusso portante diventa cruciale per comprendere processi come la rottura e la coalescenza. Nonostante il suo ruolo cruciale nelle applicazioni ingegneristiche, l'interazione tra BIA e HIT è ancora largamente inesplorata.

Una serie di DNS per esplorare lo spazio parametrico. La prima serie di simulazioni considererà una forzante omogenea e isotropa a grandi scale, mentre la BIA inietta energia a scale di lunghezza comparabili con i diametri delle bolle e le dimensioni della scia. La variazione del diametro medio delle bolle, rispetto alle scale tipiche della turbolenza, può introdurre variazioni nella dinamica del flusso che potrebbero essere prese in considerazione. Le variazioni del diametro medio possono essere ottenute variando il numero di Weber attraverso l'iniezione di energia su larga scala. Verranno studiati gli effetti della struttura modificata della dissipazione turbolenta sulla rottura e sulla coalescenza delle bolle.

### **Piano di Attività**

Il candidato opererà secondo il seguente piano di attività e programma formativo:

Fase 1: Individuazione del codice ad elevata accuratezza per flussi multifase

- Identificazione delle condizioni da implementate al fine di massimizzare l'impatto di miglioramento sui modelli CFD che saranno sviluppati nel progetto.
- Studio delle tecniche di simulazione delle soluzioni multifase

Fase 2: Analisi numeriche della turbolenza con bolle

- Simulazioni numeriche di turbolenza con bolle
- Simulazioni numeriche di flussi multifase in presenza di taglio

Attività formative

- Attività formative nel campo metodi numerici per fluidi bifase
- Attività formative nel campo dello studio della turbolenza

Il possesso del titolo di Dottore di Ricerca in Matematica/Fisica/Ingegneria costituirà titolo preferenziale per la selezione. Il candidato dovrà dimostrare di avere conoscenze di fluidodinamica numerica e statistica e acquisirà, al termine del progetto di ricerca, anche competenze nel campo della fluidodinamica dei flussi multifase e della simulazione industriale di questi.

Infine, saranno previste attività didattiche di supporto nelle discipline inerenti le attività previste dal programma di ricerca.

Titolo della ricerca: *Simulazioni multi-scala di reattori tri-fase industriali*  
Struttura di Ricerca: DIN – Dipartimento di Ingegneria Industriale

### **Sommario**

L'attività di ricerca in oggetto riguarderà lo studio numerico di flussi di bolle in flussi canonici. La disponibilità di risorse HPC per la soluzione numerica ad alta intensità di calcolo delle equazioni del modello è un prerequisito fondamentale per tradurre i risultati dell'attività di ricerca dalla scala di laboratorio alla scala industriale. Per garantire l'applicabilità industriale della strategia di modellazione e simulazione, verrà eseguita una rigorosa convalida del modello basata su simulazioni numeriche dirette, che guiderà all'identificazione di relazioni di chiusura affidabili e alla valutazione di kernel di rottura e coalescenza per la previsione della distribuzione delle dimensioni delle bolle. Verranno utilizzati sia strumenti di calcolo sviluppati presso l'Università di Bologna che programmi di calcolo open-source con particolare attenzione allo sviluppo di competenze di ricerca industriale. Le attività saranno svolte presso la sede di Forlì.

Research title: *Multi-scale simulations of industrial three-phase reactors*  
Institution: DIN – Department of Industrial Engineering

### **Abstract**

The proposed research activity will involve direct numerical simulation (DNS) of bubble flows in canonical flows. The availability of HPC resources for computationally intensive numerical solution of the model equations is a prerequisite for translating the results of the research activity from the laboratory scale to the industrial scale. To ensure the industrial applicability of the modeling and simulation strategy, rigorous model validation based on direct numerical simulations will be performed, guiding the identification of reliable closure relationships and the evaluation of rupture and coalescence kernels for predicting bubble size distribution. The tools used will be both in-house codes developed in University of Bologna and open-source ones more suited for applied research. The activities will be mainly carried out in the Forlì campus.