



*Alessandro Marchiori, Antonio Pelucchi,
Omar Ligabue, Maurizio Masi
Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria
Chimica "Giulio Natta"
Politecnico di Milano
maurizio.masi@polimi.it*



NUOVE PROSPETTIVE NELLA SIMULAZIONE DEI PROCESSI DI PRODUZIONE DI FORMULATI SOLIDI GRANULARI

In questo lavoro sono mostrate le potenzialità del Metodo degli Elementi Distinti (D.E.M.) per la simulazione di sistemi granulari, ossia sistemi costituiti da un insieme di particelle solide.

In particolare è esaminata l'applicazione alla descrizione del moto di questi sistemi, indicati all'uopo come fluidi granulari, con ricadute industriali nel campo della miscelazione e quindi nella preparazione di prodotti formulati. Infine sono presentati alcuni risultati ottenuti in esperimenti realizzati in microgravità durante la campagna di volo parabolico del 2005 dell'Agenzia Spaziale Europea.

L'industria dei formulati coinvolge molte operazioni nelle quali viene compiuta la movimentazione e la miscelazione di componenti allo stato solido. Queste operazioni necessitano una conduzione ben controllata in quanto una mancata omogeneizzazione del prodotto comporta uno scadimento delle sue proprietà merceologiche. Si vedano, ad esempio, la miscelazione dei granulati polimerici, quelle dei polimeri e additivi ed anche tutte le miscelazioni di inorganici, quali quelle tipiche dell'industria

dei cementi. Queste operazioni sono oggi condotte su basi prettamente empiriche ed il controllo di qualità sul prodotto formulato è realizzato mediante campionamento invasivo; ciò non garantisce una condizione ottimale dell'operazione e si presta a misure non rispondenti al reale stato del sistema. Per sottolineare l'importanza del problema, si consideri che la movimentazione di fluidi granulari oggi è responsabile per circa il 10% del consumo energetico mondiale [1-4] mentre, osservando il quadro industriale italiano, si ha che quasi il

50% delle industrie affiliate a Federchimica si occupa di formulazioni con un fatturato che nel 2004 è stato pari a circa 25 miliardi di euro [5].

Nonostante spesso si sia tentato di descrivere i fluidi granulari alla stregua di quelli continui con comportamento reologico non newtoniano, tale approccio non ha però mai permesso estrapolazioni sufficientemente accurate al di fuori del mero intervallo parametrico adottato per la stima dei parametri reologici stessi [1]. In letteratura sono descritti anche altri approcci, quali

quelli basati sugli automi cellulari e sui metodi tipo Monte Carlo [6, 7]. Tuttavia, anche questi si rivelano al fine inadeguati alla descrizione del sistema, dato che la natura fisica intrinseca dei sistemi granulari è discreta e non continua. Conclusione generale è quella che tutti questi modelli risultano poco efficienti sia per gestire le operazioni di *scale-up* di processo che nei casi in cui si abbia la necessità di simulare materiali granulari costituiti da particelle con caratteristiche fisiche differenti.

Le ragioni di ciò si comprendono esaminando l'intima struttura di questi sistemi, che s'identificano come un insieme di un numero elevato di particelle solide, il cui comportamento apparente è simile a quello di un fluido in quiete o in movimento, pur discostandosi notevolmente sia nella trasmissione degli sforzi meccanici al suo interno che nelle modalità di trasmissione del moto. Infatti, gli sforzi fra le particelle solide non si propagano in maniera uniforme ma tendono a concentrarsi in alcuni punti, mentre i moti macroscopici sono limitati unicamente alle zone prossime alla superficie del sistema. Inoltre non si hanno assolutamente fenomeni di diffusione in assenza di moto. Si manifestano unicamente effetti di "dispersione" solo quando il sistema è sottoposto ad uno stimolo meccanico tale da indurre un moto. Infine, si noti che in un sistema granulare l'energia potenziale è circa 10^{12} volte maggiore di quella interna, rendendo quindi inapplicabile anche un approccio di tipo termodinamico statistico [8].

Risulta quindi di fondamentale importanza trattare questi sistemi da un punto di vista computazionale con un approccio che tenga conto della loro natura discreta.

Un metodo che si presta a tale descrizione è il Metodo agli Elementi Distinti (D.E.M.), che per la natura intrinseca dei sistemi in

esame deve essere gioco forza implementato in tre dimensioni. Questo metodo, che descrive il moto di ogni singola particella solida costituente il sistema alternando la risoluzione delle equazioni del moto (una volta noto il campo di forze agenti sul sistema) alla stima delle forze stesse (una volta note le interazioni tra le particelle, ad esempio mediante le leggi delle deformazioni elastiche), è stato inizialmente sviluppato per applicazioni geotecniche (fondazioni, frane, valanghe, ...) e solo recentemente è stato applicato con successo anche ad applicazioni d'interesse dell'industria chimica, una delle quali è appunto la miscelazione di particelle solide.

Questa forma d'approccio presenta svariati vantaggi, i più importanti dei quali sono, oltre al fatto di ridurre notevolmente l'importanza dei campionamenti invasivi sui sistemi così simulati, la possibilità di eseguire in contemporanea più prove a diverse condizioni operative e la capacità di simulare, date le proprietà fisiche di un qualsivoglia fluido granulare, una qualsiasi geometria dell'apparecchiatura di movimentazione (coclea, nastro trasportatore, tubo pneumatico...) o di miscelazione (miscelatori a tamburo rotante, a coclea, ad agitatore centri-

fugo...) o di macinazione (mulini a palle, a martelli...). Oltre a ciò, è possibile anche studiare le miscele formate da componenti di svariata natura (quali ad esempio polimeri, cementi e cariche lapidee), che possono differire fra loro per grandezza, geometria, densità,

fattore d'attrito o rigidità. In maniera analoga si possono trattare materiali granulari il cui comportamento è fortemente influenzato da forze elettrostatiche o di Van der Waals le quali danno luogo a forti segregazioni fra le fasi ed incidono sensibilmente sul consumo di energia necessaria alla loro miscelazione. È il caso, questo, delle polveri coesive normalmente impiegate nei processi farmaceutici e nella produzione di prodotti per l'edilizia. Inoltre, è anche possibile simulare le miscele bifasiche e descrivere il loro comportamento, cosa impossibile da fare con qualsiasi altro metodo a causa della presenza del liquido che origina tensioni e forze elettrostatiche: si pensi, per esempio, alla messa in opera di leganti idraulici a base cementizia o alle soluzioni colloidali.

L'applicazione del D.E.M. si scontra però con le dimensioni numeriche del problema. Allo stato attuale, con un personal computer è possibile analizzare, in schematizzazione tridimensionale rigorosa, sistemi costituiti da qualche migliaio di particelle. L'implementazione su un sistema di calcolo distribuito consente però di superare agevolmente l'esame di milioni di particelle andando quindi incontro alla possibilità

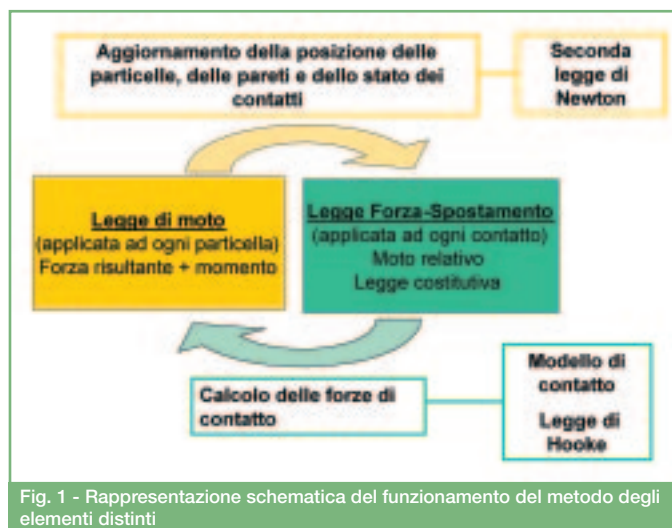


Fig. 1 - Rappresentazione schematica del funzionamento del metodo degli elementi distinti

concreta di simulare sistemi industriali e non solo apparecchiature di laboratorio. Scopo di questo lavoro è quindi quello di offrire una panoramica delle possibilità di questo metodo a sistemi d'interesse la preparazione di formulati e quindi la nostra attenzione sarà focalizzata su sistemi di miscelazione di particelle solide. Per dimostrare l'affidabilità del metodo saranno presentati dei confronti con dati sperimentali ottenuti su apparecchiature di miscelazione alla scala di laboratorio. Analoghi risultati possono essere ottenuti per la simulazione sia per molini (dove si realizza la macinazione di particelle) che per granulatori (dove si realizza l'agglomerazione di polveri fini in particelle di dimensione più elevata).

Il Metodo degli Elementi Distinti (D.E.M.)

Il Metodo degli Elementi Distinti permette di simulare fedelmente il comportamento generale di un materiale granulare considerando il comportamento di ogni singola particella che lo compone [9-15]. Come illustrato schematicamente in Figura 1, il D.E.M. integra le leggi della dinamica classica per il moto dei corpi elastici e la sua

applicazione è concettualmente molto semplice ed intuitiva: inizialmente sono calcolate le forze ed i momenti risultanti su ogni singola particella per poi valutare, tramite integrazione numerica dell'equazione del moto, le accelerazioni, le velocità e le posizioni di ognuna di queste. A questo punto sono analizzati tutti i contatti formati fra i componenti del sistema granulare nella nuova disposizione spaziale e, mediante l'applicazione della legge costitutiva del contatto, vengono determinate le forze che hanno origine da questi. Il ciclo ha poi nuovamente inizio con un nuovo calcolo delle forze e dei momenti risultanti su ogni particella. L'equazione del moto utilizzata non è altro che la seconda legge di Newton:

$$\sum \vec{F}_i = m(\vec{a}_i - \vec{g}_i) \quad (1)$$

dove m è la massa di ogni singola particella che compone il sistema granulare mentre $\sum F_i$, a_i e g_i sono rispettivamente la risultante delle forze (che comprende le forze d'attrito e di contatto), l'accelerazione e le accelerazioni delle forze di campo agenti

su ognuna di esse. Questa equazione viene quindi integrata numericamente sull'intervallo di tempo scelto. Per quanto riguarda invece la relazione costitutiva del contatto, viene utilizzata solitamente la legge di Hooke fra forza e deformazione:

$$\vec{F}_i = K\vec{U}_i \quad (2)$$

dove F_i è la risultante delle forze effetto dell'*i*-esimo contatto (che entrerà poi nell'equazione del moto), K è il coefficiente di rigidità caratteristico del materiale ricavabile dal modulo di Young e U_i è la deformazione cui è soggetta la particella quando entra in contatto con altre particelle o con le pareti di contorno del sistema [15]. È comunque possibile utilizzare, qualora fosse necessario, anche altri differenti modelli di contatto come, ad esempio, quello di Heinz-Mindlin [16-18].

Per la risoluzione di queste equazioni è disponibile il codice commerciale PFC^{3D} [15] che analizza i sistemi granulari in concerto tridimensionale, dove oltre al moto delle singole particelle è possibile considerare anche la loro rottura o aggregazione come

pure l'analisi di particelle di forma generica (simulate come aggregato di particelle sferiche). Una volta prodotta con la simulazione la tracciatura del moto di ogni particella costituente il sistema, è necessario effettuare un'analisi statistica del sistema, ad esempio valutando il suo



Fig. 2 - Parallelismo tra l'approccio D.E.M. e quello meccanico statistico

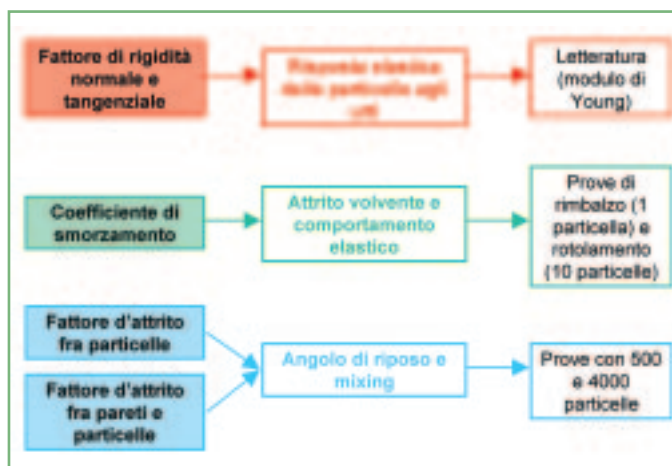


Fig. 3 - Schematizzazione delle modalità di stima dei parametri del modello D.E.M.



grado di micro- e macro-miscelazione in ogni punto dello stesso. Il codice commerciale non contempla la possibilità di compiere un tale tipo di analisi, dato che esso è di scarso interesse per le applicazioni geotecniche, e pertanto tali subroutines sono state sviluppate a cura degli autori del presente lavoro [17].

Le potenzialità di questo metodo risiedono nel fatto che entrano in gioco solo i parametri microscopici del sistema come, ad esempio, il fattore d'attrito, per poi ottenere quelli macroscopici; questo consente di

costituenti permette di ricavare le proprietà del sistema globale, come illustrato in Figura 2.

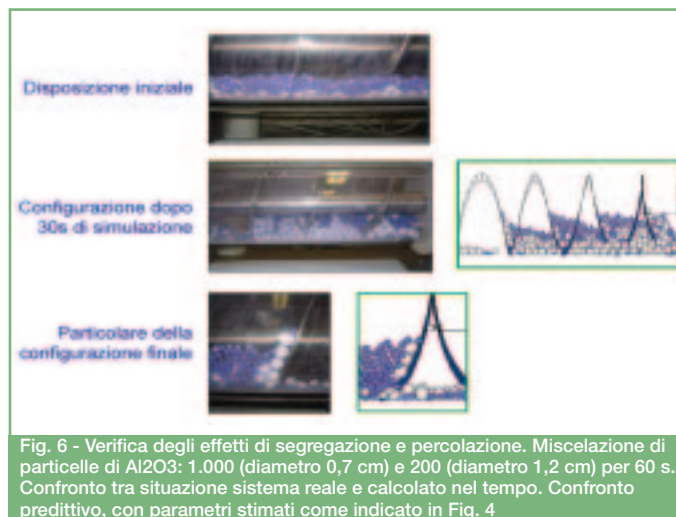
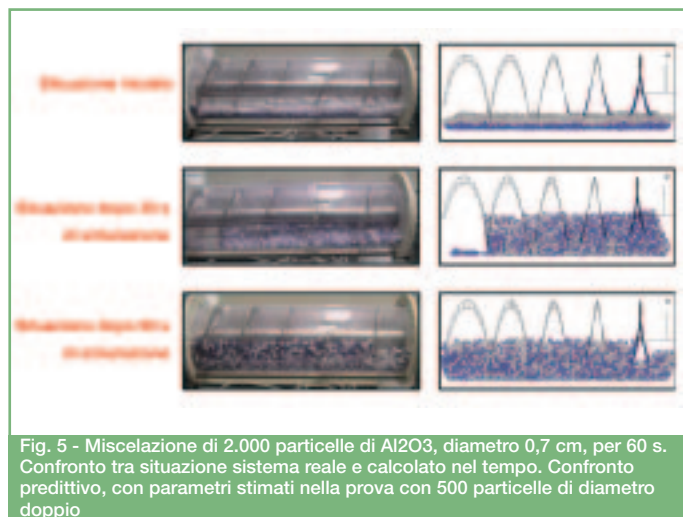
Diviene quindi importante sviluppare una strategia semplice per la stima dei parametri del modello, che sostanzialmente s'identificano con i fattori d'attrito e con le proprietà elastiche dei materiali coinvolti. Come sinteticamente illustrato in Figura 3, la procedura coinvolge la stima dei parametri elastici da dati di letteratura, seguita dalla stima dei parametri di attrito tramite una semplice serie di prove coinvolgenti

ridurre al minimo, se non eliminare completamente, le approssimazioni tipiche di altri approcci. In questo senso, da un punto di vista di un parallelismo concettuale, l'impiego di un approccio tipo D.E.M. è analogo a quello della meccanica statistica che, partendo dalle proprietà degli atomi

un numero limitato di particelle (dell'ordine di qualche decina), come esemplificato dalla Figura 4.

Applicazione alla miscelazione di solidi

Come esempio caratteristico può essere esaminata la miscelazione di particelle solide all'interno di un miscelatore rotante a coclea. Per convalidare le simulazioni, sono state effettuate delle opportune campagne sperimentali con un miscelatore dello stesso tipo alla scala di laboratorio [16]. Ad esempio la Figura 5, mostra l'ottimo accordo tra le simulazioni e la campagna di prove sperimentali. In particolare si noti che i parametri del modello sono stati stimati per un sistema di 500 particelle di 1,2 cm di diametro, mentre queste prove sono state effettuate con 2.000 particelle di 0,7 cm di diametro. Questo risultato è particolarmente importante perché dimostra la predittività del metodo. Risultati analoghi non possono essere ottenuti con gli approcci continui, Monte Carlo e degli automi cellulari. A conferma della predittività del metodo, possono essere analizzati anche gli aspetti segregativi e percolativi che si manifestano quan-



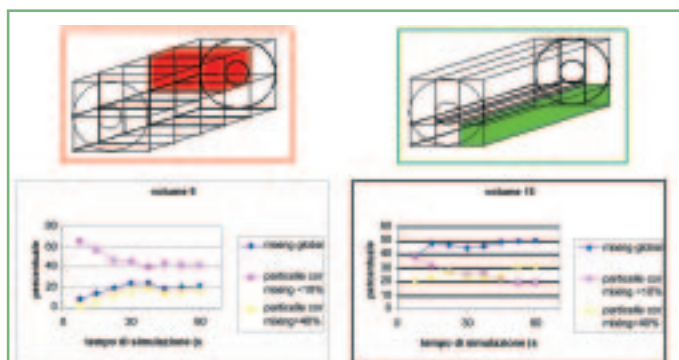


Fig. 7 - Esempio dell'evoluzione temporale dei parametri di merito per la miscelazione calcolati in diversi volumi di controllo del miscelatore

do sono presenti particelle di differente diametro, come illustrato in Figura 6. Infine, a posteriori, è anche importante valutare la bontà dell'operazione non solo da un punto di vista visivo, ma anche mediante opportuni indici statistici, quali quelli di macro e micro miscelazione, calcolati in volumi di controllo arbitrariamente scelti. Un esempio dell'evoluzione temporale di detti parametri è illustrata in Figura 7, dalla quale si vede che per il sistema qui in esame, la durata dell'operazione è notevolmente sovradimensionata rispetto alle reali necessità. Pertanto, una qualità di miscelazione analoga poteva essere ottenuta con un tempo di operazione di circa la metà, con un conseguente risparmio energetico della stessa entità.

Leggi di scala

Come già detto nell'introduzione, uno dei limiti del metodo D.E.M. è rappresentato

dall'onere computazionale ad esso associato che limita

il numero di particelle che può essere simulato. Pertanto diventa interessante cercare di sviluppare delle leggi di scala che consentano di realizzare delle appropriate similitudini e che portino vantaggi tangibili. In tal senso è possibile ottenere informazioni su sistemi costituiti da particelle di piccole dimensioni simulando sistemi di particelle di grandi dimensioni purché si modifichi il loro modulo di rigidità e corrispondentemente il valore dell'accelerazione di gravità. Come illustrato in Figura 8, il modulo di rigidità scala con il cubo del diametro di particella, mentre l'accelerazione di gravità (o equivalentemente l'accelerazione delle forze di massa) scala linearmente con la dimensione di particella. Quindi, informazioni su sistemi reali possono essere ottenute

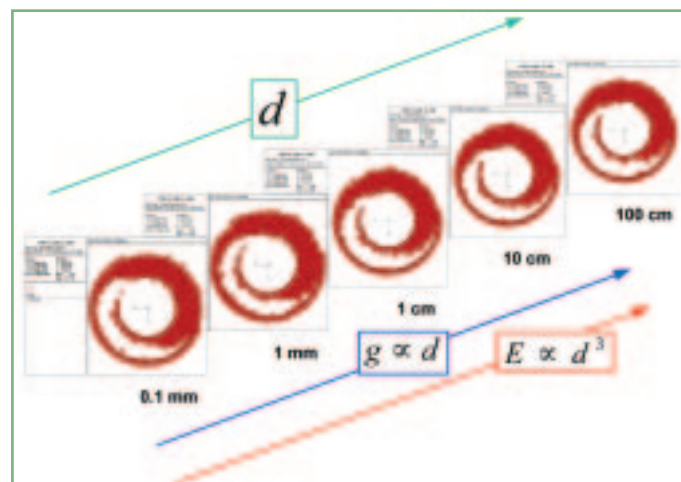


Fig. 8 - Rappresentazione schematica delle leggi di scala per sistemi granulari (g, E, d, rispettivamente accelerazione di "gravità", modulo di rigidità e diametro di particella)

simulando sistemi fittizi i cui parametri siano nei corretti rapporti relativamente a quelli del sistema reale, con considerevoli vantaggi soprattutto in termini di tempo di calcolo. Ciò comporta notevoli vantaggi nella stima dei parametri di macromiscelazione in miscelatori di scala industriale.

8ª campagna di volo parabolico

A riprova della grande attenzione sul moto dei fluidi granulari e sulla loro miscelazione, un esperimento analogo a quelli sopra illustrati è stato selezionato dall'Agenzia Spaziale Europea per partecipare all'ottava campagna di volo parabolico dedicata agli studenti. Il volo parabolico consiste infatti nel far eseguire ad un aereo una traiettoria parabolica, nella zona più alta

New Perspectives in the Simulation of Production Processes of Formulated Granular Solids

ABSTRACT 

The possibilities of Distinct Elements Methods (D.E.M.) to the simulation of granular systems (i.e., systems made by an ensemble of solid particles) are presented here. In particular, the application to the simulation of the motion of these systems (the so called granular fluids) is addressed with reference to the mixing applications. Thus the final aim is the production of formulated granular solids. Finally, some results obtained in microgravity conditions during the last 2005 Students Parabolic Flight Campaign by the European Space Agency are also presented.

della quale, si ottiene, per circa 20 secondi, l'assenza di gravità. Per ogni sessione di volo vengono effettuate 30 parabole corrispondenti a circa 10 minuti complessivi di assenza di peso. Ovviamente, dato che il volo è sub atmosferico, per un tempo equivalente l'accelerazione di gravità è doppia rispetto a quella naturale. Ciò ha concesso la possibilità di ampliare e di approfondire la comprensione del comportamento di tali sistemi in condizio-

ni operative non convenzionali se non addirittura estreme. Oltre alla raccolta dei dati sperimentali, la messa a punto dell'esperimento ha una notevole valenza didattica in quanto impegna degli studenti nella progettazione e messa in sicurezza dell'esperimento, nonché della sua gestione in condizioni di forte sollecitazione psico-fisica. Nonostante ciò, gli aspetti di natura emozionale ripagano di tutte le fatiche sopportate, come mostrato dalla

pimento del mixer o come la riduzione dei fenomeni percolativi, ma anche di conseguire un'ulteriore prova della bontà e dell'accuratezza del software utilizzato e dell'approccio generale al problema della trattazione dei fluidi granulari.

Conclusioni

Gli esempi riportati mostrano le notevoli prospettive per la simulazione dei problemi inerenti la movimentazione e miscelazione di fluidi granulari mediante l'approccio degli elementi distinti. Ovviamente, deve essere superato il problema di una efficace simulazione dei sistemi a grande numero di particelle (dell'ordine dei diversi milioni), ma la disponibilità di calcolo distribuito su più processori sembra fornire la soluzione anche a questo problema. Il metodo si presta inoltre allo studio dei sistemi di macinazione, così come di quelli di agglomerazione.

Ringraziamenti: Si ringraziano sentitamente Mapei e Asus Italia per i loro preziosi contributi.



Fig. 9 - Momenti dell'VIII campagna di volo parabolico per studenti dell'Agenzia Spaziale Europea. Esperimento: miscelazione di materiali granulari. Studenti zero g: Francesco Ceriani, Alessandro Fiorucci, Alessandro Marchiori, Laura Zamolo

Figura 9. I risultati ottenuti in condizioni così particolari sono stati notevoli ed hanno permesso non solo di evidenziare alcuni comportamenti particolari dei fluidi granulari, come lo smorzamento dell'influenza dei moti convettivi a basso grado di riem-

Bibliografia

- [1] R. Weinekötter, H. Gericke, *Mixing of solids*, Kluwer Academic, London UK, 2000.
- [2] B.C. Utter, Duke University, www.phy.duke.edu/~utter/granular.html, 2004
- [3] J. Bridgewater, *Chemical Engineering Science*, 1995, **50**, 4081.
- [4] R. Steward *et al.*, *Chem. Eng. Sci.*, 2001, **56**, 5457.
- [5] Rapporto Federchimica "L'industria chimica in Italia", www.federchimica.it, 2005.
- [6] S. Wolfram, *Theory and applications of Cellular Automata*, World Scientific, Singapore, 1986.
- [7] M. Castier, M. Cuéllar, *Powder Technology*, 1998, **97**, 200.
- [8] H. Jager, S. Nagel, *Review of Modern Physics*, 1996, **68**, 1259.
- [9] C. Lin *et al.*, *Proc. Natl. Sci. Counc.*, 2000, **24**, 394.
- [10] T. Matsushima, H. Saomoto, Discrete element simulation of an assembly of irregularly shaped grains: quantitative comparisons with experiments, 16th ASCE Engineering Mechanics Conference.
- [11] K. Mao *et al.*, *Journal of Vibrations and Acoustics*, 2004, **126**, 208.
- [12] P. Cundall, *Geotechnique*, 1979, **29**, 47.
- [13] J.A. Ferrez, Dinamic triangulation for efficient 3D simulation of granular materials, Ph.D Thesis n. 2432, EPFL, 2001.
- [14] Y. Kaneko, *Powder Technology*, 2000, **108**, 55.
- [15] PFC^{3D} Manual, Itasca, 1999.
- [16] A. Marchiori, A. Pelucchi, "Miscelazione di solidi e moto di fluidi granulari: approccio sperimentale e computazionale", Tesi di laurea, Politecnico di Milano, 2005.
- [17] O. Ligabue, M. Masi, S. Carrà, Study of the influence of friction factor on mixing quality in granular systems through 3D D.E.M. simulations, Atti del congresso GRICU, Ischia, Settembre 2004.
- [18] A. Di Rienzo, F. De Maio, *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**, 525.