

ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITA' DI BOLOGNA

SCUOLA DI INGEGNERIA E ARCHITETTURA

Sede di Forlì

Corso di Laurea in
INGEGNERIA AEROSPAZIALE
Classe L-9

ELABORATO FINALE DI LAUREA

In Propulsione Aerospaziale

Analisi degli effetti di parete nell'impacchettamento
di polveri in un propellente solido

CANDIDATO

Cecilia Ricci

RELATORE

Fabrizio Ponti

Anno Accademico
2020/2021

Indice

1.	INTRODUZIONE	7
1.1.	PROBLEMA DELL'IMPACCHETTAMENTO	7
1.2.	SPHERE PACKING ORDINATO	10
1.3.	SPHERE PACKING RANDOMICO	11
1.3.1.	METODI DI COSTRUZIONE.....	12
1.3.2.	METODI DINAMICI	15
2.	METODO UTILIZZATO	17
2.1.	CONDIZIONI AL CONTORNO	19
3.	FUNZIONI	20
3.1.	FUNZIONE PACKINGNEW	20
3.2.	FUNZIONE PACKINGNEW_BI	22
3.3.	FUNZIONE PACKINGNEW_TRI	22
4.	DISTRIBUZIONE PERCENTUALE DELL'AREA	24
4.1.	CASO MONOMODALE	25
4.1.1.	FUNZIONE AREA_MONOMODALE	25
4.2.	CASO BIMODALE	27
4.2.1.	FUNZIONE AREA_BIMODALE	27
4.3.	CASO TRIMODALE	29
4.3.1.	FUNZIONE AREA_TRIMODALE	29
5.	RISULTATI NUMERICI	31
5.1.	CASO MONOMODALE	31
5.2.	CASO BIMODALE	35
5.3.	CASO TRIMODALE	38
5.3.1.	EFFETTO DI DEVIAZIONE	41
6.	CONCLUSIONI E SVILUPPI FUTURI	44
7.	BIBLIOGRAFIA.....	45

Elenco delle figure

1. Cannonball Problem	8
2. Impacchettamento cubico e esagonale	9
3. Impacchettamento monomodale	11
4. Impacchettamento bimodale	11
5. Impacchettamento randomico	12
6. Sequential Inhibition	13
7. Triangulation Method	13
8. Lily Pond Model	14
9. Dropping and Rolling	14
10. Isotropic Compression	15
11. Particle Expansion	16
12. Collective Rearrangement	16
13. Sfere compenstrate fra loro	17
14. Dominio con pareti solide	19
15. Plot dell'area occupata da 1000 particelle monomodale	26
16. Plot dell'area occupata da 10.000 particelle caso bimodale	28
17. Plot dell'area occupata da 220.000 particelle caso trimodale ..	30
18. Effetto di parete con 1000 particelle	33
19. Effetto di parete con 9000 particelle	33
20. Disposizione 1000 particelle con effetto di parete	34
21. Disposizione 1000 particolare asse xy	34
22. Differenti percentuali nell'impacchettamento bimodale	35
23. Disposizione 9000 particelle con effetto di parete	37
24. Disposizione 9000 particolare asse xy	37
25. Differenti percentuali nell'impacchettamento trimodale	38
26. Disposizione 9000 particelle con effetto di parete	40
27. Disposizione 9000 particolare asse xy	40
28. Differenza nell'impacchettamento diversi rapporti fra raggi ...	41
29. Area occupata in percentuale con $\sigma = [0, 0.1, 0.15]$	42
30. Differenze a seguito di modifica del codice	43

Elenco delle tabelle

1. Variazioni Isotropiche	19
2. Condizioni di Parete	21
3. Fase di Controllo Bimodale	22
4. Fase di Controllo Trimodale	23
5. Input e Output Funzione Monomodale	25
6. Input e Output Funzione Monomodale	27
7. Input e Output Funzione Trimodale	29
8. Ripartizione dei centri delle particelle in base alle dimensioni	29
9. Aumento Percentuale con condizioni di parete	32
10. Valori dell'area occupata con 30% di particelle piccole	36
11. Valori dell'area occupata con 90% di particelle piccole	36
12. Valori dell'area occupata con 30% di particelle piccole	39
13. Valori dell'area occupata con 90% di particelle piccole	39
14. Modifiche applicate al codice	43

Abstract

In questo elaborato di tesi, tramite lo sviluppo di un software in Matlab, verrà mostrata la procedura di impacchettamento di polveri tramite un algoritmo di Random Close Packing, già sviluppato all'interno del Laboratorio di Propulsione, a cui sono state aggiunte condizioni di parete ad uno solo degli assi. Verrà mostrato l'effetto delle condizioni di parete sull'impacchettamento, in particolare sul posizionamento finale delle particelle, nelle casistiche di composizione granulometrica monomodale, bimodale e trimodale. Verrà mostrato un algoritmo di calcolo della distribuzione dell'area occupata dalle particelle nelle tre casistiche sopra citate, che è stato utilizzato per studiare il grado di impacchettamento finale delle particelle a seguito della conclusione dell'algoritmo.

1 INTRODUZIONE

Con l'obiettivo di studiare il processo di impacchettamento di polveri tramite un algoritmo di Random Close Packing in questo elaborato verranno descritti gli effetti che la presenza di condizioni di parete ha su tale processo.

Il capitolo 1, avrà lo scopo di introdurre la problematica dell'impacchettamento. Nello specifico il paragrafo 1.1 descriverà la storia dello Sphere Packing, il paragrafo 1.2 descriverà lo Sphere Packing ordinato, il paragrafo 1.3 lo Sphere Packing Randomico e le varie tipologie di algoritmo utilizzabili.

Nel capitolo 2, verrà descritta la tipologia di algoritmo utilizzata in questo studio.

Nel capitolo 3, verranno illustrate le funzioni utilizzate.

Nel capitolo 4, verrà riportato lo studio della distribuzione dell'area occupata.

Nel capitolo 5, verranno mostrati i risultati numerici derivati dallo studio.

Infine, nel capitolo 6, verranno riportate le conclusioni ricavate dai risultati finali.

1.1 PROBLEMA DELL'IMPACCHETTAMENTO

Il problema dell'impacchettamento consiste nell'impacchettamento di oggetti, di dimensioni e forma fissate, in una regione anch'essa di forma prefissata, durante l'impacchettamento viene identificato l'arrangiamento e la posizione degli oggetti geometrici e questi poi determineranno la dimensione finale della regione che li contiene.

Il problema nacque alla fine del 1590 con Sir Walter Raleigh, che per primo pose il *Problema delle palle di cannone* o *Cannonball Problem* al suo assistente Thomas Harriot. Sir Walter Raleigh voleva sapere quante palle di cannone si trovassero in una pila senza dover contare individualmente tutte le palle. La soluzione di Harriot fu la seguente per una piramide a base quadrata: $\frac{1}{6}k(k+1)(k+2)$ con k numero delle palle di cannone lungo la base della piramide.

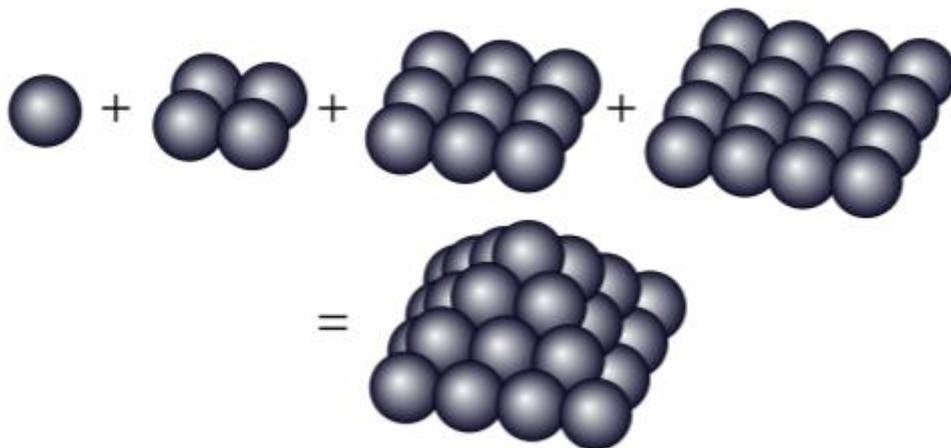


Figura 1 - Cannonball Problem

Harriot però era interessato ad un'applicazione più generale, ossia in che modo si potesse impilare nel modo più efficiente delle palle di cannone nella stiva di una nave e così nacque il problema dello *Sphere Packing*.

Nel 1611 Keplero congetturò che il miglior modo per ottenere un'alta densità di impacchettamento fosse quello di utilizzare una struttura cubica ('cubic close packing') di impacchettamento oppure una di tipo esagonale ('hexagonal close packing').

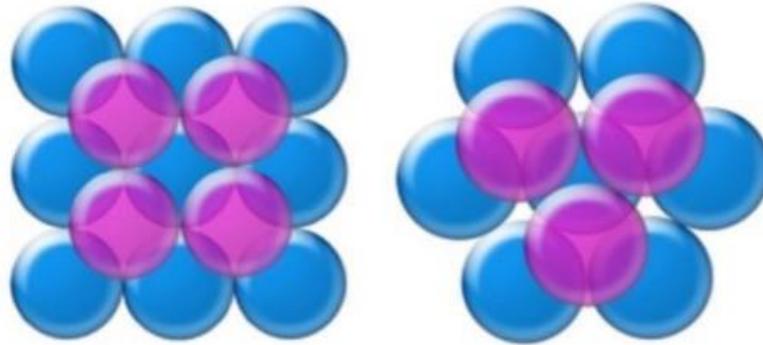


Figura 2 - Impacchettamento cubico e esagonale

Nel 1831 Gauss fu in grado di provare che il cubic close packing fosse in grado di raggiungere, nelle tre dimensioni, il maggior grado di densità di impacchettamento, fu il primo passo nel provare la Congettura di Keplero, mostrando che i centri delle sfere formano triangoli rettangoli in ogni direzione se viene utilizzato un lattice regolare.

Nel 1953 Lászlò Fejes Tóth ridusse il problema dello *Sphere Packing* ad una serie di calcoli, per cercare di trovare quale fosse la maggior densità di impacchettamento sia per arrangiamenti regolari che per quelli irregolari, potendo così fornire una prova esaustiva della Congettura di Keplero.

Nel 1998 Hales e Ferguson con l'aiuto del computer riuscirono ad automatizzare i calcoli che permisero loro di dare una prova della Congettura di Keplero, seguendo i passi di Tóth, che aveva dimostrato possibile una prova tramite *exhaustion*. [1,2]

La versione randomica del problema dell'impacchettamento di sfere rimane irrisolta [3] finché nel 1960 Bernal introdusse il concetto di random close packing (RCP) per indicare la miglior modalità di impacchettamento randomico per sfere. Nonostante molte simulazioni empiriche abbiano

riprodotto impacchettamenti randomici con una frazione volumetrica ϕ_{RCP} attorno a 0.64 non si è raggiunta l'unanimità sul suo esatto valore. [4,5]

Lo Sphere Packing Problem ha diverse applicazioni pratiche, in particolare l'impacchettamento di oggetti tridimensionali, come le sfere, si è rivelato molto utile in vari rami dell'industria, ad esempio è stato utilizzato come modello per rappresentare le strutture di liquidi e materiali vetrosi, per studiare fenomeni come la conduttività elettrica, la distribuzione dello stress e altre caratteristiche meccaniche di materiali granulari, per studiare processi come la sedimentazione, la compattazione e la sinterizzazione.

Inoltre vi sono applicazioni nella medicina nel campo della radiochirurgia, nella metallurgia per il taglio laser e nella logistica dei trasporti per quanto riguarda l'arrangiamento e lo scarico merci.

1.2 SPHERE PACKING ORDINATO

Lo scopo dello Sphere Packing è quello di trovare il rapporto tra le particelle, in termini di diametro e volume, che permette di massimizzare la frazione volumetrica all'interno del dominio.

Nel caso di sfere di uguale dimensione la massima densità ottenibile è

$\frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74048$ mentre nel caso di particelle con due diametri diversi è

$$1 - \left(1 - \frac{\pi}{\sqrt{18}}\right)^2 \cong 0.9326 .$$

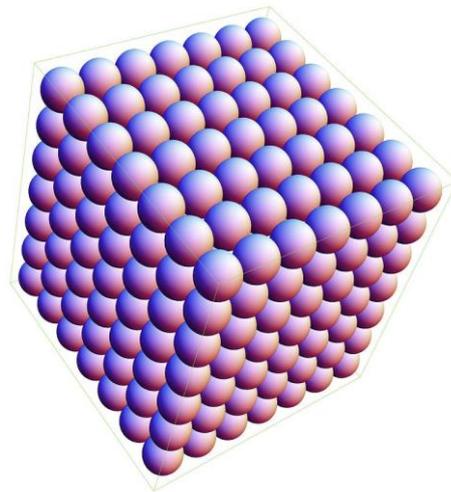


Figura 3 - Impacchettamento monomodale

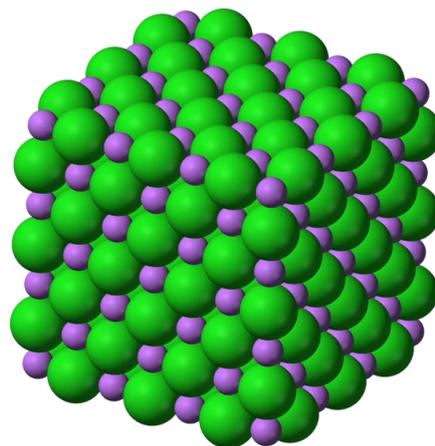


Figura 4 - Impacchettamento bimodale

1.3 SPHERE PACKING RANDOMICO

Come accennato in precedenza per un impacchettamento di tipo randomico non è possibile determinare a priori il livello di riempimento del dominio.

Di seguito saranno presentati alcuni metodi con cui approcciarsi all'impacchettamento, i metodi sono generalmente classificati in due gruppi: quello delle tecniche costruttive e quello delle tecniche dinamiche [6].

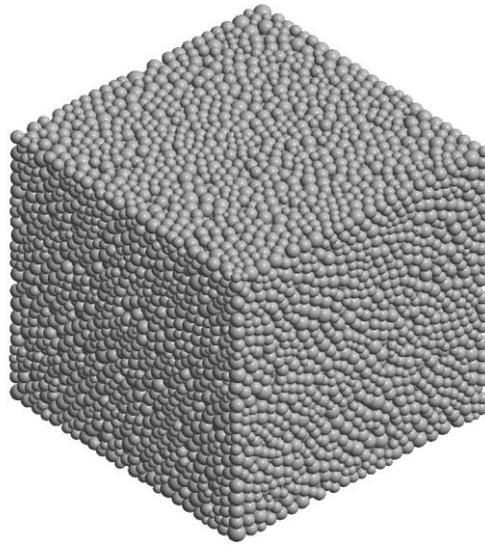


Figura 5 - Impacchettamento randomico

1.3.1 METODI DI COSTRUZIONE

Nei metodi di costruzione le considerazioni sono puramente di carattere geometrico e generalmente la posizione e la dimensione delle particelle rimangono invariate durante il processo di impacchettamento. Di conseguenza questi metodi hanno la caratteristica di essere veloci e potrebbero essere considerati vantaggiosi rispetto ad una soluzione di tipo dinamico.

Sequential Inhibition: i raggi delle particelle vengono determinati in base ad una certa legge di distribuzione delle dimensioni mentre le posizioni vengono determinate in modo randomico. Nel momento in cui una particella si compenetra con un'altra la sua posizione iniziale viene eliminata e ne viene proposta un'altra, mantenendo sempre lo stesso raggio. È facilmente

implementabile, ma non permette di raggiungere alte densità di impacchettamento a causa della sua natura ‘trial and error’.

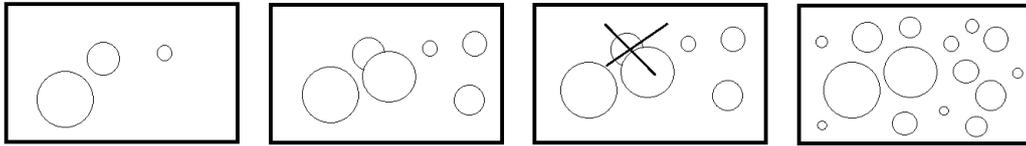


Figura 6 - Sequential inhibition

Triangulation Method: inizialmente viene applicata una prima triangolazione basata sulle caratteristiche dell'elemento considerato, successivamente vengono aggiunte circonferenze (o sfere) inscritte e infine, per aumentare la densità di impacchettamento, vengono aggiunte circonferenze ai vertici dei triangoli creati. È un metodo che necessita una costruzione a priori e genera basse densità di impacchettamento.

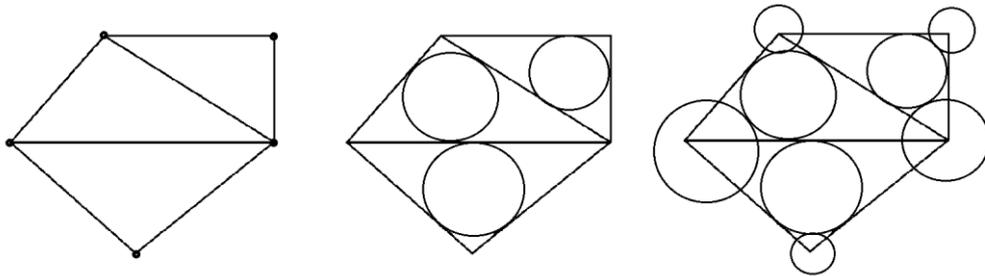


Figura 7 - Triangulation Method

Lily-Pond Model: inizialmente viene generato il numero di particelle desiderato con dimensione pari a zero e viene calcolata la dimensione di ogni particella come metà della distanza fra il suo centro e il centro della particella più vicina oppure ingrandendo progressivamente ogni particella finché non

viene a contatto con le altre. È un metodo semplice da implementare, ma non è adatto a raggiungere alte densità di impacchettamento.[7]

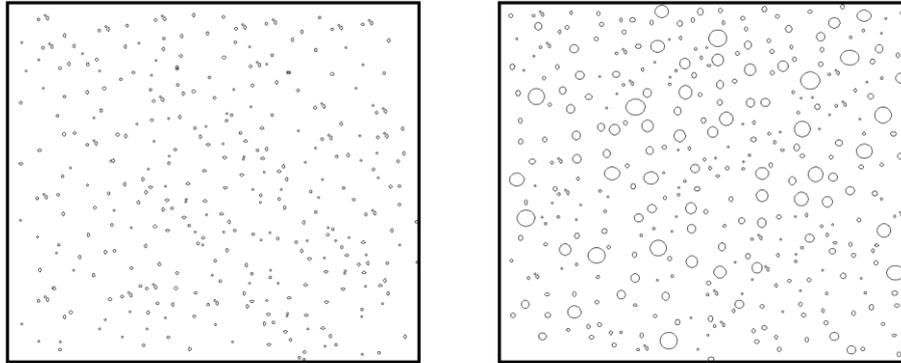


Figura 8 – Lily-Pond Model

Dropping and Rolling: la posizione di ogni particella viene spostata verso la parte bassa del dominio finché non incontra un'altra particella o il fondo del dominio (avviene il 'drop'). Successivamente viene fatta 'rotolare' finché non incontra una terza particella (avviene il 'roll'). Il processo di rotolamento avviene in maniera ricorsiva finché non è raggiunto uno stato di equilibrio stabile. È una metodologia che richiede un elevato costo computazionale ma può permettere di raggiungere elevate densità di impacchettamento sia in 2D che in 3D.

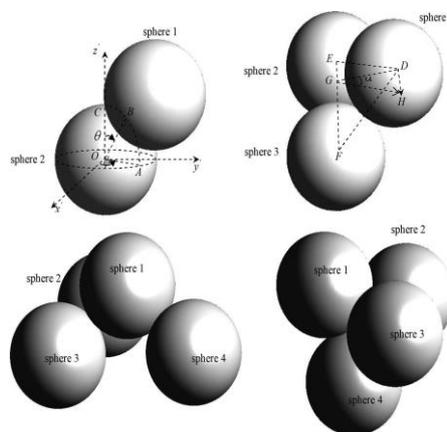


Figura 9 - Dropping and Rolling

1.3.2 METODI DINAMICI

I metodi dinamici sono basati sulla modifica di posizione e dimensione delle particelle, i movimenti delle particelle possono essere calcolati tramite modelli puramente geometrici oppure tramite modelli dinamici, nei quali ogni particella ha una o più proprietà fisiche che le permettono di trovare una posizione di equilibrio dipendente dalle sue interazioni con le altre particelle. Sono metodi che necessitano di un alto costo computazionale perché posizione e dimensione di ogni particella vengono modificate durante tutto il processo di impacchettamento.

Isotropic Compression: consiste nel creare un dominio virtuale per le particelle considerate di dimensioni molto maggiori rispetto a quelle reali, per poi comprimere in modo isotropico il dominio in modo che converga a quello reale, monitorando la distanza fra le particelle stesse. È un metodo che prevede un alto costo computazionale dal momento che la posizione delle particelle e le dimensioni del dominio variano ad ogni step. Non è possibile raggiungere alte densità di impacchettamento perché molte particelle hanno una posizione randomica e non ottimale.

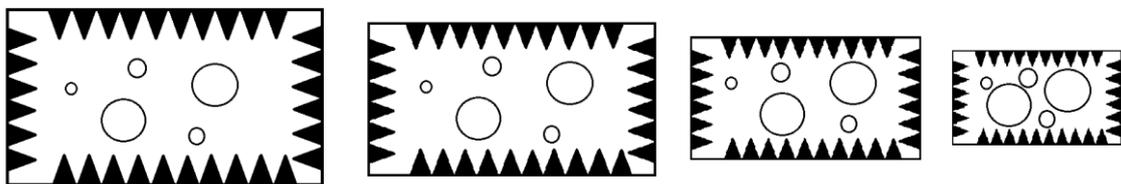


Figura 10 - Isotropic Compression

Particle Expansion: può essere considerata l'opposto della precedente, infatti al posto di variare le dimensioni del dominio variano le dimensioni

delle particelle. Inizialmente viene posto il numero desiderato di particelle all'interno del dominio, con raggio inferiore rispetto a quello desiderato, successivamente le dimensioni delle particelle vengono aumentate progressivamente ad ogni iterazione finché non viene raggiunta la densità ottimale. Non è un metodo adatto a raggiungere alte densità di impacchettamento dal momento che le particelle non si trovano nella loro posizione ottimale, ma questa è imposta in maniera randomica.

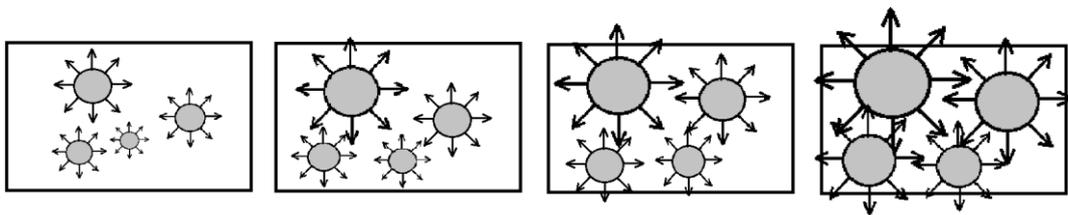


Figura 11 - Particle Expansion

Collective Rearrangement: consiste nella generazione delle particelle desiderate all'interno del dominio, permettendo la compenetrazione fra esse, successivamente viene modificata la posizione e talvolta anche la dimensione delle particelle, in modo da eliminare tali compenetrazioni. È un metodo che necessita di un alto costo computazionale e vi è il rischio che persistano compenetrazioni tra particelle se viene aggiunta una legge di distribuzione della dimensione.

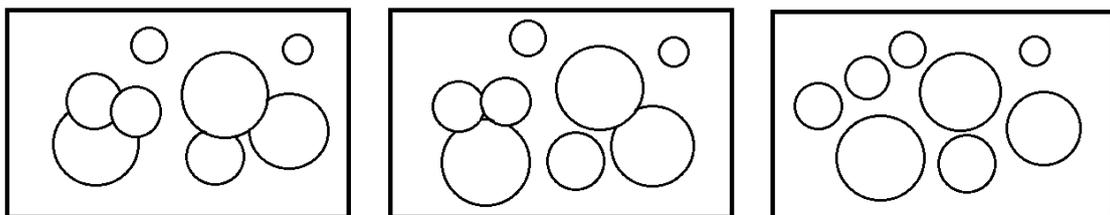


Figura 12 - Collective rearrangement

2 METODO UTILIZZATO

Il codice è stato sviluppato ispirandosi ai seguenti due metodi: *Collective Rearrangement* e *Isotropic Compression*.

Le coordinate dei centri vengono determinate in maniera randomica, una volta posizionate tutte le particelle all'interno del dominio viene applicato un processo iterativo, all'interno del quale vengono applicati spostamenti alla posizione delle particelle, tali spostamenti sono basati su una fittizia forza di repulsione che viene a formarsi in seguito alla compenetrazione di due o più sfere.

In Figura 13 si può osservare un esempio di compenetrazione.

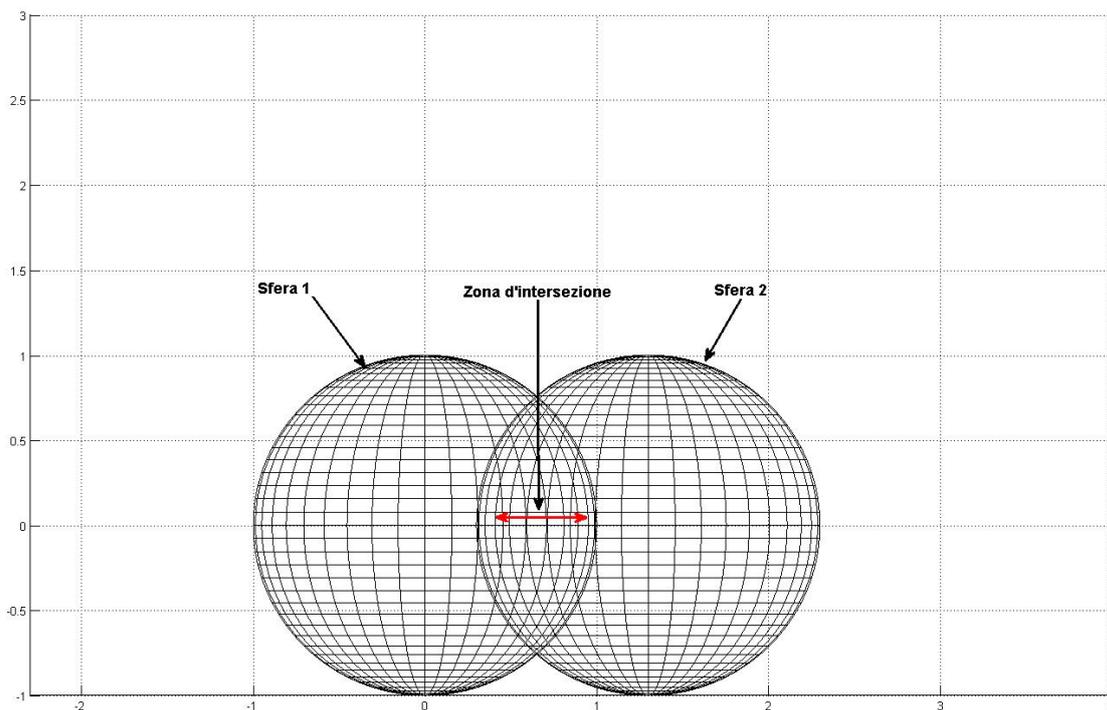


Figura 13 - Sfere compenstrate tra loro

Per il calcolo della forza risultante si è utilizzato come modello quello di due sfere che si compenetrano, la forza risultante, secondo la teoria di Hertz, può essere espressa come:

$$F_{ij} = \sqrt{\frac{r_i r_j}{r_i + r_j}} (k_n \delta_{ij}^{1.5} - \gamma_n \delta_{ij}^{0.5} v_n) \vec{n}_{ij}$$

δ_{ij} corrisponde alla compenetrazione, γ_n e k_n sono costanti caratteristiche del materiale.

Dal momento che questo modello è solo un punto di partenza per giungere alla configurazione finale, la formula può essere riscritta nella forma semplificata:

$$F_{ij} = k_p \sqrt{r_{ij}} \delta_{ij} \vec{n}_{ij}$$

con $r_{ij} = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j}$.

E dal momento che una particella potenzialmente può avere più di una compenetrazione la forza risultante sarà:

$$F_i = \sum_j k_p \sqrt{r_{ij}} \delta_{ij} \vec{n}_{ij}$$

Con k_p costante elastica delle particelle.

Nota la forza risultante agente sulla singola particella è possibile determinarne lo spostamento infinitesimo associato.

Per quanto riguarda le dimensioni del dominio si è dato al lato del cubo un valore dipendente dal volume totale delle particelle scelte, minore rispetto a quello finale, poiché in fase iniziale le particelle potrebbero essere compenstrate. Viene applicato un processo iterativo e il dominio, e di conseguenza le posizioni delle particelle, vengono espansi o compressi in maniera isotropica, come si può vedere nell'estratto di codice sottostante.

Tabella 1 - Variazioni Isotropiche

$L=L*1.0025;$ $X=X*1.0025;$	$L=L/1.00125;$ $X=X/1.00125;$
espansione isotropica	compressione isotropica

2.1 CONDIZIONI AL CONTORNO

Come obiettivo del lavoro di tesi si è prefissato quello di aggiungere delle condizioni al contorno di parete al codice già sviluppato nel Laboratorio di Propulsione. In particolare sono state aggiunte all'asse 'x'.

In Figura 14 si possono vedere le pareti che sono diventate solide.

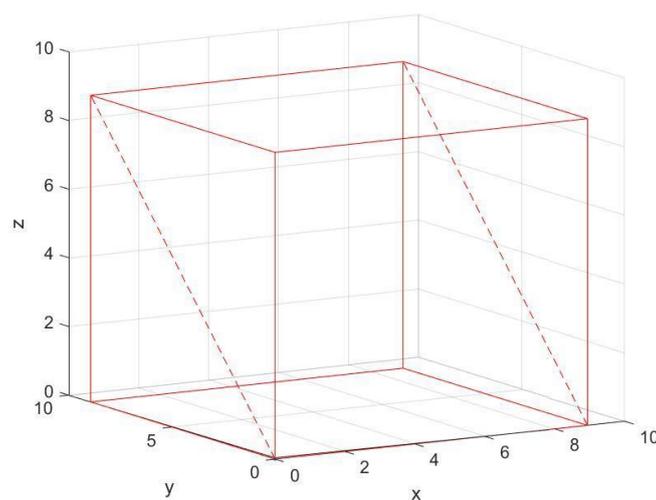


Figura 14 - Dominio con pareti solide (segmento tratteggiato)

Nel caso quindi una delle particelle esca dal dominio lungo l'asse 'x', essa riceve una forza verso il centro del dominio. Di conseguenza si genera uno spostamento, che si va a sommare agli spostamenti attuati per evitare compenetrazioni tra le particelle.

3 FUNZIONI

3.1 FUNZIONE PACKINGNEW

La problematica principale di un processo di impacchettamento di questo tipo è l'elevato tempo di calcolo richiesto, dovuto al fatto che ad ogni iterazione devono essere calcolate le distanze delle particelle rispetto alle altre e i relativi spostamenti. Se si fossero calcolate le distanze delle particelle dalle pareti e i relativi spostamenti nella fase di riarrangiamento del codice, i tempi di calcolo sarebbero risultati inattuabili, dal momento che ad ogni spostamento delle particelle lontano dalle pareti si sarebbero create nuove compenetrazioni, che avrebbero necessitato di un successivo riarrangiamento. Questo avrebbe potenzialmente portato ad un ciclo di spostamenti troppo lungo, per questo motivo si è aggiunto, all'inizio di ogni iterazione, un controllo delle distanze delle particelle dalle pareti e uno spostamento verso il centro del dominio nel caso di compenetrazione.

Questo ha permesso di svolgere il riarrangiamento delle particelle senza doverle spostare una seconda volta.

In seguito, durante la fase della determinazione delle distanze fra particelle, si sono aggiunti gli effetti della parete solida soltanto ai valori relativi all'asse 'x'.

In tabella 2 è riportato l'estratto di codice in cui è stato aggiunto l'effetto delle condizioni di parete al calcolo delle differenze fra le coordinate delle particelle.

Tabella 2 - Condizioni di Parete

```
oldnormaX_block = oldnormaX(:,1);  
oldnormaX(abs(oldnormaX)>L/2)=  
oldnormaX(abs(oldnormaX)>L/2)- ...  
L*sign(oldnormaX(abs(oldnormaX)>L/2));  
oldnormaX(:,1) = oldnormaX_block;
```

Una volta determinati gli spostamenti da applicare ad ogni particella e in fase di modifica delle coordinate si è applicato nuovamente un controllo sulle distanze dalle pareti e, nel caso fossero presenti compenetrazioni, si sono modificate le posizioni delle particelle interessate.

Tramite le funzioni per il calcolo dell'area occupata in percentuale si è calcolata l'area e si è plottata con il valore delle coordinate dei piani che sezionano il dominio.

In fase di controllo, una volta svolto il programma, si è calcolata la distanza di ogni particella dalle pareti, per verificare che non vi fossero particelle ancora compenstrate.

3.2 FUNZIONE PACKINGNEW_BI

Per il caso bimodale si sono dovute apportare alcune modifiche alla fase di controllo finale della distanza dalle pareti, dal momento che i criteri di spostamento dipendono dalla dimensione del raggio. Si è scelto di salvare i valori dei raggi nella variabile R non in maniera casuale, ma piuttosto in ordine decrescente, le prime 'NN' particelle del vettore tutte di raggio 1, mentre le rimanenti di raggio 0.2.

In Tabella 3 si può osservare la fase di controllo finale per due valori di raggio.

Tabella 3 - Fase di Controllo Bimodale

```
%X_block per R1
X_block_1 = X(1:NN,1);
X_block_1(X_block_1<RR(1)) = RR(1);
X_block_1(X_block_1>L-RR(1)) = L-RR(1);

%X_block per R2
X_block_2 = X((NN+1):end,1);
X_block_2(X_block_2<RR(2)) = RR(2);
X_block_2(X_block_2>L-RR(2)) = L-RR(2);
```

3.3 FUNZIONE PACKINGNEW_TRI

Anche per il caso trimodale si sono dovute apportare modifiche alla fase di controllo finale della distanza dalle pareti, dal momento che i valori delle dimensioni del raggio scelti sono 1, 0.2 e 0.04. Analogamente al caso

bimodale si è scelto di mantenere un ordine decrescente nel salvataggio dei valori delle dimensioni del raggio nella variabile R. In tal modo è stato possibile applicare in maniera efficace il controllo delle distanze dalle pareti, che, come accennato in precedenza, è dipendente dalle dimensioni del raggio.

In Tabella 4 si può osservare la fase di controllo per tre diversi valori di raggio.

Tabella 4 - Fase di Controllo Trimodale

```
%X_block per R1
X_block = X(:,1);
X_block_1 = X_block(1:NN);
X_block_1(X_block_1<RR(1)) = RR(1);
X_block_1(X_block_1>L-RR(1)) = L-RR(1);

%X_block per R2
X_block_2 = X_block(NN+1:NN+nn1);
X_block_2(X_block_2<RR(2)) = RR(2);
X_block_2(X_block_2>L-RR(2)) = L-RR(2);

%X_block per R3
X_block_3 = X_block(NN+nn1+1:end);
X_block_3(X_block_3<RR(3)) = RR(3);
X_block_3(X_block_3>L-RR(3)) = L-RR(3);
```

4 DISTRIBUZIONE PERCENTUALE AREA

Si sono sviluppate tre funzioni, rispettivamente per il caso monomodale, bimodale e trimodale, per poter verificare il grado di riempimento del dominio a seguito dell'impacchettamento.

Il dominio viene intersecato da un numero 'n' di piani, in questo caso si è scelto il numero 100, equispaziati lungo il suo lato (L), successivamente viene calcolata la distanza del centro di ogni particella rispetto a ciascuno dei piani. Se questa distanza risulta minore del raggio della particella presa in considerazione ciò significa che la particella stessa viene 'tagliata' dal piano, su cui rimane la sezione della sfera.

Una volta rilevata la totalità delle sezioni delle particelle tagliate dai piani si è proceduto con il calcolo dell'area di tali sezioni seguendo la formula:

$$A_{perc} = \pi * \frac{\sqrt{r^2 - d^2}}{L^2} * 100$$

In tal modo è possibile determinare il grado di riempimento delle zone di dominio intersecate dai piani. Maggiore sarà 'n', maggiore sarà il grado di accuratezza con cui viene calcolata l'area percentuale occupata.

4.1 CASO MONOMODALE

Nel caso monomodale sono stati considerati raggi tutti di dimensione pari a 1.

4.1.1 FUNZIONE AREA_MONOMODALE

Con questa funzione è possibile calcolare la distribuzione dell'area delle particelle all'interno del dominio.

Tabella 5 - Input e Output Funzione Monomodale

<i>Tipo</i>	<i>Nome</i>	<i>Descrizione</i>
INPUT	XX	Contiene le coordinate dei centri di ogni particella per ogni iterazione.
	RR	Contiene i valori del raggio di ogni particella per ogni iterazione.
	LL	Contiene il valore del lato del dominio cubico per ogni iterazione.
OUTPUT	area_percentuale	Contiene i valori dell'area occupata in percentuale per ogni piano che seziona il dominio.

Si sono creati due vettori (A e B) prendendo le coordinate dei piani e, rispettivamente, sommando e sottraendo loro il raggio delle particelle (in questo caso tutti pari a 1). In tal modo si è potuto determinare che, se le coordinate dei centri rientrano all'interno del range $[A,B]$, unico per ogni piano, allora le rispettive particelle vengono sezionate dal piano.

Si è creata una matrice contenente i vari range, relativi agli 'n' piani, e le coordinate dei centri per poter evidenziare quali centri vengono a contatto

con ognuno dei piani. Successivamente si è calcolata l'area di ogni sezione e si è ottenuta così l'area occupata in quella zona di dominio.

In Figura 15 vi è l'esempio dell'area occupata da 1000 particelle in un caso monomodale senza condizioni di parete.

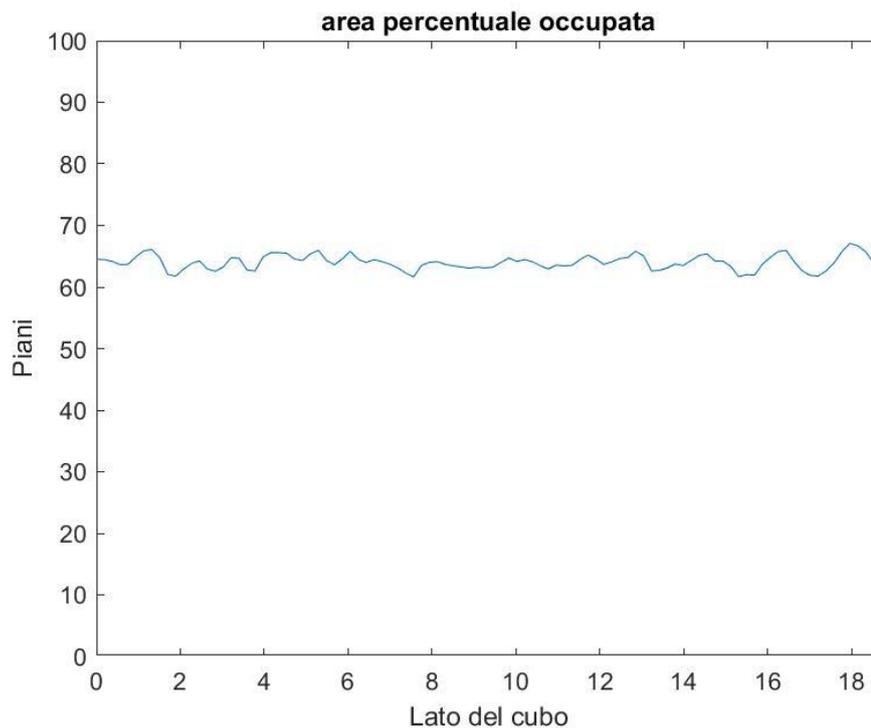


Figura 15 – Plot dell'area occupata del dominio in percentuale, 1000 particelle

Si può notare come la media dell'area occupata in percentuale sia circa il 64%, il che coincide con il valore della frazione volumetrica di circa 0.64 indicato dalla congettura di Keplero.

4.2 CASO BIMODALE

4.2.1 FUNZIONE AREA_BIMODALE

È una funzione che permette di calcolare la distribuzione dell'area delle particelle all'interno del dominio.

Tabella 6 - Input e Output Funzione Bimodale

<i>Tipo</i>	<i>Nome</i>	<i>Descrizione</i>
INPUT	XX	Contiene le coordinate dei centri di ogni particella per ogni iterazione.
	RR	Contiene i valori del raggio di ogni particella per ogni iterazione.
	LL	Contiene il valore del lato del dominio cubico per ogni iterazione.
OUTPUT	area_percentuale	Contiene i valori dell'area occupata in percentuale per ogni piano che seziona il dominio.

Nel caso bimodale si è utilizzato lo stesso approccio del caso monomodale, si sono però suddivise le particelle con raggio maggiore rispetto a quelle con raggio minore e si sono portati avanti i calcoli in maniera parallela in modo da rilevare sia l'area occupata dalle particelle più grandi sia quella occupata dalle particelle più piccole.

In Figura 16 è possibile vedere un'immagine dell'area occupata in percentuale in un caso bimodale con 10.000 particelle rispettivamente di raggio 1 e raggio 0.66667.

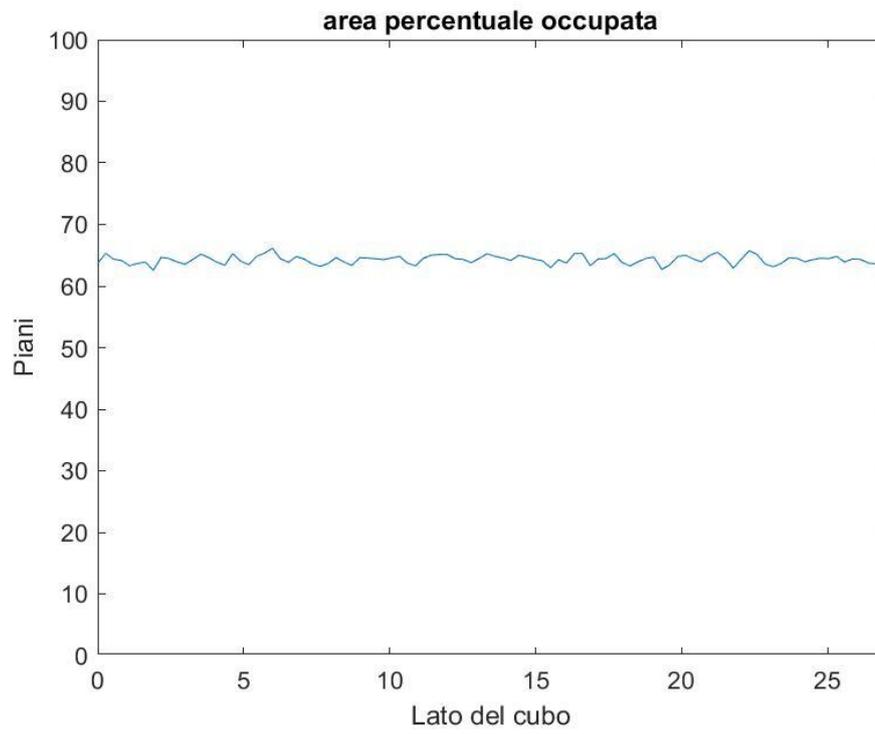


Figura 16 – Plot dell'area occupata del dominio in percentuale, 10.000 particelle

4.3 CASO TRIMODALE

4.3.1 FUNZIONE AREA_TRIMODALE

È una funzione che permette di calcolare la distribuzione dell'area delle particelle all'interno del dominio.

Tabella 7 - Input e Output Funzione Trimodale

<i>Tipo</i>	<i>Nome</i>	<i>Descrizione</i>
INPUT	XX	Contiene le coordinate dei centri di ogni particella per ogni iterazione.
	RR	Contiene i valori del raggio di ogni particella per ogni iterazione.
	LL	Contiene il valore del lato del dominio cubico per ogni iterazione.
OUTPUT	area_percentuale	Contiene i valori dell'area occupata in percentuale per ogni piano che seziona il dominio.

Nel caso trimodale si sono divise le tre tipologie di particelle in base alla dimensione del raggio, come si può vedere nell'estratto di codice.

Tabella 8 - Ripartizione dei centri delle particelle in base alle dimensioni

```
centri_grandi= centri (R==max (R) ) ;  
centri_piccoli = centri (R==min (R) ) ;  
centri_medi = centri (and (R~max (R) , R~min (R) ) ) ;
```

Si sono quindi svolti i calcoli in maniera parallela per tutte e tre le categorie di particelle, in modo da rilevare separatamente le aree occupate.

In Figura 17 è riportata l'area occupata totale da 220.000 particelle con valori di raggi: 1 per le più grandi, 0.2 per le intermedie e 0.04 per le più piccole.

Nel caso trimodale la media dell'area occupata in percentuale è di circa il 72%, il che rientra in quanto indicato nella congettura di Keplero per quanto riguarda il valore massimale della frazione volumetrica per un impacchettamento di tipo cubico, ossia: $\frac{\sqrt{\pi}}{18} \approx 0.74048$.

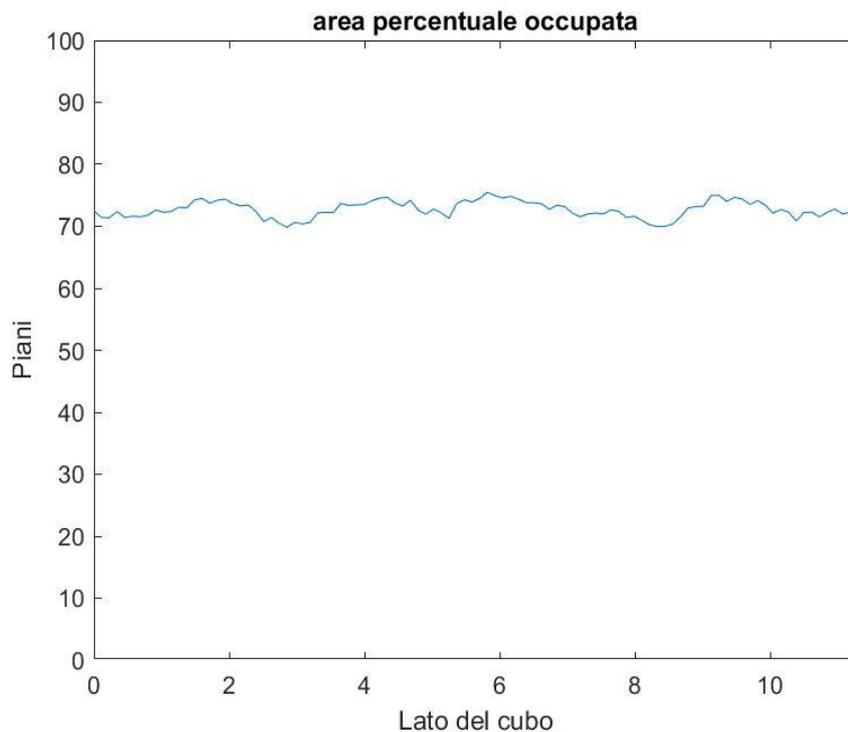


Figura 17 – Plot dell'area occupata del dominio in percentuale, 220.000 particelle

5 RISULTATI NUMERICI

La funzione `packingnew` è stata applicata per lo studio del caso monomodale mentre la funzione `packingnew_bi` è stata applicata per lo studio del caso bimodale e la funzione `packingnew_tri` nel caso trimodale. I risultati previsti sono un aumento delle dimensioni del dominio finale rispetto al caso privo di condizioni di parete e un effetto di parete visibile nella disposizione delle particelle all'interno del dominio.

5.1 CASO MONOMODALE

Nel caso monomodale sono stati considerati raggi con dimensioni pari a 1. Si sono svolti i calcoli per 10 iterazioni con numero di particelle pari a 1000 e 9000.

Per quanto riguarda il valore di L si è rilevato un aumento medio delle dimensioni del lato del dominio di circa l'8.7% per quanto riguarda gli impacchettamenti con 1000 particelle e il 8.3% per quanto riguarda gli impacchettamenti con 9000 particelle, rispetto ad un aumento medio del lato del 7.7 % proprio del caso senza condizioni di parete.

Nella seguente tabella sono riportati i valori dell'aumento percentuale nel caso con 1000 particelle.

Tabella 9 - Aumento Percentuale con condizioni di parete

<i>Numero simulazione</i>	<i>Valore iniziale</i>	<i>Valore finale</i>	<i>Aumento %</i>
1	17.3647	19.0098	9.4738
2	17.3647	18.8914	8.7922
3	17.3647	18.8442	8.5205
4	17.3647	18.8442	8.5205
5	17.3647	18.8442	8.5207
6	17.3647	18.8325	8.4533
7	17.3647	18.9386	9.0640
8	17.3647	18.9150	8.9282
9	17.3647	18.8678	8.6562
10	17.3647	18.8325	8.4532

In Figura 18 e 19 si possono osservare gli effetti della parete sull'area occupata.

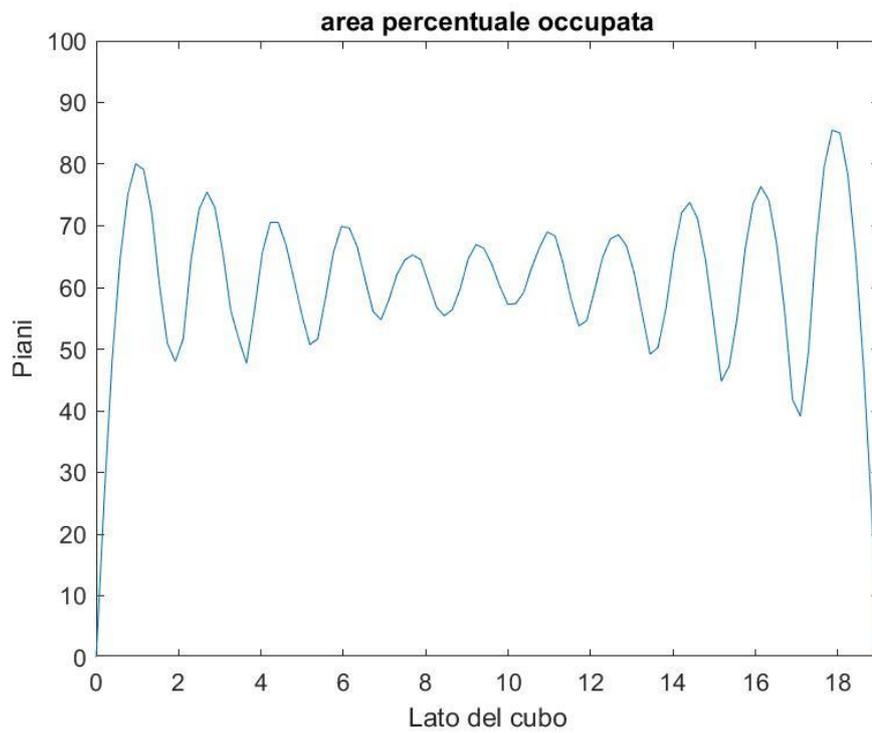


Figura 18 - Effetto di parete con 1000 particelle

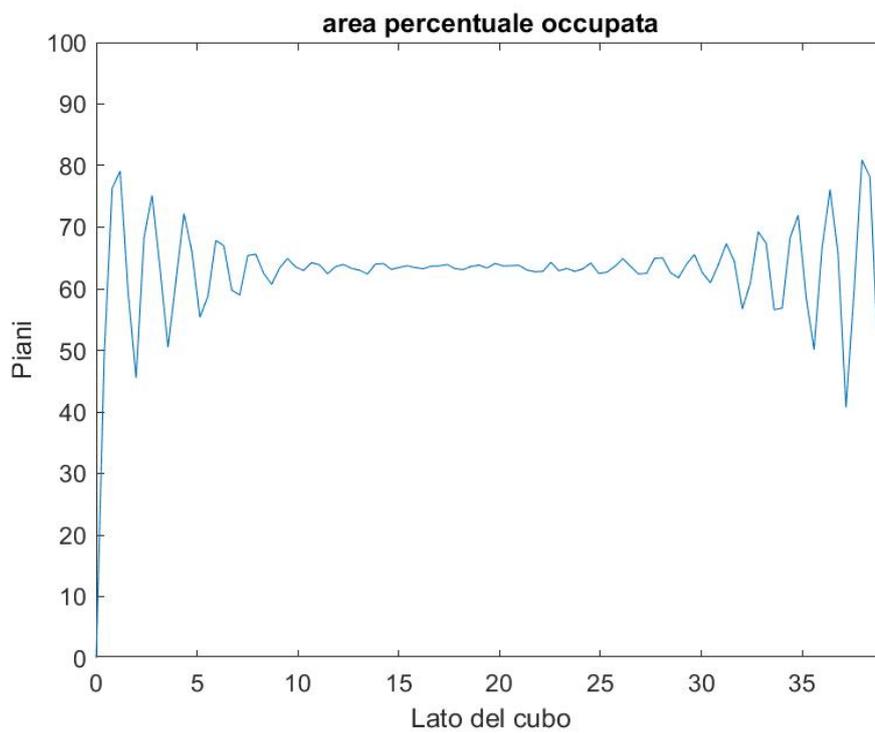


Figura 19 - Effetto di parete con 9000 particelle

Attraverso l'osservazione dei grafici si può notare come, con l'aumento della distanza dalla parete, la distribuzione dell'area si stabilizzi verso un valore di riempimento del 64%.

In Figura 20 si può osservare invece la disposizione dei centri delle particelle nel dominio tridimensionale.

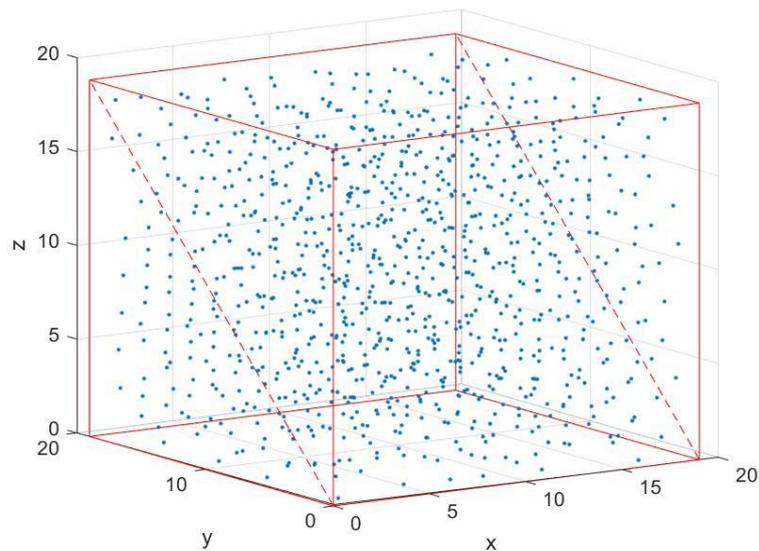


Figura 20 - Disposizione 1000 particelle con effetto di parete

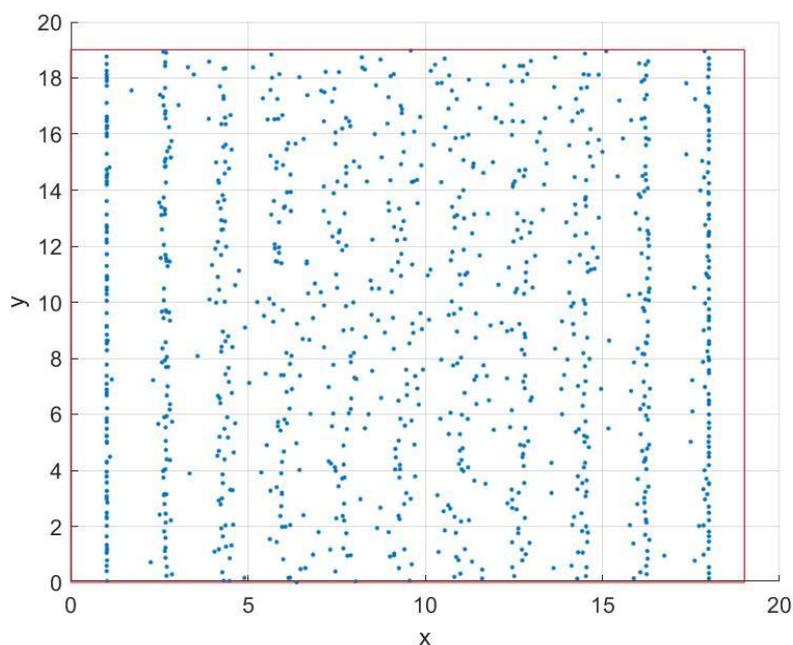


Figura 21 - Disposizione 1000 particelle con effetto di parete, particolare assi xy

5.2 CASO BIMODALE

Nel caso bimodale è stato considerato un rapporto fra i raggi di 1/5, mantenendo come dimensione delle particelle più grandi 1. Si è dovuta scegliere poi la quantità di particelle di raggio piccolo da considerare: si sono scelte per lo svolgimento dei calcoli rispettivamente le percentuali del 30%, del 50% del 70% e del 90%. In tal modo si è potuto analizzare se tale percentuale avesse un peso sugli esiti dell'impacchettamento.

Dall'analisi dei grafici (riportati in Figura 19) si può notare come la quantità di particelle piccole incida sulla dimensione del dominio finale, che risulta maggiore nella casistica riportata nell'immagine di destra.

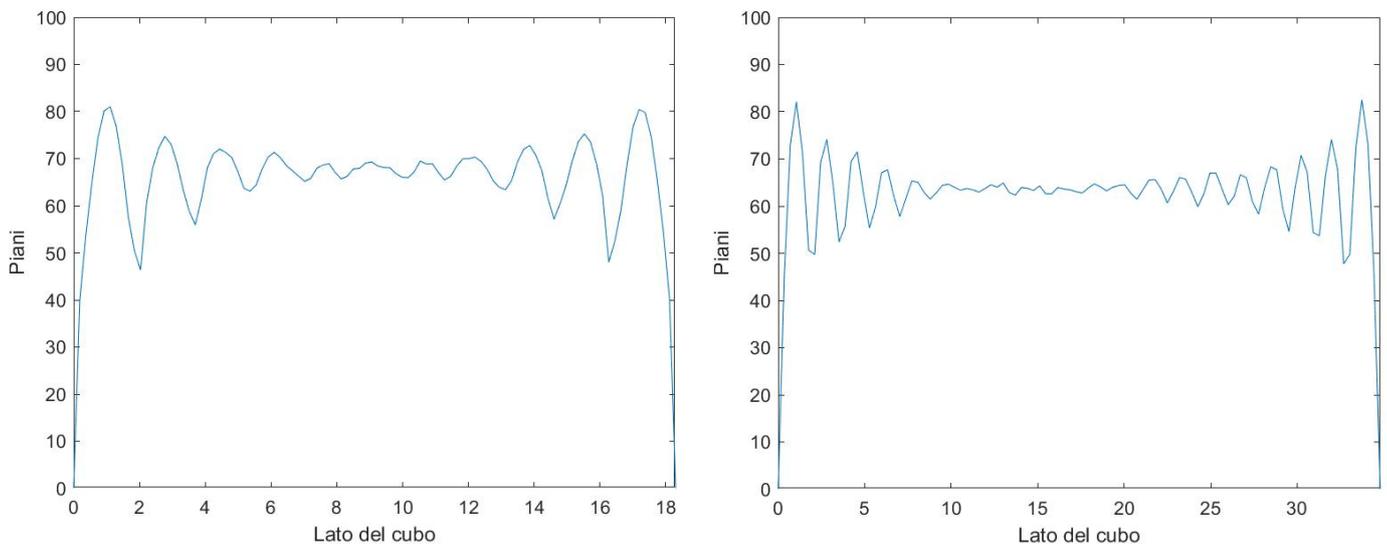


Figura 22 - a sinistra 90% di particelle piccole, a destra 30% di particelle piccole

In Tabella 10 si osservano alcuni valori dell'area occupata in percentuale, con un totale di 1000 particelle e una percentuale di particelle piccole del 30%.

Tabella 10 - Valori dell'area occupata con 30% di particelle piccole

<i>Area totale</i>	<i>Area particelle grandi</i>	<i>Area particelle piccole</i>
25.9630	25.5747	0.3883
47.1885	46.9511	0.2374
63.5635	63.5194	0.0441
75.3025	75.2796	0.0229
82.2318	82.2318	0

Mentre in Tabella 11 si osservano i valori dell'area occupata in percentuale, con un totale di 1000 particelle e una percentuale di particelle piccole del 90%.

Tabella 11 - Valori dell'area occupata con 90% di particelle piccole

<i>Area totale</i>	<i>Area particelle grandi</i>	<i>Area particelle piccole</i>
21.8313	12.4740	9.3573
39.5674	24.8263	14.7411
50.5124	35.9885	14.5239
54.6986	45.8686	8.8300
57.9336	54.4665	3.4670

In Figura 23 si osserva la disposizione delle particelle nel dominio tridimensionale.

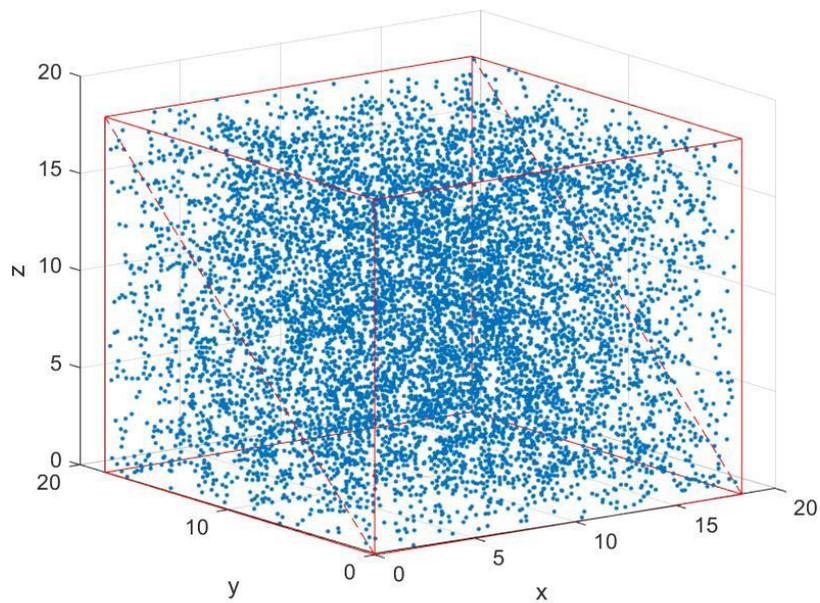


Figura 23 - Disposizione 9000 particelle (90% piccole) con effetto di parete

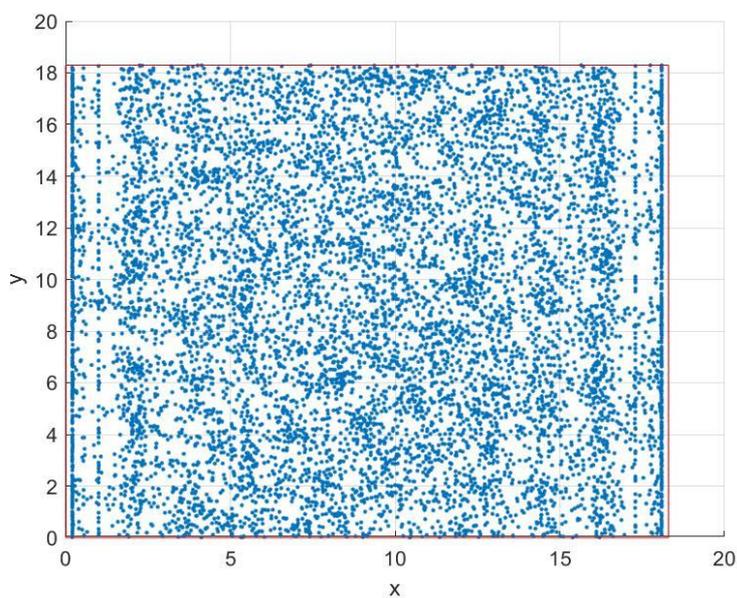


Figura 24 - Disposizione 9000 particelle (90% piccole) con effetto di parete, particolare asse xy

5.3 CASO TRIMODALE

Analogamente al caso bimodale, nel caso trimodale si è considerato inizialmente un rapporto fra i raggi di $1/5$ con la dimensione maggiore pari a 1.

Si sono dovute scegliere le percentuali di particelle grandi, medie e piccole da considerare durante i calcoli. Si sono utilizzate come percentuali il 30%, 50%, 70% e 90% del valore totale per determinare il numero di particelle piccole, successivamente si è nuovamente calcolato rispettivamente il 30%, 50%, 70% e 90% del valore ottenuto per determinare il numero di particelle medie.

Si sono così delineati quattro casi per cui sono stati svolti i calcoli con lo scopo di osservare in quale maniera potesse variare l'impacchettamento al variare del numero di particelle.

Dall'osservazione dei grafici riportati in Figura 25 si può notare come la percentuale di particelle piccole incida sulla dimensione del dominio, senza tuttavia variare la percentuale di riempimento dello stesso in seguito all'impacchettamento.

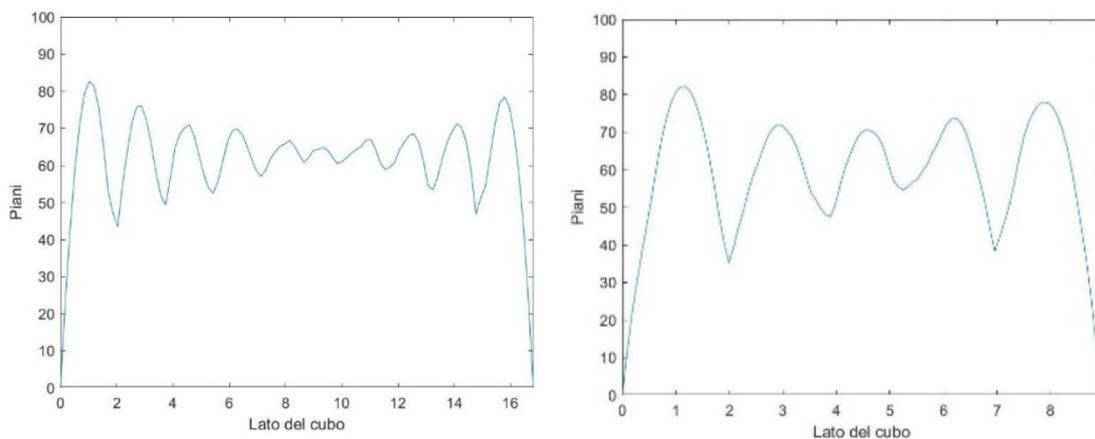


Figura 25 - a sinistra 90% di particelle piccole, a destra 30% di particelle piccole

In Tabella 12 si osservano alcuni valori dell'area occupata in percentuale, con un totale di 1000 particelle e una percentuale di particelle piccole del 30%.

Tabella 12 - Valori dell'area occupata con 30% di particelle piccole

<i>Area totale</i>	<i>particelle grandi</i>	<i>particelle medie</i>	<i>particelle piccole</i>
58.4704	58.3053	0.1643	0.0007
61.8755	61.6369	0.2378	0.0008
66.5245	66.4321	0.0919	0.0005
66.2153	66.0693	0.1449	0.0011
63.4038	63.2345	0.1692	0.0001

Mentre in Tabella 13 si osservano i valori dell'area occupata in percentuale, con un totale di 1000 particelle e una percentuale di particelle piccole del 90%.

Tabella 13 - valori dell'area occupata con 90% di particelle piccole

<i>Area totale</i>	<i>particelle grandi</i>	<i>particelle medie</i>	<i>particelle piccole</i>
39.4535	38.7814	0.5948	0.0773
44.6543	43.6996	0.8656	0.0891
48.9080	47.8533	1.0256	0.0291
54.1009	53.1567	0.9052	0.0390
58.3535	57.8504	0.4928	0.0103

In Figura 23 si osserva la disposizione delle particelle nel dominio tridimensionale.

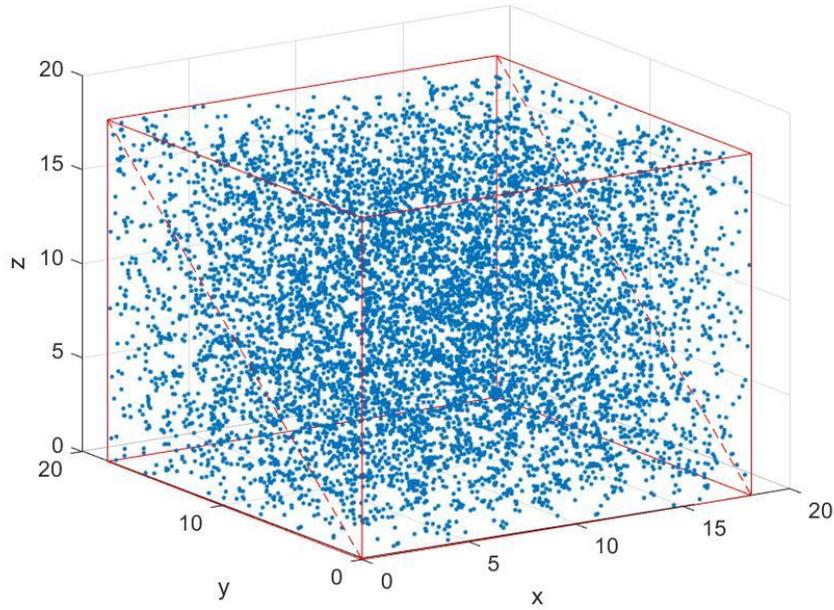


Figura 26 - Disposizione 9000 particelle (90% piccole) con effetto di parete

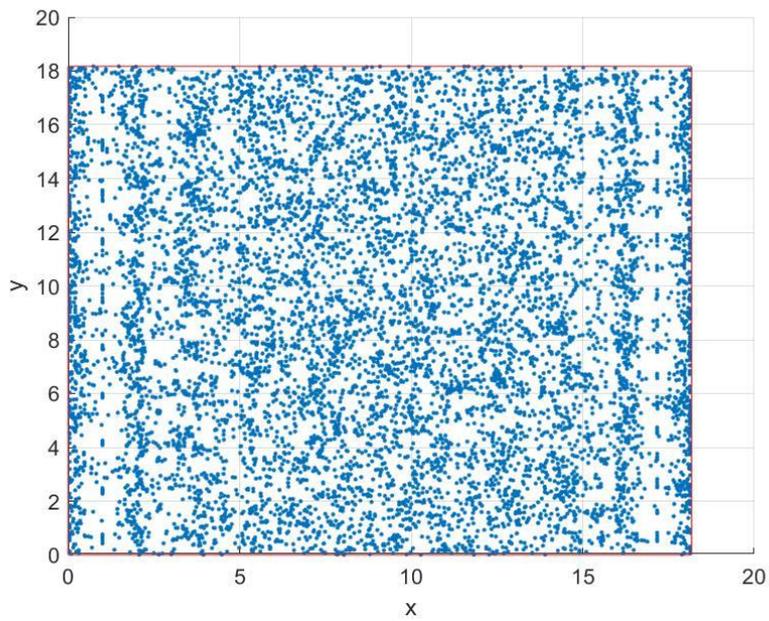


Figura 27 - Disposizione 9000 particelle (90% piccole) con effetto di parete, particolare asse xy

Si è successivamente considerato un rapporto fra i raggi di $1/3$ con la dimensione maggiore pari a 1, per poter mettere a confronto i risultati con quelli ottenuti in precedenza utilizzando un rapporto di $1/5$. I calcoli per entrambi i casi di studio sono stati svolti aumentando la quantità di particelle di raggio più piccolo al 92% e successivamente al 96%.

Nella figura sottostante si possono osservare le differenze fra i risultati ottenuti con rapporto fra i raggi $1/3$ e $1/5$ per un numero di particelle pari a 9000. Si può notare come le dimensioni del dominio finale siano maggiori nel caso del rapporto $1/3$ in quanto le dimensioni delle particelle stesse risultano maggiori.

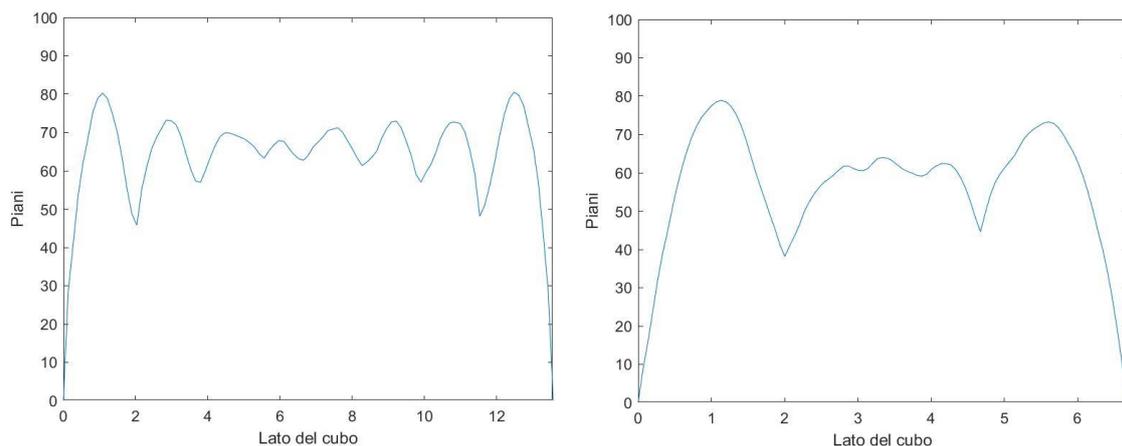


Figura 28 – a sinistra il rapporto è $1/3$, a destra il rapporto è $1/5$

5.3.1 EFFETTO DI DEVIAZIONE

Si è presa in considerazione la casistica con percentuale maggiore del 90% di particelle piccole e si sono introdotti diversi valori di dispersione soltanto sui raggi delle particelle più grandi.

Come riscontrabile da [8] il grado di impacchettamento ha una dipendenza dal protocollo numerico, per questo motivo si è applicata una distribuzione

ai valori del raggio di tipo Gaussiano e in particolare sono stati presi in considerazione valori di sigma di dispersione pari a 0, 0.1 e 0.15, in modo da analizzare il comportamento delle particelle durante l'impacchettamento nelle diverse condizioni.

Dall'osservazione del grafico in Figura 26 si può notare il comportamento dell'area occupata in percentuale. Si può osservare in particolare come aumenta la dimensione del dominio finale, alla conclusione del processo di impacchettamento.

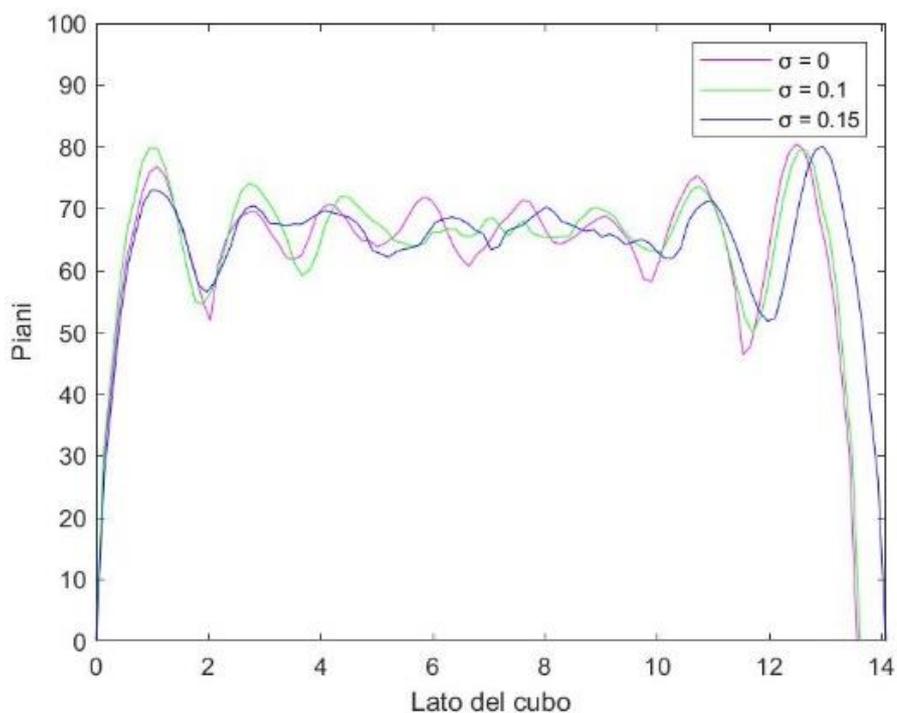


Figura 29 - Area occupata in percentuale con $\sigma = [0, 0.1, 0.15]$

Si è successivamente applicata la medesima distribuzione di tipo Gaussiano anche ai rimanenti valori del raggio, con lo scopo di studiare nel particolare le modalità di impacchettamento delle particelle di raggio più piccolo.

Allo stesso scopo sono state introdotte delle modifiche al codice per massimizzare la simmetria dell'impacchettamento.

Come si può osservare dell'estratto di codice in tabella 14 si è variata la modalità con cui il dominio si allarga e restringe in maniera isotropica. Nel codice originale le nuove coordinate dei centri venivano calcolate tramite la

formula $X * \frac{L_{nuovo}}{L_{vecchio}}$, mentre invece nel codice modificato vengono

calcolate tramite la formula $(X - R) * \frac{L_{nuovo} - 2R}{L_{vecchio} - 2R} + R$.

Tabella 14 - Modifiche applicate al codice

<pre>X(:, 2:3)=X(:, 2:3)/1.000625; X(:, 1)=(X(:, 1) - R) ./ (1+0.000625*L./(L-2*R)) +R; L=L/1.000625;</pre>	<pre>X=X/1.000625; L=L/1.000625;</pre>
codice modificato	codice originale

In Figura 27 si può osservare la differenza nella distribuzione finale per due set di dati con numero di particelle pari a 9000.

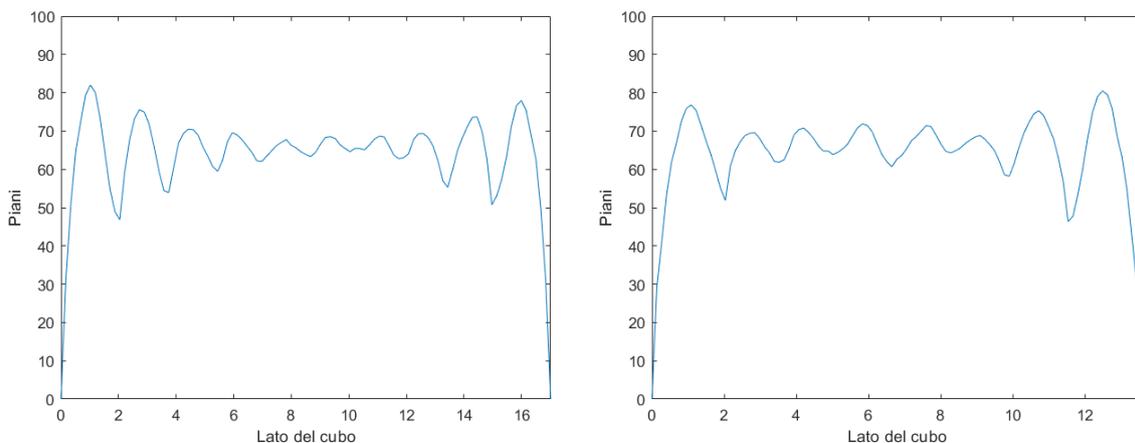


Figura 30 – a sinistra l'impacchettamento modificato, a destra quello originale

Da notare che i calcoli svolti, in particolare per un numero di particelle pari a 9000, sono risultati particolarmente impegnativi per la strumentazione utilizzata.

6 CONCLUSIONE E SVILUPPI FUTURI

In questo elaborato di tesi sono stati descritti gli effetti che le condizioni al contorno sulle pareti hanno sull'impacchettamento di polveri, tramite la modifica di uno script già sviluppato in ambiente Matlab. Si sono sviluppate funzioni atte al calcolo della percentuale di occupazione del dominio da parte delle particelle nelle tre casistiche di composizione granulometrica (monomodale, bimodale e trimodale). Queste successivamente sono state utilizzate per controllare il grado di impacchettamento delle particelle all'interno del loro dominio e per evidenziare gli effetti delle condizioni al contorno di parete che sono state aggiunte. In particolare si sono considerate condizioni al contorno soltanto su uno dei tre assi, mentre invece i restanti assi hanno mantenuto le condizioni implementate in precedenza. Si è osservato che il grado di impacchettamento delle particelle in presenza di pareti solide non varia nella zona centrale del dominio, dove rimane attorno al 64% del totale compatibilmente con la congettura di Keplero, invece avvicinandosi alle pareti crolla fino allo zero in corrispondenza della parete. Si è osservato inoltre che nel caso in cui viene modificata la quantità di particelle di raggio minore variano le dimensioni del dominio, in particolare se diminuisce la percentuale di particelle piccole aumentano le dimensioni finali del dominio. Si è poi aggiunto un effetto di deviazione sulla dimensione delle particelle di raggio maggiore e in questo caso si è osservato

un aumento della dimensione finale del dominio cubico all'aumentare del valore della σ , sigma di dispersione.

Futuri sviluppi di questo lavoro richiederanno l'implementazione di algoritmi in cui è applicata una diversa distribuzione alle dimensioni dei raggi delle particelle considerate.

A partire dai dati ottenuti attraverso lo studio mostrato in questo elaborato di tesi è possibile anche procedere al calcolo della velocità di combustione e osservare la variazione del profilo della stessa in base alle casistiche presentate.

7 BIBLIOGRAFIA

- [1] Thomas C Hales, "A proof of the kepler conjecture," *Annals of mathematics* , 1065{1185 (2005).
- [2] S. P. Ferguson, *Sphere Packings*, V. PhD thesis, University of Michigan, 1997
- [3] Yuliang Jin and Hajime Yoshino. A jamming plane of sphere packings.
- [4] JD Bernal and J Mason, "Packing of spheres: co-ordination of randomly packed spheres," *Nature* 188, 910 (1960).
- [5] R. D. Kamien and A. J. Liu, "Why is Random Close Packing Reproducible?," *Physical Review Letters*, vol. 99, no. 15, p. 155501, 2007.
- [6] Karim Hitti. *Direct numerical simulation of complex Representative Volume Elements (RVEs): Generation, Resolution and Homogenization*. Materials. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011.

[7] O. Häggström and R. Meester, Nearest neighbour and hard sphere models in continuum percolation, *Random Structures and Algorithms*, vol. 9, pp. 295-315, 1996.

[8] Kenneth W. Desmond and Eric R. Weeks Department of Physics, Emory University, Atlanta, Georgia 30322, USA