

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>5</b>
<b>Osservazioni sulla notazione adottata</b>	<b>10</b>
<b>1 Teoria cinetica dei fluidi</b>	<b>12</b>
1.1 L'equazione di Boltzmann . . . . .	12
1.2 Gli invarianti di collisione e la distribuzione di Maxwell . . . .	14
1.3 Il teorema H . . . . .	17
1.4 L'approssimazione BGK . . . . .	17
1.5 L'espansione Chapman–Enskog: da Boltzmann a Navier–Stokes	18
1.5.1 Le leggi di conservazione . . . . .	19
1.5.2 L'equazione di Eulero . . . . .	20
1.5.3 L'equazione di Navier–Stokes . . . . .	21
<b>2 Gli automi cellulari e i modelli lattice gas</b>	<b>26</b>
2.1 Gli automi cellulari . . . . .	26
2.1.1 Gli automi cellulari monodimensionali . . . . .	27
2.1.2 Un automa cellulare bidimensionale: <i>Life</i> . . . . .	28
2.2 Il modello lattice gas FHP . . . . .	29
2.3 L'evoluzione del modello FHP . . . . .	31
2.3.1 Propagazione dell'FHP . . . . .	31
2.3.2 Collisione dell'FHP . . . . .	32
2.3.3 Le variabili macroscopiche dei modelli lattice gas . . . .	36
2.4 Dai modelli lattice gas all'equazione di Navier–Stokes . . . . .	37
2.5 Difetti dei modelli lattice gas . . . . .	41
2.5.1 Mancanza di invarianza Galileana e pressione anomala	41
2.5.2 Il rumore statistico . . . . .	42
2.5.3 Alta viscosità . . . . .	43
2.5.4 Complessità dell'operatore di collisione . . . . .	43

2.5.5	Invarianti spuri . . . . .	44
<b>3</b>	<b>I modelli lattice Boltzmann</b>	<b>45</b>
3.1	Una breve storia dei modelli lattice Boltzmann . . . . .	45
3.1.1	La prima equazione lattice Boltzmann . . . . .	46
3.1.2	LBE quasi lineare . . . . .	47
3.1.3	LBE con collisioni intensificate . . . . .	50
3.1.4	LBE con operatore di collisione BGK . . . . .	54
3.2	Modelli lattice Boltzmann Single Relaxation Time (SRT) . . . . .	55
3.2.1	Il modello D2Q9 . . . . .	56
3.2.2	Il modello D3Q19 . . . . .	61
3.3	Modelli lattice Boltzmann Multi Relaxation Time (MRT) . . . . .	64
3.3.1	Schema MRT per il modello D2Q9 . . . . .	65
3.3.2	Schema MRT per il modello D3Q19 . . . . .	67
3.4	Condizioni al bordo per i modelli lattice Boltzmann . . . . .	69
3.4.1	Condizioni periodiche . . . . .	70
3.4.2	Condizioni per bordi solidi ed ostacoli . . . . .	72
3.4.3	Condizione di inlet con interpolazione . . . . .	73
3.4.4	Condizione di outlet . . . . .	75
<b>4</b>	<b>Un modello lattice Boltzmann per due fluidi immiscibili</b>	<b>78</b>
4.1	Il modello per due fluidi immiscibili . . . . .	79
4.1.1	Funzioni di distribuzione del colore $\alpha_i$ . . . . .	80
4.1.2	Funzioni di distribuzione della massa $f_i$ . . . . .	81
4.1.3	Tensione superficiale . . . . .	82
4.1.4	Implementazione numerica . . . . .	83
4.2	Deformazione di gocce sottoposte ad un flusso lineare e stazionario . . . . .	84
4.2.1	Apparato sperimentale e teorie sulla deformazione di gocce . . . . .	84
4.2.2	Setting delle simulazioni . . . . .	88
4.2.3	Rapporto di viscosità basso . . . . .	89
4.2.4	Rapporto di viscosità intermedio . . . . .	90
4.2.5	Rapporto di viscosità alto . . . . .	92
4.3	Collisione di gocce . . . . .	95
4.3.1	Descrizione del problema . . . . .	95
4.3.2	Setting delle simulazioni . . . . .	96
4.3.3	Risultati numerici . . . . .	97
4.4	Goccia che cade e flusso attorno a due ostacoli . . . . .	100

4.5	Separazione di fasi . . . . .	103
4.6	Derivazione dell'equazione macroscopica per la funzione colore $\alpha$	105
<b>5</b>	<b>Un automa cellulare per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle</b>	<b>109</b>
5.1	Generazione del mezzo poroso . . . . .	110
5.1.1	Rettangoli di dimensione $1 \times 1$ . . . . .	110
5.1.2	Rettangoli di dimensione $l \times h$ . . . . .	112
5.1.3	Possibili tipi di mezzi porosi . . . . .	112
5.2	Erosione, trasporto e deposito di particelle . . . . .	114
5.3	Erosione . . . . .	116
5.3.1	Dettagli dell'algoritmo . . . . .	117
5.4	Trasporto . . . . .	120
5.4.1	Dettagli dell'algoritmo . . . . .	121
5.5	Deposito . . . . .	124
5.5.1	Dettagli dell'algoritmo . . . . .	125
5.6	Interazione tra il fluido e le particelle . . . . .	126
5.6.1	Dettagli dell'algoritmo . . . . .	126
<b>6</b>	<b>Risultati sperimentali e numerici</b>	<b>130</b>
6.1	Il fenomeno di estrazione del caffè . . . . .	131
6.2	Misure sperimentali . . . . .	133
6.2.1	Misura della pressione e calcolo della velocità dell'acqua in ingresso . . . . .	133
6.2.2	Misura della porosità . . . . .	135
6.2.3	Misura della percentuale di bagnazione nella fase di preinfusione . . . . .	136
6.2.4	Misura del flusso di caffè in uscita . . . . .	137
6.2.5	Misura del flusso in uscita al variare della quantità di caffè . . . . .	138
6.3	Passaggio dalle unità fisiche alle unità di griglia . . . . .	138
6.4	Setting delle simulazioni . . . . .	140
6.5	Risultati numerici . . . . .	149
6.5.1	Discretizzazione del dominio . . . . .	149
6.5.2	Pressione all'inlet e nell'interno del dominio . . . . .	152
6.5.3	Fase di preinfusione e bagnazione del caffè . . . . .	153
6.5.4	Calcolo del flusso di caffè in uscita . . . . .	155
6.5.5	Flusso al variare della concentrazione del mezzo poroso	157
6.5.6	Erosione, trasporto e deposito delle polveri fini . . . . .	159

6.6	Risultati numerici al variare di alcuni parametri . . . . .	163
6.6.1	Un diverso profilo di pressione all'inlet . . . . .	163
6.6.2	Concentrazione non uniforme del caffè . . . . .	168
6.6.3	Filtri a forma di tronco di cono . . . . .	175
6.6.4	Una diversa geometria del filtro . . . . .	179

<b>Bibliografia</b>		<b>185</b>
---------------------	--	------------

# Introduzione

*“Com’è possibile che la matematica, che in fin dei conti è un prodotto del pensiero umano indipendente dall’esperienza, sia così meravigliosamente adattabile agli oggetti della realtà?”*

*Albert Einstein*

Questa domanda esprime con chiarezza l’impressione che si ha affrontando uno studio di carattere matematico, ma riguardante oggetti e fenomeni quotidiani.

Alla base di questo lavoro c’è, infatti, lo studio della dinamica dei fluidi, i quali fanno parte della vita di ogni giorno e di cui tutti, empiricamente, conosciamo il comportamento in determinate situazioni.

È facile rendersi conto di quanto lo studio della fluidodinamica sia importante per via delle sue innumerevoli applicazioni, siano esse puramente scientifiche o anche industriali.

Il moto di un fluido può essere descritto, come spesso accade in natura, da alcune equazioni differenziali alle derivate parziali: le equazioni di Navier–Stokes. Come altrettanto spesso accade, queste equazioni sono estremamente difficili da risolvere e la loro soluzione analitica è nota soltanto in pochi casi molto particolari. Così, si ricorre all’uso di schemi numerici per risolvere le equazioni di Navier–Stokes in modo approssimato. Tradizionalmente, gli schemi numerici si ottengono a partire dall’equazione stessa che viene discretizzata nello spazio e nel tempo.

Più recentemente, si è, però sviluppato un approccio completamente diverso che consiste nel costruire un modello della realtà microscopica per risalire, poi, al comportamento macroscopico.

In particolare, l’idea è quella di definire un modello semplificato del moto delle molecole di un fluido, per poi dimostrare che, nel limite macroscopico,

gli osservabili fisici (che possono essere calcolati a partire dalle quantità microscopiche simulate), soddisfano le equazioni di Navier–Stokes.

Questo nuovo punto di vista si è concretizzato grazie anche alla nascita di una classe di algoritmi detti *Automi Cellulari* (CA). Gli automi cellulari sono modelli molto interessanti per via della loro semplicità, della naturale predisposizione al parallelismo e soprattutto perché trovano applicazioni nelle più disparate discipline.

Un CA è costituito da un insieme di celle uguali tra di loro, che possono assumere un numero finito di stati e la cui evoluzione è determinata soltanto dal loro stesso stato e da quello di un intorno limitato di celle. Un automa cellulare può rappresentare qualsiasi cosa a seconda di come vengono fissate le regole di evoluzione.

Così nacquero degli automi cellulari per simulare la dinamica delle molecole di un fluido: gli *Automi Cellulari Lattice Gas* (LGCA). In questi schemi, l'evoluzione è composta da due passi: collisione e propagazione, che rappresentano proprio i processi di collisione tra molecole e di movimento delle molecole stesse in base alla loro velocità.

Come vedremo, i modelli lattice gas riducono drasticamente la complessità della realtà. Si può, però, dimostrare che il fluido da essi descritto è “realistico”, cioè la velocità e la densità del fluido, che vengono ricavate con particolari procedure a partire da quantità microscopiche, soddisfano le equazioni di Navier–Stokes.

I modelli lattice gas presentano, purtroppo, notevoli difetti che ne rendono limitato l'utilizzo. I loro principali aspetti negativi sono:

- **rumore statistico:** dovuto alla necessità di calcolare dei valori mediati per risalire alle variabili macroscopiche;
- **complessità dell'operatore di collisione:** che rende impossibile il passaggio alle tre dimensioni;
- **alta viscosità:** dovuta al basso numero di collisioni simulate dal modello.

I difetti più importanti dei modelli lattice gas vennero affrontati uno ad uno, dalla loro correzione nacquero i *Modelli Lattice Boltzmann* (LBM).

Per prima cosa, McNamara e Zanetti risolsero il problema del rumore statistico dando vita alla prima equazione lattice Boltzmann (LBE). Il loro operatore di collisione era, però, sostanzialmente lo stesso definito nei modelli

lattice gas e quindi era estremamente complesso.

Higuera e Jiménez risolsero questo problema definendo una nuova equazione lattice Boltzmann, nota come LBE quasi lineare, che finalmente permetteva applicazioni tridimensionali.

Infine, Higuera, Succi e Benzi fecero il passo definitivo, che non solo permise di simulare fluidi meno viscosi, ma, soprattutto, sancì la totale indipendenza dei modelli lattice Boltzmann dai modelli lattice gas. Questo rivoluzionario approccio liberò i modelli lattice Boltzmann dai legami residui con i loro predecessori e stabilì un nuovo punto di vista che, da allora, venne usato nella maggior parte delle seguenti applicazioni.

Attualmente, i modelli lattice Boltzmann sono diventati una valida alternativa nella simulazione di fluidi e sono stati applicati a situazioni sempre più complesse.

Noi abbiamo utilizzato gli schemi lattice Boltzmann, per definire un modello matematico per la simulazione di alcuni fenomeni fisici relativi all'estrazione del caffè espresso. Questo lavoro è stato svolto in collaborazione con la Nuova Simonelli, che, come è noto, produce e distribuisce macchine per il caffè espresso in tutto il mondo.

Il processo di estrazione del caffè è molto complesso e tante sono le variabili in gioco, alcune delle quali non sono neanche scientificamente misurabili. Lo scopo che ci siamo proposti non è stato, dunque, quello di costruire un modello che fosse in grado di stabilire la qualità del caffè (ammesso che sia possibile definire un tale modello), ma quello di costruirne uno che fosse in grado di simulare, il più fedelmente possibile, l'evoluzione di grandezze misurabili, che caratterizzano il processo (velocità e pressione dell'acqua, tempo di percolazione, volume di caffè prodotto ecc. . .).

In particolare, abbiamo considerato due aspetti del problema:

- la dinamica dell'acqua attraverso il caffè;
- la dinamica delle polveri fini del caffè che vengono staccate e trascinate dall'acqua e tendono a depositarsi sul fondo.

Questi due aspetti sono stati affrontati definendo due schemi numerici distinti e interagenti tra di loro.

- **Un modello lattice Boltzmann per due fluidi immiscibili:** abbiamo originariamente sviluppato questo modello per simulare il fronte di avanzamento dell'acqua dentro al caffè. Infatti, l'acqua, scendendo, spinge via l'aria che occupava i pori dello strato di caffè. Una volta che

tutto il dominio è stato bagnato, la dinamica non è più relativa a due fluidi, ma ad uno solo, e viene, quindi, calcolata con un usuale schema lattice Boltzmann.

Al di là di questa particolare applicazione, il modello proposto descrive la dinamica di due fluidi immiscibili con viscosità molto diverse e tiene conto della tensione superficiale che agisce nell'interfaccia tra i due fluidi.

- **Un Automa Cellulare per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle in un fluido:** con questo modello si descrive il fenomeno per cui l'acqua, scendendo nello strato di caffè, stacca le polveri più fini dai granelli di caffè e le trascina verso il fondo del filtro dove tendono a depositarsi. Questo aspetto, che può sembrare secondario, è, in realtà, non trascurabile. Infatti, la deposizione di queste polveri crea, in prossimità del fondo, uno strato più compatto di caffè che limita la fuoriuscita del liquido dal filtro.

Questa parte del modello è più strettamente legata al problema del caffè, anche se sarebbe possibile adattarlo a qualunque materiale composto da particelle fini che possono essere staccate e trascinate da un fluido.

Riepiloghiamo brevemente la struttura di questo lavoro e gli argomenti trattati.

Nel Capitolo 1, diamo una rapida revisione dei fondamenti della teoria cinetica dei fluidi, con particolare riguardo all'equazione di Boltzmann e a come, da questa, sia possibile derivare le equazioni di Navier–Stokes.

Il Capitolo 2 presenta gli automi cellulari senza nessun intento di completezza, ma solo come introduzione ai modelli lattice gas. In particolare, viene descritto il modello FHP e vengono evidenziati i suoi principali difetti.

Con il Capitolo 3, si comincia a parlare dei modelli lattice Boltzmann: vengono ripercorse le tappe fondamentali della loro evoluzione storica e si presentano i modelli attualmente più in uso in due e tre dimensioni. Inoltre, vengono discussi i modelli *multi relaxation time* che, rispetto agli usuali schemi *single relaxation time*, sono maggiormente stabili. Infine, vengono descritte le condizioni al bordo più note e quelle utilizzate nelle nostre simulazioni.

Il Capitolo 4 è dedicato alla presentazione del modello per due fluidi immiscibili. In questo capitolo, il modello viene visto indipendentemente dall'applicazione relativa al caffè e sono riportati dei confronti qualitativi e quantitativi dei nostri risultati con altri risultati numerici o sperimentali.

Nel Capitolo 5 si descrive l'algoritmo di generazione del mezzo poroso che



rappresenta la polvere di caffè e l'automa cellulare per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle. In questo caso, si fa esplicito riferimento al problema del caffè.

Infine, nel Capitolo 6, vengono raccolti i risultati del lavoro sperimentale svolto presso la Nuova Simonelli e vengono presentati i risultati numerici relativi alla simulazione dell'estrazione del caffè espresso. I risultati sperimentali sono confrontati con quelli numerici, inoltre si esaminano gli effetti di alcune variazioni dei parametri in gioco (forma del filtro, pressione dell'acqua in ingresso, ecc. . . ).

Ringraziamo la Fondazione CARIMA e la Nuova Simonelli che hanno supportato questo lavoro di ricerca con una borsa di studio dal titolo *Modellizzazione matematica di alcuni fenomeni fisici relativi all'estrazione del caffè espresso*.

# Osservazioni sulla notazione adottata

In questo lavoro i vettori sono indicati da lettere in grassetto. Ad esempio  $\boldsymbol{x}$ , rappresenta un vettore in  $\mathbb{R}^D$ , con  $D$  dimensione dello spazio in cui si lavora. Le componenti dei vettori sono rappresentate dalla stessa lettera del vettore, però non in grassetto e con un pedice che indica la componente:

$$x_a, \quad a = 1, \dots, D.$$

Inoltre, si utilizza la somma implicita sugli indici Latini ripetuti. Ad esempio la divergenza di un vettore  $\boldsymbol{u}$ , viene scritta come

$$\partial_{x_a} u_a \equiv \sum_{a=1}^D \partial_{x_a} u_a.$$

In un'uguaglianza, se l'indice compare in ambo i termini, la somma non è presente. Ad esempio in

$$\hat{P}_{ab} = m \int (v_a - u_a)(v_b - u_b) f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) d\boldsymbol{v},$$

non c'è somma né sull'indice  $a$ , né su  $b$ , perchè entrambi compaiono in  $\hat{P}_{ab}$ . Così,  $\hat{P}_{ab}$  è l'elemento di posto  $(a, b)$  di una matrice di  $D \times D$  elementi definita al variare di  $a, b = 1, \dots, D$ .

Nella scrittura

$$q_a(\boldsymbol{x}, t) = \frac{m^2}{2} \int (v_a - u_a)(v_b - u_b)(v_b - u_b) f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) d\boldsymbol{v},$$

è implicita la somma su  $b$ , che non compare a sinistra dell'uguale, mentre non c'è nessuna somma su  $a$ .

Come vedremo, nei modelli lattice Boltzmann si lavora con delle particolari unità di misura dette unità di griglia, queste unità vengono usate per esprimere tutti i parametri in gioco. Quando si vogliono confrontare i risultati numerici con dei valori sperimentali, o quando si devono imporre dei parametri reali, allora è necessario operare il passaggio da unità di griglia ad unità fisiche e viceversa. Così, alcune grandezze, quali ad esempio velocità, densità e viscosità del fluido, possono essere espresse in ambo i sistemi di unità di misura.

In generale, per indicare velocità, densità e viscosità del fluido si utilizzano, rispettivamente, i simboli  $u(\mathbf{x}, t)$ ,  $\rho(\mathbf{x}, t)$  e  $\nu$ , indipendentemente dalle unità di misura in cui sono espresse, questo, infatti, è chiarito dal contesto.

Tuttavia, nel Capitolo 6, c'è un'eccezione a questa regola, perché lì si illustra il passaggio da unità fisiche a unità di griglia e viceversa, dunque, è importante distinguere tra le due classi di unità di misura. Quindi, nel Capitolo 6, si indicano con  $\tilde{\cdot}$  le grandezze espresse in unità di griglia.

I simboli utilizzati per le singole grandezze sono definiti nel momento in cui vengono introdotti.

# Capitolo 1

## Teoria cinetica dei fluidi

I modelli lattice Boltzmann si basano sulla teoria cinetica dei fluidi, un settore della fisica statistica che studia la dinamica di sistemi non in equilibrio e il loro rilassamento verso l'equilibrio termodinamico. L'equazione di Boltzmann è una parte fondamentale di questa teoria. In questo capitolo, vedremo brevemente l'equazione di Boltzmann e come da essa sia possibile derivare le equazioni di Navier–Stokes che descrivono la dinamica dei fluidi a livello macroscopico. La trattazione che segue è basata sui testi di Succi [1] e di Wolf-Gladrow [2].

### 1.1 L'equazione di Boltzmann

Consideriamo  $N$  molecole che si muovono all'interno di una scatola di volume  $V$  e supponiamo che il sistema si trovi a temperatura  $T$ . Le molecole interagiscono a due a due attraverso un potenziale  $\phi(\mathbf{r})$ , dove  $\mathbf{r}$  è il vettore che unisce le due molecole. Se le molecole sono molto più piccole della distanza media che le separa,  $d = (V/N)^{1/3}$ , allora possiamo, con buona approssimazione, considerarle come punti senza alcuna struttura. In questo caso la loro dinamica è descritta dalle classiche leggi di Newton:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} &= \frac{\mathbf{p}_i}{m}, \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= \mathbf{F}_i, \quad i = 1, \dots, N,\end{aligned}\tag{1.1}$$

dove  $\mathbf{x}_i$  è la posizione della  $i$ -esima molecola,  $\mathbf{p}_i = m\mathbf{v}_i$  è la sua quantità di moto ed  $\mathbf{F}_i$  è la forza risultante esercitata sulla molecola. Da un punto di vista del tutto teorico, specificate le condizioni iniziali e le condizioni al

bordo, si potrebbe risolvere (1.1) e conoscere quindi  $\mathbf{x}_i(t)$  e  $\mathbf{p}_i(t)$ , per ogni molecola  $i = 1, \dots, N$  e per ogni istante  $t$ . Attualmente non è possibile risolvere un problema del genere perché  $N$  è dell'ordine del numero di Avogadro ( $6,023 \times 10^{23}$ ). Inoltre, anche ammettendo di poter calcolare la soluzione di (1.1), questa sarebbe del tutto inattendibile; infatti ogni incertezza  $\delta_0$ , sulla posizione o sulla quantità di moto iniziale crescerebbe esponenzialmente,  $\delta(t) = \delta_0 e^{\lambda t}$ . Il coefficiente  $\lambda$ , noto come coefficiente di Lyapunov, è una misura dell'orizzonte temporale del comportamento deterministico di un sistema di  $N$  corpi, cioè per  $t > \lambda^{-1}$ , la crescita dell'incertezza sulle soluzioni è così elevata da rendere impossibile ogni previsione sullo stato del sistema. Fortunatamente, non abbiamo bisogno di conoscere la dinamica esatta di ogni molecola. Infatti, le variabili fisiche a cui siamo interessati, pressione e velocità del fluido, temperatura etc. si ottengono dalla *media statistica* del comportamento di un gran numero di molecole. Il concetto di media statistica potrebbe essere non banale, qui si intende la nozione intuitiva di media su uno spazio sufficientemente piccolo rispetto alle dimensioni globali del dominio e grande abbastanza da contenere un numero di molecole tale da avere un comportamento statistico significativo.

Il comportamento collettivo di un insieme di molecole va quindi affrontato con un approccio statistico, questo può essere fatto a vari livelli di complessità, noi ci limitiamo al più semplice: il *one-body kinetic level*. A questo livello, la domanda che ci poniamo è la seguente: qual è la probabilità di trovare una molecola attorno alla posizione  $\mathbf{x}$  e con quantità di moto  $\mathbf{p}$ , al tempo  $t$ ?

Sia  $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  questa distribuzione di probabilità (anche detta semplicemente funzione di distribuzione), la quantità  $\Delta n = f \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{p}$ , con  $\Delta \mathbf{x}$  e  $\Delta \mathbf{p}$  cubetti centrati in  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{p}$  nello spazio delle fasi  $\mu = [(\mathbf{x}, \mathbf{p}) : \mathbf{x}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3]$  rappresenta il numero probabile di molecole che si trovano attorno ad  $\mathbf{x}$  e che hanno quantità di moto circa  $\mathbf{p}$  al tempo  $t$ .

Nel 1872, Ludwig Boltzmann derivò un'equazione che descrive l'evoluzione di  $f$  in termini delle interazioni microscopiche, l'equazione di Boltzmann (BE):

$$D_t f \equiv \left[ \partial_t + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{x}} + \mathbf{F} \cdot \partial_{\mathbf{p}} \right] f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = C(f, f), \quad (1.2)$$

dove il termine a sinistra descrive il moto delle molecole lungo le traiettorie associate al campo di forza  $F$ , mentre  $C(f, f)$  rappresenta l'effetto delle interazioni a due a due delle molecole e prende, quindi, il nome di operatore di collisione.

$C(f, f)$  coinvolge la funzione di distribuzione di due corpi,  $f_{12}$ , che esprime la probabilità di trovare una molecola, indichiamola con 1, attorno ad  $\mathbf{x}_1$  con velocità  $\mathbf{v}_1$  e un'altra molecola, 2, attorno ad  $\mathbf{x}_2$  e con velocità  $\mathbf{v}_2$  entrambe allo stesso istante  $t$ . Può essere scritta l'equazione che regola l'evoluzione di  $f_{12}$ , ma il problema è che questa equazione richiede la funzione di distribuzione per tre corpi,  $f_{123}$  che, a sua volta, chiama in causa  $f_{1234}$  e così via in una gerarchia senza fine (nota come gerarchia BBGKY da Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood e Yvon). Per chiudere la (1.2) Boltzmann fece delle assunzioni molto stringenti sulla natura del sistema fisico. Considerò, infatti, un gas rarefatto composto da molecole puntiformi, interagenti a due a due tramite un potenziale a corto raggio. Sotto queste ipotesi, l'interazione molecolare può essere completamente descritta da collisioni binarie localizzate e il termine  $C(f, f)$  diventa:

$$C(f, f) = \int \int (f'_{12} - f_{12}) g \sigma(\mathbf{g}, \Omega) d\Omega d\mathbf{p}_2, \quad (1.3)$$

dove  $f'_{12}$  ed  $f_{12}$  sono le funzioni di distribuzione prima e dopo la collisione rispettivamente,  $\mathbf{g}$  è la velocità relativa delle molecole prima dell'urto e  $g$  è il suo modulo,  $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$  è l'angolo solido in cui avviene l'urto,  $\sigma(\mathbf{g}, \Omega)$  esprime il numero di molecole con velocità relativa  $\mathbf{g}$  nell'angolo solido  $\Omega$ . A questo punto, si inserisce la famosa assunzione di Boltzmann che impone non correlazione tra due molecole che collidono (caos molecolare)

$$f_{12} = f_1 f_2. \quad (1.4)$$

Inserendo la condizione (1.4) nell'espressione dell'operatore di collisione (1.3), l'equazione di Boltzmann diventa:

$$\left[ \partial_t + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{x}} + \mathbf{F} \cdot \partial_{\mathbf{p}} \right] f = \int \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g \sigma(\mathbf{g}, \Omega) d\Omega d\mathbf{p}_2. \quad (1.5)$$

## 1.2 Gli invarianti di collisione e la distribuzione di Maxwell

Dalla funzione di distribuzione possono essere facilmente calcolate la densità del fluido  $\rho$ , la sua velocità  $\mathbf{u}$  e la sua energia  $e$ , come segue:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (1.6)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)u_a(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)v_a d\mathbf{v}, \quad a = 1, 2, 3, \quad (1.7)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)e(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)\frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v}. \quad (1.8)$$

Si definisce *invariante di collisione* una funzione  $\psi(\mathbf{v})$  tale che:

$$\int C(f, f)\psi(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 0.$$

Si può dimostrare che l'operatore di collisione ammette cinque invarianti di collisione elementari,  $\psi_k(\mathbf{v})$  con  $k = 0, \dots, 4$ , che sono proporzionali alle grandezze macroscopiche definite in (1.6)–(1.8).

$$\begin{aligned} \psi_0(\mathbf{v}) &= 1, \\ \psi_{1,2,3}(\mathbf{v}) &= v_{1,2,3}, \\ \psi_4(\mathbf{v}) &= \mathbf{v}^2, \end{aligned} \quad (1.9)$$

dove, con  $(v_1, v_2, v_3)$ , si intendono le tre componenti spaziali della velocità. Ogni altro invariante di collisione può essere scritto come combinazione lineare degli invarianti elementari

$$\psi(\mathbf{v}) = A + \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} + C\mathbf{v}^2, \quad (1.10)$$

dove  $A$ ,  $\mathbf{B}$  e  $C$  sono cinque moltiplicatori di Lagrange.

Una nozione di importanza fondamentale, per derivare dall'equazione di Boltzmann le equazioni della fluidodinamica, è quella di equilibrio locale. Matematicamente l'equilibrio locale è definito come una funzione di distribuzione  $f^{eq}$ , che annulla l'operatore di collisione

$$C(f^{eq}, f^{eq}) = 0.$$

Questo implica che sia soddisfatta la seguente condizione:

$$(f_1^{eq})'(f_2^{eq})' = f_1^{eq} f_2^{eq},$$

e dunque

$$\ln(f_1^{eq})' + \ln(f_2^{eq})' = \ln f_1^{eq} + \ln f_2^{eq},$$

da cui si deduce che la quantità  $\ln f^{eq}$  è un invariante di collisione additivo. Allora,  $\ln f^{eq}$  deve essere una funzione degli invarianti elementari di collisione dati in (1.9), quindi:

$$\ln f^{eq} = A + \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} + C\mathbf{v}^2,$$

imponendo la conservazione di massa, quantità di moto ed energia si possono determinare i moltiplicatori di Lagrange  $A$ ,  $\mathbf{B}$  e  $C$  e si giunge alla distribuzione di equilibrio di Maxwell–Boltzmann:

$$f^{eq} = \rho(2\pi v_T^2)^{-D/2} e^{-c^2/2v_T^2}, \quad (1.11)$$

dove  $c$  è la norma della velocità relativa delle molecole rispetto al fluido

$$c_a = v_a - u_a, \quad a = 1, \dots, D.$$

La quantità  $v_T$  è data da

$$v_T = \sqrt{\left(\frac{k_B T}{m}\right)}$$

e rappresenta la velocità associata alla temperatura  $T$ ,  $k_B$  è la costante di Boltzmann.

Notiamo che la distribuzione di Maxwell è invariante per traslazioni e rotazioni.

- Invarianza per traslazioni:

$$\begin{aligned} t' &= t - \tau, \\ x'_a &= x_a - w_a \tau, \end{aligned}$$

con  $\tau$  e  $w_a$  costanti arbitrarie.

- Invarianza per rotazioni:

$$x'_a = \sum_{b=1}^D R_{ab} x_b,$$

con  $R_{ab}$  matrice di rotazione unitaria e simmetrica.

L'invarianza rotazionale si ottiene automaticamente nella teoria cinetica del continuo, ma sarebbe un grave errore assumere che essa sia garantita anche quando il tempo, lo spazio e la velocità vengono discretizzati. Una quantità che gioca un ruolo centrale nella teoria dei modelli lattice gas e lattice Boltzmann funzionale a verificare che sia soddisfatta l'invarianza rotazionale è il tensore della quantità di moto del flusso,  $\mathbf{P}$ , definito come segue:

$$P_{ab}(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, t) v_a v_b d\mathbf{v}.$$



## 1.3 Il teorema H

L'equazione di Boltzmann è storicamente, il primo tentativo di rispondere quantitativamente alla domanda sul perché, da un punto di vista macroscopico, i fenomeni fisici vadano in una sola direzione, mentre la dinamica microscopica è, apparentemente, perfettamente reversibile.

Come abbiamo visto, l'equazione di Boltzmann si basa sull'assunzione del caos molecolare, cioè sull'ipotesi di non correlazione tra due molecole che entrano in collisione. È proprio questa assunzione che rompe la simmetria tipica dei processi microscopici. Infatti, due molecole che collidono devono necessariamente essere correlate per via della conservazione di massa, quantità di moto ed energia. Il senso profondo dell'assunzione del caos molecolare è quello di ritenere che queste correlazioni decadano così velocemente nel tempo, che la probabilità che due molecole collidano ancora una con l'altra, in stato correlato, dopo un intervallo di tempo comunque piccolo, è praticamente nulla.

Rompendo questa simmetria, si apre la porta al comportamento irreversibile e uno dei maggiori contributi di Boltzmann alla meccanica statistica è proprio una misura quantitativa di irreversibilità: il famoso *teorema H*.

Dato il funzionale  $H$

$$H(t) := \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \, d\mathbf{v} d\mathbf{x},$$

dove  $f$  è una qualunque funzione che soddisfa l'equazione di Boltzmann (1.5), vale la relazione

$$\frac{dH}{dt} \leq 0,$$

e l'uguale si ha solo se  $f$  è una distribuzione di Maxwell (equazione (1.11)). Il funzionale  $H$  è legato all'entropia  $S$  dalla relazione

$$S = -k_B H.$$

## 1.4 L'approssimazione BGK

Uno dei maggiori problemi dell'equazione di Boltzmann è la complessità dell'integrale di collisione. Sono state proposte espressioni più semplici considerando che molti dettagli dell'interazione di due molecole non influenzano significativamente le quantità macroscopiche.

L'operatore di collisione semplificato,  $J(f)$ , che sostituisce  $C(f, f)$  deve essere sottoposto a due vincoli:

1.  $J(f)$  deve conservare gli invarianti elementari di collisione,  $\psi_k$  di  $C(f, f)$

$$\int \psi_k(\mathbf{v}) J(f) d\mathbf{v} d\mathbf{x} = 0, \quad k = 0, \dots, 4. \quad (1.12)$$

2. Il termine di collisione deve esprimere la tendenza ad una distribuzione di Maxwell (Teorema H).

Entrambi questi vincoli sono soddisfatti dall'operatore di collisione BGK (da Bhatnagar, Gross e Krook che lo proposero per primi nel 1954 [3]).

Il modo più semplice per verificare il secondo vincolo è immaginare che ogni collisione modifichi la funzione di distribuzione  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  di una quantità proporzionale alla distanza di  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  da una Maxwelliana  $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ , così è definito l'operatore BGK

$$J(f) = \omega [f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - f(\mathbf{x}, \mathbf{v})], \quad (1.13)$$

il coefficiente  $\omega$  è detto frequenza di collisione. Dalla (1.12) e dalla (1.13) segue:

$$\int \psi_k(\mathbf{v}) J(f) d\mathbf{v} d\mathbf{x} = \omega \left[ \int \psi_k(\mathbf{v}) f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{x} - \int \psi_k(\mathbf{v}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{x} \right] = 0, \quad k = 0, \dots, 4, \quad (1.14)$$

cioè ad ogni istante e in ogni punto la Maxwelliana deve dare la stessa densità, velocità e temperatura date dalla distribuzione  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Dal momento che questi valori variano, in generale, nello spazio e nel tempo,  $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  è detta Maxwelliana locale.

## 1.5 L'espansione Chapman–Enskog: da Boltzmann a Navier–Stokes

È di fondamentale interesse, sia pratico sia teorico, derivare l'equazione di Navier–Stokes da quella di Boltzmann. Questa derivazione va sotto il nome di espansione di Chapman–Enskog o multi-scale analysis. Restringiamo i calcoli solo al caso dell'operatore di collisione più semplice, l'operatore BGK. La prima cosa da notare è che, mentre la distribuzione  $f$  dell'equazione di Boltzmann dipende esplicitamente dal tempo, le funzioni di distribuzione  $f^{(n)}$  dell'espansione Chapman–Enskog dipendono solo implicitamente dal tempo

attraverso la densità, la velocità e la temperatura. Le  $f^{(n)}$  non sono, dunque, le più generali soluzioni dell'equazione di Boltzmann, ma si può comunque dimostrare che distribuzioni iniziali arbitrarie si rilassano molto velocemente verso questo tipo di distribuzione.

Il parametro di espansione utilizzato è il numero di Knudsen,  $K_n$ , cioè il rapporto tra il *mean free path* (la distanza media percorsa dalle molecole tra due collisioni successive) e la scala spaziale caratteristica del sistema.

### 1.5.1 Le leggi di conservazione

Le leggi di conservazione si ottengono moltiplicando l'equazione di Boltzmann per un invariante di collisione  $\psi_k(\mathbf{v})$  ( $\psi_0 = 1$ ,  $\psi_a = v_a$  per  $a = 1, 2, 3$  e  $\psi_4 = \frac{1}{2}m|\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2$ ) e integrando in  $d\mathbf{v}$ . L'integrale dell'operatore di collisione si annulla e quindi si ottiene:

$$\int \psi_k (\partial_t + v_a \partial_{x_a}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = 0, \quad (1.15)$$

dove si considera nulla la forza esterna  $\mathbf{F}$  agente sul sistema. In 3D si ottiene:

- per  $\psi_0 = 1$

$$\partial_t \rho + \partial_{x_a} (\rho u_a) = 0, \quad (1.16)$$

dove è implicita la somma su  $a$ .

- per  $\psi_a = v_a$ , al variare di  $a = 1, 2, 3$

$$\rho \partial_t u_a + \rho u_b \partial_{x_b} u_a = -\partial_{x_b} \hat{P}_{ab}, \quad (1.17)$$

dove è implicita la somma su  $b$ . Qui, infatti, l'indice  $a$  della (1.15) è sostituito da  $b$  per non confonderlo con l'indice di  $\psi_a$ .

- da  $\psi_4 = \frac{1}{2}m|\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2$

$$\rho \partial_t \theta + \rho u_b \partial_{x_b} \theta = -\frac{2}{3} \partial_{x_a} q_a - \frac{2}{3} \hat{P}_{ab} \Lambda_{ab}, \quad (1.18)$$

dove è implicita la somma su entrambi gli indici  $a$  e  $b$ .

Nelle (1.16)–(1.18) si utilizzano le seguenti definizioni:

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (1.19)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) = mn(\mathbf{x}, t), \quad (1.20)$$

$$\rho u_a(\mathbf{x}, t) = m \int v_a f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (1.21)$$

$$\theta(\mathbf{x}, t) = k_B T(\mathbf{x}, t) = \frac{m}{3n} \int (v_a - u_a)(v_a - u_a) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (1.22)$$

$$\Lambda_{ab} = \frac{m}{2} (\partial_{x_b} u_a + \partial_{x_a} u_b), \quad (1.23)$$

$$\hat{P}_{ab} = m \int (v_a - u_a)(v_b - u_b) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (1.24)$$

$$q_a(\mathbf{x}, t) = \frac{m^2}{2} \int (v_a - u_a)(v_b - u_b)(v_b - u_b) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (1.25)$$

### 1.5.2 L'equazione di Eulero

Nell'espansione Chapman-Enskog si esprime  $f$  in termini della parte di equilibrio e di quella di non equilibrio

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots,$$

dove  $f^{(0)} = f^{eq}$  è la Maxwelliana e rappresenta la parte in equilibrio della distribuzione  $f$ , mentre il resto dell'espansione è l'allontanamento dall'equilibrio.

Se ci si arresta al primo ordine dell'espansione, cioè si pone semplicemente  $f = f^{(0)}$  nelle equazioni (1.19)–(1.25), le leggi di conservazione (1.16)–(1.18) diventano:

$$\partial_t \rho + \partial_{x_a} (\rho u_a) = 0 \quad (\text{equazione di continuità}), \quad (1.26)$$

$$\rho \partial_t u_a + \rho u_b \partial_{x_b} u_a = -\partial_{x_b} p \quad (\text{equazione di Eulero}) \quad (1.27)$$

$$\partial_t \theta + u_b \partial_{x_b} \theta = -\frac{1}{c_v} \theta \partial_{x_a} u_a, \quad (1.28)$$

dove  $p = nk_B T = n\theta$  è la pressione e  $c_v = 3/2$  è la capacità termica a volume costante.

In questa approssimazione, l'equazione di continuità è già nella sua forma finale. Nell'equazione di moto (1.27) non compare il termine dissipativo che si ottiene dal secondo ordine di approssimazione.

### 1.5.3 L'equazione di Navier–Stokes

La funzione di distribuzione è ancora espansa come segue:

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots . \quad (1.29)$$

Il parametro di espansione  $\epsilon$  è spesso usato con due significati diversi:

1. come parametro per l'espansione in serie;
2. come parametro formale che permette di separare i termini che appartengono a diversi ordini di grandezza. In questo senso può essere considerato come un *indice* ed essere eliminato dal risultato finale, ponendolo uguale ad 1.

Inserendo l'espansione (1.29) nelle equazioni (1.19)–(1.25), le leggi di conservazione (1.16)–(1.18) diventano:

$$\partial_t \rho + \partial_{x_a}(\rho u_a) = 0, \quad (1.30)$$

$$\rho \partial_t u_a + \rho u_b \partial_{x_b} u_a = - \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \partial_{x_b} \hat{P}_{ab}^{(n)}, \quad (1.31)$$

$$\rho \partial_t \theta + \rho u_b \partial_{x_b} \theta = - \frac{2}{3} \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \left( \partial_{x_a} q_a^{(n)} + \hat{P}_{ab}^{(n)} \Lambda_{ab} \right), \quad (1.32)$$

dove

$$\hat{P}_{ab}^{(n)} := m \int f^{(n)}(v_a - u_a)(v_b - u_b) d\mathbf{v}, \quad (1.33)$$

$$q_a^{(n)} := \frac{m^2}{2} \int f^{(n)}(v_a - u_a) |\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2 d\mathbf{v}. \quad (1.34)$$

Dalla seconda legge di conservazione otterremo l'equazione di Navier–Stokes esplicitando il termine  $\partial_{x_a} \hat{P}_{ab}^{(1)}$ .

Dal momento che  $f$  dipende da  $t$  solo tramite  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$  e  $T$ , applicando la regola a catena si ha

$$\partial_t f = \partial_\rho f \partial_t \rho + \partial_{u_a} f \partial_t u_a + \partial_\theta f \partial_t \theta.$$

Inserendo l'espansione (1.29) nelle derivate di  $f$  rispetto a  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$  e  $T$ , si ottiene:

$$\begin{aligned} \partial_\rho f &= \partial_\rho f^{(0)} + \epsilon \partial_\rho f^{(1)} + \epsilon^2 \partial_\rho f^{(2)} + \dots, \\ \partial_{u_a} f &= \partial_{u_a} f^{(0)} + \epsilon \partial_{u_a} f^{(1)} + \epsilon^2 \partial_{u_a} f^{(2)} + \dots, \\ \partial_\theta f &= \partial_\theta f^{(0)} + \epsilon \partial_\theta f^{(1)} + \epsilon^2 \partial_\theta f^{(2)} + \dots. \end{aligned}$$

Le espansioni di  $\partial_t \rho$ ,  $\partial_t u_a$  e  $\partial_t T$  devono essere derivate in modo da essere consistenti con le leggi di conservazione in ogni ordine di  $\epsilon$ . I termini dell'espansione formale,

$$\partial_t = \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \dots,$$

vengono derivati direttamente dalle leggi di conservazione come segue:

- Dalla prima legge di conservazione, (1.30):

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} \rho &:= \partial_{x_a} (\rho u_a), \\ \partial_t^{(n+1)} \rho &:= 0 \quad (n > 0). \end{aligned} \tag{1.35}$$

- Dalla seconda legge di conservazione, (1.31):

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} u_a &:= -u_b \partial_{x_b} u_a - \frac{1}{\rho} \partial_{x_b} \hat{P}_{ab}^{(0)}, \\ \partial_t^{(n+1)} u_a &:= -\frac{1}{\rho} \partial_{x_b} \hat{P}_{ab}^{(n)} \quad (n > 0). \end{aligned} \tag{1.36}$$

- Dalla terza legge di conservazione, (1.31):

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} \theta &:= -u_b \partial_{x_b} \theta - \frac{2}{3\rho} \left( \partial_{x_a} q_a^{(0)} + \hat{P}_{ab}^{(0)} \Lambda_{ab} \right), \\ \partial_t^{(n+1)} \theta &:= -\frac{2}{3\rho} \left( \partial_{x_a} q_a^{(n)} + \hat{P}_{ab}^{(n)} \Lambda_{ab} \right) \quad (n > 0). \end{aligned}$$

L'applicazione dell'espansione di  $f$  e di  $\partial_t$  porta ad un'espansione di  $\partial_t f$  in serie di potenze di  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} \partial_t f &= (\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \dots) (f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots) \\ &= \epsilon \partial_t^{(1)} f^{(0)} + \epsilon^2 \left( \partial_t^{(1)} f^{(1)} + \partial_t^{(2)} f^{(0)} \right) + \epsilon^3 \dots \end{aligned}$$

Inserendo l'espansione di  $f$  nell'operatore di collisione  $C(f, f)$  con approssimazione BGK si ha

$$\begin{aligned} C(f, f) &= -\omega (f - f^{(0)}) \\ &= -\omega (\epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots) \\ &=: J^{(0)} + \epsilon J^{(1)} + \epsilon^2 J^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

dove

$$\begin{aligned} J^{(0)}(f^{(0)}) &= 0, \\ J^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) &= J^{(1)}(f^{(1)}) = -\omega f^{(1)}, \\ J^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) &= J^{(2)}(f^{(2)}) = -\omega f^{(2)}. \end{aligned}$$

In generale, cioè, quando non si usa l'approssimazione BGK,  $J^{(n)}$  dipende da tutti i termini  $f^{(k)}$  dell'espansione con  $k \leq n$ , ma con l'operatore BGK  $J^{(n)}$  dipende solo da  $f^{(n)}$ .

La derivata spaziale viene espansa solo al primo ordine, cioè

$$\partial_{x_a} = \epsilon \partial_{x_a}^{(1)},$$

perché processi macroscopici diversi, come avvezione e diffusione, agiscono su scale temporali diverse, ma su scale spaziali simili.

Eguagliando i termini dell'equazione di Boltzmann dello stesso ordine in  $\epsilon$ , otteniamo:

$$J^{(0)}(f^{(0)}) = 0, \quad (1.37)$$

$$\partial_t^{(1)} f^{(0)} + v_a \partial_{x_a}^{(1)} f^{(0)} = J^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) = -\omega f^{(1)}, \quad (1.38)$$

$$\partial_t^{(1)} f^{(1)} + \partial_t^{(2)} f^{(0)} + v_a \partial_{x_a}^{(1)} f^{(1)} = J^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) = -\omega f^{(2)}.$$

L'equazione (1.37) è verificata perché  $J$  si annulla, per la distribuzione di Maxwell. La relazione (1.38) ci permette, invece, di calcolare esplicitamente  $f^{(1)}$

$$f^{(1)} = -\frac{1}{\omega} (\partial_t^{(1)} f^{(0)} + v_a \partial_{x_a} f^{(0)}). \quad (1.39)$$

Grazie a questa espressione di  $f^{(1)}$  possiamo calcolare  $\hat{P}_{ab}^{(1)}$ ; dalla sua definizione (1.33) e considerando la (1.39) si ha

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ab}^{(1)} &= m \int (v_a - u_a)(v_b - u_b) f^{(1)} d\mathbf{v} \\ &= -\frac{m}{\omega} \int (v_a - u_a)(v_b - u_b) (\partial_t^{(1)} f^{(0)} + v_c \partial_{x_c}^{(1)} f^{(0)}) d\mathbf{v}. \end{aligned}$$

Utilizzando le definizioni (1.35) e (1.36) si possono valutare i termini  $\partial_t^{(1)} f^{(0)}$  e  $v_c \partial_{x_c}^{(1)} f^{(0)}$  (per i dettagli di questi calcoli si veda [2]), integrando si ottiene

infine

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ab}^{(1)} &= -n \frac{k_B T}{\omega} \left[ (\delta_{ab} \delta_{cd} + \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc}) \frac{\partial u_d}{\partial x_c} - \delta_{ab} \frac{\partial u_c}{\partial x_c} \right] \\ &= -n \frac{k_B T}{\omega} \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2 \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} & 2 \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

dove  $\mathbf{u} \equiv (u, v, w)$  e  $\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$ ; inoltre si è assunto che non ci siano variazioni di densità.

La divergenza di  $\hat{P}_{ab}^{(1)}$  è

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{P}_{ab}^{(1)}}{\partial x_a} &= -n \frac{k_B T}{\omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_b} \left( \frac{\partial u_a}{\partial x_a} \right) + \frac{\partial}{\partial x_a} \left( \frac{\partial u_b}{\partial x_b} \right) \right] \\ &= -n \frac{k_B T}{\omega} [\nabla^2 \mathbf{u} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u})].\end{aligned}$$

Dalla (1.31) arrestandosi al termine di ordine  $\epsilon$  si ha

$$\rho \partial_t u_a + \rho u_b \partial_{x_b} u_a = -\partial_{x_a} \hat{P}_{ab}^{(0)} - \epsilon \partial_{x_a} \hat{P}_{ab}^{(1)}.$$

Dividendo per  $\rho$  e sostituendo le espressioni di  $\hat{P}_{ab}^{(0)}$  e della divergenza di  $\hat{P}_{ab}^{(1)}$ , si ottiene l'equazione di Navier–Stokes:

$$\partial_t u_a + u_b \partial_{x_b} u_a = -\partial_{x_a} P + \nu \partial_{x_b} \partial_{x_b} u_a + \xi \partial_{x_a} \partial_{x_b} u_b,$$

dove le due viscosità cinematiche, la viscosità tangenziale (*shear viscosity*) ( $\nu$ ) e la *bulk viscosity* ( $\xi$ ), sono uguali e sono date da:

$$\nu = \xi = \frac{k_B T}{\omega m},$$

mentre  $P$  è la pressione del fluido ed è data da

$$P = \frac{p}{\rho} = \frac{n k_B T}{\omega m n} = \frac{k_B T}{m}.$$

Dal momento che si ignorano variazioni di densità, dall'equazione di continuità (1.26) si ha che  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , in conclusione, vengono verificate le equazioni di Navier–Stokes per fluidi incomprimibili:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u}) &= -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u}.\end{aligned}$$



La fisica dei fluidi è controllata principalmente da due parametri adimensionali, il numero di Mach e il numero di Reynolds:

$$Ma = \frac{u}{c_s},$$
$$Re = \frac{uL}{\nu},$$

dove  $c_s$  è la velocità del suono,  $u$  è la norma di una velocità caratteristica del sistema considerato ed  $L$  è una lunghezza che caratterizza il problema in esame (ad esempio nel flusso attorno ad un ostacolo è la dimensione dell'ostacolo).

Il numero di Mach misura la forza del termine inerziale  $\partial_b u_a u_b$  rispetto al gradiente di pressione, mentre il numero di Reynolds è una misura del rapporto tra gli effetti inerziali e quelli viscosi.

## Capitolo 2

# Gli automi cellulari e i modelli lattice gas

Gli automi cellulari sono schemi estremamente semplici e versatili. Una delle loro applicazioni più importanti è quella relativa alla fluidodinamica con la nascita degli automi cellulari lattice gas (LGCA). In questo capitolo, vedremo molto brevemente il concetto generale di automa cellulare e descriveremo in maggior dettaglio, un modello lattice gas bidimensionale, lo schema FHP. Vedremo, inoltre, come sia possibile dai modelli lattice gas risalire ancora alle equazioni della fluidodinamica. Infine, evidenzieremo i difetti degli LGCA perché, proprio nel tentativo di porre rimedio a questi problemi, sono nati gli schemi che maggiormente ci interessano: i modelli lattice Boltzmann. La trattazione che segue è principalmente basata sui testi di Succi [1] e di Wolf-Gladrow [2].

### 2.1 Gli automi cellulari

Gli automi cellulari (CA) possono essere definiti come segue:

- sono costituiti da una disposizione regolare di celle dello stesso tipo;
- ogni cella può assumere un numero finito di stati;
- gli stati sono aggiornati simultaneamente a livelli discreti di tempo;
- le regole di aggiornamento delle celle sono deterministiche ed uniformi nello spazio e nel tempo;

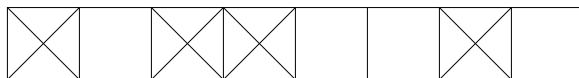
- le regole di aggiornamento di una cella dipendono solo da un intorno locale di celle che la circondano.

In realtà, non tutte queste regole sono sempre rispettate; ad esempio, vedremo che nel modello lattice gas FHP compaiono delle regole di aggiornamento probabilistiche.

### 2.1.1 Gli automi cellulari monodimensionali

Un automa cellulare monodimensionale consiste in un certo numero di celle disposte una accanto all'altra (vedi Fig. 2.1). Supponiamo che siano imposte condizioni periodiche sui bordi, cioè che la prima cella abbia come suo vicino a sinistra l'ultima cella e che l'ultima abbia come suo vicino a destra la prima. L'insieme degli stati di tutte le celle ad un dato istante è la configurazione globale dell'automa a quell'istante.

Indichiamo con  $a_i(t)$  lo stato della cella  $i$ -esima al tempo  $t$ . I singoli stati, che



*Figura 2.1: Automa cellulare monodimensionale con due stati possibili: cella occupata (indicato con una croce) e cella vuota.*

sono sempre in numero finito  $k$ , vengono indicati con gli interi non negativi  $0, 1, \dots, k - 1$ . Lo stato di ogni cella evolve nel tempo come segue:

$$a_i(t) = F \left[ a_{i-r}^{(t-1)}, a_{i-r+1}^{(t-1)}, \dots, a_i^{(t-1)}, \dots, a_{i+r}^{(t-1)} \right].$$

Dunque, lo stato della cella  $i$ -esima al tempo  $t$  dipende dallo stato delle celle in un intorno di ampiezza  $r$ , al tempo precedente  $t - 1$ .

La funzione  $F$  viene detta regola di evoluzione o di aggiornamento.

Consideriamo un automa cellulare con  $k = 2$  stati possibili (che sono quindi indicati con 0 ed 1) e con  $r = 1$ , cioè la regola di evoluzione dipende solo dalla cella stessa e dalle celle adiacenti. Ci sono otto possibili configurazioni di  $\{a_{i-1}^{(t-1)}, a_i^{(t-1)}, a_{i+1}^{(t-1)}\}$ , l'automa è completamente definito associando un valore (0 o 1) ad  $a_i^{(t)}$  per ogni possibile configurazione di input. Una possibile regola di evoluzione è data in Tab. 2.1.

Tabella 2.1: Una possibile regola di evoluzione per un automa cellulare monodimensionale con  $k = 2$  ed  $r = 1$ .

$a_{i-1}^{(t-1)}$	$a_i^{(t-1)}$	$a_{i+1}^{(t-1)}$	$a_i^{(t)}$	
0	0	0	0	0
1	0	0	1	1
2	0	1	0	0
3	0	1	1	0
4	1	0	0	1
5	1	0	1	0
6	1	1	0	0
7	1	1	1	0

### 2.1.2 Un automa cellulare bidimensionale: *Life*

In due dimensioni c'è molta più libertà nella disposizione delle celle e nella definizione degli intorni. Due famosi tipi di intorni sono quelli di von Neumann e Moore definiti come segue:

- intorno di von Neumann di ampiezza  $r$

$$N_{i,j} := \{(k, l) \in L \text{ t.c. } |k - i| + |l - j| \leq r\},$$

- intorno di Moore di ampiezza  $r$

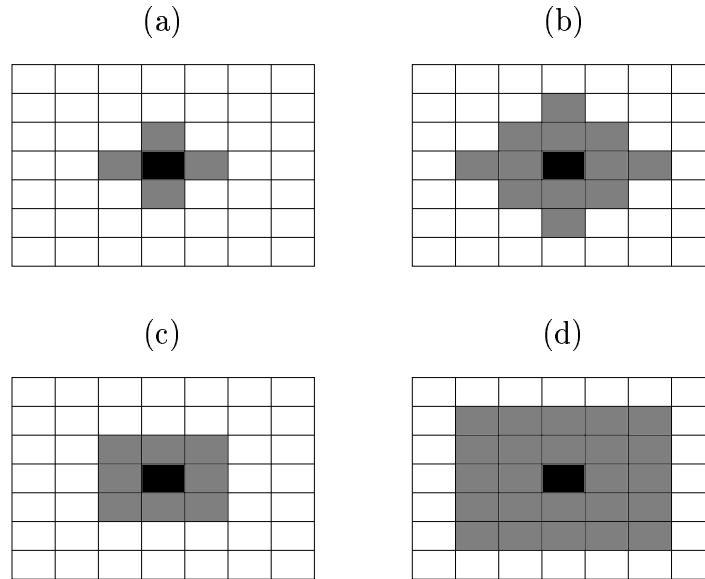
$$N_{i,j} := \{(k, l) \in L \text{ t.c. } |k - i| \leq r \text{ e } |l - j| \leq r\},$$

dove  $L$  è l'insieme di tutte le celle della griglia.

Questi intorni, per  $r = 1$  ed  $r = 2$ , sono rappresentati in Fig. 2.2.

Nei primi anni '70 Conway, presentò *Life*, un automa cellulare in grado di simulare l'evoluzione di una società di organismi viventi. In *Life* ogni cella ha due stati, morto (0) o vivo (1) e otto vicini, cioè si considera un intorno di Moore di ampiezza 1. L'automata è definito da due regole di evoluzione:

- ogni cella viva rimane viva al passo successivo se ha due o tre vicini vivi, altrimenti muore;
- una cella morta torna viva solo se ha esattamente tre vicini vivi.



*Figura 2.2: Intorni in 2D: (a) e (b) intorni di von Neumann di ampiezza 1 e 2, rispettivamente; (c) e (d) intorni di Moore di ampiezza 1 e 2, rispettivamente.*

Lo stato iniziale è specificato in modo casuale: ogni cella assume, con probabilità  $1/2$ , lo stato di viva o morta.

Gli automi cellulari hanno un vasto campo di applicazione, ma, nonostante questo, sono modelli estremamente semplici sia concettualmente sia da un punto di vista implementativo. Hanno una naturale predisposizione al parallelismo perché sono definiti da operazioni molto localizzate; inoltre, sono incondizionatamente stabili. Una delle più famose e produttive applicazioni degli automi cellulari è quella al campo della fluidodinamica con la nascita degli automi cellulari lattice gas (LGCA).

## 2.2 Il modello lattice gas FHP

Nel 1986 Frisch, Hasslacher e Pomeau presentarono un semplice automa cellulare che obbediva alle leggi di conservazione a livello microscopico ed era in grado di riprodurre aspetti anche molto complessi del moto reale di un fluido [4]. Questo automa cellulare lattice gas è noto come modello FHP dalle iniziali dei suoi inventori.

Consideriamo una griglia esagonale, tale che ogni nodo sia circondato da sei vicini identificati da sei vettori che li uniscono al nodo corrente  $\mathbf{c}_i = (c_{ia})_{a=1,2}$ ,  $i = 1, \dots, 6$  dove  $a = 1, 2$  indica le due dimensioni dello spazio (vedi Fig. 2.3). In particolare, i vettori  $\mathbf{c}_i$  sono dati da:

$$\mathbf{c}_i = c \left( \cos \frac{\pi}{3}i, \sin \frac{\pi}{3}i \right), \quad i = 1, \dots, 6,$$

dove  $c$  è la norma dei vettori e usualmente si prende  $c = 1$  per semplicità.

Ogni nodo della griglia può contenere fino a sei particelle con le seguenti

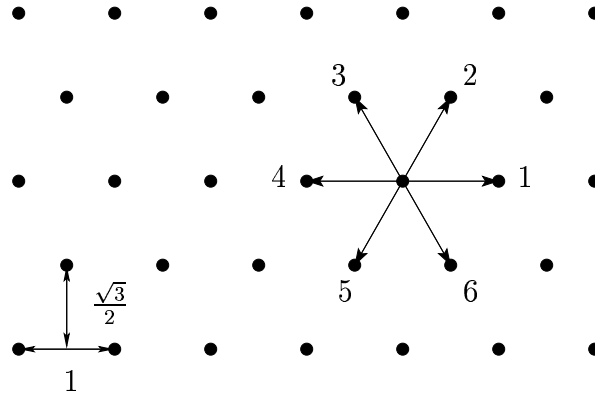


Figura 2.3: Griglia del modello FHP: i vettori delle velocità  $\mathbf{c}_i$  sono indicati dalle frecce 1, 2, 3, 4, 5, 6.

condizioni:

- tutte le particelle hanno la stessa massa ( $m = 1$ );
- le particelle possono muoversi soltanto lungo una delle sei direzioni definite dai vettori  $\mathbf{c}_i$ , cioè possono muoversi solo con velocità  $\mathbf{c}_i$  per  $i$  compreso tra 1 e 6;
- in un time step le particelle saltano sul nodo vicino puntato dal vettore  $\mathbf{c}_i$  corrispondente, non sono permessi salti più lunghi né più corti. Questo significa che tutte le particelle hanno la stessa energia;
- lungo ogni direzione  $\mathbf{c}_i$  può muoversi al più una particella, cioè due o più particelle non possono trovarsi sullo steso link (principio di esclusione).

È evidente che quello proposto è un modello molto semplificato della reale dinamica molecolare di un gas. In un gas reale le molecole possono muoversi

lungo qualunque direzione (isotropia), mentre qui sono costrette a sei direzioni soltanto. Inoltre, nella realtà, le molecole possono muoversi a qualunque velocità (ovviamente più bassa di quella della luce), mentre, nel modello, il modulo della velocità è unitario per tutte le particelle. Infine, il principio di esclusione non ha un corrispondente nella realtà.

Nonostante tutto questo, il modello FHP riesce a simulare fenomeni fluidodinamici realistici.

Lo stato del sistema è pienamente specificato dalla presenza/assenza di una particella in ogni link. Si introduce, quindi, il numero di occupazione  $n_i$  definito come segue:

- $n_i(\mathbf{x}, t) = 1$ : il link  $i$ -esimo del nodo  $\mathbf{x}$  è occupato da una particella al tempo  $t$ . Questo significa che nel punto  $\mathbf{x}$ , al tempo  $t$ , c'è una particella con velocità  $\mathbf{c}_i$ .
- $n_i(\mathbf{x}, t) = 0$ : il link  $i$ -esimo del nodo  $\mathbf{x}$  non è occupato da una particella al tempo  $t$ . Questo significa che nel punto  $\mathbf{x}$ , al tempo  $t$ , non c'è nessuna particella con velocità  $\mathbf{c}_i$ .

## 2.3 L'evoluzione del modello FHP

L'evoluzione dei modelli LGCA è definita da due passi:

- collisione;
- propagazione.

Esaminiamo prima la propagazione che è il meccanismo più semplice tra i due.

### 2.3.1 Propagazione dell'FHP

La propagazione consiste nello spostare le particelle sui nodi vicini, a seconda della loro velocità  $\mathbf{c}_i$ . Una particella che al tempo  $t$  si trova in  $\mathbf{x}$  ed ha una velocità  $\mathbf{c}_i$ , al tempo  $t + 1$  si troverà nel nodo  $(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$ . La propagazione è quindi espressa dalla seguente equazione:

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t), \quad i = 1, \dots, 6.$$

Conseguentemente, si definisce l'operatore discreto di propagazione  $\Delta_i$

$$\Delta_i = n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - n_i(\mathbf{x}, t), \quad i = 1, \dots, 6. \quad (2.1)$$

Questa è la diretta trascrizione nel discreto dell'operatore di propagazione di Boltzmann  $D_t \equiv \partial_t + v_a \partial_{x_a}$ , in una griglia in cui spazio e tempo vengono discretizzati mantenendo la seguente relazione:

$$\frac{\Delta x_{ia}}{\Delta t} = c_{ia}, \quad a = 1, 2.$$

Le particelle si propagano e, arrivate nel nodo di destinazione, collidono con le altre particelle eventualmente giunte sul loro stesso nodo. La collisione ridistribuisce le particelle lungo i link, cioè l'urto modifica la velocità di ogni singola particella (conservando, però, la quantità di moto globale del nodo) e le particelle lasciano nuovamente il nodo spostandosi a seconda della velocità che hanno acquisito con la collisione.

### 2.3.2 Collisione dell'FHP

Come abbiamo visto, lo stato di ogni nodo è dato dal valore dei numeri di occupazione, relativi ad ognuno dei suoi link. Specificare la collisione significa associare ad ogni possibile combinazione di input, uno stato di output. La collisione può, quindi, assegnare una particella ad un link che era vuoto, togliere una particella da un link pieno o lasciare il link inalterato. Tutto questo facendo in modo che il numero delle particelle di un nodo non cambi prima e dopo la collisione e che non cambi neanche la quantità di moto. Ne segue che solo alcune collisioni sono possibili (cioè solo determinati input provocano un cambiamento). In Fig. 2.4 sono specificate tutte le possibili collisioni dell'FHP (a meno di rotazioni di  $\pi/3$ ). Si noti che, per alcune configurazioni di input, ci sono due combinazioni di output possibili ed equiprobabili (Fig. 2.4 (a) e (c)), dunque, la regola di evoluzione dell'FHP non è deterministica.

La collisione condivide due caratteristiche cruciali con le reali collisioni molecolari:

- conserva il numero delle particelle (conservazione della massa);
- conserva la quantità di moto.

Queste proprietà sono una condizione *necessaria* per ottenere un comportamento fluidodinamico una volta che si sia considerato un numero sufficientemente grande di particelle, ma non sono sufficienti.



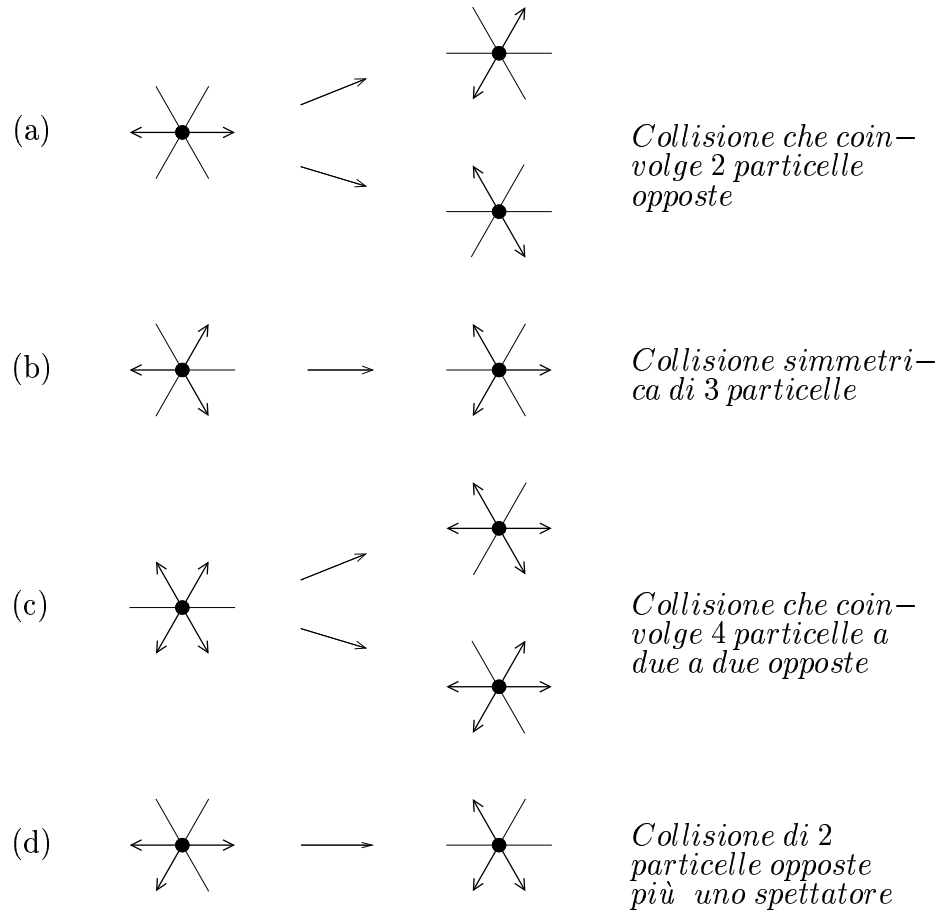


Figura 2.4: Collisioni del modello FHP: le direzioni occupate sono indicate dalle frecce, quelle vuote dalle linee. Si noti che alle configurazioni (a) e (c) corrispondono due possibili stati di output, ognuno dei quali ha probabilità pari ad  $\frac{1}{2}$  di essere selezionato.

A riprova di questo consideriamo l'automa cellulare noto come HPP (da Hardy, de Pazzis e Pomeau [5, 6]). In questo modello, si considera una griglia quadrata, in cui ogni nodo è collegato soltanto ai quattro vicini situati, per così dire, a nord, sud, est ed ovest rispetto ad esso, come mostrato in Fig. 2.5. Anche in questo caso le leggi di collisione sono definite in modo

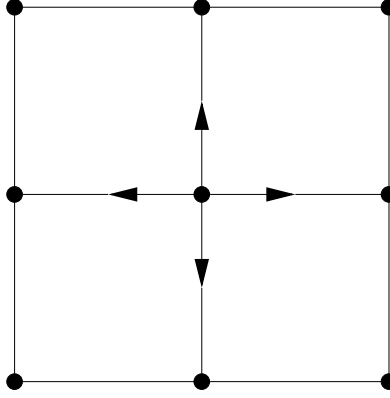


Figura 2.5: Griglia quadrata dello schema HPP. Le frecce indicano i quattro link considerati dal modello.

tale da garantire la conservazione del numero di particelle e della quantità di moto, ma non verificano un'altra caratteristica basilare delle equazioni di Navier–Stokes, l'invarianza rotazionale. Il termine che rivela l'isotropia (o la sua assenza) è il tensore  $P_{ab}$ . Nelle equazioni di Navier–Stokes si ha  $P_{ab} = \rho u_a u_b + p \delta_{ab}$ , quindi, in due dimensioni:

$$\begin{aligned} P_{xx} &= p + \rho u_x^2, \\ P_{xy} &= P_{yx} = \rho u_x u_y, \\ P_{yy} &= p + \rho u_y^2, \end{aligned} \tag{2.2}$$

dove  $p$  è la pressione del fluido. Questo tensore è isotropo perché le sue componenti sono invarianti per rotazioni arbitrarie del sistema di riferimento. Eseguendo un'espansione analoga a quella vista nel continuo (vedi paragrafo 1.5), opportunamente adattata al nostro spazio delle fasi discretizzato secondo il modello HPP, potremmo verificare che il tensore  $P_{ab}$  risulta definito come segue:

$$\begin{aligned} P_{xx} &= p + \rho(u_x^2 - u_y^2), \\ P_{xy} &= P_{yx} = 0, \\ P_{yy} &= p + \rho(u_y^2 - u_x^2), \end{aligned}$$

ed è evidente che questo tensore non è isotropo.

La mancanza di isotropia è intrinseca nel modello, in particolare essa dipende dalla griglia scelta che non ha abbastanza simmetria rotazionale. Intuitivamente, possiamo dire che mentre il gruppo delle rotazioni di multipli di  $\pi/3$ ,  $\mathbb{Z}_6$ , può “sostituire”  $SO(1)$  (il gruppo delle rotazioni nel continuo),  $\mathbb{Z}_4$  non può farlo. Quindi un quadrato non basta per approssimare un cerchio, ma sorprendentemente è sufficiente un esagono.

Torniamo ora all'operatore di collisione. La collisione è un procedimento del tutto locale, esso modifica i numeri di occupazione di ogni nodo senza nessun intervento da parte dei vicini. Se indichiamo con  $n'_i$  il numero di occupazione dopo la collisione, possiamo scrivere:

$$n'_i - n_i = C_i(\mathbf{n}), \quad (2.3)$$

dove  $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_l)$ , è l'insieme di tutti i numeri di occupazione di un dato nodo.

Si definisce matrice di transizione  $A(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ , la matrice di tutte le possibili collisioni, da un qualunque stato iniziale  $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_l)$  ad un qualunque stato finale  $\mathbf{s}' = (s'_1, \dots, s'_l)$ .

$$A(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \begin{cases} 1 & \text{se esiste una collisione che trasforma } \mathbf{s} \text{ in } \mathbf{s}', \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases}$$

dove per stato  $\mathbf{s}$  si intende l'insieme dei valori dei numeri di occupazione di un nodo.

La matrice di transizione deve soddisfare la seguente condizione (*semi-detailed balance condition*):

$$\sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = 1,$$

così si richiede che uno stato di destinazione  $\mathbf{s}'$  sia necessariamente provocato da uno stato sorgente, ma non si impone una relazione biunivoca, cioè lo stesso stato sorgente può dare origine a più stati destinazione.

Una relazione biunivoca sarebbe imposta dalla condizione

$$A(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = A(\mathbf{s}', \mathbf{s}),$$

(*detailed balance condition*), che assicura micro-reversibilità.

La probabilità di avere uno stato di input  $\mathbf{s}$  con un dato numero di occupazione  $\mathbf{n}$ , è definita come segue:

$$P(\mathbf{s}, \mathbf{n}) = \prod_{i=1}^l n_i^{s_i} \bar{n}_i^{\bar{s}_i}, \quad (2.4)$$

dove  $\bar{n}_i = 1 - n_i$  e  $\bar{s}_i = 1 - s_i$ . Se, ad esempio,  $\mathbf{s} = (1, 0, 0, 1, 0, 0)$ , la probabilità di trovarsi nello stato  $\mathbf{s}$  è data da  $P((1, 0, 0, 1, 0, 0), \mathbf{n}) = n_1 \bar{n}_2 \bar{n}_3 n_4 \bar{n}_5 \bar{n}_6$  dalla definizione (2.4), è chiaro che questa quantità sarà sempre nulla tranne nel caso in cui il numero di occupazione  $\mathbf{n}$  sia esattamente  $(1, 0, 0, 1, 0, 0)$ .

Grazie a queste definizioni possiamo scrivere l'operatore di collisione in forma algebrica

$$n'_i - n_i = C_i = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} (s'_i - s_i) P(\mathbf{s}, \mathbf{n}) A(\mathbf{s}, \mathbf{s}'). \quad (2.5)$$

$C_i$  può assumere tre valori  $(-1, 0, 1)$  e si può direttamente verificare che se  $n_i = 0$ ,  $C_i$  non può valere  $-1$  e se  $n_i = 1$ ,  $C_i$  non assume il valore  $+1$ .

Riassumendo, dalla (2.1) e dalla (2.3) si ottiene la regola di evoluzione dell'FHP:

$$\Delta_i n_i = C_i, \quad (2.6)$$

o, equivalentemente

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n'_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.7)$$

Si noti infine che la collisione deve essere specificata in modo che valgano le seguenti condizioni:

- conservazione di massa e quantità di moto

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^l C_i &= 0, \\ \sum_{i=1}^l c_{ia} C_i &= 0. \end{aligned}$$

- conservazione del momento angolare (invarianza rotazionale).

### 2.3.3 Le variabili macroscopiche dei modelli lattice gas

Le variabili macroscopiche, quali velocità  $\mathbf{u}$  e densità  $\rho$ , vengono determinate mediando su di un numero sufficiente di nodi. La griglia viene suddivisa in blocchi che contengono un certo numero di nodi, indichiamo con  $\mathbf{r}$  la posizione di ogni macro-blocco su questa griglia meno fine. Si definisce numero medio di occupazione  $N_i$ , la quantità

$$N_i(\mathbf{r}, t) = \langle n_i(\mathbf{x}, t) \rangle,$$

per ogni  $i = 1, \dots, l$ , dove la media si intende sul blocco di nodi di posizione  $\mathbf{r}$ .

Densità, quantità di moto e quantità di moto del flusso sono dati da:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^l N_i(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)u_a(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^l c_{ia}N_i(\mathbf{r}, t), \quad (2.9)$$

$$P_{ab}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^l c_{ia}c_{ib}N_i(\mathbf{r}, t). \quad (2.10)$$

## 2.4 Dai modelli lattice gas all'equazione di Navier–Stokes

L'equazione (2.6) (o (2.7)) rappresenta la dinamica delle nostre microparticelle sulla griglia, essa è l'analogo lattice gas delle equazioni di Newton per le molecole reali. Può, quindi, essere vista come il punto di partenza della gerarchia che, nel continuo, ci porta dalle leggi di Newton (che descrivono il moto delle singole molecole) alle equazioni di Navier–Stokes (che descrivono il fenomeno su scala macroscopica).

Si può costruire un analogo discreto per ogni passo della gerarchia e, in questo modo, risalire dai modelli lattice gas alle equazioni di Navier–Stokes, come schematizzato in Fig. 2.6.

Nonostante la drastica riduzione di gradi di libertà dei modelli LGCA rispetto alla realtà, l'equazione di Navier–Stokes della griglia (cioè quella che si ottiene partendo dal nostro mondo discretizzato) praticamente coincide con la sua corrispondente nel continuo. Tutto questo procedimento si basa essenzialmente sulle leggi di conservazione della meccanica classica: conservazione di massa, quantità di moto e momento angolare.

Riepiloghiamo brevemente i passi che ci portano dalla dinamica delle singole particelle (Newton–Hamilton) alle equazioni di Navier–Stokes nel continuo.

1. Da Newton–Hamilton a Liouville.

Nell'assunzione di ergodicità (cioè assumendo che la probabilità di trovarsi in una certa regione dello spazio delle fasi sia proporzionale al volume di quella regione), le equazioni di moto deterministiche di Newton–Hamilton sono sostituite dall'equazione probabilistica di Liouville per

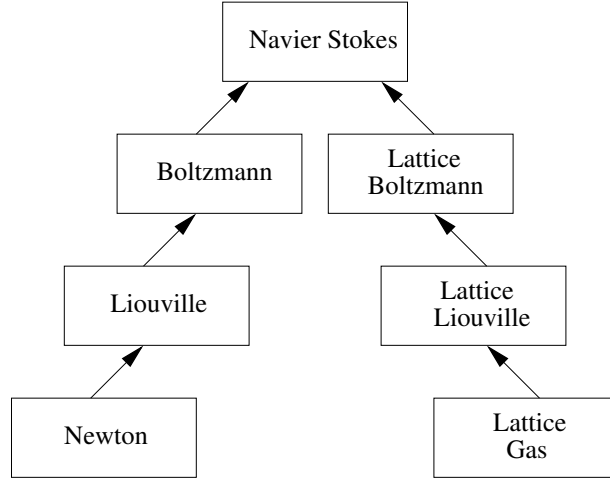


Figura 2.6: Gerarchia dal microscopico al macroscopico nel continuo e nella griglia. La mancanza di dettagli microscopici nel discreto si fa sempre meno importante mentre si sale di livello lungo la gerarchia.

la funzione di distribuzione di  $N$  particelle:

$$f_N(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{v}_N; t).$$

Questa funzione esprime la probabilità che la particella 1 si trovi nel punto  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1)$  dello spazio delle fasi e la particella 2 si trovi nel punto  $(\mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2)$  e così via fino alla particella  $N$ , tutte allo stesso tempo  $t$ .

2. Da Liouville a Boltzmann.

Le funzioni di distribuzione di ordine  $N$  vengono espresse in termini di funzioni di distribuzione di ordine più basso. L'ultimo gradino è la funzione di distribuzione di Boltzmann,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ , che riguarda una sola particella. La gerarchia non è, però, chiusa perché ogni funzione di distribuzione dipende da quelle a livello superiore e per chiuderla si effettua un troncamento.

3. Da Boltzmann a Navier–Stokes.

Integrando, sullo spazio delle fasi si ottengono delle equazioni differenziali a derivate parziali che coinvolgono i momenti della distribuzione di Boltzmann  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ . Considerando un numero finito di momenti,  $m = 1, \dots, M$ , si ottiene un sistema di  $M$  equazioni della forma di un'equazione di continuità generalizzata

$$\partial_t \rho_m + \partial_a J_{am} = C_m, \quad m = 1, \dots, M, \quad (2.11)$$

dove

$$\begin{aligned}\rho_m &= \int f \phi_m(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \\ J_{am} &= \int f v_a \phi_m(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \\ C_m &= \int C(f) \phi_m(\mathbf{v}) d\mathbf{v}.\end{aligned}$$

Le quantità  $\rho_m$  e  $J_{am}$  sono rispettivamente la densità generalizzata e la quantità di moto generalizzata, mentre  $C_m$  rappresenta l'effetto delle interazioni molecolari. Le funzioni  $\{\phi_m\}$  sono tipicamente polinomi di Hèrmitte in  $\mathbf{v}$ . I momenti fluidodinamici più importanti sono, naturalmente, densità, velocità e quantità di moto del flusso:

$$\begin{aligned}\rho &= \int f d\mathbf{v}, \\ u_a &= \frac{m}{\rho} \int f v_a d\mathbf{v}, \\ P_{ab} &= m \int f v_a v_b d\mathbf{v}.\end{aligned}$$

Il sistema (2.11) non è chiuso, perché la derivata temporale di  $\rho_m$  coinvolge la divergenza di  $J_m$ , che è un momento di grado superiore. Per chiuderlo, si divide la distribuzione  $f$  in due componenti, quella di equilibrio locale e quella di non equilibrio locale:

$$f = f^{eq} + f^{neq}.$$

Con l'assunzione  $f^{neq} \sim O(K_n) f^{eq}$  e procedendo con l'espansione di Chapman–Enskog, si determina l'equazione di Eulero arrestandosi all'ordine  $O(K_n)$  e l'equazione di Navier–Stokes per l'ordine  $O(K_n^2)$ , come abbiamo visto in dettaglio nel paragrafo 1.5.

Esattamente gli stessi passi si seguono per derivare dai modelli lattice gas l'equazione di Navier–Stokes; bisogna, però, fare molta attenzione, perché la natura discreta della griglia mette a rischio la conservazione delle simmetrie. Nel caso discreto, i momenti più importanti (densità, velocità e quantità di moto del flusso) sono dati dalle relazioni (2.8)–(2.10). La funzione di equilibrio assume la forma di una distribuzione di Fermi–Dirac

$$N_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \frac{\rho}{l} \frac{1}{1 + e^{\phi_i}},$$

dove  $\phi_i$  è una combinazione lineare degli invarianti di collisione: massa e quantità di moto

$$\phi_i = A + B c_{ia} u_a.$$

$A$  e  $B$  sono dei coefficienti di Lagrange e devono essere scelti in modo che  $N_i^{eq}$  soddisfi la conservazione di massa e quantità di moto, cioè

$$\rho = \sum_{i=1}^l N_i = \sum_{i=1}^l N_i^{eq} = \sum_{i=1}^l \frac{\rho/l}{1 + e^{\phi_i}},$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{i=1}^l \mathbf{c}_i N_i = \sum_{i=1}^l \mathbf{c}_i N_i^{eq} = \sum_{i=1}^l \mathbf{c}_i \frac{\rho/l}{1 + e^{\phi_i}}.$$

Soluzioni esplicite per  $A$  e  $B$  sono note solo per pochi casi. In generale, i moltiplicatori di Lagrange possono essere calcolati attraverso un'espansione per piccoli numeri di Mach,  $M_a = u/c_s$  (con  $u = |\mathbf{u}|$ ). Con questo procedimento si ottiene la forma finale della distribuzione di equilibrio

$$N_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \frac{\rho}{l} [1 + u_i + G(\rho) q_i], \quad (2.12)$$

dove

$$u_i = \frac{c_{ia} u_a}{c_s^2},$$

$$q_i = \frac{Q_{iab} u_a u_b}{2c_s^4},$$

e

$$Q_{iab} = c_{ia} c_{ib} - c_s^2 \delta_{ab}.$$

Con  $c_s$  si intende  $c_s = c/\sqrt{D}$ , la velocità del suono nella griglia. Il fattore  $G(\rho)$  è dato da

$$G(\rho) = \frac{1 - 2d}{1 - d},$$

con  $d = \rho/l$ , densità ridotta.

Si può dimostrare che, affinché  $N_i^{eq}$  sia invariante rispetto a trasformazioni di Galilei il fattore  $g$  definito come segue

$$g := \frac{D}{D+2} G(\rho) = \frac{1}{2} G(\rho),$$

deve essere uguale ad 1.

Evidentemente  $g$  è minore di 1, l'invarianza Galileiana non è dunque soddisfatta.



Il fatto che  $g$  sia minore di 1 dipende dalla griglia sottostante, che è invariante solo per alcune rototraslazioni, ma non per un'arbitraria trasformazione di Galilei. Comunque, scegliendo distribuzioni diverse da quella di Fermi–Dirac o con un semplice accorgimento che vedremo nel paragrafo seguente, questo problema può essere eliminato.

Con queste premesse ed espandendo  $N_i$  come

$$N_i = N_i^{eq} + \epsilon N_i^{neq},$$

con  $\epsilon = K_n$ , si può eseguire un'espansione di Chapman–Enskog e si possono derivare le equazioni macroscopiche che risultano essere le equazioni di Navier–Stokes, a meno di due anomalie che discuteremo nel paragrafo seguente. Naturalmente, in questa equazione risultante compare la viscosità cinematica,  $\nu$ , che è data da

$$\nu = \frac{1}{12} \frac{1}{d(1-d)^3} - \frac{1}{8}. \quad (2.13)$$

## 2.5 Difetti dei modelli lattice gas

Il procedimento di derivazione delle equazioni di Navier–Stokes, a partire dal modello lattice gas, evidenzia due difetti relativi alla griglia scelta:

- mancanza di invarianza Galileana;
- anomala dipendenza della pressione del fluido dalla velocità.

Altri problemi sorgono per via della discretizzazione dello spazio delle fasi:

- rumore statistico;
- alta viscosità (bassi numeri di Reynolds);
- complessità dell'operatore di collisione;
- invarianti spuri.

### 2.5.1 Mancanza di invarianza Galileana e pressione anomala

Le prime due anomalie dipendono dal fatto che lo spazio delle velocità è discreto; questo porta ad un'espressione per le funzioni di equilibrio che non

è in grado di restituire i corretti tensori di inerzia e pressione (cioè quelli dell'equazione di Navier–Stokes).

Il tensore  $P_{ab}^{eq} = \sum_i N_i^{eq} c_{ia} c_{ib}$  che si ottiene per l'FHP è dato da

$$\begin{aligned} P_{xx}^{eq} &= \rho G(\rho)(u_x^2 - u_y^2) + \frac{\rho}{2}, \\ P_{xy}^{eq} &= P_{yx}^{eq} = \rho G(\rho)2u_x u_y, \\ P_{yy}^{eq} &= \rho G(\rho)(u_y^2 - u_x^2) + \frac{\rho}{2}. \end{aligned}$$

Identificando  $\frac{\rho}{2}(1 - g(\rho)\mathbf{u}^2)$  con la pressione  $p$ , otteniamo

$$\begin{aligned} P_{xx}^{eq} &= \rho g(\rho)u_x^2 + p, \\ P_{xy}^{eq} &= P_{yx}^{eq} = \rho g(\rho)u_x u_y, \\ P_{yy}^{eq} &= \rho g(\rho)u_y^2 + p, \end{aligned}$$

che è molto simile al tensore reale (vedi (2.2)), tranne che per il fattore  $g(\rho) = G(\rho)/2$ .

Si vede chiaramente che la pressione, così definita, dipende dalla velocità e questa dipendenza è anomala; inoltre,  $g(\rho) \neq 1$  e quindi non abbiamo invarianza galileana. Il problema è che, per prima cosa non esiste alcun valore di  $\rho$  per cui  $g(\rho) = 1$  e, se anche fosse  $g(\rho) = 1$ , questo non farebbe che massimizzare la dipendenza della pressione dalla velocità.

Questo problema, che sembra insolubile, fu in realtà superato molto velocemente: ci si accorse, infatti, che, per piccoli numeri di Mach ( $u/c_s \ll 1$ ), l'anomalia nella pressione diventa trascurabile, inoltre la densità è quasi costante perché siamo nel limite di incomprimibilità, ne segue che  $g$  è costante. Sotto queste ipotesi, è sufficiente riscalarlo i tempi e la viscosità di un fattore  $g$ :  $t \rightarrow t/g$  e  $\nu \rightarrow \nu/g$ , per riottenere le equazioni di Navier–Stokes senza anomalie.

## 2.5.2 Il rumore statistico

Il rumore statistico è un problema intrinseco dei modelli LGCA. Infatti, per ottenere valori macroscopici, quali densità e velocità, si effettuano delle medie su un certo numero di punti. Questo introduce, naturalmente, una fluttuazione attorno al valore medio che è tanto più piccola quanto più grande è il numero dei punti su cui si media. Del resto, considerando molti punti per ogni blocco macroscopico, si ha bisogno di un enorme quantitativo di memoria (e anche di tempo di calcolo) per ottenere dei risultati su domini e

per tempi di un qualche interesse pratico. Insomma, è necessario arrivare ad un compromesso tra precisione dei risultati e utilizzo delle risorse.

Si osservi, quindi, che se da un lato il fatto di lavorare con variabili booleane garantisce stabilità incondizionata ed estrema efficienza di calcolo, dall'altro, introduce la necessità di calcolare dei valori mediati per ottenere risultati macroscopici.

### 2.5.3 Alta viscosità

Il massimo numero di Reynolds che un modello LGCA può simulare dipende principalmente dal minimo *mean free path* che si può raggiungere, cioè dal massimo numero di collisioni, per unità di tempo, che l'automa è in grado di simulare.

In realtà, non è soltanto il numero di collisioni in cui mediamente una particella è coinvolta a fare la differenza, ma è importante anche la qualità della collisione stessa, cioè la quantità di moto che la collisione riesce a trasferire da una direzione ad un'altra attorno al nodo. In questo senso il fatto di avere uno spazio delle fasi discreto gioca un doppio ruolo.

Da un lato, il basso numero di velocità disponibili e il fatto che la collisione debba conservare massa e quantità di moto restringe di molto il numero dei possibili urti. Ad esempio, anche considerando il modello FHP-III (si tratta di una variazione dell'FHP in cui si aggiunge la possibilità che una particella rimanga ferma nel nodo, quindi ci sono sette link per ogni nodo), soltanto 22 configurazioni su 128 possibili danno luogo ad una collisione. Quindi, soltanto il 20% circa dello spazio delle fasi è attivo.

Dall'altro canto, la natura discreta delle velocità forza le particelle ad incontrarsi ad ogni time step, infatti, non esiste la possibilità che si *sforino* senza toccarsi e questo aumenta la probabilità di collisione.

Grazie a questi due meccanismi contrastanti, si può sperare di ottenere una buona situazione per ciò che riguarda il numero di collisioni, e infatti, questo è proprio quello che accade.

### 2.5.4 Complessità dell'operatore di collisione

Questo problema si manifesta quando si cerca di aggiungere qualcosa al modello per simulare problemi fisici più complessi (ad esempio la presenza di due fluidi), o anche se si cerca semplicemente di passare da due a tre dimensioni spaziali. La complessità computazionale dell'operatore di collisione è dell'ordine  $O(2^l)$ , dove  $l$  è il numero dei link.

Per avere un'idea della situazione, basti pensare che l'unico modello in dimensione  $D > 2$  che garantisce l'isotropia è l'FCHC (Face Centered HyperCube) definito per  $D = 4$  che ha  $l = 24$  link, dunque una complessità dell'ordine di  $O(2^{24})$ . Se anche si riuscisse a scrivere in forma analitica un operatore di collisione che richiede  $2^{24} = 16128$  milioni di operazioni booleane, il tempo richiesto per effettuarle sarebbe enorme.

### 2.5.5 Invarianti spuri

In assenza di fattori esterni, un fluido reale conserva massa, quantità di moto ed energia, niente di meno e niente di più. I fluidi "discreti" possono conservare altre quantità che non hanno nessun significato fisico e che devono la loro esistenza soltanto alla griglia in cui il fluido è costretto a vivere. Questi invarianti vengono detti *invarianti spuri* e potrebbero portare a comportamenti macroscopici non realistici.

Fortunatamente, essi sembrano influire solo in alcune situazioni, ad esempio nelle vicinanze di bordi non allineati con la griglia. In generale, quindi, questo può essere considerato un problema di minor rilievo rispetto agli altri.

Nel tentativo di risolvere i maggiori problemi relativi alla teoria e anche all'implementazione dei modelli lattice gas, negli anni '90, cominciarono ad essere sviluppati i modelli lattice Boltzmann.

# Capitolo 3

## I modelli lattice Boltzmann

I modelli lattice Boltzmann (LBM) sono nati dal tentativo di risolvere i problemi dei modelli lattice gas, mantenendo, però, le sue caratteristiche principali: semplicità, velocità di calcolo e predisposizione al parallelismo. I modelli lattice Boltzmann si sono gradualmente allontanati dai loro predecessori e si sono, ormai, affermati come strumento del tutto autonomo per la simulazione di fluidi.

In questo capitolo, vedremo le tappe dell'evoluzione degli LBM e presenteremo gli schemi attualmente più utilizzati in due e tre dimensioni: gli schemi LBM con approssimazione BGK, i cosiddetti modelli *Single Relaxation Time* (SRT). Presenteremo, inoltre, i modelli *Multi Relaxation Time* (MRT) che permettono di raggiungere numeri di Reynolds molto più alti rispetto agli SRT. Infine, descriveremo le condizioni al bordo utilizzate nel corso delle nostre simulazioni.

### 3.1 Una breve storia dei modelli lattice Boltzmann

La prima equazione lattice Boltzmann (LBE) fu proposta da McNamara e Zanetti nel tentativo di eliminare il rumore statistico che affliggeva gli LGCA [7]. Questa equazione, come vedremo, era però ancora strettamente legata al modello lattice gas, da cui era stata derivata e, quindi, risentiva di tutti gli altri difetti degli LGCA. In particolare, rimaneva il problema della complessità dell'operatore di collisione che rendeva molto difficile estendere i modelli lattice gas a problemi tridimensionali.

In risposta a questo problema, venne proposta da Higuera e Jiménez una se-

conda equazione lattice Boltzmann: l'equazione quasi lineare, che, pur semplificando enormemente l'operatore di collisione, era ancora legata a doppio filo con il modello lattice gas [8].

Ben presto Higuera, Succi e Benzi si resero conto che questo forte vincolo era del tutto inutile e poteva essere spezzato [9]. La loro idea fu quella di utilizzare i parametri che definiscono l'operatore di collisione come variabili del sistema. Questi parametri possono essere fissati “liberamente” (garantendo la conservazione di massa, quantità di moto ed energia e che siano soddisfatte le equazioni di Navier–Stokes a livello macroscopico) a seconda dello scopo che si vuole raggiungere. Ad esempio, Higuera, Succi e Benzi utilizzarono questo metodo per ottenere numeri di Reynolds più alti. Il loro lavoro fu un contributo fondamentale per lo sviluppo della teoria dei modelli lattice Boltzmann, non tanto perché permise di superare l'ultimo limite degli LGCA, ma soprattutto perché stabilì un approccio del tutto nuovo al problema, che venne poi usato per svariate applicazioni e che rese l'equazione lattice Boltzmann indipendente dagli schemi lattice gas.

### 3.1.1 La prima equazione lattice Boltzmann

Nel 1988 McNamara e Zanetti proposero la prima equazione lattice Boltzmann [7], sviluppata col preciso scopo di porre rimedio al problema del rumore statistico che affliggeva gli LGCA.

L'idea di base è semplice: sostituire i numeri di occupazione  $n_i$ , che sono variabili booleane, con delle corrispondenti quantità mediate e quindi reali

$$f_i = \langle n_i \rangle.$$

Sostanzialmente, invece di tracciare la storia di ogni singola molecola, ci si accontenta di conoscere l'evoluzione media di una “nuvola” di particelle.

Formalmente è conveniente scrivere il numero di occupazione  $n_i$  come somma della media  $f_i$ , e della fluttuazione attorno alla media  $g_i$ .

$$n_i = f_i + g_i, \tag{3.1}$$

dove, per definizione, la fluttuazione ha media nulla ( $\langle g_i \rangle = 0$ ). Inserendo (3.1) in (2.6) (l'equazione di evoluzione degli LGCA), otteniamo

$$\Delta_i f_i = C_i(f) + G_i, \tag{3.2}$$

dove con  $f$  si intende l'insieme di tutte le funzioni di distribuzione  $(f_1, \dots, f_i)$  e il termine  $G_i$  tiene conto delle correlazioni fra particelle. Si noti che il

termine a sinistra della (3.2) è la diretta trascrizione di quello che abbiamo visto per gli LGCA, in cui si è soltanto sostituito  $n_i$  con  $f_i$ . Questo si può fare per via della linearità dell'operatore di propagazione.

Questa operazione non è così semplice per l'operatore di collisione che non è affatto lineare. La sostituzione di  $n_i$  con delle quantità mediate introduce dei termini di correlazione che sono tutti inclusi in  $G_i$ . In modo del tutto analogo a quanto si è visto nel continuo, si fa l'assunzione di caos molecolare, cioè di non correlazione tra particelle che urtano

$$G_i = 0.$$

In questo modo, quello che rimane è un'equazione non lineare alle differenze finite per la distribuzione  $f_i$

$$\Delta_i f_i = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = C_i(f_1, \dots, f_l),$$

questa è la prima equazione lattice Boltzmann.

Naturalmente il problema del rumore statistico è risolto alla radice, perché le  $f_i$  sono per definizione delle quantità mediate. Si noti, però, che l'operatore di collisione è una diretta trascrizione di quello degli LGCA, per questo la sua complessità non si è affatto ridotta.

### 3.1.2 LBE quasi lineare

Il problema della complessità dell'operatore di collisione e, quindi, l'impossibilità di estendere l'equazione lattice Boltzmann al tridimensionale, non è durato a lungo. Higuera e Jiménez [8] lo risolsero utilizzando la stessa filosofia di McNamara e Zanetti, cioè cercando di eliminare i dettagli dell'interazione microscopica che non influenzano significativamente il fenomeno macroscopico.

Uno dei passi fondamentali nell'espansione Chapman–Enskog è l'assunzione di un basso numero di Knudsen, così che si possa ritenere che, nell'espressione

$$f_i = f_i^{eq} + f_i^{neq},$$

la parte non in equilibrio sia di ordine  $O(K_n)$  rispetto alla parte in equilibrio. Inoltre, come abbiamo visto, la discretizzazione dello spazio delle velocità richiede di scrivere la parte in equilibrio come un'espansione nel numero di Mach, che deve quindi essere sufficientemente piccolo. Higuera e Jiménez imposero immediatamente anche questa espansione, ottenendo:

$$f_i = f_i^{eq0} + f_i^{eq1} + f_i^{eq2} + f_i^{neq} + O(K_n Ma^2), \quad (3.3)$$

dove gli indici 0, 1, 2 si riferiscono all'espansione nel numero di Mach della  $f_i^{eq}$ . Con riferimento esplicito alla funzione di equilibrio dell'FHP (2.12), quei termini sono

$$\begin{aligned} f_i^{eq0} &= \frac{\rho_0}{l}, \\ f_i^{eq1} &= \frac{\rho_0 c_{ia} u_a}{l c_s^2}, \\ f_i^{eq2} &= \frac{\rho_0 Q_{iab} u_a u_b}{2l c_s^4}, \end{aligned}$$

dove  $\rho_0$  è la densità *uniforme e globale*.

A questo punto, si può espandere l'operatore di collisione attorno all'*equilibrio globale*  $f_i^{eq0}$

$$C_i(f) = C_i^0 + C_{ij}^0 \phi_j + \frac{1}{2} C_{ijk}^0 \phi_j \phi_k, \quad (3.4)$$

dove  $\phi_i = f_i - f_i^{eq0}$  e  $C_{ij} = \partial C_i / \partial f_j$ ,  $C_{ijk} = \partial^2 C_i / \partial f_j \partial f_k$  e l'apice 0 rappresenta la valutazione in  $f_i^{eq0}$ .

Ricordando che  $C_i^0 = 0$ , perché l'equilibrio globale annulla l'operatore di collisione, eliminando i termini di ordine superiore a  $O(K_n M a^2)$  e inserendo l'espansione (3.3) in (3.4), otteniamo

$$C_i(f) = C_{ij}^0 f_j^{eq1} + \frac{1}{2} C_{ijk}^0 f_j^{eq1} f_k^{eq1} + C_{ij}^0 f_j^{neq}. \quad (3.5)$$

Ora consideriamo la (3.5) nel caso di *equilibrio locale*, cioè  $f_i = f_i^{eq}$  ( $f^{neq} = 0$ ), ricordando che l'equilibrio locale annulla la collisione, otteniamo

$$0 = C_{ij}^0 f_j^{eq1} + \frac{1}{2} C_{ijk}^0 f_j^{eq1} f_k^{eq1}.$$

Questo ci permette di esprimere la matrice Hessiana,  $C_{ijk}^0$ , in termini dello Jacobiano,  $C_{ij}^0$ , e quindi di scrivere, dalla (3.5), la seguente espressione quasi lineare

$$C_i(f) = C_{ij}^0 f_j^{neq} \equiv C_{ij}^0 (f_j - f_j^{eq}).$$

Questa forma dell'operatore di collisione ci porta, infine, all'equazione lattice Boltzmann proposta da Higuera e Jiménez

$$\Delta_i f_i = A_{ij} (f_j - f_j^{eq}),$$

dove la notazione  $A_{ij} \equiv C_{ij}^0$  evidenzia lo stretto legame con la matrice di transizione  $A(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$  che regola la dinamica microscopica dei modelli lattice



gas. La caratteristica importante di questa LBE è il fatto che la matrice di scattering,  $A_{ij} \equiv C_{ij}^0$ , viene calcolata all'equilibrio globale  $f_i^{eq0}$ , quindi può essere derivata analiticamente dalla matrice di transizione  $A(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$  una volta per tutte.

La riduzione di complessità è impressionante, mentre l'operatore di collisione degli LGCA richiedeva  $O(2^l)$  operazioni per essere valutato, la matrice di scattering  $A_{ij}$  ne richiede  $O(l^2)$ . È chiaro che nel caso  $l = 24$  questo fa una gran differenza.

La matrice  $A_{ij}$  ha tre importanti proprietà:

- è ciclica e isotropa;
- è simmetrica;
- è definita negativa.

L'isotropia e la simmetria seguono dal fatto che l'urto tra  $f_i$  ed  $f_j$  dipende solo da  $\mu_{ij} = |\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j / c^2|$ , cioè dal coseno dell'angolo compreso tra le direzioni  $\mathbf{c}_i$  e  $\mathbf{c}_j$ . Così, gli elementi distinti di  $A_{ij}$  passano da  $O(l^2)$  a un  $O(l)$ . La ciclicità è una conseguenza della periodicità del coseno. Così la matrice  $A_{ij}$  risulta essere composta da pochi elementi che si ripetono e questo permette di studiare completamente il suo spettro solo con mezzi analitici. Il fatto che sia definita negativa segue proprio dalle proprietà dello spettro.

I principi di conservazione di massa e quantità di moto si traducono nei seguenti vincoli:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^l A_{ij} &= 0, \quad j = 1, \dots, l, \\ \sum_{i=1}^l c_{ia} A_{ij} &= 0, \quad j = 1, \dots, l, \quad a = 1, \dots, D, \end{aligned} \tag{3.6}$$

dove si è fatto uso della simmetria  $A_{ij} = A_{ji}$ . Questo significa che  $A_{ij}$  ha  $D + 1$  autovalori nulli.

Il maggiore degli autovalori non nulli di  $A_{ij}$ ,  $\lambda$ , determina la viscosità secondo la legge:

$$\nu = -c_s^2 \frac{D}{D+2} \left( \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{2} \right).$$

Si osservi che le leggi (3.6) garantiscono la conservazione della massa e della quantità di moto anche se la funzione di equilibrio locale non determina la stessa densità e quantità di moto delle distribuzioni  $f_i$ .

### 3.1.3 LBE con collisioni intensificate

Il lavoro di Higuera e Jiménez non aveva risolto un altro cruciale problema degli LGCA, il basso numero di collisioni, e quindi il basso numero di Reynolds, che poteva essere simulato. Questo aspetto fu considerato da Higuera, Succi e Benzi [9].

La loro idea è basata su un'osservazione: il basso numero di collisioni dell'LBE quasi lineare dipende dal fatto che c'è una corrispondenza biunivoca tra la matrice di scattering  $A_{ij}$  e la matrice di transizione,  $A(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ . Cioè,  $A_{ij}$  non produce una sola collisione che non sia permessa dal modello lattice gas sottostante e viceversa. Questa dipendenza non è affatto necessaria. Higuera, Succi e Benzi propongono di svincolare la matrice di scattering dal modello lattice gas da cui è nata e di considerarla come un insieme di parametri "liberi" del sistema che possono essere modificati con lo scopo di ottenere particolari effetti macroscopici, ad esempio una più bassa viscosità, cioè numeri di Reynolds più alti. Questa dichiarazione di indipendenza è del tutto lecita se si sceglie  $A_{ij}$  con le giuste simmetrie e le necessarie proprietà e si verifica che essa garantisca le equazioni di Navier–Stokes come limite macroscopico.

Le proprietà che  $A_{ij}$  deve rispettare sono semplicemente:

- conservazione di massa e quantità di moto (vincoli (3.6));
- isotropia e simmetria;
- essere definita negativa.

Una volta che gli autovalori e i corrispondenti insiemi di autovettori sono noti, ogni matrice può essere scomposta come segue:

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^l \lambda_k P_{ij}^k,$$

dove  $P_{ij}^k$  è la proiezione lungo il  $k$ -esimo autovettore  $E_i^k$ .

Vediamo in dettaglio il procedimento di scomposizione spettrale, nel caso particolare del modello FCHC. Questo schema è definito in uno spazio di dimensione  $D = 4$  e coinvolge  $l = 24$  link che sono dati da

$$\mathbf{c} = (\pm 1, \pm 1, 0, 0)$$

e tutte le sue permutazioni. La matrice  $A_{ij}$ , che consideriamo, è dunque una matrice  $24 \times 24$ . Molte proprietà dello spettro  $\sigma[A]$  sono già note. Per

prima cosa, una diretta analisi dei coseni di  $\theta_{ij}$  angolo tra la direzione  $\mathbf{c}_i$  e la direzione  $\mathbf{c}_j$ , ci porta a dire che ci sono solo cinque elementi indipendenti,  $a, b, c, d, e$ , corrispondenti agli angoli  $\theta = 0, \pi/3, \pi/2, 2\pi/3, \pi$ . Lo spettro consiste, quindi, di al più cinque autovalori distinti.

$$\sigma[A] = \{\lambda_k, k = 1, \dots, 5\}, \quad (3.7)$$

ognuno con molteplicità  $\mu_k$  tale che  $\sum_{k=1}^5 \mu_k = 24$ . Gli autovalori sono reali, perché  $A$  è simmetrica e sono contenuti in  $] -2, 0[$ , per ragioni di stabilità numerica. La conservazione della massa e della quantità di moto (equazioni (3.6)) impongono agli elementi  $a, b, c, d, e$ , le due seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} a + 8b + 6c + 8d + e &= 0, \\ a + 4b - 4c - e &= 0. \end{aligned}$$

Rimangono, quindi, solo tre autovalori non nulli distinti.

Consideriamo ora gli autovettori  $\mathbf{E}^k$ . Cinque autovettori (quelli corrispondenti all'autovalore nullo) si ottengono immediatamente dalla conservazione di massa e quantità di moto

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^0 &= (1, \dots, 1), \\ E_i^a &= c_{ia} \quad a = 1, \dots, 4. \end{aligned}$$

Gli altri possono essere calcolati con la procedura di Gram-Schmidt. Cerchiamo un insieme di autovettori ortogonali ad  $\mathbf{E}^0$  ed  $\mathbf{E}^a$  per  $a = 1, \dots, 4$ , poniamo

$$E_i^{ab} = c_{ia}c_{ib} - K_{ab},$$

dove  $K_{ab}$  è un tensore ignoto che otterremo imponendo l'ortogonalità.

$$\sum_{i=1}^l (c_{ia}c_{ib} - K_{ab}) \mathbf{E}_i^0 = 0, \quad (3.8)$$

$$\sum_{i=1}^l (c_{ia}c_{ib} - K_{ab}) c_{id} = 0, \quad d = 1, \dots, 4. \quad (3.9)$$

La (3.9) è automaticamente soddisfatta dalla parità della griglia (tutti i tensori di ordine dispari sono identicamente nulli). La (3.8) implica

$$lK_{ab} = \sum_{i=1}^l c_{ia}c_{ib} = \frac{lc^2}{D} \delta_{ab},$$

da cui

$$K_{ab} = \frac{c^2}{D} \delta_{ab} = c_s^2 \delta_{ab}.$$

Così rimangono definiti i vettori

$$E_i^{ab} \equiv Q_{iab} = c_{ia} c_{ib} - c_s^2 \delta_{ab}.$$

Questo ci dà un insieme di  $(D(D+1)/2) - 1 = 9$  autovettori (la matrice che ha per elementi i vettori  $Q_{iab}$  è simmetrica ed ha traccia nulla, quindi ha  $(D(D+1)/2) - 1$  elementi linearmente indipendenti):

$$E_i^k \equiv c_{ia} c_{ib} - c_s^2 \delta_{ab} \quad k = 5, \dots, 13,$$

$$\lambda = \lambda_1 \quad \mu_1 = 9.$$

Procedendo in modo del tutto analogo, si determinano gli altri autovettori:

$$E_i^{14} = \chi'_i, \quad E_i^{15} = \chi''_i,$$

$$\lambda = \lambda_2, \quad \mu_2 = 2.$$

$$E_i^k = \chi'_i c_{ia}, \quad E_i^k = \chi''_i c_{ia}, \quad k = 16, \dots, 23,$$

$$\lambda = \lambda_3, \quad \mu_3 = 8.$$

Infine, si ottengono le seguenti espressioni per gli autovalori non nulli:

$$\lambda_1 = a - 2c + d,$$

$$\lambda_2 = \frac{3}{2}(a - d),$$

$$\lambda_3 = \frac{3}{2}(a + 6c + d),$$

con molteplicità  $\mu_1 = 9$ ,  $\mu_2 = 2$  e  $\mu_3 = 8$ .

Ad ogni autovettore, si associa un momento macroscopico facendo la proiezione delle funzioni di distribuzione  $f_i$  sull'autovettore  $\mathbf{E}^k$ . Cioè

$$\psi_k(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{24} E_i^k f_i.$$

Gli autovettori associati all'autovalore nullo danno le variabili fluidodinamiche che si conservano, massa e quantità di moto

$$\rho \equiv \psi_0(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{24} f_i,$$

$$\rho u_a \equiv J_a \equiv \psi_a(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{24} c_{ia} f_i, \quad a = 1, \dots, 4.$$

Gli autovettori associati all'autovalore  $\lambda_1$  determinano la quantità di moto del flusso

$$S_{ab} \equiv \psi_{ab}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{24} Q_{iab} f_i, \quad a, b = 1, \dots, 4,$$

con l'ovvia relazione

$$P_{ab} \equiv \sum_{i=1}^{24} c_{ia} c_{ib} f_i = S_{ab} + P \delta_{ab},$$

dove  $P = c_s^2 \rho$ . Tutti gli altri autovettori, collegati agli autovalori  $\lambda_2$  e  $\lambda_3$ , danno origine a variabili che non hanno significato fisico ma che non possono essere eliminate perché ne andrebbe della simmetria di tutto il sistema. Queste variabili vengono dette *ghost field*.

Si cerca di limitare il loro effetto ponendo i corrispondenti autovalori  $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$ ; in questo modo ad ogni time step i ghost field vengono forzati all'equilibrio.

Si può dimostrare che anche questo approccio porta, nel limite macroscopico, all'equazione di Navier–Stokes in cui la viscosità cinematica è data da

$$\nu = -c_s^2 \frac{D}{D+2} \left( \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{2} \right).$$

Questa legge, che collega la viscosità cinematica con il maggiore degli autovalori della matrice  $A_{ij}$ , era già valida per l'LBE quasi lineare; c'è però un cambiamento fondamentale di prospettiva:  $\lambda_1$  ora non è imposto dalla microdinamica sottostante, ma è un parametro libero che può essere variato per ottenere basse viscosità.

In linea di principio potremmo mettere  $\lambda_1 = -2$  e avere quindi viscosità nulla, ma questo purtroppo non è possibile perché il modello diventerebbe numericamente instabile. Comunque, la minima viscosità raggiungibile è determinata solo dalla risoluzione della griglia e non da limitazioni intrinseche del modello (come per gli LGCA).

Possiamo concludere che questo modello possiede due caratteristiche che possono essere variate “liberamente”:

- la matrice di scattering  $A_{ij}$ ;
- le distribuzioni di equilibrio locale  $f_i^{eq}$ .

Variando questi parametri, si può generare un'intera classe di equazioni differenziali alle derivate parziali iperboliche, comprese, naturalmente, le equazioni di Navier–Stokes. In particolare, la scelta già discussa degli autovalori di  $A_{ij}$  e la scelta di

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{l} \left( 1 + \frac{c_{ia}u_a}{c_s^2} + \frac{Q_{iab}u_a u_b}{2c_s^4} \right),$$

ci permette di ottenere le equazioni di Navier–Stokes nel limite macroscopico, soddisfa le leggi di conservazione e l'invarianza Galileana.

Con questo approccio si supera, dunque, il limite della bassa viscosità e, soprattutto, si stabilisce un modello scollegato dal lattice gas ed estremamente flessibile.

### 3.1.4 LBE con operatore di collisione BGK

Il modello che abbiamo appena descritto è, di fatto, un modello multi relaxation time: nel senso che i vari momenti associati agli autovalori non nulli (cioè i momenti non conservati) vengono rilassati verso l'equilibrio con tempi diversi.

Ci si chiede, quindi, se non sia possibile semplificare ulteriormente il modello, rendendo unico il tempo di rilassamento. L'idea segue quella proposta da Bhatnagar, Gross e Krook nel continuo [3].

Il modello appena visto ci ha mostrato che la matrice di scattering e la funzione di equilibrio locale possono essere visti come parametri teorici e possono, quindi, essere variati a seconda dello scopo perseguito nei limiti imposti dalle leggi di conservazione e dalla stabilità numerica. In questo schema, la viscosità cinematica è controllata soltanto dal maggiore degli autovalori non nulli  $\lambda_1$ . È naturale dunque cercare di definire una matrice di scattering che dipenda solo e unicamente da questo parametro, cioè una matrice diagonale

$$A_{ij} \rightarrow -\omega \delta_{ij},$$

dove  $\omega = 1/\lambda_1$ . Questo significa passare da un modello multi relaxation time a un modello single relaxation time, in cui tutti i momenti si rilassano con lo stesso tempo  $\tau = 1/\omega$ . Ne segue che la nostra LBE diventa semplicemente

$$\Delta_i f_i = -\omega(f_i - f_i^{eq}). \quad (3.10)$$

Visto il diretto collegamento con il modello BGK dell'equazione di Boltzmann nel continuo, l'equazione (3.10) è stata denominata Lattice BGK, LBGK.

Vanno fatte alcune considerazioni: la (3.10) implica che tutti i nodi vengono rilassati nello stesso modo, questo è

- indesiderabile per i ghost field, il cui effetto potrebbe essere amplificato;
- inammissibile per le quantità conservate.

Il problema dei ghost field, fortunatamente, non è così preoccupante, perché il loro effetto rimane, generalmente, trascurabile. Per quanto riguarda le quantità conservate si risolve il problema facilmente: naturalmente non è possibile includere le leggi di conservazione dentro la matrice  $A_{ij}$  (non è in alcun modo possibile che una matrice diagonale del tipo  $-\omega\delta_{ij}$  soddisfi i vincoli (3.6)), allora, esse devono essere imposte nell'equilibrio locale. Cioè è necessario richiedere che le distribuzioni di equilibrio mantengano la stessa densità e la stessa quantità di moto delle funzioni di distribuzione:

$$\sum_i f_i^{eq} = \sum_i f_i = \rho, \quad (3.11)$$

$$\sum_i f_i^{eq} c_{ia} = \sum_i f_i c_{ia} = \rho u_a. \quad (3.12)$$

La cosa principale per il modello LBGK è trovare un'espressione per le  $f_i^{eq}$  che soddisfi queste leggi, la forma delle  $f_i^{eq}$  dipende dalla griglia scelta come vedremo nel seguente paragrafo.

## 3.2 Modelli lattice Boltzmann Single Relaxation Time (SRT)

Abbiamo derivato l'equazione lattice Boltzmann con approssimazione BGK dell'operatore di collisione. Questo modello e lo sviluppo di schemi a più velocità (cioè discretizzazioni dello spazio delle velocità con vettori di norma diversa tra loro) ci permette, infine, di arrivare alla definizione degli attuali modelli lattice Boltzmann.

Per definire un LBM bisogna specificare tre elementi:

- la griglia e l'insieme delle velocità;
- la distribuzione di equilibrio;
- l'equazione cinetica.

Di questi tre fattori uno solo è stato già fissato: l'equazione cinetica. Si è visto, infatti, che lo schema utilizzato è quello dato dall'approssimazione BGK dell'operatore di collisione. L'equazione cinetica è, dunque, il modello LBGK.

Per una griglia di passo  $\delta x$ , per un intervallo temporale  $\delta t$  e per un set di velocità  $\{\mathbf{c}_i : i = 0, \dots, l\}$  l'equazione LBGK si può scrivere, in generale, nella forma

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \omega(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (3.13)$$

dove  $\omega = \delta t / \tau$ , con  $\tau$  tempo di rilassamento e le distribuzioni di equilibrio devono soddisfare le condizioni di conservazione di massa (3.11) e quantità di moto (3.12).

Variando la griglia e le distribuzioni di equilibrio, si derivano particolari modelli lattice Boltzmann. In seguito, utilizzeremo la notazione  $DdQq$  per identificare i vari modelli, dove  $d$  è il numero delle dimensioni dello spazio e  $q$  rappresenta il numero delle velocità del modello. Ad esempio, la sigla D2Q9 si riferisce ad un modello bidimensionale a 9 velocità. Non è possibile, in questa sede, dare una trattazione completa dei modelli LBGK e delle loro applicazioni, per qualunque approfondimento si fa, quindi, riferimento ai già citati testi di Succi [1] e Wolf-Gladrow [2] e agli articoli di Qian, d'Humières e Lallemand [10], Benzi, Succi e Vergassola [11], Chen e Doolen [12] e Yu, Mei, Luo e Shyy [13].

### 3.2.1 Il modello D2Q9

Il modello D2Q9 è definito su una griglia quadrata di passo  $\delta x$  e ogni nodo è collegato ai suoi otto vicini da altrettanti link; inoltre, si considera una componente ferma nel nodo stesso, come mostrato in Fig. 3.1. Le velocità sono nove e sono date dai seguenti vettori  $\mathbf{c}_i$ :

$$\mathbf{c}_0 = (0, 0), \quad (3.14)$$

$$\mathbf{c}_{1,3} = (\pm c, 0), \quad \mathbf{c}_{2,4} = (0, \pm c), \quad (3.15)$$

$$\mathbf{c}_{5,6,7,8} = (\pm c, \pm c). \quad (3.16)$$

Il modello ha una velocità nulla ( $\mathbf{c}_0$ ), quattro velocità di norma  $c$  e quattro velocità di norma  $\sqrt{2}c$ . La costante  $c$  è detta *costante della griglia* ed è definita come

$$c = \frac{\delta x}{\delta t}.$$



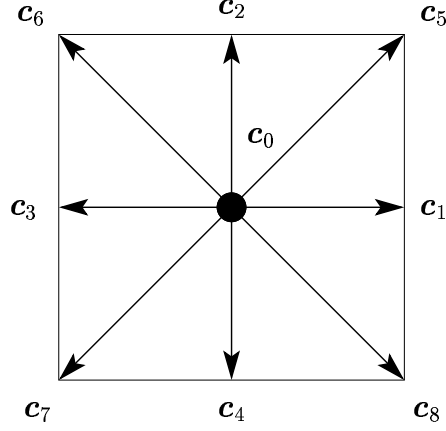


Figura 3.1: Vettori velocità del modello D2Q9.

In generale, si assume, senza perdita di generalità,  $\delta x = \delta t = 1$  per semplicità, quindi  $c = 1$ .

La densità  $\rho$ , la quantità di moto  $\mathbf{j}$ , e la quantità di moto del flusso  $P_{ab}$ , sono definite come

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^l f_i, \quad (3.17)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^l \mathbf{c}_i f_i, \quad (3.18)$$

$$P_{ab} = \sum_{i=0}^l \mathbf{c}_{ia} \mathbf{c}_{ib} f_i. \quad (3.19)$$

Per velocità tendenti a zero si definisce una distribuzione di equilibrio globale,  $f_i^{eq0}$ . Per piccoli numeri di Mach la distribuzione  $f_i$  può essere scritta come somma dell'equilibrio globale,  $f_i^{eq0}$ , e di una piccola perturbazione,  $g_i$ .

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq0} + g_i(\mathbf{x}, t),$$

con  $|g_i| \ll f_i^{eq0}$ .

Le quantità  $f_i^{eq0}$  devono essere positive per assicurare una densità positiva. Inoltre, sono scelte di tipo Maxwelliano, nel senso che i momenti delle velocità della griglia sulle distribuzioni  $f_i^{eq0}$  devono coincidere con i momenti della velocità sulla distribuzione di Maxwell nel continuo fino al quarto ordine.

Ricordiamo che la distribuzione di Maxwell è data da

$$f^M(\mathbf{v}) = \rho_0 \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{D/2} e^{-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}},$$

questa forma si ottiene direttamente dalla (1.11), esplicitando  $v_T$  e per  $\mathbf{u} = 0$ . I momenti di ordine dispari sono, dunque, nulli

$$\sum_{i=0}^l f_i^{eq0} c_{ia} = \int f^M(\mathbf{v}) v_a d\mathbf{v} = 0,$$

$$\sum_{i=0}^l f_i^{eq0} c_{ia} c_{ib} c_{id} = \int f^M(\mathbf{v}) v_a v_b v_d d\mathbf{v} = 0,$$

mentre i momenti di ordine pari ci danno le seguenti relazioni:

$$\sum_{i=0}^l f_i^{eq0} = \int f^M(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \rho_0, \quad (3.20)$$

$$\sum_{i=0}^l f_i^{eq0} c_{ia} c_{ib} = \int f^M(\mathbf{v}) v_a v_b d\mathbf{v} = \rho_0 \frac{k_B T}{m} \delta_{ab}, \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^l f_i^{eq0} c_{ia} c_{ib} c_{id} c_{ie} &= \int f^M(\mathbf{v}) v_a v_b v_d v_e d\mathbf{v} = \\ &\rho_0 \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2 (\delta_{ab} \delta_{de} + \delta_{ad} \delta_{be} + \delta_{ae} \delta_{bd}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Il modello D2Q9 include tre velocità che possono avere tre diverse norme ( $0$ ,  $c$ ,  $\sqrt{2}c$ ). Per ragioni di simmetria, le quantità  $f_i^{eq0}$  sono identiche per direzioni a cui sono associate velocità con la stessa norma. Rimangono quindi tre sole  $f_i^{eq0}$  denominate  $f_0^{eq0}$ ,  $f_1^{eq0}$  ed  $f_2^{eq0}$ , associate rispettivamente alle velocità di norma  $0$ ,  $c$ ,  $\sqrt{2}c$ , come schematizzato in Tab. 3.1. Per il modello D2Q9, le equazioni (3.20), (3.21) e (3.22) danno le seguenti relazioni:

- momento di ordine 0

$$\sum_{i=0}^8 f_i^{eq0} = f_0^{eq0} + 4f_1^{eq0} + 4f_2^{eq0} = \rho_0; \quad (3.23)$$

Tabella 3.1: Vettori velocità del modello D2Q9 raggruppati secondo la norma.

$\mathbf{c}_i^2$	Celle	No. di celle	$f_i^{eq0}$
0	0	1	$f_0^{eq0}$
$c^2$	1, 2, 3, 4	4	$f_1^{eq0}$
$2c^2$	5, 6, 7, 8	4	$f_2^{eq0}$

- momento di ordine 1

$$\sum_{i=0}^8 c_{i1}^2 f_i^{eq0} = 2c^2 f_1^{eq0} + 4c^2 f_2^{eq0} = \rho_0 \frac{k_B T}{m}, \quad (3.24)$$

e

$$\sum_{i=0}^8 c_{i2}^2 f_i^{eq0} = 2c^2 f_1^{eq0} + 4c^2 f_2^{eq0} = \rho_0 \frac{k_B T}{m},$$

si noti che la prima e la seconda componente di  $\mathbf{c}_i$  danno luogo alla stessa condizione;

- momento di ordine 4

$$\sum_{i=0}^8 c_{i1}^4 f_i^{eq0} = 2c^4 f_1^{eq0} + 4c^4 f_2^{eq0} = 3\rho_0 \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2, \quad (3.25)$$

e da  $c_{i2}$  si ottiene la stessa relazione.

$$\sum_{i=0}^8 c_{i1}^2 c_{i2}^2 f_i^{eq0} = 4c^4 f_2^{eq0} = \rho_0 \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2. \quad (3.26)$$

Si definisce così un sistema di quattro equazioni, (3.23), (3.24), (3.25) e (3.26) nelle quattro incognite  $f_0^{eq0}$ ,  $f_1^{eq0}$ ,  $f_2^{eq0}$  e  $k_B T/m$ . La soluzione del sistema è:

$$\begin{aligned} W_0 &\equiv \frac{f_0^{eq0}}{\rho_0} = \frac{4}{9}, \\ W_1 &\equiv \frac{f_1^{eq0}}{\rho_0} = \frac{1}{9}, \\ W_2 &\equiv \frac{f_2^{eq0}}{\rho_0} = \frac{1}{36}, \\ c_s^2 &\equiv \frac{k_B T}{m} = \frac{c^2}{3}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Si verifica direttamente che questi valori annullano i momenti di ordine dispari.

Rimane da scegliere la funzione di equilibrio locale,  $f_i^{eq}$ , verso cui le distribuzioni  $f_i$  vengono rilassate. Ricordando il teorema H, le  $f_i$  sono definite come uno sviluppo in serie della Maxwelliana fino al secondo ordine.

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{j}) = W_i \left\{ \rho + \frac{m}{k_B T} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{j} + \frac{m}{2\rho k_B T} \left[ \frac{m}{k_B T} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{j})^2 - \mathbf{j}^2 \right] \right\},$$

e, dalle (3.27),

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = W_i \rho \left( 1 + \frac{3}{c^2} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{u}^2 \right).$$

Con questa scelta delle  $f_i^{eq}$ , l'espansione di Chapman-Enskog ci permette di derivare le equazioni di Navier-Stokes con pressione  $p = \rho k_B T / m = \rho c_s^2$ , viscosità cinematica

$$\nu = \frac{k_B T}{m} \left( \frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \delta t = c_s^2 \left( \frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \delta t, \quad (3.28)$$

e il termine di avvezione che soddisfa l'invarianza Galileana. Si verifica facilmente che le  $f_i^{eq}$  soddisfano le condizioni (3.11) e (3.12) che garantiscono la conservazione della massa e della quantità di moto.

Nel caso  $\delta x = \delta t = 1$ , l'equazione cinetica (3.13) diventa

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\omega(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (3.29)$$

e può essere scritta come composizione di due passi: collisione e propagazione.

- Collisione:

$$f_i^*(\mathbf{x}, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) - \omega(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)). \quad (3.30)$$

- Propagazione

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i^*(\mathbf{x}, t + 1). \quad (3.31)$$

Dove le  $f_i^*$  sono le distribuzioni dopo la collisione. Inoltre, le funzioni di equilibrio sono date da

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = W_i \rho \left( 1 + 3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2 \right). \quad (3.32)$$

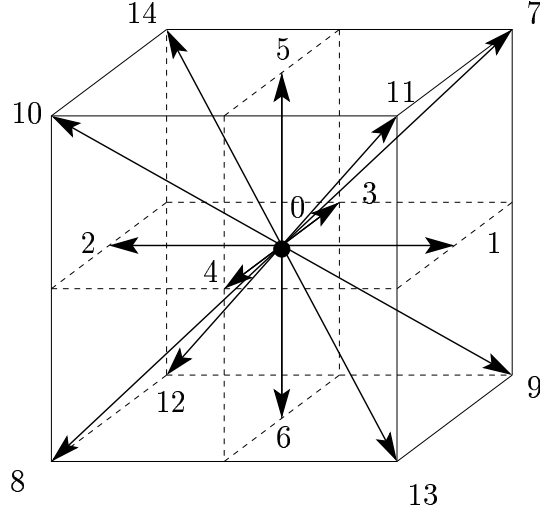


Figura 3.2: Vettori velocità del modello D3Q15.

### 3.2.2 Il modello D3Q19

I modelli lattice Boltzmann tridimensionali sono sviluppati su griglie cubiche e differiscono per il numero di link considerati. Gli schemi più noti sono:

- D3Q15;
- D3Q19;
- D3Q27.

In seguito, si assume  $\delta x = \delta t = 1$ , quindi  $c = 1$ .

Il modello D3Q15 comprende il seguente insieme di velocità:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_0 &= (0, 0, 0), \\ \mathbf{c}_{1,2} &= (\pm 1, 0, 0), \quad \mathbf{c}_{3,4} = (0, \pm 1, 0), \quad \mathbf{c}_{5,6} = (0, 0, \pm 1) \\ \mathbf{c}_{7,\dots,14} &= (\pm 1, \pm 1, \pm 1). \end{aligned}$$

In Fig. 3.2 sono rappresentati i link del modello D3Q15. Per il modello D3Q19 si ha:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_0 &= (0, 0, 0), \\ \mathbf{c}_{1,2} &= (\pm 1, 0, 0), \quad \mathbf{c}_{3,4} = (0, \pm 1, 0), \quad \mathbf{c}_{5,6} = (0, 0, \pm 1) \\ \mathbf{c}_{7,8,9,10} &= (\pm 1, \pm 1, 0), \\ \mathbf{c}_{11,12,13,14} &= (\pm 1, 0, \pm 1), \\ \mathbf{c}_{15,16,17,18} &= (0, \pm 1, \pm 1). \end{aligned}$$

In Fig. 3.2.2 è riportato lo schema dei link per il modello D3Q19.  
 Infine, il modello D3Q27 è un'unione dei due precedenti:

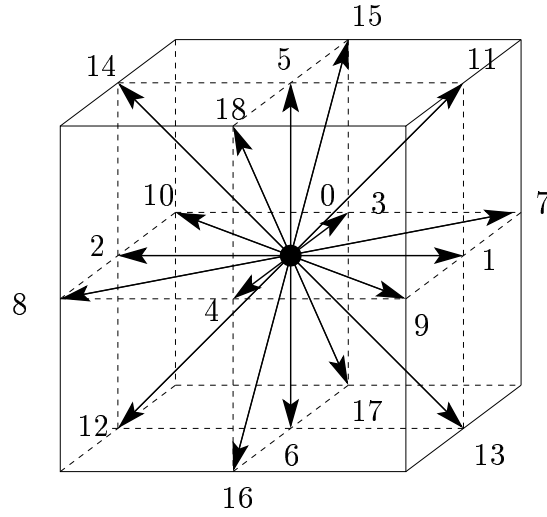


Figura 3.3: Vettori velocità del modello D3Q19.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}_0 &= (0, 0, 0), \\
 \mathbf{c}_{1,2} &= (\pm 1, 0, 0), \quad \mathbf{c}_{3,4} = (0, \pm 1, 0), \quad \mathbf{c}_{5,6} = (0, 0, \pm 1) \\
 \mathbf{c}_{7,8,9,10} &= (\pm 1, \pm 1, 0), \\
 \mathbf{c}_{11,12,13,14} &= (\pm 1, 0, \pm 1), \\
 \mathbf{c}_{15,16,17,18} &= (0, \pm 1, \pm 1) \\
 \mathbf{c}_{19,\dots,26} &= (\pm 1, \pm 1, \pm 1).
 \end{aligned}$$

Il modello D3Q19 è numericamente più stabile del modello D3Q15 ed è chiaramente più efficiente del modello D3Q27. Sembra, quindi, un buon compromesso tra i due. Nelle nostre simulazioni è stato usato il modello D3Q19, per questo ci limiteremo a descrivere quest'ultimo.

Specificato il set di velocità del modello, ci rimangono da determinare i pesi  $W_i \equiv f_i^{eq0}/\rho_0$  e la distribuzione di equilibrio locale  $f_i^{eq}$ . Si procede in modo del tutto analogo a quanto visto per il modello D2Q9.

Anche nel modello D3Q19 le velocità hanno tre diverse norme (come schematizzato in Tab. 3.2). Si definiscono, quindi, quattro equazioni nelle incognite  $f_0^{eq0}$ ,  $f_1^{eq0}$ ,  $f_2^{eq0}$  e  $k_B T/m$ :

Tabella 3.2: Vettori velocità del modello D3Q19 raggruppati secondo la norma.

$c_i^2$	Celle	No. di celle	$f_i^{eq0}$
0	0	1	$f_0^{eq0}$
1	1, ..., 6	6	$f_1^{eq0}$
2	7, ..., 18	12	$f_2^{eq0}$

- momento di ordine 0

$$\sum_{i=0}^{18} f_i^{eq0} = f_0^{eq0} + 6f_1^{eq0} + 12f_2^{eq0} = \rho_0;$$

- momento di ordine 1

$$\sum_{i=0}^{18} c_{i1}^2 f_i^{eq0} = 2f_1^{eq0} + 8f_2^{eq0} = \rho_0 \frac{k_B T}{m},$$

- momento di ordine 4

$$\sum_{i=0}^{18} c_{i1}^4 f_i^{eq0} = 2f_1^{eq0} + 8f_2^{eq0} = 3\rho_0 \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2,$$

e

$$\sum_{i=0}^{18} c_{i1}^2 c_{i2}^2 f_i^{eq0} = 4f_2^{eq0} = \rho_0 \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2.$$

La soluzione di questo sistema è:

$$\begin{aligned} W_0 &\equiv \frac{f_0^{eq0}}{\rho_0} = \frac{1}{3}, \\ W_1 &\equiv \frac{f_1^{eq0}}{\rho_0} = \frac{1}{18}, \\ W_2 &\equiv \frac{f_2^{eq0}}{\rho_0} = \frac{1}{36}, \\ c_s^2 &\equiv \frac{k_B T}{m} = \frac{c^2}{3}. \end{aligned}$$

Il calcolo delle  $f_i^{eq}$  è del tutto indipendente dal numero delle dimensioni e dei link, quindi

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = W_i \rho \left( 1 + 3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}\mathbf{u}^2 \right). \quad (3.33)$$

La viscosità cinematica e l'equazione cinetica sono le stesse già viste in due dimensioni (equazioni (3.28) e (3.29)). Le variabili macroscopiche (densità, velocità e quantità di moto del flusso) sono di nuovo date dalle relazioni:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^l f_i, \quad (3.34)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^l \mathbf{c}_i f_i, \quad (3.35)$$

$$P_{ab} = \sum_{i=0}^l \mathbf{c}_{ia} \mathbf{c}_{ib} f_i. \quad (3.36)$$

### 3.3 Modelli lattice Boltzmann Multi Relaxation Time (MRT)

I modelli SRT rilassano tutti i momenti delle distribuzioni  $f_i$  con lo stesso parametro, cioè nello stesso tempo  $\tau = 1/\omega$ . Questa scelta semplifica molto l'operatore di collisione a discapito, però, della flessibilità del modello. Sono stati, quindi, proposti alcuni modelli in cui il tempo di rilassamento dei singoli momenti macroscopici non sia sempre lo stesso: i modelli Multi Relaxation Time (MRT) [14]. L'idea era, del resto, precedente al modello SRT: già il modello di Higuera, Succi e Benzi [9] è un modello MRT.

Per quanto riguarda il modello D2Q9, descriveremo lo schema MRT proposto da Lallemand e Lou [15], mentre per il D3Q19 faremo riferimento al lavoro di d'Humières, Ginzburg, Krafczyk, Lallemand e Luo [16]. Un diverso approccio agli schemi MRT è quello proposto da Dellar [17] che, però, qui non analizzeremo.

I modelli MRT si sono dimostrati numericamente molto più stabili dei modelli SRT quando si raggiungono alti numeri di Reynolds. Lallemand e Luo danno una dettagliata analisi della stabilità del modello [15]. Un confronto tra SRT ed MRT è presentato da molti autori, tra i quali Yu *et al.* [13], Lallemand e Luo [15], d'Humières *et al.* [16] e Wu e Shao [18, 19].



### 3.3.1 Schema MRT per il modello D2Q9

I modelli SRT agiscono sulle variabili  $f_i$  con  $i = 0, \dots, l$  associate alle velocità discrete  $\mathbf{c}_i$ . Si possono, però, considerare delle variabili diverse, ottenute come combinazioni lineari delle  $f_i$ : i momenti delle distribuzioni  $f_i$ .

La ragione per cui si opera questo cambiamento di prospettiva è facilmente comprensibile: i momenti delle  $f_i$  determinano le variabili macroscopiche che hanno significati fisici. Molti processi fisici che si verificano nei fluidi sono regolati dall'interazione tra i momenti. Una rappresentazione basata sui momenti permette di controllarli singolarmente e di rilassarli indipendentemente intervenendo in modo diretto ed efficace sulle proprietà fisiche simulate.

Si definisce, quindi, un nuovo insieme di variabili

$$\mathbf{R} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T,$$

che si ottengono come combinazioni lineari delle  $f_i$ , in particolare vale la seguente definizione per  $\mathbf{R}$ :

$$\mathbf{R} = \mathbf{M}\mathbf{F},$$

dove  $\mathbf{F} = (f_0, \dots, f_8)^T$  e la matrice  $\mathbf{M}$  è data da

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Si noti che queste nuove variabili hanno un preciso significato fisico:  $\rho$  è la densità,  $e$  è l'energia,  $\varepsilon$  è collegata al quadrato dell'energia,  $j_x$  e  $j_y$  corrispondono alla componente  $x$  ed  $y$  della quantità di moto,  $q_x$  e  $q_y$  rappresentano la componente  $x$  ed  $y$  del flusso di energia, infine  $p_{xx}$  e  $p_{xy}$  sono la componente diagonale e non diagonale del tensore della quantità di moto del flusso.

Le quantità  $\rho$ ,  $j_x$  e  $j_y$  devono conservarsi, il che significa che la collisione non deve avere alcun effetto su di esse. La collisione agisce, però, sulle quantità non conservate. Si assume, dunque, che le quantità non conservate si rilassino linearmente verso le loro funzioni di equilibrio che dipendono soltanto dalle quantità conservate.

Le equazioni di rilassamento per i momenti non conservati sono dunque:

$$\begin{aligned}
e^* &= e - s_1(e - e^{eq}), \\
\varepsilon^* &= \varepsilon - s_2(\varepsilon - \varepsilon^{eq}), \\
q_x^* &= q_x - s_4(q_x - q_x^{eq}), \\
q_y^* &= q_y - s_6(q_y - q_y^{eq}), \\
p_{xx}^* &= p_{xx} - s_7(p_{xx} - p_{xx}^{eq}), \\
p_{xy}^* &= p_{xy} - s_8(p_{xy} - p_{xy}^{eq}),
\end{aligned} \tag{3.37}$$

dove le quantità con \* sono le variabili dopo la collisione.

Le funzioni di equilibrio possono essere scelte liberamente, a patto che la simmetria del sistema sia rispettata. Quelle originariamente proposte da Lallemand e Luo sono:

$$\begin{aligned}
e^{eq} &= -2\rho + 3(j_x^2 + j_y^2), \\
\varepsilon^{eq} &= \rho - 3(j_x^2 + j_y^2), \\
q_x^{eq} &= -j_x, \\
q_y^{eq} &= -j_y, \\
p_{xx}^{eq} &= j_x^2 - j_y^2, \\
p_{xy}^{eq} &= j_x j_y.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Una volta che lo stato post-collisione,  $\mathbf{R}^*$ , è stato calcolato, si torna alle variabili  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{R}^* \tag{3.39}$$

Si ottengono così i valori delle variabili  $f_i$  dopo la collisione e si esegue, sulle  $f_i^*$ , l'usuale passo di propagazione dato dalla (3.31).

Si può dimostrare che, ponendo  $s_7 = s_8$ , la viscosità cinematica (shear viscosity) è data dalla nota relazione

$$\nu = c_s^2 \left( \frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) = c_s^2 \left( \frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right). \tag{3.40}$$

Il parametro  $s_1$  regola invece la bulk viscosity,  $\eta$ ,

$$\eta = \frac{2 - 3c_s^2}{6} \left( \frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right).$$

Gli altri parametri di rilassamento possono essere variati più liberamente e, in generale, si pongono leggermente più grandi di 1. Infine, si noti che per ottenere il modello LBGK con parametro di rilassamento  $\omega$  è sufficiente porre  $s_1 = s_2 = s_4 = s_6 = s_7 = s_8 = \omega$ .

### 3.3.2 Schema MRT per il modello D3Q19

Si procede in modo del tutto analogo a quanto visto per il modello D2Q9. Si definisce, quindi, un nuovo insieme di variabili,  $\mathbf{R}$ :

$$\mathbf{R} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, j_z, q_z, 3p_{xx}, 3\pi_{xx}, p_{ww}, \pi_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{xz}, m_x, m_y, m_z)^T.$$

Queste variabili si ottengono dalla combinazione lineare delle distribuzioni  $f_i$

$$\mathbf{R} = \mathbf{M}\mathbf{F},$$

dove  $\mathbf{F} = (f_0, \dots, f_{18})^T$  e la matrice  $\mathbf{M}$  è data da

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -30 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 \\ 12 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ 0 & -4 & -4 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & -2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Le quantità conservate sono  $\rho$ ,  $j_x$ ,  $j_y$  e  $j_z$ , le variabili non conservate vengono rilassate linearmente verso l'equilibrio,  $\mathbf{R}^{eq}$

$$\mathbf{R}^* = \mathbf{R} - \mathbf{S}(\mathbf{R} - \mathbf{R}^{eq}), \quad (3.41)$$

dove  $\mathbf{S}$  è la matrice diagonale dei parametri di rilassamento

$$\mathbf{S} = \text{diag}(0, s_1, s_2, 0, s_4, 0, s_4, 0, s_4, s_9, s_{10}, s_9, s_{10}, s_{13}, s_{13}, s_{13}, s_{16}, s_{16}, s_{16}).$$

Le funzioni di equilibrio,  $\mathbf{R}^{eq}$ , dipendono solo dalle quantità conservate e sono date da

$$\begin{aligned}
e^{(eq)} &= -11\rho + \frac{19}{\rho_0} \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = -11\rho + \frac{19}{\rho_0} (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2), \\
\varepsilon^{(eq)} &= w_\varepsilon \rho + \frac{w_{\varepsilon j}}{\rho_0} \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}, \\
q_x^{(eq)} &= -\frac{2}{3} j_x, \quad q_y^{(eq)} = -\frac{2}{3} j_y, \quad q_z^{(eq)} = -\frac{2}{3} j_z, \\
p_{xx}^{(eq)} &= \frac{1}{3\rho_0} [2j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)], \\
p_{ww}^{(eq)} &= \frac{1}{\rho_0} [j_y^2 + j_z^2], \\
p_{xy}^{(eq)} &= \frac{1}{\rho_0} j_x j_y, \quad p_{yz}^{(eq)} = \frac{1}{\rho_0} j_y j_z, \quad p_{xz}^{(eq)} = \frac{1}{\rho_0} j_x j_z, \\
\pi_{xx}^{(eq)} &= w_{xx} p_{xx}^{(eq)}, \quad \pi_{ww}^{(eq)} = w_{xx} p_{ww}^{(eq)}, \\
m_x^{(eq)} &= m_y^{(eq)} = m_z^{(eq)} = 0,
\end{aligned} \tag{3.42}$$

dove  $w_\varepsilon$ ,  $w_{\varepsilon j}$  e  $w_{xx}$  sono altri parametri liberi. La costante  $\rho_0$  è la densità media, nelle equazioni (3.42) si utilizza l'approssimazione  $1/\rho \approx 1/\rho_0$  per ridurre gli effetti di comprimibilità. Se si vuole simulare l'equazione di Navier–Stokes per fluidi comprimibili, è sufficiente sostituire  $\rho_0$  con  $\rho$ . Anche in questo caso, dopo aver calcolato lo stato post collisione,  $\mathbf{R}^*$ , si torna alle variabili  $f_i$  con l'operazione

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{R}^*, \tag{3.43}$$

e si effettua, sulle distribuzioni  $f_i^*$ , la propagazione data dalla (3.31). Se si pone  $s_9 = s_{13}$ , la shear viscosity è data da

$$\nu = c_s^2 \left( \frac{1}{s_9} - \frac{1}{2} \right) = c_s^2 \left( \frac{1}{s_{13}} - \frac{1}{2} \right), \tag{3.44}$$

mentre la bulk viscosity,  $\eta$ , è data da

$$\eta = \frac{5 - 9c_s^2}{9} \left( \frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right).$$

Gli altri parametri possono essere fissati liberamente. Per ritornare al modello LBGK con parametro di rilassamento  $\omega$ , è necessario porre  $s_1 = s_2 = s_4 = s_9 = s_{10} = s_{13} = s_{16} = \omega$ ; inoltre, gli ulteriori parametri liberi dei momenti

di equilibrio vanno posti come segue:  $w_\varepsilon = 3$ ,  $w_{\varepsilon j} = -11/2$  e  $w_{xx} = -1/2$ . Per ottenere, invece, una stabilità ottimale, d’Humières *et al.* [16] hanno determinato i seguenti valori per i parametri liberi:  $w_\varepsilon = 0$ ,  $w_{\varepsilon j} = -475/63$  e  $w_{xx} = 0$ ,  $s_1 = 1, 19$ ,  $s_2 = s_{10} = 1, 4$ ,  $s_4 = 1, 2$  e  $s_{16} = 1, 98$ .

### 3.4 Condizioni al bordo per i modelli lattice Boltzmann

L’implementazione dei modelli lattice Boltzmann richiede, come è facile comprendere, l’imposizione di particolari condizioni sui bordi.

Infatti, il meccanismo di propagazione chiama in causa i vicini di un nodo. Sul bordo del dominio, però, non tutti i vicini esistono e così alcuni link rimangono indeterminati. Il valore delle distribuzioni su questi link deve essere imposto con opportune condizioni.

Le condizioni al bordo sono un argomento particolarmente delicato, perché influenzano la stabilità e i risultati del modello. In questo paragrafo descriveremo le condizioni periodiche [1, 2, 21] e le condizioni per bordi solidi o ostacoli, note come *bounce back rule* [1, 2]. Vedremo, inoltre, le condizioni di inlet e di outlet, quelle, cioè, che ci permettono di simulare l’ingresso e l’uscita di un flusso.

In particolare, descriveremo una condizione di inlet con interpolazione proposta da Yu [13, 23]. Questa condizione è molto stabile e abbassa sensibilmente l’onda di pressione riflessa dall’inlet. Per tali ragioni abbiamo preferito questa condizione al metodo classico, che consiste nell’assegnare sui link le distribuzioni di equilibrio corrispondenti alla velocità e alla densità imposte all’inlet. Quest’ultima condizione, è, infatti, estremamente semplice e anche molto stabile, ma riflette dentro il dominio la maggior parte delle onde di pressione che raggiungono l’inlet influenzando significativamente il flusso.

Un approccio diverso è stato proposto da Zou ed He [20], le loro condizioni richiedono di specificare solo o la velocità o la densità (non entrambe). I link incogniti sono determinati in base a questa sola informazione ed eseguendo il bounce back per la parte non in equilibrio. Questo trattamento dell’inlet è certamente interessante (soprattutto se si vuole fissare solo una grandezza macroscopica), risulta, però, instabile quando si alza il numero di Reynolds e, per quanto riguarda la riflessione dell’onda di pressione, dà risultati del tutto analoghi a quelli ottenuti con il metodo classico. Un confronto tra queste tre condizioni di inlet è presentato in [13].

Per l’outlet descriveremo solamente la condizione utilizzata nelle nostre si-

mulazioni [24] che risulta essere un'ottima condizione trasparente, cioè in grado di simulare correttamente la fuoriuscita di un fluido senza modificare eccessivamente le velocità e rendendo minima l'onda di pressione riflessa dall'outlet.

Le condizioni vengono descritte con esplicito riferimento al modello D2Q9 (ad eccezione della condizione di inlet per cui si utilizza uno schema monodimensionale per semplicità), la loro generalizzazione al caso tridimensionale è immediata. A meno che non sia specificato diversamente, supponiamo di avere un dominio rettangolare composto da  $n \times m$  nodi, sia  $W$  la griglia

$$W = \{(x, y) : x = 1, \dots, n \text{ e } y = 1, \dots, m\}.$$

Indichiamo con  $N$ ,  $S$ ,  $E$ ,  $O$  i quattro lati del dominio come schematizzato in Fig. 3.4.

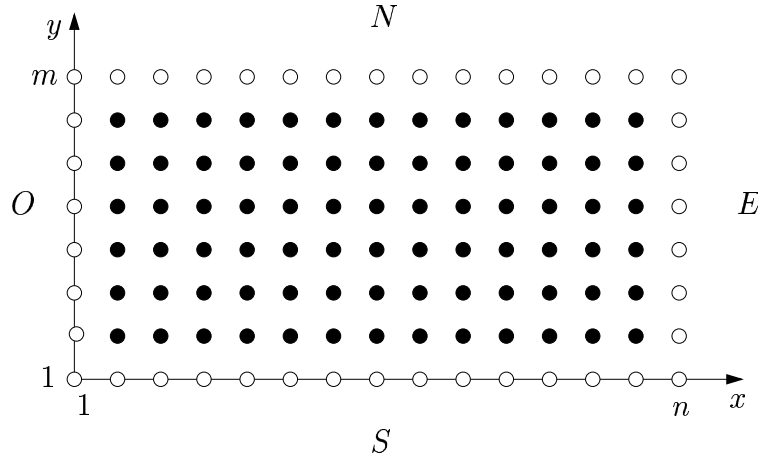


Figura 3.4: Dominio rettangolare utilizzato per la descrizione delle condizioni al bordo. I cerchi neri rappresentano i nodi interni, mentre quelli bianchi sono i punti del bordo.

### 3.4.1 Condizioni periodiche

Le condizioni periodiche ci permettono di simulare un dominio infinito che si ripete sempre uguale a se stesso. L'idea è semplice: tutto quello che esce da un lato rientra dal lato opposto.

Descriviamo in dettaglio la condizione per il lato  $N$ , definito ovviamente come

$$N = \{(x, y) : x = 1, \dots, n \text{ e } y = m\}.$$

Sia  $(x, m)$  un generico punto interno al lato  $N$ , i suoi link incogniti sono  $f_7$ ,  $f_4$  ed  $f_8$ , questi dovrebbero essere determinati dai vicini posti ad un livello superiore, che, però, non esiste. Si immagina che il dominio sia avvolto su se stesso e che, dunque, il lato  $S$  si trovi subito sopra al lato  $N$  (e il lato  $N$  subito al di sotto del lato  $S$ ). Dunque la condizione è data da:

$$\begin{aligned} f_7(x, m) &= f_7(x + 1, 1), \\ f_4(x, m) &= f_4(x, 1), \\ f_8(x, m) &= f_8(x - 1, 1), \end{aligned}$$

(vedi Fig. 3.5). In modo analogo, possiamo definire i link entranti nel lato  $S$

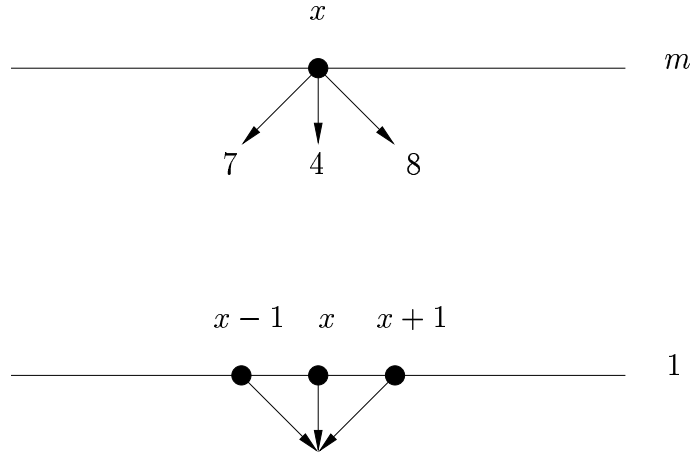


Figura 3.5: Schema delle condizioni al bordo periodiche per il lato  $N$  del dominio di riferimento.

e nei lati  $E$  ed  $O$ .

Gli angoli richiedono un trattamento particolare. Consideriamo quello posto a Nord Est ( $NE$ ): i suoi link incogniti sono  $f_3$ ,  $f_4$ ,  $f_6$ ,  $f_7$  ed  $f_8$  (come mostrato in Fig. 3.6), che sono dati da

$$\begin{aligned} f_3(n, m) &= f_3(1, m), \\ f_4(n, m) &= f_4(n, 1), \\ f_6(n, m) &= f_6(1, m - 1), \\ f_7(n, m) &= f_7(1, 1), \\ f_8(n, m) &= f_8(n - 1, 1). \end{aligned}$$

Allo stesso modo, possono essere definiti i link ignoti degli altri angoli.

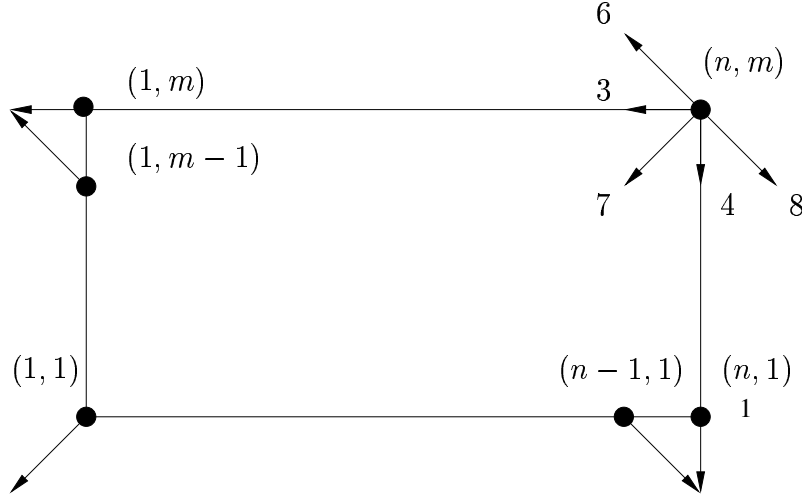


Figura 3.6: Schema delle condizioni al bordo periodiche per l'angolo NE del dominio di riferimento.

### 3.4.2 Condizioni per bordi solidi ed ostacoli

Le condizioni più semplici per simulare un bordo solido o un ostacolo sono note come condizioni bounce back. Vengono anche dette condizioni *no-slip*, perché impongono velocità nulla sulla superficie del muro solido.

L'idea è quella di riflettere indietro, nella stessa direzione da cui sono venute, le distribuzioni che entrano in un nodo solido.

Immaginiamo di avere un muro sul lato  $N$  del nostro dominio e consideriamo un generico punto  $(x, m)$  di questo lato. I link  $f_2$ ,  $f_5$  ed  $f_6$  del nodo  $(x, m)$  sono noti e possono essere determinati con la propagazione, essi assumono il valore dei link dei nodi vicini che entrano nel nodo solido (vedi Fig. 3.7 (a)).

$$\begin{aligned} f_2(x, m) &= f_2(x, m - 1), \\ f_5(x, m) &= f_5(x - 1, m - 1), \\ f_6(x, m) &= f_6(x + 1, m - 1). \end{aligned}$$

Questi link vengono ribaltati e determinano, così, i link incogniti (vedi Fig. 3.7 (b)):

$$\begin{aligned} f_4(x, m) &= f_2(x, m), \\ f_7(x, m) &= f_5(x, m), \\ f_8(x, m) &= f_6(x, m). \end{aligned}$$

Si osservi che, alla successiva propagazione, i link che erano entrati nel nodo



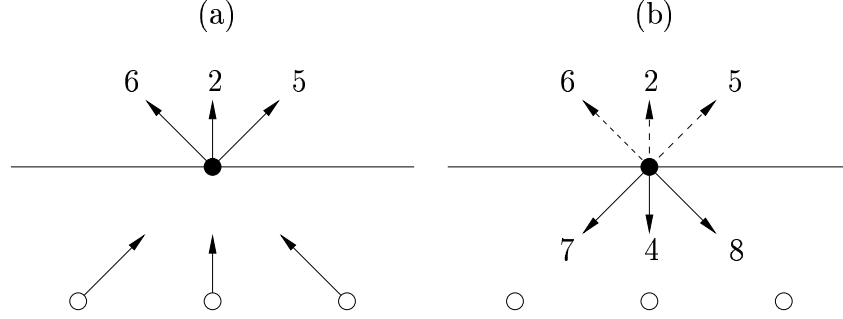


Figura 3.7: Condizioni bounce-back per bordi solidi. Il cerchio nero rappresenta il nodo solido, mentre quelli bianchi sono nodi occupati dal fluido. (a) Propagazione dei link dei nodi vicini nel nodo solido. (b) Ribaltamento dei link del nodo solido e determinazione dei link incogniti 4, 7 ed 8.

solido torneranno verso i nodi da cui provenivano, sono stati, quindi, respinti indietro dal muro. Questa condizione può essere facilmente adattata ad un ostacolo di qualunque forma posto all'interno del dominio.

### 3.4.3 Condizione di inlet con interpolazione

Questa condizione è stata proposta da Yu [23], con lo scopo di assegnare sull'inlet delle distribuzioni che risentissero il meno possibile del flusso interno al dominio.

Per prima cosa, si osserva che vale

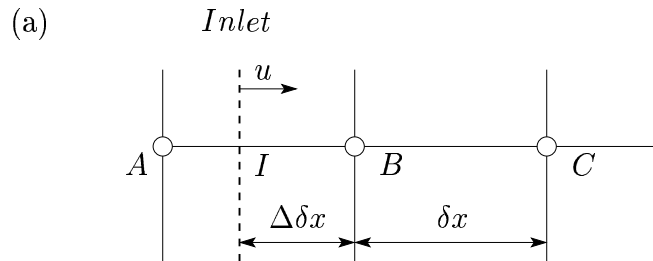
$$f = f^{eq} + f^{neq},$$

con  $|f^{neq}| \ll |f^{eq}|$ . Se  $f_i^{eq}$  (con  $\mathbf{c}_i$  diretto all'interno del dominio) è specificato e non gli è permesso di variare in funzione del flusso interno, allora la maggior parte della distribuzione  $f_i$  all'inlet sarà indipendente dall'interno. Ne segue che solo una piccola frazione dell'onda di pressione proveniente dal dominio sarà riflessa indietro dall'inlet attraverso la componente  $f_i^{neq}$ .

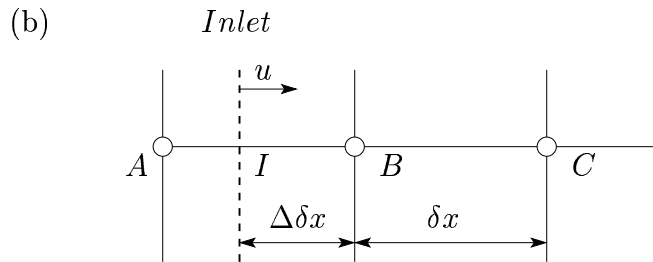
Per descrivere questa condizione facciamo riferimento al caso unidimensionale mostrato in Fig. 3.8.

L'inlet è posto tra i nodi  $A$  e  $B$  della griglia, in particolare si trova a distanza  $\Delta$  da  $B$ . Dopo la propagazione,  $f_{1,B}$  deve essere determinato, devono cioè essere calcolate le quantità  $f_{1,B}^{eq}$  ed  $f_{1,B}^{neq}$ .

Densità e velocità del fluido sono note all'inlet, quindi è possibile calcolare  $f_{1,I}^{eq}$  tramite l'espressione (3.32) (o (3.33)) opportunamente adattata al modello



Non note :  $f_{1,B}^{eq} \rightarrow$   
 Note :  $f_{1,I}^{eq} \rightarrow \quad f_{1,C}^{eq} \rightarrow$



Non note :  $f_{1,B}^{neq} \rightarrow$   
 Note :  $\leftarrow f_{3,B}^{neq} \quad \leftarrow f_{3,C}^{neq} \quad f_{1,C}^{neq} \rightarrow$

Figura 3.8: Condizione di inlet con interpolazione. (a) Si evidenziano le quantità note e non note delle parti in equilibrio della funzione di distribuzione all'inlet. (b) Si evidenziano le quantità note e non note delle parti non in equilibrio della funzione di distribuzione all'inlet.

unidimensionale. Utilizzando i valori  $f_{1,I}^{eq}$  ed  $f_{1,C}^{eq}$  si può calcolare  $f_{1,B}^{eq}$  per interpolazione

$$f_{1,B}^{eq} = f_{1,I}^{eq} + \frac{\Delta}{1 + \Delta} (f_{1,C}^{eq} - f_{1,I}^{eq}).$$

Per costruire  $f_{1,B}^{neq}$  si segue lo stesso schema, però  $f_{1,I}^{neq}$  non è noto, si utilizza allora la stessa idea proposta da Zou ed He [20]: il bounce back della parte non in equilibrio, si pone dunque

$$f_{1,I}^{neq} = f_{3,B}^{neq}.$$

Interpolando si esprime  $f_{1,B}^{neq}$

$$f_{1,B}^{neq} = f_{1,I}^{neq} + \frac{\Delta}{1 + \Delta} (f_{1,C}^{neq} - f_{1,I}^{neq}).$$

In [13] è presentato un confronto tra queste condizioni, la condizione di Zou ed He [20] (condizione in cui si specifica solo una delle due grandezze macroscopiche, densità e pressione, e si calcola l'altra in funzione di quella assegnata) e la classica condizione di inlet che impone velocità e densità ponendo semplicemente

$$f_B = f^{eq}(\rho, \mathbf{u}),$$

con  $\rho$  e  $\mathbf{u}$  note.

Il confronto mostra chiaramente che le condizioni con interpolazione riducono di molto l'onda di pressione riflessa dall'inlet.

### 3.4.4 Condizione di outlet

Supponiamo che nel lato  $E$  del nostro dominio sia posizionato l'outlet del flusso (vedi Fig. 3.4). Il nostro scopo è determinare i link entranti nel lato  $E$  in modo tale che l'outlet risulti quasi "trasparente". Vogliamo, cioè, che il flusso interno sia influenzato il meno possibile dalla condizione imposta.

Con riferimento alla figura Fig. 3.9, consideriamo un generico nodo di outlet  $(n, y) \equiv O$ , dobbiamo determinare i link  $f_3$ ,  $f_6$  ed  $f_7$ . Le condizioni coinvolgono anche i link entranti sulle colonne  $n - 1$  ed  $n - 2$ . Spostiamoci sul nodo  $(n - 1, y) \equiv A$ , calcoliamo la variazione di densità e velocità su quel nodo tra i tempi  $t - 1$  e  $t - 2$ , cioè

$$\Delta\rho(A) = \rho(A, t - 1) - \rho(A, t - 2),$$

$$\Delta\mathbf{u}(A) = \mathbf{u}(A, t - 1) - \mathbf{u}(A, t - 2).$$

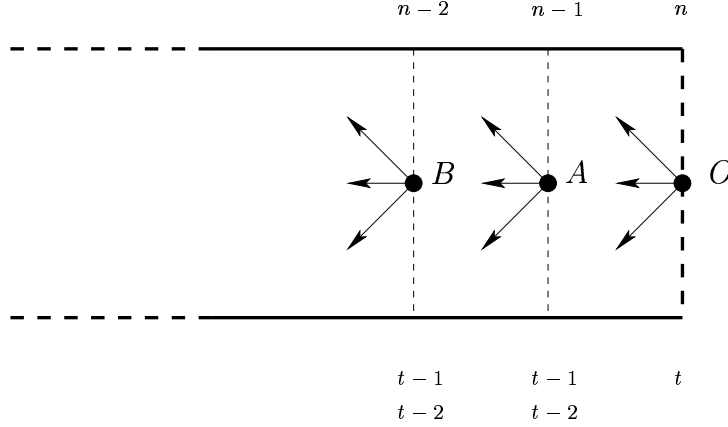


Figura 3.9: La figura mostra lo schema utilizzato per la condizione di outlet. Il punto  $O$  è un generico nodo di outlet e i punti  $A$  e  $B$  sono i corrispondenti nodi sulla penultima e terzultima colonna rispettivamente. Mentre, sottostanti le colonne interessate, vengono indicati i tempi relativi al calcolo delle quantità mancanti.

Se si imponesse su  $O$  la stessa variazione di densità calcolata su  $A$ , si avrebbe

$$\rho_A = \rho(O, t - 1) + \Delta\rho(A).$$

A questo punto, si calcolano dei link “fittizi”,  $f_3(A)$ ,  $f_6(A)$  ed  $f_7(A)$  imponendo su  $O$  la variazione di velocità calcolata su  $A$ :

$$\begin{aligned} f_3(A) &= f_3(O, t - 1) + \frac{1}{9}\rho_A(\Delta\mathbf{u}(A) \cdot \mathbf{c}_3), \\ f_6(A) &= f_6(O, t - 1) + \frac{1}{36}\rho_A(\Delta\mathbf{u}(A) \cdot \mathbf{c}_6), \\ f_7(A) &= f_7(O, t - 1) + \frac{1}{36}\rho_A(\Delta\mathbf{u}(A) \cdot \mathbf{c}_7). \end{aligned}$$

Analogamente, si calcolano su  $B$  le variazioni di densità e velocità,  $\Delta\rho(B)$  e  $\Delta\mathbf{u}(B)$ , e si pone

$$\rho_B = \rho(O, t - 1) + \Delta\rho(B),$$

così i link fittizi  $f_3(B)$ ,  $f_6(B)$  ed  $f_7(B)$  sono dati da

$$\begin{aligned} f_3(B) &= f_3(O, t - 1) + \frac{1}{9}\rho_B(\Delta\mathbf{u}(B) \cdot \mathbf{c}_3), \\ f_6(B) &= f_6(O, t - 1) + \frac{1}{36}\rho_B(\Delta\mathbf{u}(B) \cdot \mathbf{c}_6), \\ f_7(B) &= f_7(O, t - 1) + \frac{1}{36}\rho_B(\Delta\mathbf{u}(B) \cdot \mathbf{c}_7). \end{aligned}$$

A questo punto si calcolano i link effettivi entranti in  $O$  come media pesata dei link fittizi su  $A$  e  $B$ , facendo, dunque, un'interpolazione spaziale oltre che temporale:

$$\begin{aligned} f_3(O, t) &= Df_3(A) + (1 - D)f_3(B), \\ f_6(O, t) &= Df_6(A) + (1 - D)f_6(B), \\ f_7(O, t) &= Df_7(A) + (1 - D)f_7(B), \end{aligned}$$

dove  $D$  è una costante compresa tra 0 ed 1 e nelle nostre simulazioni abbiamo sempre posto  $D = 1/2$ . Si osservi che i link fittizi, così calcolati, potrebbero essere negativi, in questo caso, la variazione non viene aggiunta e si lascia  $f_i(A/B) = f_i(O, t - 1)$ , altrimenti l'instabilità data da un link negativo si propagherebbe velocemente in tutto il dominio.

In [24] queste condizioni sono presentate nel dettaglio e confrontate con altre condizioni di outlet, dal confronto si evince chiaramente che il loro comportamento è migliore rispetto alle altre. Queste condizioni riescono ad influenzare in modo trascurabile il campo delle velocità e la densità del fluido in uscita.

## Capitolo 4

# Un modello lattice Boltzmann per due fluidi immiscibili

I modelli lattice Boltzmann si sono evoluti velocemente e sono stati utilizzati in situazioni sempre più complesse. Date le sue svariate applicazioni sia scientifiche sia industriali, risulta interessante il problema della simulazione di due o più fluidi con caratteristiche diverse o dello stesso fluido in fasi distinte (ad esempio acqua e vapore acqueo).

Questo problema è stato affrontato da molti autori nel corso degli anni: un primo modello lattice Boltzmann per due fluidi fu proposto da Gunstensen, Rothman, Zaleski e Zanetti [25]. Il loro approccio era basato su un precedente modello lattice gas per due fluidi. Più tardi Swift, Osborn e Yeomans [26] implementarono un metodo basato sul così detto *free energy approach*. Shan e Chen [27] e Martin e Chen [28] definirono, invece, un metodo in cui i due fluidi interagivano tra loro nell'interfaccia di separazione tramite un potenziale che ne modificava le velocità. Inamuro, Tomita e Ogino [29, 30] hanno presentato un modello per due fluidi con la stessa densità, ma viscosità diverse e, recentemente, Inamuro, Ogata, Tajima e Konoshi [31] hanno proposto un modello per due fluidi con densità molto diverse, purtroppo il loro modello risulta computazionalmente molto costoso e poco adatto a domini complessi (come, ad esempio, un mezzo poroso).

Noi abbiamo preso spunto da quest'ultimo approccio, per sviluppare un modello lattice Boltzmann per due fluidi immiscibili con la stessa densità, ma con viscosità molto diverse [32]. Il movimento dell'interfaccia che separa i due fluidi è calcolato da un apposito schema LBGK che fa evolvere una funzione *colore* la quale, a sua volta, stabilisce quale dei due fluidi è presente

in ogni nodo.

Lo scopo ultimo del nostro lavoro è la definizione di un modello matematico che simuli il processo di estrazione del caffè espresso. Questo processo è estremamente complicato per via delle molte variabili che lo influenzano.

Un aspetto importante del fenomeno di estrazione è la fase di bagnazione dello strato di caffè: l'acqua scende, per effetto di un gradiente di pressione, e bagna il caffè.

In questa fase, l'aria, che era presente all'interno del caffè, viene sostituita dall'acqua. Per modellare questo abbiamo bisogno di un schema che consideri la dinamica di due fluidi immiscibili (che, nel caso del caffè, sono acqua e aria).

In questo capitolo, descriveremo il nostro metodo; confronteremo i nostri risultati con quelli sperimentali e teorici presentati da Bentley e Leal [33] riguardo alla deformazione di gocce sotto l'effetto di un flusso stazionario; faremo un confronto qualitativo con i risultati di Shin e Juric [34] sulla collisione di gocce; presenteremo anche altre possibili applicazioni del nostro modello come il flusso attorno a degli ostacoli, la caduta di una goccia e la separazione di una miscela composta da due fluidi immiscibili. Infine, deriveremo l'equazione macroscopica per la funzione colore utilizzando l'analisi *multi-scale*.

## 4.1 Il modello per due fluidi immiscibili

Consideriamo due fluidi immiscibili, denominati fluido rosso e fluido blu, essi hanno la stessa densità, ma due diverse viscosità  $\nu_r$  e  $\nu_b$ .

Come abbiamo visto, la viscosità è collegata al parametro di rilassamento dalla relazione (3.28) per i modelli SRT e dalle analoghe relazioni (3.40) e (3.44) per i modelli MRT in due e tre dimensioni rispettivamente. Ne segue che avremo due parametri di rilassamento (uno per ogni fluido)  $\omega_r$  ed  $\omega_b$ .

Nel nostro modello, sono definite due classi di funzioni di distribuzione:

- $\alpha_i$ : funzioni di distribuzione del colore;
- $f_i$ : funzioni di distribuzione della massa.

Analizziamo nel dettaglio le loro evoluzioni.

### 4.1.1 Funzioni di distribuzione del colore $\alpha_i$

Introduciamo una variabile macroscopica  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  che indica la presenza del fluido rosso, di quello blu o di entrambi (come accade nell'interfaccia tra i due). Associamo un valore,  $\alpha_r$ , al fluido rosso e un altro valore,  $\alpha_b$ , al fluido blu così che tutti i nodi occupati dal fluido rosso (blu) sono inizializzati con  $\alpha = \alpha_r$  ( $\alpha = \alpha_b$ ). In particolare, poniamo  $\alpha_r = 1$  e  $\alpha_b = 0$ .

La variabile  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  ha la seguente interpretazione:

- $\alpha(\mathbf{x}, t) \geq 1$ :  $\mathbf{x}$  è occupato dal fluido *rosso* al tempo  $t$ ,
- $\alpha(\mathbf{x}, t) \leq 0$ :  $\mathbf{x}$  è occupato dal fluido *blu* al tempo  $t$ ,
- $0 < \alpha(\mathbf{x}, t) < 1$ :  $\mathbf{x}$  è sull'interfaccia (quindi, è contemporaneamente occupato da entrambi i fluidi).

Dal momento che l'interfaccia si muove con il fluido,  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  dovrebbe verificare, a livello macroscopico, la seguente equazione:

$$\partial_t \alpha + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha = 0. \quad (4.1)$$

Definiamo, quindi, un apposito schema LBGK (cioè, scegliamo distribuzioni del colore di equilibrio appropriate) in modo che  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  soddisfi (4.1).

La variabile  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  è semplicemente definita come la somma delle distribuzioni del colore  $\alpha_i$ :

$$\alpha(\mathbf{x}, t) = \sum_i \alpha_i(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

L'evoluzione delle distribuzioni  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$  è data da un modello LBGK, l'equazione cinetica è dunque data da

$$\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \alpha_i(\mathbf{x}, t) - \omega_\alpha (\alpha_i(\mathbf{x}, t) - \alpha_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad i = 0, \dots, l, \quad (4.3)$$

dove  $\omega_\alpha$  è il parametro di rilassamento per le funzioni di distribuzione del colore e le  $\alpha_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$  sono definite come segue:

$$\alpha_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \frac{\alpha(\mathbf{x}, t) f_i(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}.$$

Qui le  $f_i(\mathbf{x}, t)$  sono le funzioni di distribuzione della massa e  $\rho(\mathbf{x}, t)$  è la densità locale del fluido.

Il passo di evoluzione viene, usualmente, diviso in collisione e propagazione:

$$\alpha_i^*(\mathbf{x}, t + 1) = \alpha_i(\mathbf{x}, t) - \omega_\alpha (\alpha_i(\mathbf{x}, t) - \alpha_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (4.4)$$

$$\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \alpha_i^*(\mathbf{x}, t + 1). \quad (4.5)$$



Nel paragrafo 4.6 mostremo come, con questa scelta delle funzioni di equilibrio del colore, la funzione  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  verifichi la seguente equazione:

$$\partial_t \alpha + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha = \frac{\alpha}{\rho} \left( \frac{1}{\omega_\alpha} - \frac{1}{2} \right) \partial_{x_a} \partial_{x_b} (P_{ab}), \quad (4.6)$$

dove  $P_{ab}$  è la quantità di moto del flusso definita in (3.19) (o (3.36)) ed è implicitamente assunta la somma sugli indici spaziali  $a$  e  $b$ .

Prendendo  $\omega_\alpha$  il più possibile vicino a 2 (nel limite della stabilità numerica) il termine destro dell'equazione (4.6) diventa quasi nullo, quindi  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  evolve in accordo con la (4.1).

Si noti che durante la sua evoluzione  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  può diventare leggermente maggiore del  $\max(\alpha_r, \alpha_b) = 1$  e leggermente inferiore del  $\min(\alpha_r, \alpha_b) = 0$ , si definisce dunque una funzione indicatrice  $\phi$

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \alpha(\mathbf{x}, t) \geq 1, \\ [\sin((\alpha - 1/2)\pi) + 1]/2 & \text{se } 0 < \alpha(\mathbf{x}, t) < 1, \\ 0 & \text{se } \alpha(\mathbf{x}, t) \leq 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

che ha lo scopo di troncare  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  e di raccordare e restringere l'interfaccia.

#### 4.1.2 Funzioni di distribuzione della massa $f_i$

L'evoluzione delle funzioni di distribuzione della massa,  $f_i$ , è eseguita con il modello SRT o con il modello MRT, dove, però, il parametro di rilassamento non è fissato, ma varia nello spazio e nel tempo a seconda di quale dei fluidi è presente nel nodo che consideriamo. Il parametro di rilassamento è, quindi, una funzione di  $\mathbf{x}$  e  $t$  e viene calcolato in ogni punto e ad ogni time step secondo l'equazione seguente:

$$\omega(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t)\omega_r + (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\omega_b. \quad (4.8)$$

Evidentemente  $\omega(\mathbf{x}, t) = \omega_r$  quando il nodo  $\mathbf{x}$  è occupato dal fluido rosso, in questo caso, infatti,  $\phi(\mathbf{x}, t) = 1$  (vedi (4.7)); se, invece,  $\mathbf{x}$  è occupato dal fluido blu  $\omega(\mathbf{x}, t) = \omega_b$  e quando  $\mathbf{x}$  si trova nell'interfaccia tra i due fluidi, allora,  $\omega(\mathbf{x}, t)$  è una combinazione convessa di  $\omega_r$  ed  $\omega_b$ .

A causa della relazione che lega  $\omega$  e la viscosità del fluido (equazioni (3.28), (3.40) e (3.44)), la definizione (4.8) del parametro di rilassamento impone, in ogni punto, la viscosità del fluido che lo occupa.

Si osservi che se si utilizza un modello SRT,  $\omega(\mathbf{x}, t)$  è l'unico parametro di

rilassamento del modello, mentre, negli schemi MRT, con  $\omega(\mathbf{x}, t)$  si intende il parametro che determina la viscosità cinematica tangenziale (shear viscosity), quindi i parametri  $s_7(= s_8)$  e  $s_9(= s_{13})$  per i modelli D2Q9 e D3Q19 rispettivamente.

Le distribuzioni  $f_i$  vengono usualmente usate per calcolare le variabili macroscopiche  $\rho$  ed  $\mathbf{u}$  tramite le relazioni (3.17) e (3.18) (o (3.34) e (3.35)). Velocità e densità saranno relative al fluido rosso o al fluido blu a seconda del valore di  $\phi$  nel nodo considerato.

### 4.1.3 Tensione superficiale

Nella zona di contatto tra due fluidi immiscibili agisce una forza che tende a mantenerli separati, la tensione superficiale. L'effetto della tensione superficiale può essere incluso nel modello modificando le distribuzioni di equilibrio. Per questo, bisogna ancora distinguere tra modelli SRT e modelli MRT. Nel caso dei modelli SRT, è sufficiente aggiungere un termine alla funzione di equilibrio, noi utilizziamo il termine proposto da Kehrwald [35] e quindi la funzione di equilibrio diventa

$$f_i^{eq} = W_i \rho \left[ 1 + 3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}\mathbf{u}^2 \right] + S_i,$$

con

$$S_i = W_i \frac{9}{2} \sigma \left( \frac{F_a F_b}{\|\mathbf{F}\|} - \delta_{ab} \|\mathbf{F}\| \right) \left( c_{ia} c_{ib} - \frac{\delta_{ab}}{3} \right), \quad (4.9)$$

dove  $a$  e  $b$  indicano le coordinate spaziali ed è implicitamente assunta la sommatoria su questi indici.

Inoltre

$$\mathbf{F} = \nabla \phi,$$

e  $\sigma$  è il coefficiente di tensione superficiale e controlla l'intensità di questo termine.

I termini  $S_i$  in zone occupate da un solo fluido sono nulli, perché  $\nabla \phi$  risulterà nullo in quelle regioni. La tensione superficiale viene, quindi, applicata solo all'interfaccia in modo automatico e senza bisogno di conoscerne la posizione.

Ci sono vari modi per calcolare  $F = \nabla\phi$ , noi abbiamo posto

$$F_a = (\nabla\phi)_a = \frac{1}{6} \sum_i c_{ia} \phi(\mathbf{x} + c_{ia}) \quad a = 1, 2 \quad \text{per il D2Q9,}$$

$$F_a = (\nabla\phi)_a = \frac{1}{10} \sum_i c_{ia} \phi(\mathbf{x} + c_{ia}) \quad a = 1, 2, 3 \quad \text{per il D3Q19.}$$

Nel caso di modelli MRT, il termine  $S_i$  non può essere incorporato in modo così diretto, perchè non si hanno distribuzioni di equilibrio, ma momenti di equilibrio. Allora si sottopongono gli  $S_i$  alla stessa trasformazione applicata alle distribuzioni  $f_i$ , in modo da poterli aggiungere ai momenti.

In particolare, si procede come segue:

1. si calcola  $\mathbf{S} = (S_0, \dots, S_l)$  come in (4.9);
2. si trasforma  $\mathbf{S}$  con la matrice  $\mathbf{M}$  degli schemi MRT

$$\mathbf{S}_{MRT} = \mathbf{M}\mathbf{S};$$

3. si aggiunge  $\mathbf{S}_{MRT}$  alle funzioni di equilibrio dei momenti date da (3.38) per il D2Q9 e da (3.42) per il D3Q19.

#### 4.1.4 Implementazione numerica

Riepiloghiamo schematicamente i passi dell'algoritmo proposto.

1. Collisione delle distribuzioni  $f_i(\mathbf{x}, t)$ :
  - Metodo SRT: si utilizza l'equazione (3.30).
  - Metodo MRT: si utilizzano le equazioni (3.37) e (3.39) per il modello D2Q9 e le (3.41) e (3.43) per il D3Q19.
2. Collisione delle distribuzioni  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$  data dall'equazione (4.4).
3. Propagazione delle distribuzioni  $f_i(\mathbf{x}, t)$  e  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$  tramite le relazioni (3.31) e (4.5) rispettivamente.
4. Calcolo delle variabili macroscopiche  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $\alpha$  e  $\phi$  utilizzando le equazioni (3.17), (3.18), (4.2) e (4.7) rispettivamente.

Come abbiamo già visto e come ampiamente documentato in letteratura, gli schemi MRT sono numericamente molto più stabili degli SRT al crescere del numero di Reynolds [13, 15, 16, 18, 19].

In accordo con questo risultato, anche l'implementazione MRT del nostro modello per due fluidi immiscibili, risulta numericamente più stabile della versione SRT, per alti numeri di Reynolds. Inoltre, il costo computazionale dei due schemi è confrontabile. Se consideriamo il tempo di calcolo dei modelli MRT ed SRT ( $T_{SRT}$  e  $T_{MRT}$  rispettivamente), troviamo che  $T_{SRT}/T_{MRT}$  vale circa 0.97 sia in due sia in tre dimensioni.

Per queste ragioni, abbiamo preferito utilizzare lo schema MRT nelle seguenti simulazioni. Nell'esempio del flusso attorno a degli ostacoli (paragrafo 4.4), è necessario utilizzare il modello MRT, perché l'SRT sarebbe numericamente instabile per quel set di parametri.

## 4.2 Deformazione di gocce sottoposte ad un flusso lineare e stazionario

Per verificare il nostro modello, lo abbiamo applicato al problema della deformazione di gocce sotto l'azione di un flusso lineare e stazionario. I nostri risultati sono confrontati con quelli sperimentali e teorici presentati da Bentley e Leal [33].

Per prima cosa, riepilogheremo brevemente l'apparato sperimentale utilizzato da Bentley e Leal e le teorie sulla deformazione. Descriveremo, poi, il setting del nostro modello per queste simulazioni e infine, confronteremo i nostri risultati con quelli esposti da Bentley e Leal.

### 4.2.1 Apparato sperimentale e teorie sulla deformazione di gocce

La trattazione che segue è basata sul lavoro di Bentley e Leal [33]. Consideriamo una goccia di raggio  $a$ , viscosità dinamica  $\mu_d$  e densità  $\rho_d$  sospesa in un secondo fluido con viscosità dinamica  $\mu_o$  e densità  $\rho_o$ . Il coefficiente di tensione superficiale tra i due fluidi è  $\sigma$ . Al fluido esterno che circonda la goccia viene applicato un flusso lineare e stazionario.

Tutto il sistema è caratterizzato dai seguenti parametri:

- rapporto delle viscosità:

$$\lambda = \frac{\mu_d}{\mu_o},$$

- numero di capillarità:

$$C = \frac{G\mu_o a}{\sigma},$$

- numero di Reynolds:

$$Re = \frac{\rho_o G a^2}{\mu_o},$$

- rapporto delle densità:

$$k = \frac{\rho_d}{\rho_o},$$

dove  $G$  è l'intensità del tensore del gradiente della velocità.

In [33] l'attenzione è ristretta agli effetti dovuti alle viscosità, quindi, i numeri di Reynolds sono sempre molto piccoli e i due fluidi hanno sostanzialmente la stessa densità ( $k = 1$ ). Sotto queste condizioni, il sistema è descritto da tre parametri soltanto: il rapporto tra le viscosità  $\lambda$ , il numero di capillarità  $C$  e il flusso imposto.

Il flusso generato dal dispositivo usato in [33] è caratterizzato da un parametro  $\beta$  che specifica l'intensità relativa tra la componente rettilinea del flusso e la vorticità. Il gradiente della velocità è definito come:

$$\nabla \mathbf{u} = \frac{1}{2}G \begin{bmatrix} 1 + \beta & 1 - \beta & 0 \\ -1 + \beta & -1 - \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Variando  $\beta$  si può modificare il tipo di flusso, in particolare  $\beta = 1$  corrisponde ad un flusso puramente dritto, mentre, per  $\beta = -1$ , si ha un flusso puramente rotatorio. In Fig. 4.1 sono rappresentati i flussi che si ottengono per  $\beta = 0, 8$ ,  $\beta = 0, 6$  e  $\beta = 0, 2$ , questi sono i flussi utilizzati nelle simulazioni. L'angolo  $\theta_e$  tra l'asse delle  $x$  e l'uscita lineare delle linee di flusso è dato da

$$\sin \theta_e = \frac{\beta - 1}{\beta + 1}.$$

La deformazione di una goccia è quantitativamente descritta da due parametri: il parametro di deformazione  $D_f$  o  $L/a$ , che indica quanto la goccia è stata allungata e l'angolo di orientamento  $\theta$  della goccia.

Il parametro  $D_f$  è definito da

$$D_f = \frac{L - B}{L + B},$$

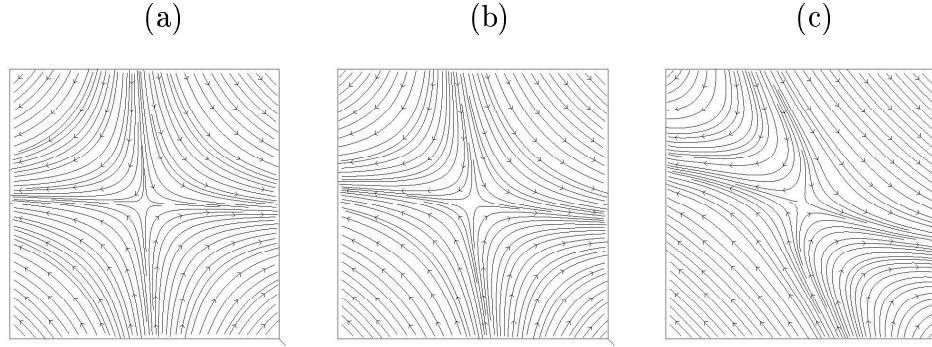


Figura 4.1: Linee di flusso del campo di velocità imposto nel fluido in cui la goccia è immersa per diversi valori di  $\beta$ : (a)  $\beta = 0,8$ , (b)  $\beta = 0,6$ , (c)  $\beta = 0,2$ .

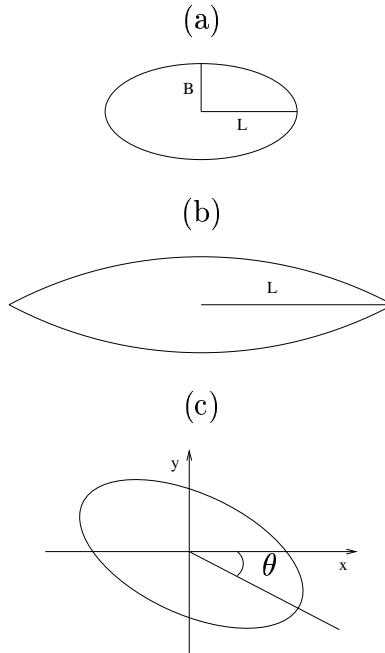
dove  $L$  e  $B$  sono il maggiore e il minore degli assi della goccia come illustrato in Fig. 4.2 (a). Quando  $L/B$  diventa grande,  $D_f$  si incrementa molto poco con l'aumento della deformazione e viene quindi utilizzata la quantità  $L/a$  (vedi Fig. 4.2 (b)). L'angolo di orientamento  $\theta$  è l'angolo tra l'asse delle  $x$  e il maggiore semi-asse della goccia (vedi Fig. 4.2 (c)).

In Bentley e Leal [33], vengono considerati una grande varietà di combinazioni di rapporti di viscosità e di tipi di flusso. In ogni caso, la procedura sperimentale consiste nel porre una goccia di raggio 1 mm nel dispositivo che genera il flusso. Il flusso viene avviato alla più bassa intensità possibile e viene lentamente incrementato permettendo alla goccia di raggiungere lo stato stazionario per ogni livello di intensità del flusso. In molti casi, si riscontra l'esistenza di un valore critico del flusso, per il quale non si raggiunge nessuna forma stazionaria oppure la goccia si rompe. Questo limite corrisponde ad un valore critico del numero di capillarità  $C_c$ .

Bentley e Leal confrontano i loro risultati sperimentali con quelli teorici ottenuti utilizzando le due seguenti teorie:

- teoria delle piccole deformazioni;
- teoria delle grandi deformazioni.

La teoria delle piccole deformazioni fu inizialmente proposta da Taylor [36, 37], termini di ordine superiore furono poi aggiunti da diversi autori fra i quali Cox [38] and Barthès-Biesel and Acrivos [39].



*Figura 4.2: Misure di deformazione.*

I risultati di queste ricerche sono stati raccolti e discussi da Rallison [40] e, più recentemente, da Stones [41].

Non tratteremo la teoria delle piccole deformazioni, sottolineiamo soltanto che i risultati teorici qui riportati sono gli stessi già pubblicati da Bentley e Leal [33] che sono stati ottenuti seguendo [39].

La teoria delle grandi deformazioni, fu inizialmente studiata sempre da Taylor [42] e poi sviluppata da Buckmaster [43, 44], Acrivos e Lo [45] e Hinch e Acrivos [46]. In Bentley e Leal, i valori teorici per le grandi deformazioni sono stati ottenuti estendendo al caso  $\beta \neq 1$  i risultati che Hinch e Acrivos [46] avevano presentato per  $\beta = 1$  (con un'apposita procedura che è ben descritta in [33]).

Si considerano tre categorie di deformazioni, a seconda del rapporto tra le viscosità:

- rapporto di viscosità basso ( $\lambda < 0,02$ );
- rapporto di viscosità intermedio ( $0,02 < \lambda < 2$ );
- rapporto di viscosità alto ( $\lambda > 3$ ).

## 4.2.2 Setting delle simulazioni

Abbiamo simulato un caso per ogni categoria di rapporto di viscosità. I parametri fisici relativi ai tre esperimenti sono riportati in Tab. 4.1, mentre in Tab. 4.2 sono raccolti i corrispondenti parametri lattice Boltzmann utilizzati nel modello (il passaggio dalle unità fisiche alle unità di griglia è descritto nel paragrafo 6.3).

*Tabella 4.1: Parametri sperimentali.*

Sistema num.	$\mu_o$ (P)	$\mu_d$ (P)	$\lambda$	$\sigma_{ex}$ (dynes/cm)	$\beta$
1	49,5	0,0534	0,00108	3,98	0,8
2	42,0	4,956	0,118	5,54	0,6
3	10,63	290,0	27,3	5,19	0,2

*Tabella 4.2: Parametri utilizzati nel modello lattice Boltzmann. Tutti i valori sono espressi in unità della griglia.*

Sistema num.	$\nu_o$	$\nu_d$	$\omega_o$	$\omega_d$	$\omega_\alpha$	$\sigma_{LB}$	$\beta$
1	0,1656	0,000193	1,003	1,998	1,9999	$0,482 \times 10^{-4}$	0,8
2	0,141	0,0167	1,08	1,82	1,9999	$0,635 \times 10^{-4}$	0,6
3	0,0364	0,996	1,641	0,287	1,9999	$0,594 \times 10^{-4}$	0,2

Si osservi che, per piccoli numeri di Reynolds, l'orientamento e la deformazione delle gocce dipende solo dal numero di capillarità  $C$  e dal rapporto di viscosità  $\lambda$  (una volta che il tipo di flusso è stato fissato). Al crescere del numero di Reynolds, (posto che rimanga sempre sufficientemente piccolo), il numero di time step necessari per raggiungere lo stato stazionario è minore, quindi la deformazione è più veloce, ma è sostanzialmente la stessa. A conferma di questa osservazione confrontiamo la soluzione ottenuta per  $\lambda = 0,118$ ,  $C = 0,196$  e  $\beta = 0,6$  per diversi numeri di Reynolds. In particolare, poniamo  $Re = 6,1 \times 10^{-5}$ ,  $Re = 6,1 \times 10^{-4}$  e  $Re = 6,1 \times 10^{-3}$  ed eseguiamo rispettivamente  $10^7$ ,  $10^6$  and  $10^5$  time step. I risultati sono mostrati in Fig. 4.3 e sono in ottimo accordo tra di loro.

In tutte le simulazioni usiamo un dominio discretizzato con  $100 \times 100$  unità di griglia e una goccia con raggio iniziale  $a = 10$  unità di griglia. Poniamo



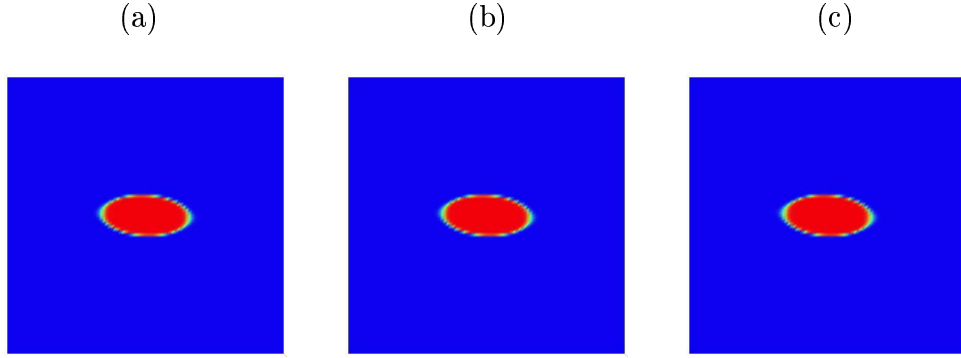


Figura 4.3: Forme stazionarie ottenute per  $\lambda = 0,118$ ,  $C = 0,196$ ,  $\beta = 0,6$  per diversi numeri di Reynolds ed eseguendo un diverso numero di time step,  $N$ : (a)  $Re = 6,1 \times 10^{-5}$ ,  $N = 10^7$ , (b)  $Re = 6,1 \times 10^{-4}$ ,  $N = 10^6$ , (c)  $Re = 6,1 \times 10^{-3}$ ,  $N = 10^5$ .

la goccia circolare al centro del dominio e imponiamo sul bordo una velocità data da

$$\mathbf{u} = \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{x},$$

dove  $\nabla \mathbf{u}$  è dato da (4.10).

Una volta che  $\lambda$  e  $\beta$  sono fissati, eseguiamo simulazioni per valori crescenti di  $C$  (cioè incrementiamo l'intensità del flusso) e lasciamo che la goccia raggiunga lo stato stazionario. In alcuni casi, la goccia non raggiunge nessuna forma stazionaria, in queste situazioni si è raggiunto il valore critico del numero di capillarità  $C_c$ .

### 4.2.3 Rapporto di viscosità basso

Per questa categoria di esperimenti abbiamo considerato un rapporto di viscosità  $\lambda = 1,08 \times 10^{-3}$  e un flusso caratterizzato da  $\beta = 0,8$ .

In generale, per bassi rapporti di viscosità ( $\lambda < 0,02$ ), è possibile ottenere gocce stazionarie molto deformate. Al crescere di  $C$  il raggio di curvatura agli estremi della goccia diminuisce fino a renderli appuntiti. Questo passaggio da estremi tondeggianti ad estremi appuntiti dovrebbe avvenire, approssimativamente, per  $(1 + \beta)C = 0,5$ , nel nostro caso questo corrisponde a  $C = 0,278$ . I nostri risultati confermano questa previsione, infatti, per  $C = 0,263$ , gli estremi sono ancora tondeggianti, mentre per  $C = 0,321$  sono appuntiti. L'angolo  $\theta$  si avvicina monotonicamente all'angolo di uscita delle linee di flusso, che vale  $-3,2^\circ$  per  $\beta = 0,8$ . Al punto critico di rottura la

goccia non raggiunge una forma stazionaria e continua ad allungarsi indefinitamente con gli estremi appuntiti. Per  $C = 0,511$  noi rileviamo questo comportamento non stazionario ottenuto anche nel lavoro sperimentale. In Fig. 4.4 sono mostrati i risultati delle nostre simulazioni. Un confronto con la teoria delle piccole deformazioni è possibile per  $C = 0,175$ , mentre le forme previste da questa stessa teoria per valori superiori di  $C$  non sono realistiche. Per  $C \geq 0,321$  viene utilizzata la teoria delle grandi deformazioni.

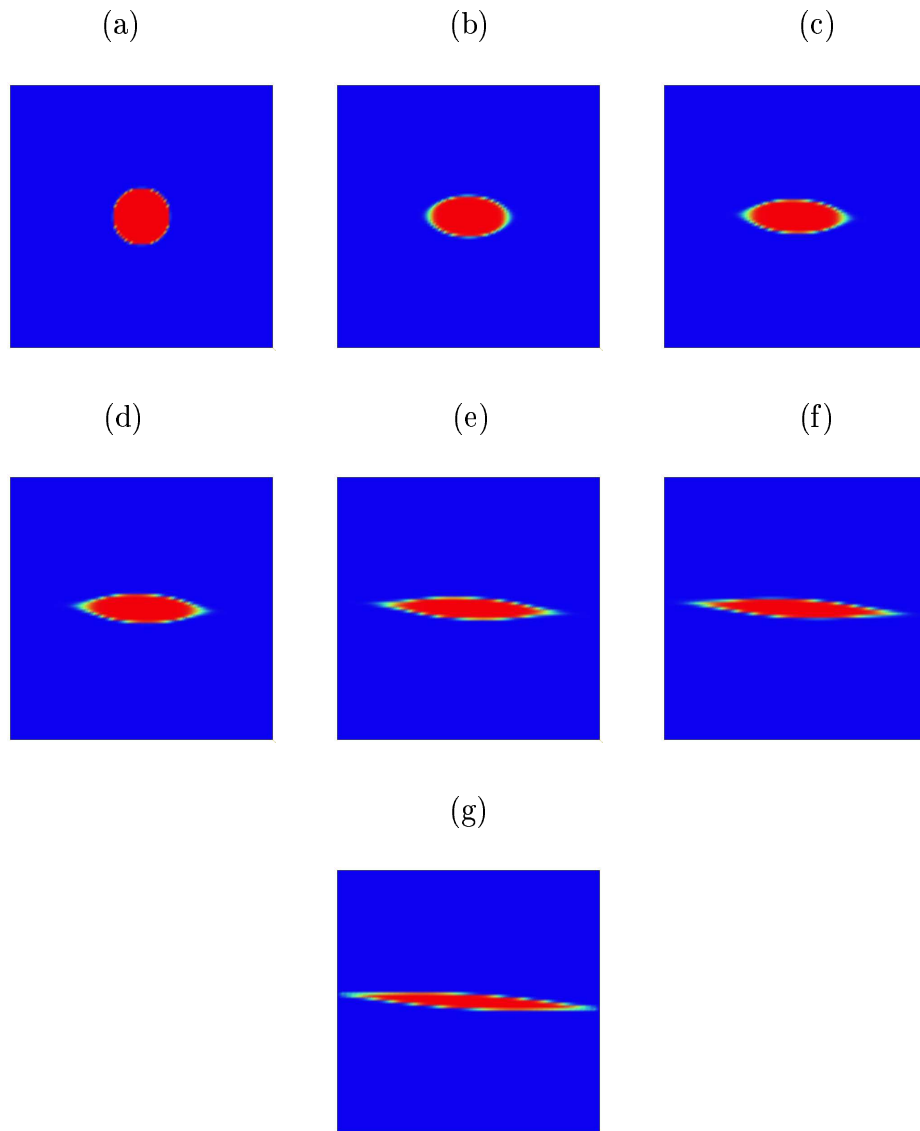
I risultati quantitativi sono riportati in Tab. 4.3. Gli angoli di orientamento calcolati dal nostro modello sono leggermente più grandi di quelli misurati sperimentalmente e di quelli teorici, i parametri di deformazione sono molto vicini sia a quelli sperimentali sia a quelli teorici. Per  $C = 0,511$  la nostra goccia non cessa mai di allungarsi, quindi abbiamo riportato la massima deformazione calcolabile prima che la goccia fuoriesca dai limiti del dominio. In quest'ultimo caso, di conseguenza, i nostri risultati sono solo indicativi.

*Tabella 4.3: Parametro di deformazione ed angolo di orientamento per  $\lambda = 1,08 \times 10^{-3}$  e  $\beta = 0,8$  a diversi numeri di capillarità.*

$C$	Esperimento		Teoria		Modello	
	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,175	0,315	-1,0	0,312	-0,9	0,316	-1,3
0,263	0,531	-1,5	0,516	-1,4	0,519	-1,6
$C$	$L/a$	$\theta$	$L/a$	$\theta$	$L/a$	$\theta$
0,321	2,70	-2,0	1,67	-	1,83	-2,4
0,409	3,77	-3,0	2,77	-	2,86	-3,3
0,453	4,51	-3,0	3,51	-	3,58	-3,4
0,511	6,45	-3,0	5,14	-	4,1	-3,2

#### 4.2.4 Rapporto di viscosità intermedio

Consideriamo un rapporto di viscosità  $\lambda = 0,118$  e un flusso caratterizzato da  $\beta = 0,6$ . Da un punto di vista qualitativo le deformazioni sono molto simili per  $\lambda$  variabile nel range 0,02 e 2,0. Gli estremi della goccia rimangono arrotondati fino al punto critico di non stazionarietà e l'angolo di orientamento cresce in modo monotono. Per  $C > 0,2$  i risultati ottenuti dalla teoria



*Figura 4.4: Forme stazionarie ottenute per  $\lambda = 1,08 \times 10^{-3}$ ,  $\beta = 0,8$  e per diversi valori di  $C$ : (a)  $C = 0,0$ , (b)  $C = 0,175$ , (c)  $C = 0,263$ , (d)  $C = 0,321$ , (e)  $C = 0,409$ , (f)  $C = 0,453$ , (g)  $C = 0,511$ .*

delle piccole deformazioni non sono più attendibili. I risultati delle nostre simulazioni al variare di  $C$  sono mostrati in Fig. 4.5.

In Tab. 4.4 sono riportati i risultati quantitativi. Sia l'angolo di orientamento sia il parametro di deformazione sono molto vicini ai valori sperimentali e teorici. Nella maggior parte dei casi i nostri risultati sono compresi tra il valore teorico e quello sperimentale. Il numero critico di capillarità osservato sperimentalmente è  $C_c = 0,21$ , il nostro modello, invece, dà ancora una forma stazionaria per questo valore di  $C$ .

*Tabella 4.4: Parametro di deformazione ed angolo di orientamento per  $\lambda = 0,118$  e  $\beta = 0,6$  a diversi numeri di capillarità.*

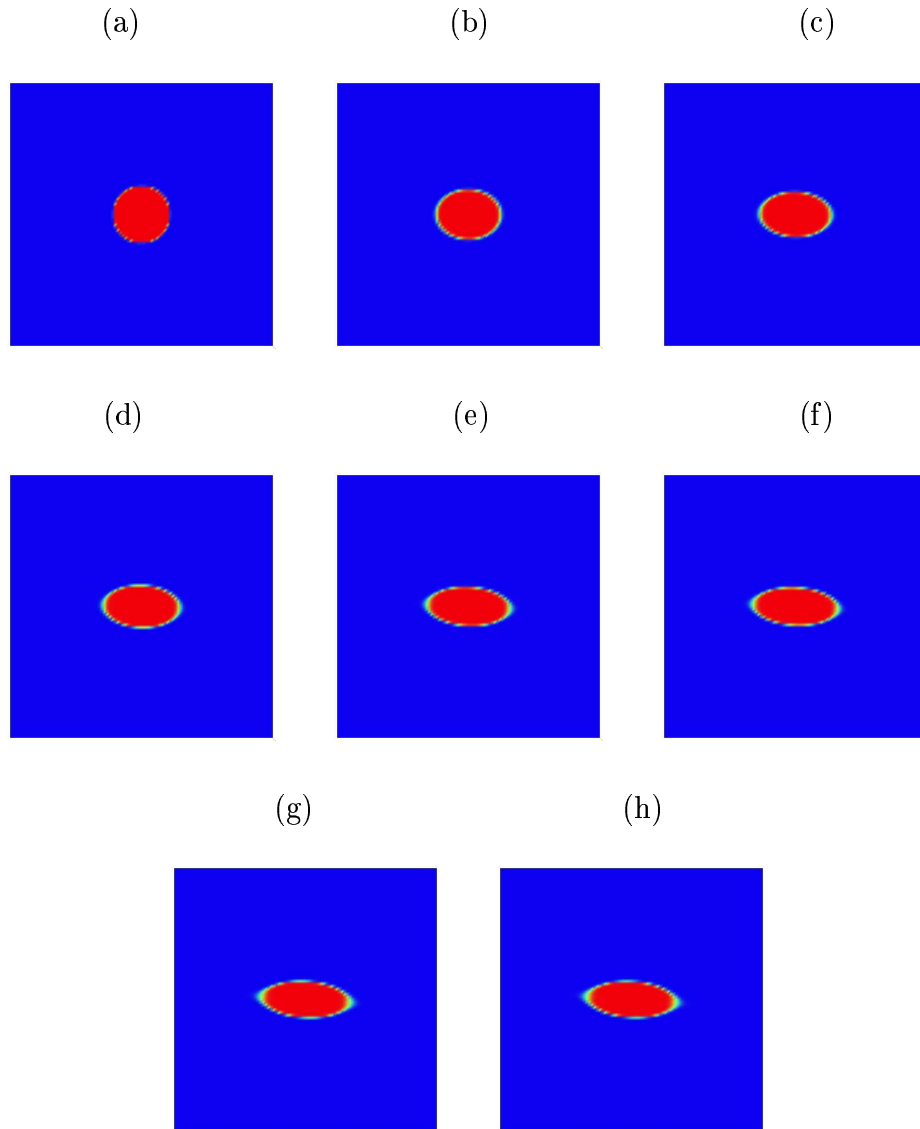
$C$	Esperimento		Teoria		Modello	
	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0718	0,118	-0,0	0,118	-1,0	0,120	-1,0
0,124	0,211	-2,0	0,205	-1,6	0,209	-1,7
0,156	0,274	-3,0	0,262	-2,0	0,274	-2,4
0,196	0,381	-4,0	0,348	-2,5	0,353	-3,1
0,206	0,426	-4,5	0,378	-2,6	0,400	-3,7
0,213	0,479	-5,0	0,408	-2,8	0,437	-4,6
0,215	–	–	0,417	-2,8	0,420	-4,6

### 4.2.5 Rapporto di viscosità alto

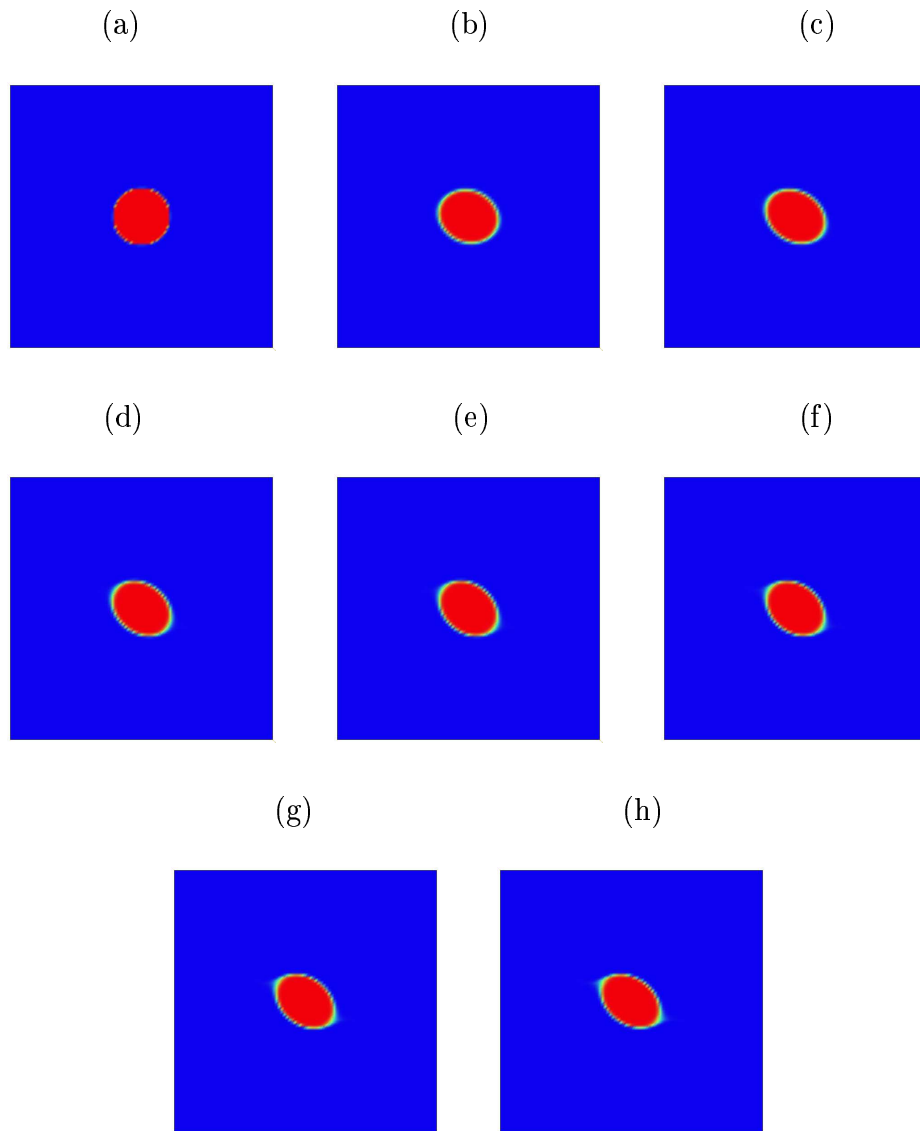
Consideriamo un rapporto di viscosità  $\lambda = 27,3$  e  $\beta = 0,2$ . Per un alto rapporto di viscosità ( $\lambda > 3$ ), la vorticità del flusso influenza fortemente l'orientamento e la deformazione della goccia. L'angolo  $\theta$  comincia a crescere per basse intensità del flusso e supera anche l'angolo di uscita delle linee di flusso (che vale  $-20,9^\circ$  per  $\beta = 0,2$ ).

In flussi con  $\beta = 0,4$  e  $\beta = 0,2$ , Bentley e Leal [33] trovarono un rapporto di viscosità limite, sopra il quale non è più possibile che la goccia si rompa, indipendentemente dall'intensità del flusso. Questo limite è all'incirca 27 per  $\beta = 0,2$ . Dal momento che abbiamo fissato  $\lambda = 27,3$  nella nostra simulazione, non ci si aspetta che la goccia si rompa.

Come accade anche sperimentalmente, nelle nostre simulazioni la goccia non è molto deformata anche ad alti regimi del flusso (vedi Fig. 4.6), in ogni caso le nostre gocce sono leggermente più allungate rispetto a quanto atteso.



*Figura 4.5: Forme stazionarie ottenute per  $\lambda = 0,118$ ,  $\beta = 0,6$  e per diversi valori di  $C$ : (a)  $C = 0,0$ , (b)  $C = 0,0718$ , (c)  $C = 0,124$ , (d)  $C = 0,156$ , (e)  $C = 0,196$ , (f)  $C = 0,206$ , (g)  $C = 0,213$ , (h)  $C = 0,215$ .*



*Figura 4.6: Forme stazionarie ottenute per  $\lambda = 0,118$ ,  $\beta = 0,6$  e per diversi valori di  $C$ : (a)  $C = 0,0$ , (b)  $C = 0,0718$ , (c)  $C = 0,124$ , (d)  $C = 0,156$ , (e)  $C = 0,196$ , (f)  $C = 0,206$ , (g)  $C = 0,213$ , (h)  $C = 0,215$ .*

I risultati quantitativi sono raccolti in Tab. 4.5. Anche in questo caso sono vicini a quelli sperimentali e teorici.

Tabella 4.5: Parametro di deformazione ed angolo di orientamento per  $\lambda = 27,3$  e  $\beta = 0,2$  a diversi numeri di capillarità.

$C$	Esperimento		Teoria		Modello	
	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$	$D_f$	$\theta$
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0821	0,0635	-28,0	0,0640	-28,3	0,0636	-27,2
0,164	0,0786	-34,0	0,0767	-34,9	0,0807	-34,7
0,246	0,0788	-35,0	0,0805	-37,5	0,0976	-36,6
0,329	0,0798	-35,0	0,0820	-38,7	0,1111	-37,3
0,411	0,0855	-40,0	0,0827	-39,3	0,1190	-40,1
0,489	0,0844	-43,0	0,0830	-39,6	0,1377	-41,3
0,544	0,0925	-41,0	0,0831	-39,7	0,1529	-40,2

## 4.3 Collisione di gocce

Un altro fenomeno ampiamente studiato è quello della collisione di due gocce di un dato fluido immerse in un secondo fluido. Noi confrontiamo qualitativamente i nostri risultati riguardo alla collisione di gocce con quelli numerici presentati da Shin e Juric [34].

Daremo un breve riepilogo del problema così come è stato proposto da Shin e Juric; descriveremo i criteri di confronto e il setting delle nostre simulazioni; infine presenteremo i nostri risultati.

### 4.3.1 Descrizione del problema

Shin e Juric [34] utilizzano un metodo numerico detto *level contour reconstruction method* per simulare la collisione di gocce in tre dimensioni.

Le collisioni fra gocce possono essere suddivise in due grandi categorie: collisioni frontali e collisioni fuori asse. Nelle collisioni frontali le gocce si muovono l'una verso l'altra lungo un asse comune, mentre, nelle collisioni fuori asse, le gocce si muovono lungo assi paralleli ma non coincidenti.

In questo sistema abbiamo due gocce di diametro  $D$ , viscosità dinamica  $\mu_d$  e densità  $\rho_d$  sospese in un secondo fluido di viscosità dinamica  $\mu_o$  e densità  $\rho_o$ .

Il coefficiente di tensione superficiale tra i due fluidi è  $\sigma$ . Una forza agisce sulle due gocce facendole muovere l'una verso l'altra con velocità relativa  $U$ . Il fenomeno è governato dal rapporto di viscosità  $\lambda = \mu_d/\mu_o$ , dal rapporto di densità  $k = \rho_d/\rho_o$  e da tre parametri adimensionali:

- numero di Weber:

$$We = \frac{\rho_d D U^2}{\sigma}, \quad (4.11)$$

- numero di Reynolds:

$$Re = \frac{\rho_d D U}{\mu_d}, \quad (4.12)$$

- parametro di impatto:

$$\eta = \frac{\chi}{D}, \quad (4.13)$$

dove  $\chi$  è la distanza tra gli assi di movimento delle gocce prima della collisione. Nel caso di collisione frontale  $\chi = 0$ .

### 4.3.2 Setting delle simulazioni

Lo scopo di questo confronto qualitativo è verificare che il nostro modello sia in grado di catturare le caratteristiche principali delle collisioni tra gocce che variano fortemente a seconda dei numeri di Reynolds e di Weber.

Il confronto è fondamentalmente basato sull'osservazione visuale dell'evoluzione della superficie delle gocce nel tempo.

Il nostro modello non può riprodurre una differenza di densità (che è, invece, sempre presente nelle simulazioni riportate da Shin e Juric [34]), così, mentre il numero di Reynolds, che non dipende dalle densità, può essere posto come in [34], il numero di Weber viene riscritto dividendolo per  $\rho_d$ .

In pratica, si suppone  $\rho_o = 0, 1$ , si determina  $\rho_d = k/\rho_o$  e il numero di Weber simulato è quello dato in [34] diviso per  $\rho_d$ , perché, nel nostro modello,  $\rho_o = \rho_d$ .

Una volta che  $Re$  e  $We$  sono fissati,  $U$  e  $\sigma$  vengono calcolati dalle equazioni (4.12) e (4.11) rispettivamente. Inoltre, dato un valore,  $\nu_o$ , per la viscosità cinematica del fluido circostante e calcolato il rapporto delle viscosità cinematiche  $\xi = \nu_d/\nu_o = \lambda/k$ , poniamo di conseguenza  $\nu_d = \xi\nu_o$ .

Consideriamo due casi di collisione frontale ed un caso di collisione fuori asse. In Tab. 4.6 sono riportati i parametri usati nelle simulazioni (il numero di Weber è quello dato in [34], cioè non è diviso per  $\rho_d$ ).



Tabella 4.6: Parametri utilizzati nelle simulazioni di collisioni tra due gocce. I valori sono espressi in unità di griglia.

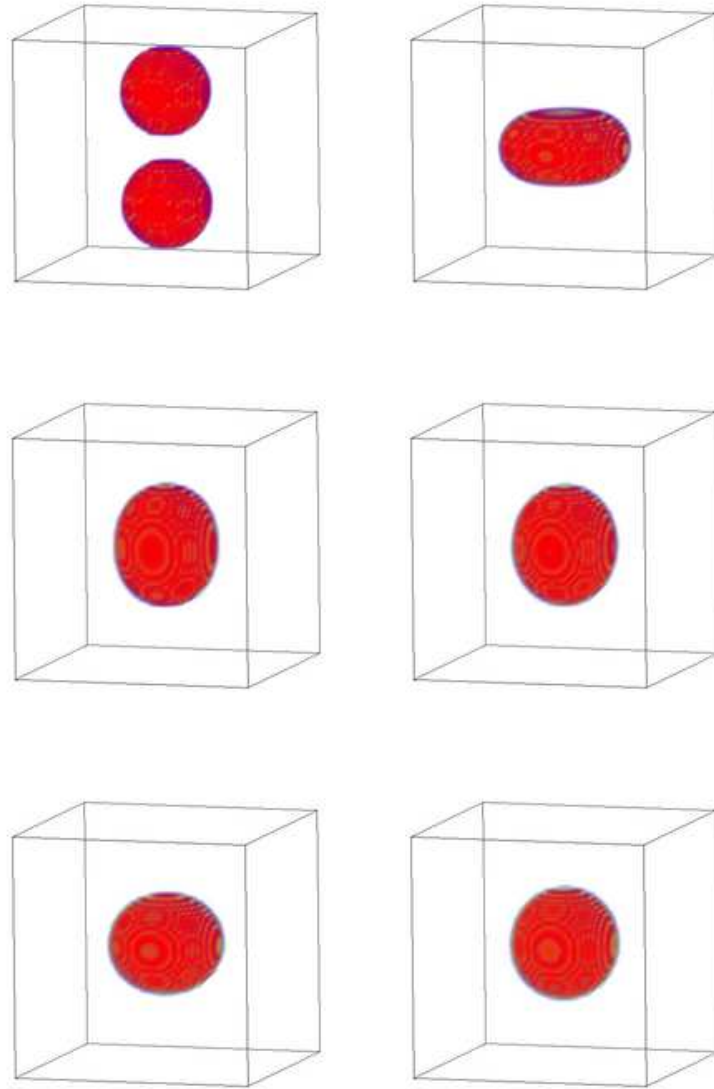
	Simulazione num.		
	1	2	3
$Re$	20	127	75
$We$	15	300	20
$U$	0,042	0,036	0,026
$\sigma$	0,0047	0,0010	0,0083
$\eta$	0	0	0,35
$\lambda$	500	200	250
$k$	20	30	30
$\xi$	25	6,67	8,33
$\nu_d$	0,042	0,0112	0,014
$\nu_o$	0,00168	0,00168	0,00168
$\omega_d$	1,60	1,874	1,845
$\omega_o$	1,98	1,98	1,98
$\omega_\alpha$	1,995	1,995	1,992
$D$	20	20	20
$nx \times ny \times nz$	$60 \times 60 \times 60$	$80 \times 80 \times 80$	$80 \times 80 \times 80$

### 4.3.3 Risultati numerici

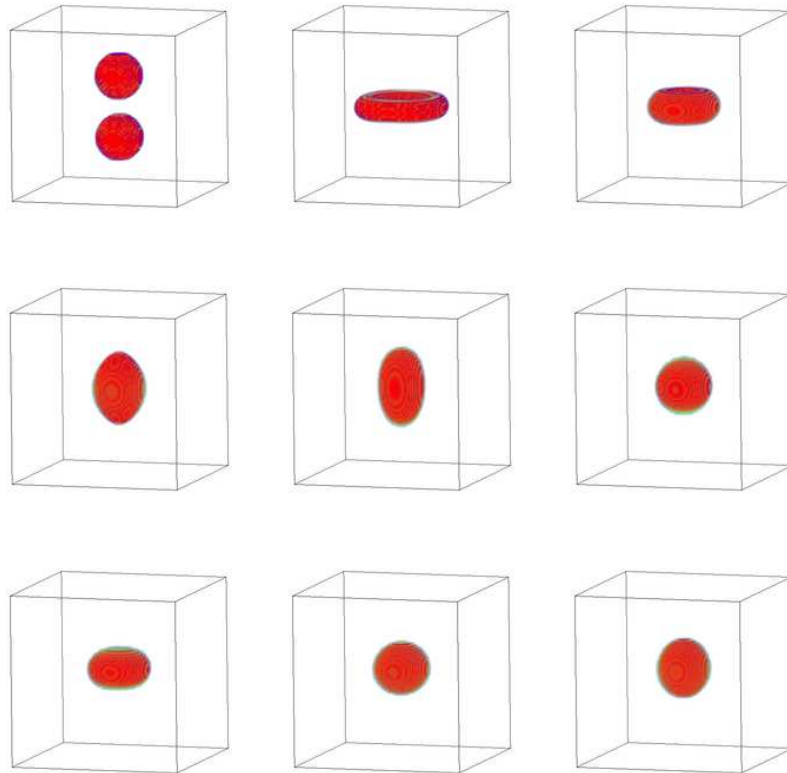
Il primo caso di collisione frontale (Sim. num. 1 in Tab. 4.6) è caratterizzato da bassa energia ed alta tensione superficiale. Con numeri di Reynolds e di Weber così bassi, le gocce si fondono in un'unica goccia che tende a ritornare ad una forma sferica dopo avere effettuato una sola, piccola oscillazione come mostrato in Fig. 4.7.

Consideriamo ora un sistema di collisione frontale a più alta energia e più bassa tensione superficiale (Sim. num. 2 in Tab. 4.6). In questo caso, la singola goccia che si ottiene dalla collisione tende a deformarsi di più rispetto a prima. Con questo numero di Reynolds più alto e con una tensione superficiale inferiore, quando collidono, le gocce raggiungono una forma piatta, poi, l'unica goccia risultante, si allunga e comincia ad oscillare con un'ampiezza di oscillazione decrescente, infine, tende a riportarsi ad una forma sferica (vedi Fig. 4.8).

Consideriamo, infine, un caso di collisione fuori asse (Sim. num. 3 in Tab. 4.6). Con un parametro di impatto basso come quello usato qui, le



*Figura 4.7: Collisione frontale con  $Re = 20$ ,  $We = 15$  e  $\xi = 25$ .*



*Figura 4.8: Collisione frontale con  $Re = 127$ ,  $We = 300$  and  $\xi = 6, 67$ .*

gocce si uniscono e formano una sola goccia che ruota ed oscilla. L'ampiezza dell'oscillazione diminuisce con il passare del tempo e, ancora una volta, la goccia tende ad una forma sferica (vedi Fig. 4.9).

I risultati ottenuti sono in buon accordo con quelli di Shin e Juric [34] in tutti i casi considerati. Si possono osservare gli stessi andamenti per le oscillazioni e, per quel che riguarda la collisione fuori asse, le stesse rotazioni.

## 4.4 Goccia che cade e flusso attorno a due ostacoli

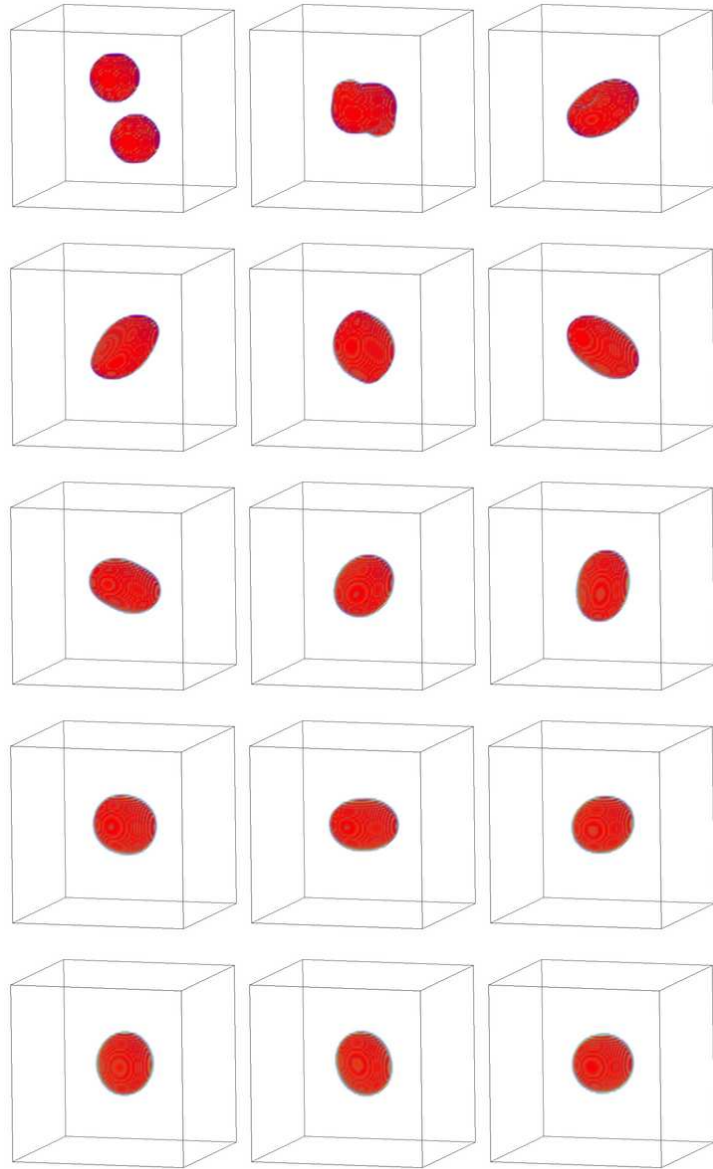
Presentiamo due simulazioni numeriche allo scopo di illustrare altre possibili applicazioni del nostro modello. In Tab. 4.7 sono riportati i parametri usati nelle due simulazioni.

*Tabella 4.7: Paramteri utilizzati nelle simulazioni della goccia che cade e del flusso attorno a due ostacoli. I valori sono espressi in unità di griglia.*

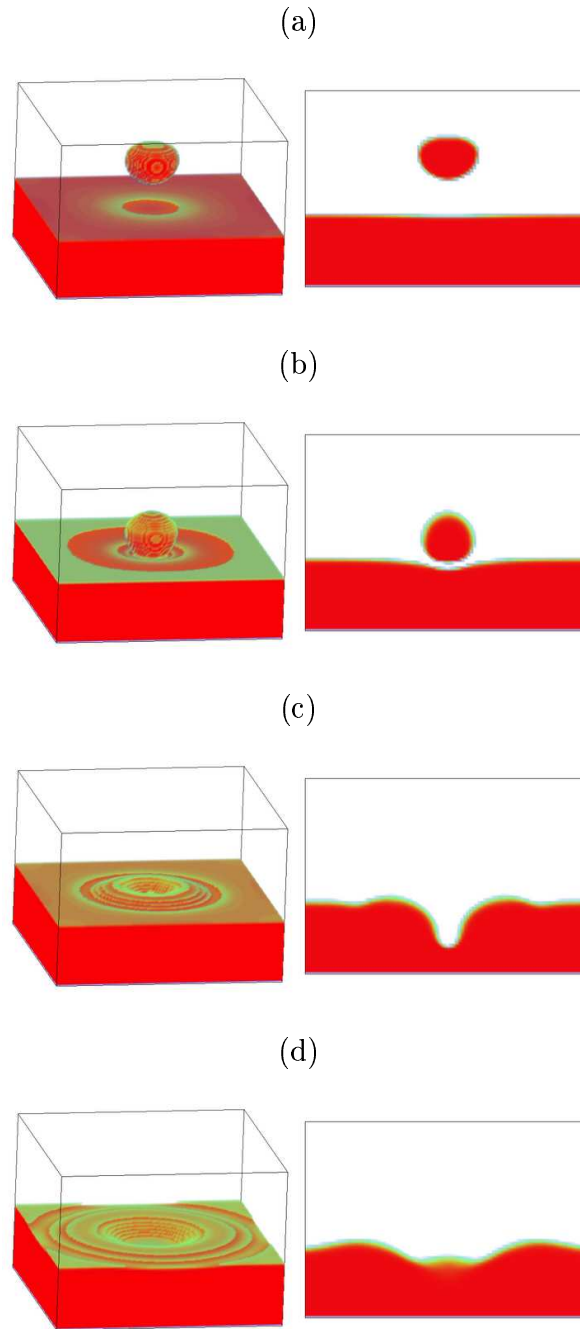
	Goccia	Ostacoli
$\nu_r$	0,018519	0,004274
$\nu_b$	0,000418	0,000418
$\omega_r$	1,8	1,95
$\omega_b$	1,995	1,995
$\omega_\alpha$	1,95	1,95
$\sigma$	0,03	0,005
$nx \times ny \times nz$	$100 \times 100 \times 70$	$50 \times 50 \times 100$

Nella prima simulazione, una goccia di fluido rosso è posta sopra ad un letto dello stesso fluido e la restante parte del dominio è riempita dal fluido blu. La goccia cade ad una data velocità  $U = 0,1 \delta x / \delta t$ . Il centro della goccia è inizialmente posto in posizione  $(50, 50, 55)$  e il diametro è  $D = 20 \delta x$ . Lo strato di fluido è alto 25 unità di griglia. Il fondo del dominio si assume solido, quindi si utilizzano le condizioni di bounce back su quel lato. Sul lato superiore, sono imposte delle condizioni di bordo aperto, cioè le condizioni di outlet descritte nel paragrafo 3.4.4. Nei restanti quattro lati si hanno condizioni periodiche.

Il risultato di questa simulazione è illustrato in Fig. 4.10, dove solo il fluido rosso viene rappresentato, mentre il blu è trasparente per rendere chiara e comprensibile l'immagine.



*Figura 4.9: Collisione fuori asse con  $Re = 75$ ,  $We = 20$ ,  $\xi = 8,33$  e  $\eta = 0,35$ .*



*Figura 4.10: Colonna sinistra: funzione colore  $\phi$  per diversi time steps: (a)  $t = 200$ , (b)  $t = 500$ , (c)  $t = 800$ , (d)  $t = 1160$ . Colonna destra: funzione colore su una sezione parallela al piano  $xz$  e passante per il centro del dominio. I time steps sono gli stessi della colonna sinistra.*

Nella seconda simulazione, due ostacoli sono posti all'interno di un canale riempito dal fluido blu. Il fluido rosso entra dal lato superiore del dominio con una velocità fissata  $U = 0,1 \delta x / \delta t$ . Per imporre questa velocità si utilizzano le condizioni di inlet con interpolazione [13, 23] (vedi paragrafo 3.4.3). Sui lati del dominio e sugli ostacoli si utilizza la condizione di bounce back. Sul fondo si impone la condizione di outlet (vedi paragrafo 3.4.4). Il risultato della simulazione è illustrato in Fig. 4.11, dove, come sopra, viene visualizzato solo il fluido rosso.

## 4.5 Separazione di fasi

Una simulazione molto comune, per i modelli di fluidi a più componenti, è quella nota come *Spinodal Decomposition*: il processo di separazione di una mistura di fluidi che, in condizioni normali, sono immiscibili e che, però, sono inizialmente mescolati (questo può avvenire, ad esempio, agitando energicamente i due fluidi, oppure scaldandoli al di sopra di una temperatura critica e poi lasciandoli raffreddare). La mistura, lasciata a riposo, comincia a separarsi velocemente e si formano regioni sempre più grandi occupate da un solo fluido.

Per simulare questo processo abbiamo considerato un dominio bidimensionale quadrato, i parametri utilizzati sono riportati in Tab. 4.8. Su tutti i lati si impongono condizioni periodiche. Ogni punto del dominio è inizial-

*Tabella 4.8: Parametri utilizzati nella simulazione della separazione di fasi. I valori sono espressi in unità di griglia.*

	Separazione di fasi
$\nu_r$	0,00084
$\nu_b$	0,04167
$\omega_r$	1,99
$\omega_b$	1,6
$\omega_\alpha$	1,995
$\sigma$	0,002
$nx \times ny$	$150 \times 150$
$T$	30000

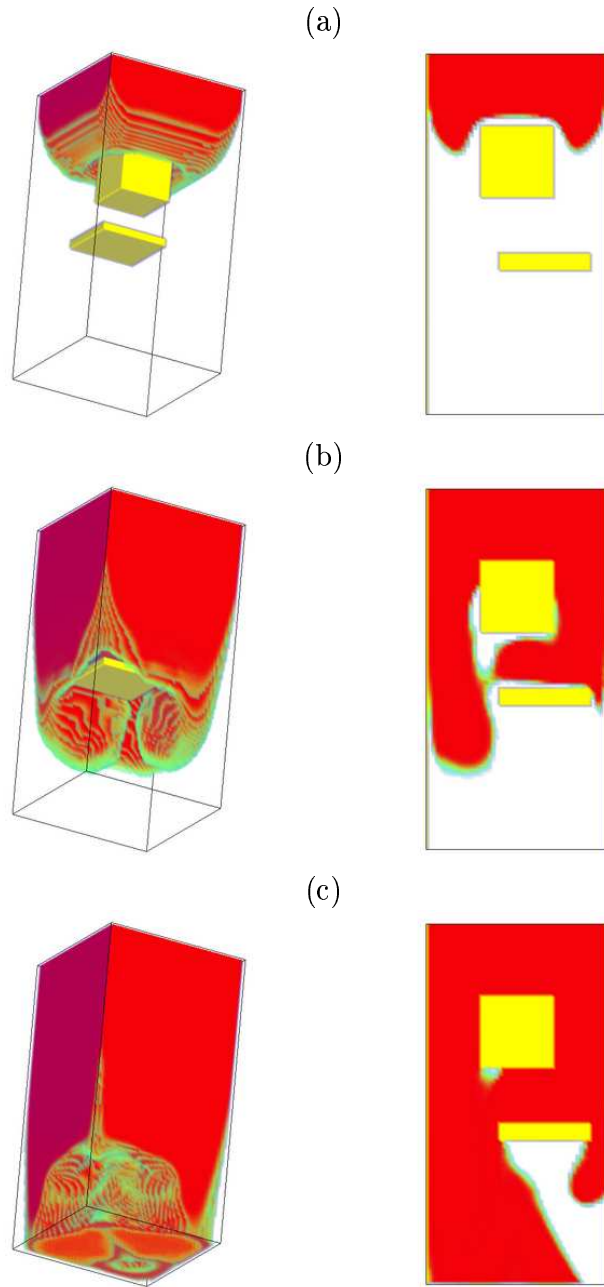
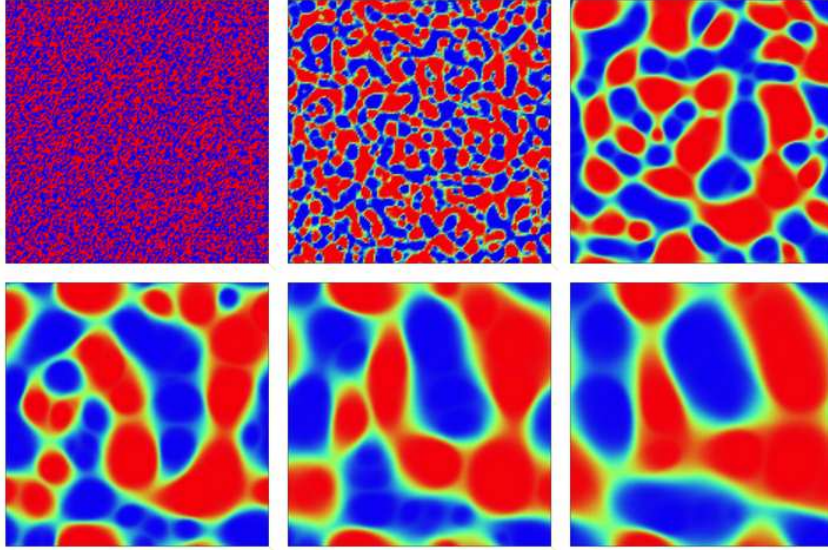


Figura 4.11: Colonna sinistra: funzione colore  $\phi$  per diversi time steps: (a)  $t = 390$ , (b)  $t = 1020$ , (c)  $t = 1650$ . Colonna destra: funzione colore su una sezione parallela al piano  $xz$  e passante per il centro del dominio. I time steps sono gli stessi della colonna sinistra.



mente occupato dal fluido rosso o da quello blu con una probabilità del 50 %. Quindi, allo stato iniziale, i due fluidi sono mescolati in modo uniforme. All'aumentare del numero delle iterate, si cominciano a formare zone occupate da un solo fluido che si uniscono creando regioni sempre più grandi, come illustrato in Fig. 4.12.



*Figura 4.12: Separazione di fasi: la prima immagine mostra la situazione iniziale (iterata 0), e procedendo da sinistra verso destra e dall'alto verso il basso è rappresentato l'evolversi della simulazione.*

## 4.6 Derivazione dell'equazione macroscopica per la funzione colore $\alpha$

In questo paragrafo deriviamo l'equazione macroscopica che governa l'evoluzione della funzione colore  $\alpha(\mathbf{x}, t)$  utilizzando l'analisi multi-scale. Ricordiamo che le distribuzioni di equilibrio del colore sono date da

$$\alpha_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \frac{\alpha(\mathbf{x}, t) f_i(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}, \quad i = 0, \dots, l,$$

dove preferiamo indicare  $\alpha_i^{eq}$  con il simbolo  $\alpha_i^{(0)}$  in vista dell'espansione delle distribuzioni  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$  attorno all'equilibrio.

Inoltre l'equazione cinetica è data da

$$\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \alpha_i(\mathbf{x}, t) - \omega_\alpha(\alpha_i(\mathbf{x}, t) - \alpha_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)), \quad i = 0, \dots, l. \quad (4.14)$$

Dalla definizione delle  $\alpha_i^{(0)}$  segue immediatamente che è soddisfatta la condizione di *conservazione del colore*:

$$\alpha(\mathbf{x}, t) = \sum_i \alpha_i(\mathbf{x}, t) = \sum_i \alpha_i^{(0)}(\mathbf{x}, t).$$

I momenti di ordine superiore delle  $\alpha_i^{(0)}$  sono dati da:

$$\sum_i c_{ia} \alpha_i^{(0)} = \frac{\alpha}{\rho} \sum_i c_{ia} f_i = \alpha u_a, \quad a = 1, \dots, D \quad (4.15)$$

$$\sum_i c_{ia} c_{ib} \alpha_i^{(0)} = \frac{\alpha}{\rho} \sum_i c_{ia} c_{ib} f_i = \frac{\alpha}{\rho} P_{ab} \quad a, b = 1, \dots, D, \quad (4.16)$$

dove  $D$  è la dimensione dello spazio in cui lavoriamo.

Le funzioni di distribuzione del colore  $\alpha_i$  vengono espanse attorno ad  $\alpha_i^{(0)}$ :

$$\alpha_i = \alpha_i^{(0)} + \epsilon \alpha_i^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (4.17)$$

Dall'equazione (4.14), eseguendo un'espansione di Taylor di  $\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1)$  attorno al punto  $(\mathbf{x}, t)$  si può calcolare un'approssimazione di  $\alpha_i^{(1)}$ :

$$\begin{aligned} \alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) &= \alpha_i(\mathbf{x}, t) + \partial_t \alpha_i(\mathbf{x}, t) + \partial_{x_a} c_{ia} \alpha_i(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \alpha_i(\mathbf{x}, t) - \omega_\alpha(\alpha_i(\mathbf{x}, t) - \alpha_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)). \end{aligned}$$

Quindi

$$\omega_\alpha \alpha_i^{(0)} - \omega_\alpha \alpha_i = \partial_t \alpha_i + \partial_{x_a} c_{ia} \alpha_i + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (4.18)$$

Inserendo l'espansione (4.17), nel termine a sinistra, dell'ultima equazione, otteniamo

$$\epsilon \alpha_i^{(1)} = -\frac{1}{\omega_\alpha} \partial_{x_a} c_{ia} \alpha_i - \frac{1}{\omega_\alpha} \partial_t \alpha_i + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (4.19)$$

Inoltre, si utilizzano le seguenti espansioni per le derivate temporali e spaziali [47]:

$$\partial_t \rightarrow \epsilon^2 \partial_t^{(2)}, \quad (4.20)$$

$$\partial_{x_a} \rightarrow \epsilon \partial_{x_a}^{(1)}. \quad (4.21)$$

Dalla (4.14), sommando su  $i$ , otteniamo la relazione

$$0 = \sum_i [\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - \alpha_i(\mathbf{x}, t)].$$

Espandendo  $\alpha_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1)$  fino al secondo ordine attorno al punto  $(\mathbf{x}, t)$ , inserendo le espansioni (4.17), (4.20) e (4.21) possiamo scrivere

$$0 = \sum_i \left[ \epsilon^2 \partial_t^{(2)} \alpha_i + \epsilon \partial_{x_a}^{(1)} c_{ia} \alpha_i + \frac{1}{2} \epsilon^2 \partial_{x_a}^{(1)} \partial_{x_b}^{(1)} \alpha_i + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right].$$

Consideriamo ora, uno ad uno, i termini dell'equazione precedente:

- termine della derivata temporale

$$\epsilon^2 \partial_t^{(2)} \sum_i \alpha_i = \epsilon^2 \partial_t^{(2)} \alpha \rightarrow \partial_t \alpha.$$

- termine della derivata spaziale del primo ordine

$$\begin{aligned} \epsilon \partial_{x_a}^{(1)} \sum_i c_{ia} \alpha_i &= \epsilon \partial_{x_a}^{(1)} \sum_i c_{ia} \alpha_i^{(0)} + \epsilon^2 \partial_{x_a}^{(1)} \sum_i c_{ia} \alpha_i^{(1)} = \\ &= \epsilon \partial_{x_a}^{(1)} (\alpha u_a) - \frac{\epsilon^2}{\omega_\alpha \rho} \partial_{x_a}^{(1)} \partial_{x_b}^{(1)} (P_{ab}) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \rightarrow \\ &\rightarrow \partial_{x_a} (\alpha u_a) - \frac{1}{\omega_\alpha \rho} \partial_{x_a} \partial_{x_b} (P_{ab}), \end{aligned}$$

dove sono state utilizzate le equazioni (4.15), (4.16) e (4.19) e si sono considerati solo i termini fino al secondo ordine in  $\epsilon$ .

- termine della derivata spaziale del secondo ordine

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \epsilon^2 \partial_{x_a}^{(1)} \partial_{x_b}^{(1)} \sum_i c_{ia} c_{ib} \alpha_i &= \frac{1}{2} \epsilon^2 \partial_{x_a}^{(1)} \partial_{x_b}^{(1)} \sum_i c_{ia} c_{ib} \alpha_i^{(0)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) = \\ &= \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{\alpha}{\rho} \partial_{x_a}^{(1)} \partial_{x_b}^{(1)} (P_{ab}) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\rho} \partial_{x_a} \partial_{x_b} (P_{ab}), \end{aligned}$$

dove è stata utilizzata l'equazione (4.16) e si sono considerati solo i termini fino al secondo ordine in  $\epsilon$ .

Sommando i termini del primo e del secondo ordine, si ottiene

$$\partial_t \alpha + \partial_{x_a}(\alpha u_a) = \frac{\alpha}{\rho} \left( \frac{1}{\omega_\alpha} - \frac{1}{2} \right) \partial_{x_a} \partial_{x_b} (P_{ab}).$$

Dal momento che  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  nel limite di un fluido incomprimibile, si ottiene, infine

$$\partial_t \alpha + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha = \frac{\alpha}{\rho} \left( \frac{1}{\omega_\alpha} - \frac{1}{2} \right) \partial_{x_a} \partial_{x_b} (P_{ab}).$$

## Capitolo 5

# Un automa cellulare per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle

Come abbiamo già accennato nell'introduzione, il nostro obiettivo è la definizione di un modello matematico per la simulazione di alcuni fenomeni fisici relativi all'estrazione del caffè espresso.

Nel Capitolo 4 abbiamo messo il primo mattone del nostro modello: siamo ora in grado di simulare la dinamica di due fluidi e il movimento dell'interfaccia tra i due.

C'è un altro ingrediente fondamentale che non è stato ancora considerato: il *caffè*.

Dobbiamo, innanzitutto, introdurre la presenza del caffè nel modello, ma questo non è sufficiente. Infatti, il caffè non è una componente statica del fenomeno, esso interagisce con il fluido che tende a staccare, dalla polvere di caffè, le particelle più fini e a trascinarle verso il fondo del filtro. Ne risulta un aumento della quantità di caffè sul fondo che ostruisce, in parte, il filtro riducendo, così, il flusso di caffè in uscita.

Questo aspetto del fenomeno diventa particolarmente importante dopo la fase di bagnazione, quando, cioè, la pressione dell'acqua raggiunge il suo valore massimo (9 bar).

Per simulare questo fenomeno di erosione, trasporto e deposito delle polveri fini del caffè, abbiamo definito un automa cellulare con regole di evoluzione probabilistiche prendendo spunto dai lavori di Chopard, Masselot e Dupuis [48, 49, 50] per quel che riguarda la filosofia dello schema e l'imple-

mentazione della parte relativa al trasporto.

In questo capitolo descriveremo il modo in cui il mezzo poroso viene creato e presenteremo il nostro modello per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle.

## 5.1 Generazione del mezzo poroso

Il caffè è, per noi, semplicemente un mezzo poroso, cioè un materiale solido non compatto, che presenta, quindi, degli spazi vuoti. In particolare, il materiale solido è disposto in modo casuale e uniforme, con questo si intende che, a priori, non ci sono regioni in cui il mezzo poroso è più compatto.

Il nostro mezzo poroso sarà dunque costituito da alcuni nodi solidi disposti casualmente e uniformemente all'interno del dominio.

Ricordiamo che i nodi solidi si distinguono da quelli occupati dal fluido perché la loro regola di evoluzione è diversa, essi vengono aggiornati con la condizione di bounce back (vedi paragrafo 3.4.2).

Descriviamo ora la tecnica usata per la creazione del mezzo poroso. Per semplicità faremo riferimento ad un dominio bidimensionale rettangolare. Lo schema può essere esteso in modo diretto al caso tridimensionale e ad una qualunque forma del dominio.

Consideriamo la regione del dominio in cui è possibile inserire il mezzo poroso, sia essa un rettangolo composto da  $m \times n$  punti della griglia:

$$W = \{(x, y) \text{ t.c. } x = 1, \dots, m, \text{ e } y = 1, \dots, n\}.$$

Il mezzo poroso è costituito da rettangoli di dimensione  $l \times h$  che vengono aggiunti randomicamente fino ad ottenere una percentuale di materiale solido fissata  $P_s$ .

### 5.1.1 Rettangoli di dimensione $1 \times 1$

Il caso più semplice è quello della creazione di blocchetti solidi di dimensione  $1 \times 1$ , cioè rettangoli che occupano un solo punto della griglia.

Fissata la percentuale di materiale solido che si vuole ottenere  $P_s$ , si consideri l'insieme di tutti i punti "candidati" ad essere occupati dal materiale solido  $V$ . Sia, inoltre,  $S$  l'insieme di tutti i punti in cui è stato posizionato il materiale e che sono, dunque, solidi. All'inizio, chiaramente, si ha:

$$S = \emptyset,$$
$$V = \{(x, y) \text{ t.c. } x = 1, \dots, m, \text{ e } y = 1, \dots, n\} \equiv W.$$

Si estrae casualmente un punto  $(\bar{x}, \bar{y})$  dall'insieme  $V$ , il punto viene occupato dal materiale solido, quindi viene inserito nell'insieme dei nodi solidi ed eliminato dall'insieme di quelli vuoti. Si eseguono, cioè, le due seguenti operazioni:

$$\begin{aligned} S &\rightarrow S \cup \{(\bar{x}, \bar{y})\}, \\ V &\rightarrow V \setminus \{(\bar{x}, \bar{y})\}. \end{aligned}$$

Il procedimento si ripete controllando ad ogni estrazione quale percentuale di mezzo poroso si è raggiunta, la frazione di mezzo poroso rispetto al dominio è data da

$$\frac{|S|}{|W|},$$

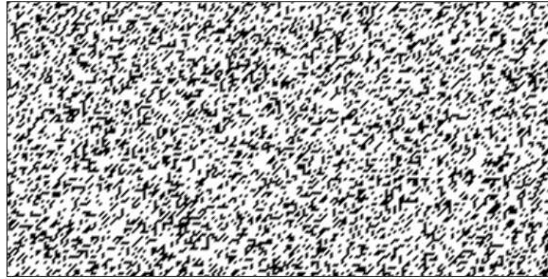
dove il simbolo  $|\cdot|$  indica la cardinalità dell'insieme. Ci si interrompe non appena risulta verificata la condizione:

$$P_s \leq \frac{|S|}{|W|}. \quad (5.1)$$

Può, pertanto, accadere che la frazione di materiale solido ottenuta superi la soglia specificata, l'errore è comunque superiormente limitato da

$$\max(err) = \frac{1 \times 1}{|W|}.$$

In figura Fig. 5.1 è mostrato un esempio di mezzo poroso bidimensionale con rettangoli  $1 \times 1$  e frazione del mezzo poroso  $P_s = 30\%$ .



*Figura 5.1: Mezzo poroso costituito da rettangoli di dimensione  $1 \times 1$  e  $P_s = 30\%$ . Il dominio è discretizzato con  $200 \times 100$  punti nodali.*

### 5.1.2 Rettangoli di dimensione $l \times h$

L'idea è del tutto analoga a quella vista sopra, in questo caso, però, il punto  $(\bar{x}, \bar{y}) \in V$  selezionato casualmente, rappresenta l'angolo in basso a sinistra del rettangolo di dimensione  $l \times h$  che si vuole inserire.

Se viene estratto il punto  $(\bar{x}, \bar{y})$ , si formerà il rettangolo dato dai punti

$$R = \{(\bar{x} + i, \bar{y} + j) \text{ t.c. } i = 1, \dots, l, \text{ e } j = 1, \dots, h\}.$$

Così, la creazione di questo rettangolo solido provoca l'eliminazione dei punti di  $R$  da  $V$  e il loro inserimento in  $S$ :

$$\begin{aligned} S &\rightarrow S \cup R, \\ V &\rightarrow V \setminus R. \end{aligned}$$

Naturalmente potrebbe accadere che il punto  $(\bar{x}, \bar{y})$  determini un rettangolo non tutto contenuto nella regione del dominio che abbiamo a disposizione, in questo caso si estrae un nuovo punto.

Il procedimento viene ripetuto iterativamente e il ciclo si interrompe quando risulta verificata la condizione (5.1). Si osservi, però, che l'errore massimo che si può commettere è dato da

$$\max(err) = \frac{l \times h}{|W|}.$$

A parità di dimensioni della griglia, l'errore aumenta all'aumentare delle dimensioni dei rettangoli; mentre fissando le dimensioni dei rettangoli, l'errore diminuisce al crescere della finezza della griglia.

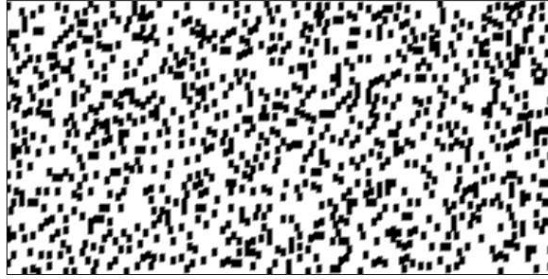
In Fig. 5.2 è rappresentato un mezzo poroso composto da rettangoli di dimensione  $2 \times 3$  con  $P_s = 30\%$ .

### 5.1.3 Possibili tipi di mezzi porosi

Si possono costruire anche mezzi porosi con grani di dimensioni diverse tra loro. Supponiamo, ad esempio, di voler costruire un mezzo poroso con una percentuale  $P_s^1$  di rettangoli di dimensione  $l_1 \times h_1$  e una percentuale  $P_s^2$  di rettangoli di dimensione  $l_2 \times h_2$ .

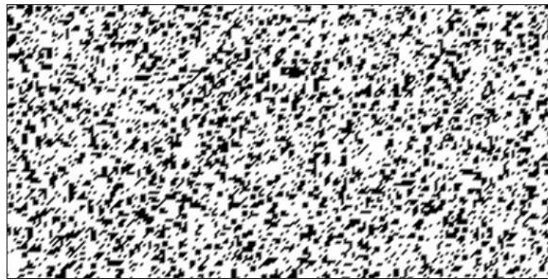
Sarà sufficiente applicare l'algoritmo alla percentuale  $P_s^1$  inserendo rettangoli  $l_1 \times h_1$ , e, sulla parte di dominio rimasta libera, si inseriranno rettangoli  $l_2 \times h_2$  fino ad ottenere una percentuale complessiva di mezzo poroso pari a  $P_s = P_s^1 + P_s^2$  su tutto il dominio.





*Figura 5.2: Mezzo poroso costituito da rettangoli di dimensione  $2 \times 3$  e  $P_s = 30\%$ . Il dominio è discretizzato con  $200 \times 100$  punti nodali.*

Un esempio di mezzo poroso con rettangoli di diverse dimensioni è dato in Fig. 5.3. In particolare la frazione di mezzo poroso complessiva è  $P_s = 30\%$ , di cui il 15% è costituito da rettangoli  $1 \times 1$  e il restante 15% da rettangoli  $2 \times 2$ .



*Figura 5.3: Mezzo poroso costituito da rettangoli di dimensioni diverse tra loro.  $l_1 \times h_1 = 1 \times 1$  con  $P_s^1 = 15\%$  e  $l_2 \times h_2 = 2 \times 2$  con  $P_s^2 = 15\%$ . Il dominio è discretizzato con  $200 \times 100$  punti nodali.*

Infine, è possibile definire regioni in cui la percentuale di materiale solido è maggiore ed altre in cui è minore, come mostrato in Fig. 5.4, dove la metà sinistra del dominio ha una frazione di mezzo poroso pari al 15%, mentre nella parte destra la concentrazione è del 35%.

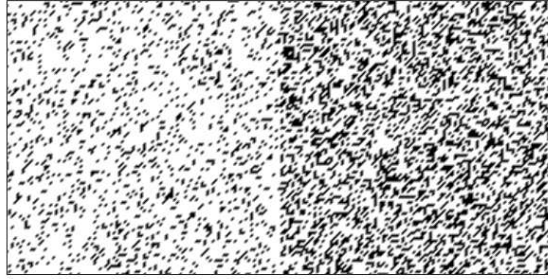


Figura 5.4: Mezzo poroso costituito da regioni con concentrazioni diverse di materiale solido. Nella metà sinistra abbiamo  $P_s = 15\%$ , mentre nella parte destra  $P_s = 35\%$ . Il dominio è discretizzato con  $200 \times 100$  punti nodali.

## 5.2 Erosione, trasporto e deposito di particelle

Con l'algoritmo che abbiamo appena illustrato, si ottiene un dominio in cui ogni nodo può assumere due stati: solido o fluido. I nodi solidi eseguono il bounce back, mentre quelli fluidi evolvono secondo lo schema lattice Boltzmann SRT o MRT.

Vogliamo ora definire un modello per simulare un altro importante aspetto della dinamica dell'estrazione del caffè: il distaccamento, il trasporto e l'accumulo delle polveri fini [51].

Quello che accade, da un punto di vista fisico, è che il flusso d'acqua stacca, dai granelli della polvere di caffè, le particelle più fini e le trascina con sé verso il fondo del filtro dove queste polveri si accumulano formando uno strato di caffè più compatto (*compact layer*). Questo fenomeno non è trascurabile perché determina la diminuzione del flusso in uscita man mano che il compact layer si forma e ostruisce, in parte, il fondo del filtro.

Per simulare questo aspetto del problema si deve, innanzitutto, operare un cambiamento di prospettiva: il nodo solido non è più visto come qualcosa di indivisibile, ma come l'agglomerato di un certo numero di particelle. L'idea è che il flusso d'acqua possa staccare alcune di queste particelle dal nodo solido cui appartengono e possa trascinarle con sé fino a che queste non si depositano su di un altro nodo solido.

Evidentemente tutto questo ha senso soltanto per i nodi solidi che rappresentano il caffè e non per quelli che compongono il bordo del filtro. Bisogna,

quindi, distinguere tra questi due tipi di nodi solidi che chiameremo nodi di caffè e nodi di muro, rispettivamente. Il termine “nodo solido” li comprenderà entrambi.

Dunque tutti i nodi solidi evolvono secondo la regola di bounce back, ma solo i nodi di caffè possono perdere le loro particelle per effetto del flusso di acqua, mentre i nodi di muro conservano sempre tutte le loro particelle.

Inizialmente tutti i nodi solidi hanno un numero fissato di particelle, mentre i nodi fluidi non contengono nessuna particella. L'evoluzione delle particelle è regolata da un automa cellulare probabilistico definito da tre passi:

- **Erosione:** dato un nodo di caffè, alcune delle sue particelle potrebbero saltare su nodi vicini occupati dal fluido, se l'acqua ha già raggiunto quei nodi. Inoltre, una percentuale fissata di nodi di caffè potrebbe dissolversi completamente nell'acqua, cioè alcuni nodi di caffè possono diventare fluidi. Si distinguono, dunque, due classi di nodi di caffè: quelli che possono perdere un numero massimo di particelle e quelli che possono, invece, perderle tutte diventando, così, nodi di fluido. I nodi di caffè sono, quindi, distinti in *non fluidificabili* e *fluidificabili*.
- **Trasporto:** le particelle che, tramite l'erosione, sono entrate in un nodo occupato dal fluido, si muovono in accordo con il flusso, cioè con la stessa velocità dell'acqua che li trasporta.
- **Deposito:** se la velocità dell'acqua in un nodo è diretta verso un nodo solido, le particelle che, eventualmente, il nodo fluido contiene si “depositano” sul nodo solido. Inoltre, se un numero sufficiente di particelle si accumula in un nodo di fluido, quel nodo si trasforma in un nodo di caffè.

Dato un generico punto  $\mathbf{x}$  della griglia, sia esso solido o fluido, indichiamo con

$$n(\mathbf{x}, t),$$

il numero di particelle che si trovano in  $\mathbf{x}$  al tempo  $t$ .

Inoltre, dal momento che nodi fluidi possono diventare di caffè e nodi di caffè possono trasformarsi in nodi fluidi, indichiamo con  $s(\mathbf{x}, t)$ , l'indicatore

$$s(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \mathbf{x} \text{ è un nodo di fluido al tempo } t, \\ 0 & \text{se } \mathbf{x} \text{ è un nodo solido al tempo } t. \end{cases}$$

Sia poi  $N$  il massimo numero di particelle che possono essere contenute in un nodo. All'istante iniziale fissiamo  $n(\mathbf{x}, 0) = N$  per i nodi solidi e  $n(\mathbf{x}, 0) = 0$

per i nodi di fluido.

Si osservi che per i nodi di muro  $n(\mathbf{x}, t)$  rimarrà sempre uguale ad  $N$ , ad essi non è, infatti, permesso perdere alcuna particella.

Infine, ricordiamo la definizione (4.7) della funzione colore  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , che stabilisce quale fluido è prevalentemente presente nel nodo  $\mathbf{x}$  al tempo  $t$  in un sistema composto da due fluidi: il fluido rosso e quello blu. In questo caso, il fluido rosso rappresenta l'acqua, mentre quello blu corrisponde all'aria. In particolare, abbiamo:

- $\phi(\mathbf{x}, t) = 1$ , se  $\mathbf{x}$  è occupato interamente dall'acqua,
- $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ , se  $\mathbf{x}$  è occupato interamente dall'aria,
- $0 < \phi(\mathbf{x}, t) < 1$ , se  $\mathbf{x}$  è nell'interfaccia tra i due.

Queste definizioni saranno riprese nei paragrafi successivi per illustrare, nel dettaglio, i tre passi dell'automa cellulare per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle.

### 5.3 Erosione

L'algoritmo di erosione viene chiaramente applicato solo sui nodi di caffè, ed è il meccanismo per cui questi nodi possono cedere una frazione delle loro particelle ai nodi di fluido circostanti.

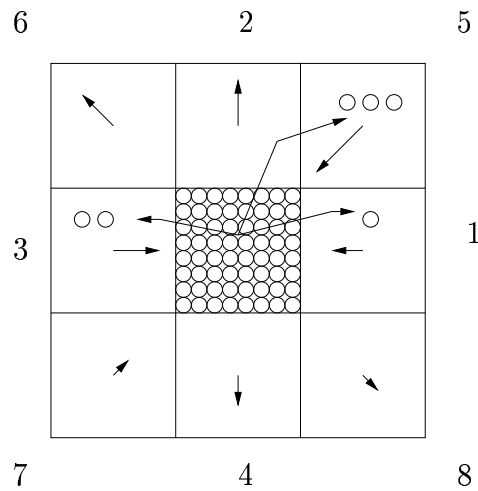
Siccome le particelle sono staccate dal flusso d'acqua, un nodo di caffè può rilasciare particelle soltanto verso un vicino che è già stato raggiunto dall'acqua.

Siano quindi  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  due nodi vicini, dove  $\mathbf{x}$  è un nodo di caffè ed  $\mathbf{y}$  è un nodo di fluido in cui è presente “abbastanza” acqua (chiariremo sotto che cosa si intende per “abbastanza”).

In poche parole, l'algoritmo di erosione consiste nell'esaminare la velocità del flusso  $\mathbf{u}(\mathbf{y}, t)$ : se  $\mathbf{u}(\mathbf{y}, t)$  è diretta verso  $\mathbf{x}$ , allora il flusso può staccare un certo numero di particelle da  $\mathbf{x}$  e portarle su  $\mathbf{y}$  secondo una regola probabilistica. La probabilità di staccare particelle e il numero di particelle staccate sono proporzionali alla proiezione della velocità  $\mathbf{u}(\mathbf{y}, t)$  lungo la direzione che unisce  $\mathbf{y}$  ad  $\mathbf{x}$ .

In Fig. 5.5 è rappresentato uno schema della regola di erosione (per semplicità l'esempio è relativo al modello D2Q9, ma l'algoritmo è esattamente lo stesso sia in due sia in tre dimensioni). Il nodo centrale è quello solido ed è costituito da particelle, i nodi circostanti sono fluidi e le frecce in essi sono le

proiezioni della velocità del fluido lungo la direzione che congiunge ciascun nodo a quello centrale. Si può osservare che se la velocità non è diretta verso il nodo solido (come accade per i vicini 2, 4, 6 ed 8), non viene ceduta nessuna particella. Se, invece, la velocità ha una proiezione positiva nella direzione incidente sul nodo centrale (come per i vicini 1, 3, 5 e 7), allora il numero di particelle erose è proporzionale al modulo della proiezione stessa. Il vicino 7 ci mostra che se la proiezione è positiva, ma molto piccola, allora la probabilità di staccare particelle è molto bassa e dunque può accadere che non se ne stacchi nessuna.



*Figura 5.5: Schema dell'algoritmo di erosione per un nodo solido circondato da nodi di fluido.*

### 5.3.1 Dettagli dell'algoritmo

Sia  $\mathbf{x}$  un nodo di caffè. Il procedimento di erosione viene applicato su  $\mathbf{x}$  solo se i nodi vicini sono stati raggiunti dall'acqua, cioè se il contenuto medio di acqua dei nodi fluidi che circondano  $\mathbf{x}$  è superiore ad un valore di soglia  $\phi_{wet}$ . Più precisamente, supponiamo che  $\mathbf{y}$  sia un nodo di fluido,  $\phi(\mathbf{y}, t)$  è la funzione colore che indica se  $\mathbf{y}$  è occupato in prevalenza dall'acqua o dall'aria, diciamo che il nodo  $\mathbf{y}$  è stato raggiunto dall'acqua se  $\phi(\mathbf{y}, t) > \phi_{wet}$ .

Dal momento che in un nodo di caffè non si può considerare il livello d'acqua (nei nodi solidi,  $\phi(\mathbf{x}, t)$  non è definita), si valuta la quantità d'acqua che è

presente intorno ad esso. Sia  $\mathbf{x}$  un nodo di caffè, indichiamo con  $\phi_{av}(\mathbf{x}, t)$  la media di  $\phi(\mathbf{x}, t)$  nei nodi di fluido nell'intorno di  $\mathbf{x}$ :

$$\phi_{av}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{i=1}^l s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)\phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)}{\sum_{i=1}^l s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)}.$$

Allora, il processo di erosione può essere applicato in  $\mathbf{x}$  soltanto se  $\phi_{av}(\mathbf{x}, t) > \phi_{wet}$ .

La regola di erosione dipende anche dal tipo di nodo di caffè. Abbiamo già accennato, infatti, che ci sono due classi di nodi di caffè: quelli fluidificabili e quelli non fluidificabili.

- **Fluidificabili:** sono quei nodi che possono sciogliersi completamente nell'acqua e diventare fluidi. Questi nodi sono, quindi, abilitati a perdere tutte le loro  $N$  particelle. I nodi fluidificabili sono una percentuale fissata del numero totale di nodi di caffè.
- **Non fluidificabili:** sono nodi di caffè che possono perdere fino ad un massimo numero di particelle  $N_{er}$ . Se un nodo di questo tipo perde tutte le  $N_{er}$  particelle (raggiunge quindi il valore minimo consentito di particelle  $N_{min} = N - N_{er}$ ), non può cederne altre e, di conseguenza, l'algoritmo di erosione non viene più eseguito su questo nodo, a meno che alcune particelle vengano successivamente depositate su di lui dagli algoritmi di trasporto e deposito. In questo caso il nodo torna ad essere eroso, ma la probabilità di perdere particelle viene diminuita. Naturalmente, questo ciclo si può ripetere più di una volta, ed ogni volta la probabilità del nodo di rilasciare particelle viene abbassata.

Per implementare quest'ultimo meccanismo, si associa ad ogni nodo di caffè una probabilità  $p^{er}(\mathbf{x}, t)$ . Inizialmente  $p^{er}(\mathbf{x}, t)$  è posta ad 1 e viene diminuita, nei nodi non fluidificabili, ogni qual volta essi raggiungono il numero minimo di particelle  $N_{min}$ .

Sia  $p_i^{er}(\mathbf{x}, t)$  la probabilità del nodo di caffè  $\mathbf{x}$  di cedere particelle al nodo  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  con  $i = 1, \dots, l$ . Allora  $p_i^{er}(\mathbf{x}, t)$  è data da:

$$p_i^{er}(\mathbf{x}, t) = \max\left(0, s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t)p^{er}(\mathbf{x}, t)\frac{\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) \cdot \mathbf{c}_j}{\|\mathbf{c}_j\|}\right), \quad (5.2)$$

dove  $\mathbf{c}_j$  è la direzione opposta a  $\mathbf{c}_i$ . La (5.2) implica che il nodo di fluido  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  è in grado di staccare particelle dal nodo di caffè  $\mathbf{x}$  solo se la velocità

del fluido in  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  ha una proiezione positiva lungo  $\mathbf{c}_j$ , cioè soltanto se  $\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$  è parzialmente incidente in  $\mathbf{x}$ . La probabilità sarà tanto maggiore quanto più questa componente incidente è elevata. In Fig. 5.6 è mostrato uno schema del calcolo della probabilità di erosione per il vicino 5 (si fa ancora riferimento al modello D2Q9). In numero di particelle  $n_i^{er}(\mathbf{x}, t)$  che possono

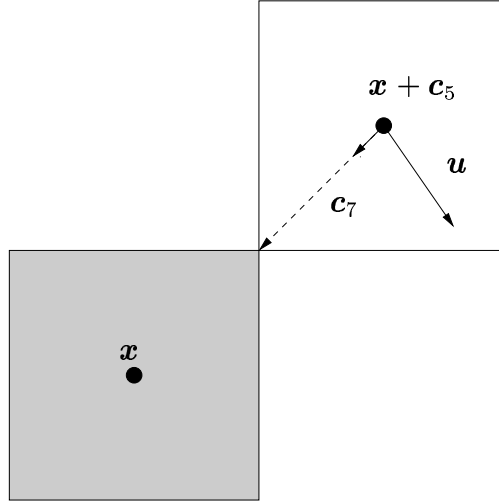


Figura 5.6: Schema della valutazione della componente di  $\mathbf{u}$  lungo la direzione  $\mathbf{c}_j$  per il vicino 5. Il nodo in grigio è quello solido.

saltare sul nodo  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  (con probabilità  $p_i^{er}(\mathbf{x}, t)$ ) è, di nuovo, proporzionale alla proiezione di  $\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t)$  lungo  $\mathbf{c}_j$

$$n_i^{er}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) \cdot \mathbf{c}_j / \|\mathbf{c}_j\|}{v_{max}} N_{max}(\mathbf{x}).$$

Dove  $v_{max}$  è una costante che rappresenta il modulo più grande delle velocità coinvolte nel problema, ad esempio, nel caso del flusso attraverso un mezzo poroso,  $v_{max}$  è il modulo della velocità imposta all'ingresso del flusso.  $N_{max}(\mathbf{x})$  è il massimo numero di particelle che possono essere staccate dal nodo. Il valore di  $N_{max}(\mathbf{x})$  è fissato dipendentemente dal fatto che il nodo sia fluidificabile o meno:

- **Fluidificabile:** il nodo può perdere tutte le sue particelle, dunque

$$N_{max}(\mathbf{x}) = N.$$

- **Non fluidificabile:** il nodo può perdere fino ad un massimo di  $N_{er}$  particelle, quindi

$$N_{max}(\mathbf{x}) = N_{er}.$$

I nodi fluidificabili si trasformano in nodi fluidi se il numero di particelle che contengono scende sotto ad un valore di soglia  $N_f$ . Il procedimento inverso avviene per effetto dell’algoritmo di deposito. I dettagli delle trasformazioni solido–fluido e fluido–solido sono dati nel paragrafo 5.6.

## 5.4 Trasporto

L’erosione stacca particelle dai nodi di caffè e le posiziona su nodi occupati dal fluido. Il fluido trasporta con sé le particelle. L’algoritmo di trasporto che andiamo a descrivere è stato sviluppato a partire da quello proposto da Chopard, Masselot e Dupuis [48, 49, 50].

Consideriamo una particella contenuta in un nodo di fluido  $\mathbf{x}$  (che sia stato raggiunto dall’acqua), inoltre, sia  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  la velocità del fluido in  $\mathbf{x}$ . In un time step la particella, che si muove con l’acqua, dovrebbe trovarsi in posizione

$$\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \tag{5.3}$$

(ricordiamo che l’unità temporale di griglia è pari ad 1). Di fatto, però, il punto  $\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , generalmente, non coincide con un punto della griglia. Se forzassimo il movimento sulla griglia, approssimando il punto  $\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  con il punto nodale più vicino, otterremmo un moto delle particelle con velocità fisicamente scorrette.

Per chiarire questo punto osserviamo che le velocità sulla griglia sono in genere molto basse, infatti, lo schema lattice Boltzmann è numericamente stabile e dà risultati fisicamente corretti per bassi numeri di Mach ( $Ma < 0,1$ ). Ricordando che  $Ma = u/c_s^2$ , ci si rende conto che le velocità di griglia sono basse. Supponiamo, allora, che la velocità in un punto sia, ad esempio,  $0,01 \delta x/\delta t$ , questo significa che per avere un movimento di una unità di griglia si devono eseguire 100 time step. È facile capire che se si forza una particella, che dovrebbe avere velocità  $0,01 \delta x/\delta t$ , a spostarsi di un  $\delta x$  ogni time step (è il minimo spostamento necessario per andare su un vicino) la si sta, in realtà, facendo muovere ad una velocità pari a  $1 \delta x/\delta t$ .

Si ricorre, pertanto, ad un algoritmo probabilistico: le particelle possono saltare su un nodo vicino con una probabilità che è proporzionale alla velocità



del fluido nel nodo in cui si trovano. Così il movimento della singola particella in un singolo time step non segue la regola (5.3), ma, il comportamento mediato nello spazio e nel tempo delle particelle, soddisfa, con buona approssimazione, quella stessa regola.

Inoltre, la regola di trasporto include anche il fatto che le particelle si spostano su un nodo di fluido solo se questo è stato raggiunto dall'acqua.

### 5.4.1 Dettagli dell'algoritmo

Sia  $\mathbf{x}$  un nodo di fluido, sia  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  la velocità del fluido in  $\mathbf{x}$  al tempo corrente  $t$ . Dobbiamo calcolare la destinazione di ciascuna delle  $n(\mathbf{x}, t)$  particelle che si trovano in  $\mathbf{x}$ . A priori, è possibile che una particella salti su uno fra tutti i nodi che possono essere raggiunti direttamente da  $\mathbf{x}$ . Per il modello D2Q9, tutti i nodi raggiungibili da  $\mathbf{x}$ , sono esattamente quelli dell'intorno considerato dallo schema lattice Boltzmann. Quindi i nodi in cui una particella può saltare sono

$$\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, \quad i = 0, \dots, 8,$$

dove gli  $\mathbf{c}_i$  sono quelli dati in (3.14).

Questo non è vero per il modello D3Q19, ricordiamo, infatti, che nello schema D3Q19 non vengono considerati i vicini a distanza  $\sqrt{3}$  da  $\mathbf{x}$ . Ora, questi nodi potrebbero, invece, essere una destinazione delle particelle e vanno, quindi, inseriti nel trasporto. Queste ulteriori direzioni sono date dai vettori

$$\mathbf{c}_{19,20,21,22,23,24,25,26} = (\pm 1, \pm 1, \pm 1).$$

Nel seguito di questo paragrafo indicheremo con  $\mathbf{c}_i$  per  $i = 0, \dots, l'$ , tutti i possibili nodi raggiungibili da  $\mathbf{x}$ , dove

- $l' = 8$  per il modello D2Q9;
- $l' = 26$  per il modello D3Q19.

Consideriamo le direzioni principali  $\mathbf{c}_i$  per  $i = 1, \dots, 4$  e  $i = 1, \dots, 6$  per i modelli D2Q9 e D3Q19, rispettivamente (vedi Fig. 5.7). Indichiamo con  $l''$  il numero delle direzioni principali:

- $l'' = 4$  per il modello D2Q9;
- $l'' = 6$  per il modello D3Q19.

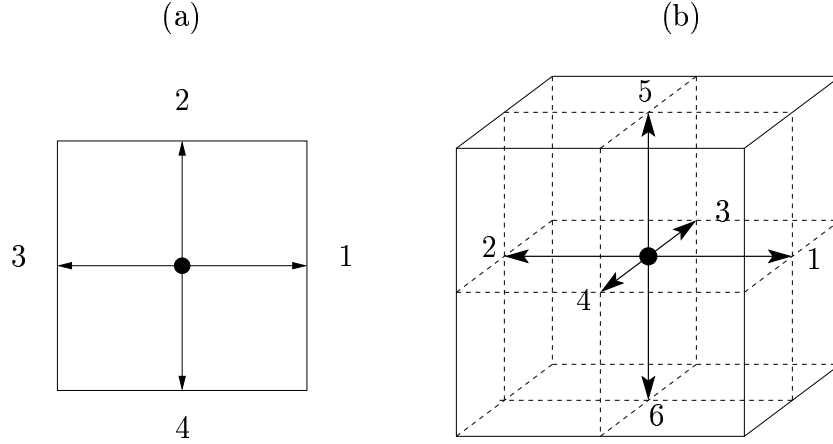


Figura 5.7: Direzioni principali: (a) modello D2Q9; (b) modello D3Q19.

Ad ognuna di queste direzioni è associata una probabilità  $p_i(\mathbf{x}, t)$ . Essa rappresenta la probabilità, per una particella posizionata in  $\mathbf{x}$  al tempo  $t$ , di saltare sul vicino  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  per  $i = 1, \dots, l''$ .

La probabilità  $p_i(\mathbf{x}, t)$  dipende dalla proiezione di  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  lungo  $\mathbf{c}_i$  e dal contenuto medio di acqua in direzione  $\mathbf{c}_i$ .

Quest'ultima quantità è definita come una media pesata di  $\phi(\mathbf{y}, t)$  dove  $\mathbf{y}$  varia su tutti i nodi  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_j$  tali che  $\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j > 0$ :

- per il modello D2Q9

$$\phi_i(\mathbf{x}, t) = k_1 \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) + k_2 \sum_{\substack{j=5, \dots, 8 \\ (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j) > 0}} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t), \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.4)$$

dove  $k_1 = 1/2$  e  $k_2 = 1/4$ .

- per il modello D3Q19

$$\begin{aligned} \phi_i(\mathbf{x}, t) = & k_1 \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) + k_2 \sum_{\substack{j=7, \dots, 18 \\ (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j) > 0}} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t) \\ & + k_3 \sum_{\substack{j=19, \dots, 26 \\ (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j) > 0}} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t), \quad i = 1, \dots, 6, \quad (5.5) \end{aligned}$$

dove  $k_1 = 4/9$ ,  $k_2 = 1/9$  e  $k_3 = 1/36$ .

Osserviamo che per i nodi solidi la funzione  $\phi$  non è definita, del resto la presenza di un nodo solido in una direzione non deve abbassare il contenuto di acqua in quella direzione. Di conseguenza, se  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_j$  è un nodo solido, nelle (5.4) e (5.5) si pone  $\phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t) = 1$ .

Le probabilità  $p_i(\mathbf{x}, t)$  per  $i = 1, \dots, l''$ , sono definite come segue:

$$p_i(\mathbf{x}, t) = \phi_i(\mathbf{x}, t) \max(0, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{c}_i).$$

Si osservi che, se abbiamo una probabilità positiva in una direzione  $\mathbf{c}_i$ , automaticamente la probabilità è nulla nella direzione opposta. Ad esempio, nel modello D2Q9, se la velocità è diretta come in Fig. 5.8, le probabilità che la particella vada nei vicini  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_1$  e  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_4$  saranno positive, mentre le probabilità che si sposti verso  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_3$  e  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_2$  saranno nulle.

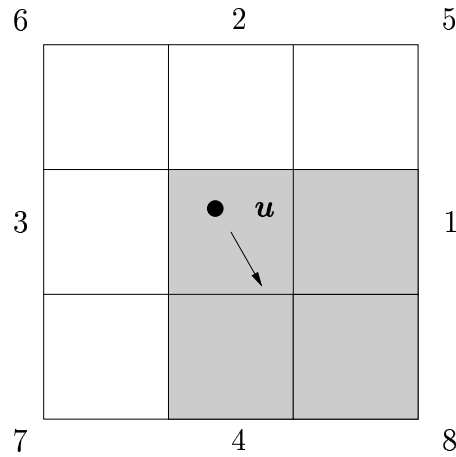


Figura 5.8: Schema dell'algoritmo di trasporto per il modello D2Q9. I nodi in grigio sono le possibili destinazioni della particella.

A questo punto, per ognuna delle  $n(\mathbf{x}, t)$  particelle contenute in  $\mathbf{x}$  e per ognuna delle direzioni principali  $\mathbf{c}_i$  per  $i = 1, \dots, l''$ , è definita una variabile booleana  $\mu_i^k(\mathbf{x}, t)$  dove  $k = 1, \dots, n(\mathbf{x}, t)$ :

$$\mu_i^k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{con probabilità } p_i(\mathbf{x}, t), \\ 0 & \text{con probabilità } 1 - p_i(\mathbf{x}, t). \end{cases} \quad (5.6)$$

Allora il nodo di destinazione della particella  $k$  contenuta in  $\mathbf{x}$  al tempo  $t$  è dato da

$$\mathbf{x} + \sum_{i=1}^{l''} \mu_i^k(\mathbf{x}, t) \mathbf{c}_i.$$

Ancora con riferimento alla Fig. 5.8: abbiamo già detto che  $p_3$  e  $p_2$  sono necessariamente nulle, quindi, dalla (5.6),  $\mu_3$  e  $\mu_2$  valgono certamente 0 (si elimina l'apice visto che ci si riferisce ad una sola particella). Per la particella in  $\mathbf{x}$  sono possibili le seguenti situazioni:

1.  $\mu_1 = 0$  e  $\mu_4 = 0$ : la particella ha come destinazione il nodo  $\mathbf{x}$ , cioè rimane ferma;
2.  $\mu_1 = 1$  e  $\mu_4 = 0$ : la particella salta sul nodo  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_1$ ;
3.  $\mu_1 = 0$  e  $\mu_4 = 1$ : la particella salta sul nodo  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_4$ ;
4.  $\mu_1 = 1$  e  $\mu_4 = 1$ : la particella salta sul nodo  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_8 = \mathbf{x} + \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_4$ .

L'algoritmo di trasporto interagisce anche con lo schema di deposito. Il risultato di questa interazione è che la procedura di trasporto non è necessariamente applicata a tutte le  $n(\mathbf{x}, t)$  particelle che si trovano in  $\mathbf{x}$  al tempo  $t$ . In particolare, in certe situazioni, alcune particelle non possono raggiungere la loro destinazione e rimangono nel nodo  $\mathbf{x}$ . In questo caso, una parte di queste particelle “bloccate” in  $\mathbf{x}$ , si accumula nel nodo e non può spostarsi di lì precludendo, così, alla creazione di un nuovo nodo solido.

Questo processo viene implementato definendo una variabile  $p_m(\mathbf{x}, t) \in [0, 1]$  che indica la frazione di particelle di  $\mathbf{x}$  che possono muoversi. L'algoritmo di trasporto viene, dunque, eseguito su  $n(\mathbf{x}, t)p_m(\mathbf{x}, t)$  particelle.

Inizialmente,  $p_m(\mathbf{x}, t)$  è posto uguale ad 1 per tutti i nodi di fluido. Poi, ad ogni time step,  $p_m(\mathbf{x}, t)$  viene eventualmente diminuito proporzionalmente al numero di particelle “bloccate” in  $\mathbf{x}$ .

## 5.5 Deposito

Durante il suo movimento, una particella potrebbe avere, come destinazione, un nodo solido. Il nodo solido potrebbe essere “pieno”, cioè potrebbe contenere  $N$  particelle, oppure, potrebbe averne perse alcune con il meccanismo di erosione. Solo nel secondo caso, le particelle che arrivano, possono essere aggiunte al nodo solido. Nel primo caso, la particella rimane nel nodo da cui proviene e comincia ad accumularsi lì (vedi Fig. 5.9).

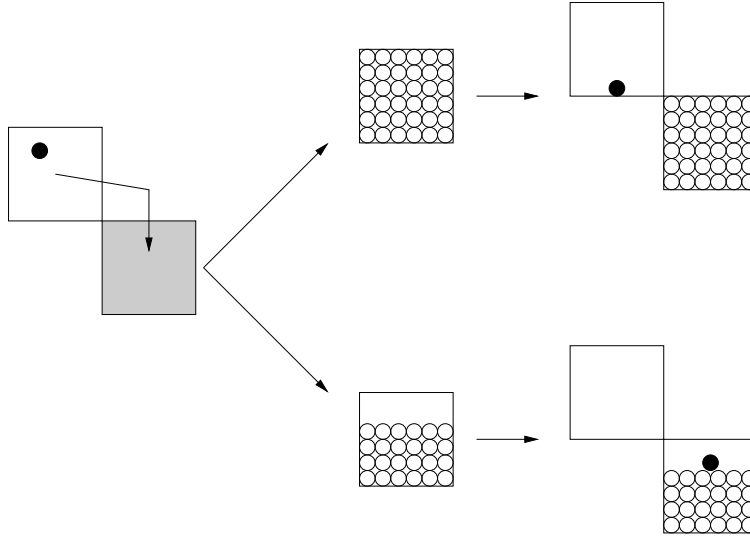


Figura 5.9: Schema dell'algoritmo di deposito.

### 5.5.1 Dettagli dell'algoritmo

Sia  $\mathbf{x}$  il nodo fluido da cui le particelle si muovono e  $\mathbf{y}$  il loro nodo solido di destinazione. Distinguiamo due casi:

- **nodo solido non pieno:**  $n(\mathbf{y}, t) < N$ . Le particelle che arrivano sono aggiunte al nodo (finchè rimane valida la condizione  $n(\mathbf{y}, t) < N$ ).
- **nodo solido pieno:**  $n(\mathbf{y}, t) = N$ . In questo caso, le particelle che arrivano non possono essere depositate su  $\mathbf{y}$ , quindi rimangono in  $\mathbf{x}$  (si osservi che se  $\mathbf{y}$  è un nodo di muro,  $n(\mathbf{y}, t) = N$  sempre). Il fatto che queste particelle si siano accumulate, viene considerato aggiungendo il loro numero alla variabile  $n_{acc}(\mathbf{x}, t)$  (inizialmente posta a 0 per tutti i nodi).

Questa variabile viene poi usata per decrementare la frazione di particelle di  $\mathbf{x}$  che possono muoversi. Infatti, la frazione  $p_m(\mathbf{x}, t)$ , di particelle che possono essere trasportate è calcolata come

$$p_m(\mathbf{x}, t) = \max\left(0, 1 - \frac{n_{acc}(\mathbf{x}, t)}{N}\right).$$

In questo modo, maggiore è il numero di particelle accumulate in  $\mathbf{x}$ , più difficile è, per le particelle di  $\mathbf{x}$ , muoversi.

Quando il numero di particelle contenute in un nodo di fluido supera un valore di soglia  $N_s$ , il nodo fluido diventa un nodo di caffè.

## 5.6 Interazione tra il fluido e le particelle

L'algoritmo che determina il moto delle particelle (erosione, trasporto e deposito), influisce sulla dinamica del fluido in un modo soltanto: per via dei cambiamenti che induce nella configurazione del dominio. In particolare, nodi fluidi possono diventare di caffè e alcuni nodi di caffè possono diventare fluidi.

### 5.6.1 Dettagli dell'algoritmo

Fissiamo due valori di soglia,  $N_f$  ed  $N_s$  (vedi i paragrafi 5.3.1 e 5.5.1). Il primo è il numero di particelle sotto al quale un nodo di caffè diventa fluido; il secondo è il numero di particelle che un nodo di caffè deve superare per diventare solido.

**Da fluido a solido:** consideriamo un nodo di fluido  $\mathbf{x}$ . Se

$$n(\mathbf{x}, t) > N_s,$$

allora  $\mathbf{x}$  diventa un nodo di caffè. Questo significa che le distribuzioni di massa  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , e di colore  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$ , verranno aggiornate con la regola di bounce back (vedi paragrafo 3.4.2) dall'istante  $t + 1$  in poi.

In Fig. 5.10 si può vedere come la creazione di un nuovo nodo solido modifichi significativamente il flusso, diminuendone sensibilmente la velocità e deviandone il corso. Nella figura i nodi neri rappresentano il materiale solido e le frecce sono i vettori della velocità del fluido.

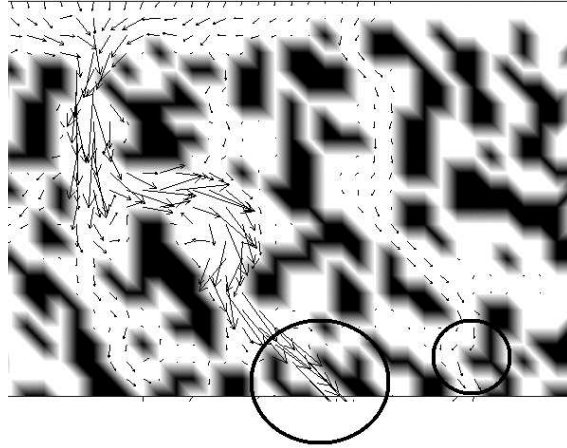
**Da solido a fluido:** sia  $\mathbf{x}$  un nodo di caffè fluidificabile. Se

$$n(\mathbf{x}, t) < N_f,$$

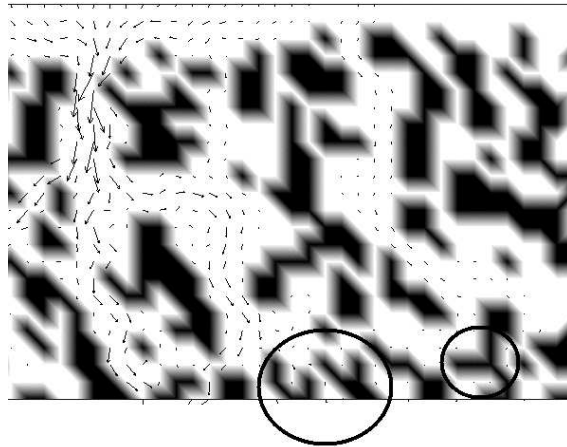
allora  $\mathbf{x}$  diventa un nodo di fluido. Questo significa che l'equazione cinetica (3.29), o le corrispondenti equazioni dello schema MRT, saranno usate da quel momento in poi per aggiornare le funzioni di distribuzione della massa  $f_i$  e la (4.3) per aggiornare le funzioni di distribuzione del colore  $\alpha_i$ . Bisogna, però, inizializzare i valori delle  $f_i$  e delle  $\alpha_i$ :

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\rho_0, \mathbf{u}),$$

(a)



(b)



*Figura 5.10: Formazione di nuovi nodi solidi: (a) flusso prima della formazione dei nodi solidi; (b) flusso dopo la formazione dei nodi solidi.*

dove  $\rho_0$  è il valore iniziale della densità e  $\mathbf{u} = 0$ ;

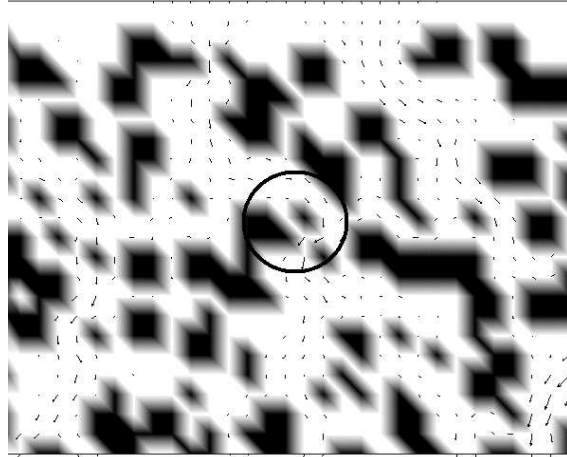
$$\alpha_i(\mathbf{x}, t) = \alpha_i^{eq}(\alpha),$$

con  $\alpha = \phi_{av}$ . In Fig. 5.11 è mostrato un esempio in cui due nodi si trasformano da solidi a fluidi. Si può notare come, anche in questo caso, il flusso risulti fortemente condizionato.

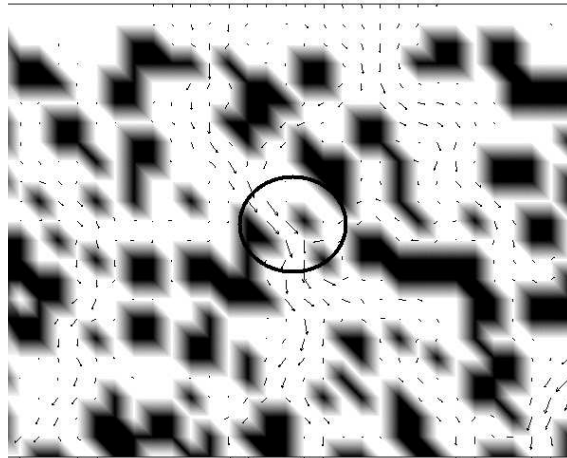
**Ciclo di un nodo di caffè non fluidificabile:** sia  $\mathbf{x}$  un nodo di caffè non fluidificabile. Inizialmente esso contiene  $N$  particelle e non può perdere più di  $N_{er}$  particelle. Se raggiunge il minimo numero di particelle che può contenere  $N_{min} = N - N_{er}$ ,  $\mathbf{x}$  rimane un nodo di caffè (continua ad evolvere secondo la regola di bounce back), ma non esegue più la procedura di erosione. Se altre particelle si depositano, successivamente, su  $\mathbf{x}$ , e il suo numero di particelle verifica, dunque,  $n(\mathbf{x}, t) > N - N_{er}$ , il nodo torna erodibile, ma con una probabilità di perdere particelle  $p^{er}$ , dimezzata. Questo ciclo si ripete ogni qual volta il numero di particelle raggiunge  $N_{min}$ .



(a)



(b)



*Figura 5.11: Formazione di nuovi nodi fluidi: (a) flusso prima della formazione dei nodi fluidi; (b) flusso dopo la formazione dei nodi fluidi.*

# Capitolo 6

## Risultati sperimentali e numerici

Veniamo, infine, alla descrizione dell'applicazione principale del modello: la simulazione del processo di estrazione del caffè.

Preparare un buon caffè non è un compito così semplice come potrebbe sembrare perché la qualità del prodotto finale dipende da molti fattori:

- la temperatura e la pressione dell'acqua;
- la quantità e il tipo di polvere di caffè;
- la pressatura dello strato di caffè;
- il tempo di percolazione;
- l'esperienza del barista.

Evidentemente, alcuni di questi fattori non possono essere studiati scientificamente, ma, per gli altri, con anni di esperienza nel settore, si sono ormai fissate delle condizioni ottimali necessarie per ottenere un buon espresso italiano.

Naturalmente, anche rispettando queste condizioni, non si ottiene con *certezza* un buon caffè, anche perché, il concetto di *buon espresso* è comunque soggettivo.

Un caffè viene valutato in base a parametri sensoriali: colore, sapore, aroma, consistenza. È chiaro che nessuna di queste caratteristiche può essere “calcolata” da un modello matematico, per quanto complesso.

Per quel che ci riguarda, dunque, siamo interessati a riprodurre, il più fedelmente possibile, quelle grandezze che possono essere oggettivamente misurate, cioè pressione e velocità dell'acqua, quantità di caffè prodotto, tempo di percolazione e così via. Il modello darà una descrizione della dinamica del fenomeno e potrà essere utilizzato per valutare in che modo il processo è influenzato dalle variazioni dei parametri in gioco.

Per validare il modello, sono stati svolti degli esperimenti presso la Nuova Simonelli che ha gentilmente offerto le sue strutture e le sue apparecchiature, oltre all'assistenza tecnica per portare a termine le misure.

In questo capitolo, descriveremo brevemente il lavoro sperimentale svolto, sostanzialmente elencando i risultati ottenuti; vedremo come si effettua il passaggio dalle unità fisiche alle unità di griglia per i modelli lattice Boltzmann e presenteremo il setting delle nostre simulazioni. Inoltre, mostreremo i risultati numerici, confrontandoli con i risultati sperimentali. Infine, vedremo come i risultati numerici sono influenzati dalla variazione di alcuni parametri.

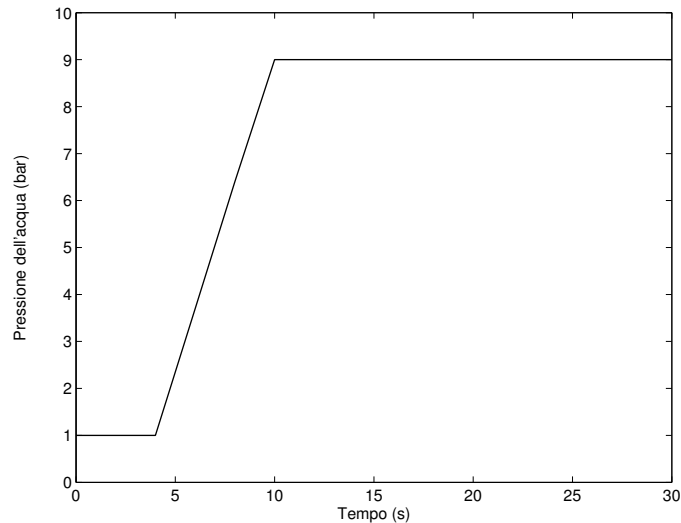
Si tenga presente che la fase sperimentale è tuttora in corso e i risultati qui presentati sono preliminari. Attualmente, i risultati numerici sono in promettente accordo con quelli sperimentali e, quindi, si ritiene che ulteriori e più accurate misurazioni potrebbero portare ad un setting ancora più soddisfacente del modello.

## 6.1 Il fenomeno di estrazione del caffè

Come abbiamo accennato, il fenomeno di estrazione del caffè è piuttosto complesso, però, sono ormai state fissate delle condizioni ottimali che devono essere soddisfatte per ottenere un buon espresso:

- quantità di polvere di caffè necessaria:  $7 \pm 0,5 \text{ gr}$ ;
- temperatura dell'acqua all'ingresso del filtro:  $88^\circ \pm 2^\circ C$ ;
- pressione dell'acqua (nella fase di infusione):  $9 \pm 1 \text{ bar}$ ;
- tempo di percolazione:  $30 \pm 2,5 \text{ s}$ ;
- quantità di caffè in tazza:  $25 \pm 2,5 \text{ ml}$ .

La pressione dell'acqua non è costante per tutta la durata del processo, essa presenta, infatti, l'andamento mostrato in Fig. 6.1. Questo andamento, evidenzia due fasi: la fase di preinfusione (da 0 a 4 secondi) e la fase di infusione (da 4 a 30 secondi). La fase di preinfusione è caratterizzata da un



*Figura 6.1: Profilo della pressione dell'acqua all'ingresso del filtro in funzione del tempo.*

basso valore della pressione (1 *bar*), che rimane costante per circa 4 secondi. Questa fase è molto importante, perché l'acqua, scendendo lentamente, scioglie maggiormente gli olii aromatici e le altre sostanze che danno odore e sapore al caffè.

Nella seconda fase (infusione), la pressione dell'acqua sale linearmente a 9 *bar* in circa 6 secondi e rimane a questo livello fino alla fine del processo.

Nella fase di infusione, dunque, la velocità dell'acqua aumenta sensibilmente e il caffè comincia ad uscire dal filtro.

Inoltre, durante tutto il processo in generale e nella seconda fase in particolare, si aggiunge anche il fenomeno di trascinamento delle polveri fini.

Ogni granellino di caffè è, infatti, circondato da polveri molto fini che l'acqua tende a staccare e a trascinare con sé verso il fondo del filtro. Questo meccanismo comporta la creazione di uno strato di caffè più compatto nelle vicinanze del fondo che limita la fuoriuscita del caffè.

## 6.2 Misure sperimentali

Nelle strutture della Nuova Simonelli, sono state eseguite varie misurazioni, con lo scopo di studiare le grandezze che maggiormente caratterizzano il processo di estrazione del caffè.

Prima di descrivere brevemente queste misurazioni, osserviamo che i tipi di filtri prodotti dalla Nuova Simonelli sono di due forme: cilindro e tronco di cono e di due dimensioni per ogni forma a seconda che il filtro sia per una o per due tazzine di caffè.

Nelle prove sperimentali (e dunque anche nelle simulazioni), ci siamo limitati a considerare un filtro cilindrico per un caffè singolo.

In questo caso, il filtro ha raggio  $R = 2 \text{ cm}$  e l'altezza dello strato di caffè è  $h = 0,9 \text{ cm}$ . Inoltre, il fondo del filtro è costituito da una superficie piana forata da piccoli buchi circolari.

### 6.2.1 Misura della pressione e calcolo della velocità dell'acqua in ingresso

La pressione dell'acqua in ingresso può essere misurata direttamente, applicando un manometro alla camera che contiene l'acqua. In Fig. 6.2 è rappresentato uno schema del circuito dell'acqua. La doccetta, che immette l'acqua nel filtro, è collegata ad una camera di preinfusione. L'acqua entra nella camera di preinfusione sempre a  $9 \text{ bar}$ , ma, inizialmente, la camera è vuota e, dunque, l'acqua perde pressione e arriva alla doccetta alla pressione di  $1 \text{ bar}$ . Man mano che la camera di preinfusione si riempie, la pressione dell'acqua sale fin quando la camera è del tutto piena e, quindi, l'acqua esce dalla doccetta alla pressione di  $9 \text{ bar}$ .

La pressione dell'acqua è stata misurata applicando un manometro alla camera di preinfusione e leggendo il valore della pressione ogni 2 secondi. La misura è stata ripetuta più volte nelle stesse condizioni. I valori medi delle misure effettuate danno il profilo riportato in Fig. 6.1, che abbiamo già descritto.

Per simulare il fenomeno, abbiamo bisogno di conoscere la velocità dell'acqua in ingresso, infatti, nel modello, è la velocità che viene imposta all'inlet. La velocità dell'acqua all'inlet può essere calcolata misurando la portata del flusso per un dato valore della pressione.

Si dice portata di un flusso, il volume di fluido che attraversa una sezione

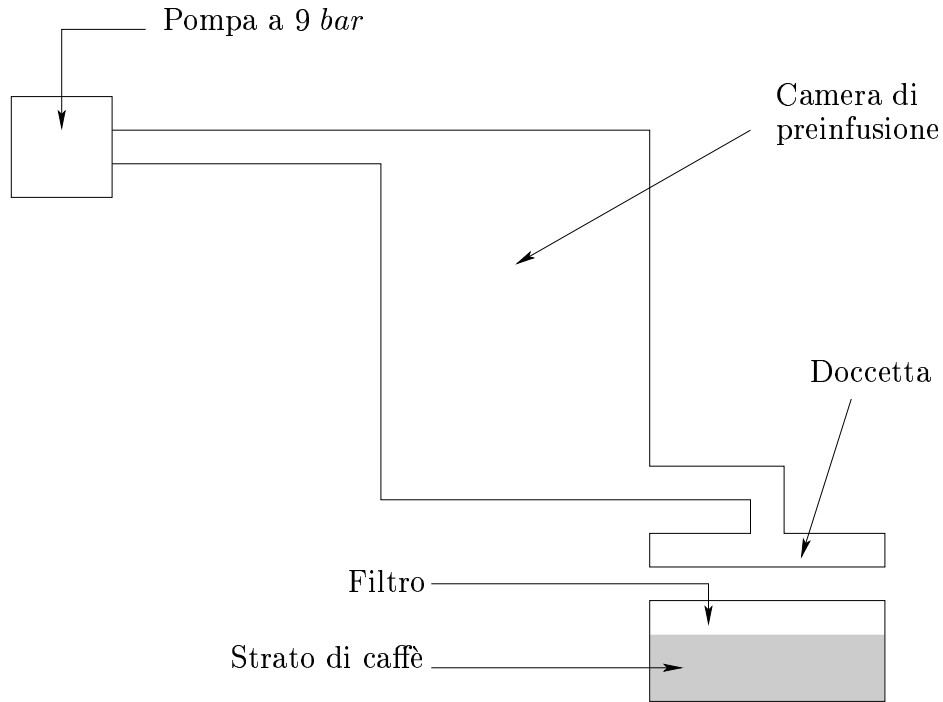


Figura 6.2: Schema della camera di preinfusione di una macchina per il caffè espresso.

trasversale nell'unità di tempo

$$Q = Su,$$

dove  $Q$  è la portata,  $S$  è la superficie attraversata e  $u$  è la componente della velocità del flusso normale ad  $S$ . In un tempo  $T$ , il volume  $V$  di fluido, che attraversa la superficie  $S$  è  $V = QT$ , se si può ritenere che la velocità  $u$  sia costante.

Nel nostro caso,  $S$  è la superficie dei fori della doccetta a contatto con il filtro,  $Q$  è la portata che andremo a misurare e  $u$  è la velocità dell'acqua all'inlet che vogliamo calcolare.

La doccetta ha 112 fori di diametro  $2\text{ mm}$ , per una superficie di  $351,86\text{ mm}^2$  ( $351,86 \times 10^{-6}\text{ m}^2$ ).

Le misure della portata sono state effettuate ad  $1\text{ bar}$  e  $9\text{ bar}$  di pressione utilizzando il seguente procedimento:

1. si fissa il volume  $V$  di fluido in uscita;
2. si misura il tempo necessario  $T$ , per ottenere quel volume di acqua;

3. si calcola  $Q = V/T$  ;
4. si determina la velocità come  $u = Q/S$ .

Le misure sono state ripetute più volte, sia ad 1 *bar* sia a 9 *bar* di pressione, i valori medi ottenuti sono:

- velocità ad 1 *bar*:  $u_1 = 0,011 \text{ m/s}$ ;
- velocità a 9 *bar*:  $u_2 = 0,037 \text{ m/s}$ .

### 6.2.2 Misura della porosità

Una tra le misure più complesse da effettuare è stata quella della porosità, cioè della frazione di vuoto presente in uno strato di caffè pressato, come viene usualmente pressato, prima di fare un espresso.

Non avendo la possibilità di creare il vuoto, non si è potuto semplicemente confrontare i volumi sotto vuoto e in condizioni normali. Di conseguenza, abbiamo utilizzato la seguente procedura:

- abbiamo riempito il nostro filtro con la corretta quantità di caffè;
- il caffè è stato pressato come se si dovesse preparare un espresso;
- abbiamo versato uniformemente dell'acqua con un contagocce, misurando la quantità di acqua versata e mantenendo costante il volume dello strato di caffè;
- il passo precedente è stato ripetuto lentamente, aspettando ogni volta che l'acqua riuscisse a penetrare nello strato di caffè.

Quando le prime gocce sono uscite dal fondo, ci siamo fermati e abbiamo considerato, come volume occupato dall'aria, il volume di acqua inserito. L'idea è, infatti, che l'acqua riempia lo spazio originariamente occupato dall'aria.

Per questa prova, si è eccezionalmente usato un filtro cilindrico per due caffè di raggio  $R = 3 \text{ cm}$  e uno strato di caffè alto  $h = 1 \text{ cm}$ . La quantità di caffè era di 13,7 grammi.

La quantità di acqua inserita è stata di  $18 \text{ cm}^3$ . Si ottiene, così, una porosità  $\xi$  pari a

$$\xi = \frac{V_a}{V_t} = \frac{18 \text{ cm}^3}{28,3 \text{ cm}^3} = 0,636,$$

dove  $V_a$  è il volume di acqua inserito e  $V_t$  è il volume totale occupato dall'aria e dal caffè. Ne segue che la concentrazione del caffè è pari a circa

$$(1 - \xi) = 1 - 0,636 = 0,364 = 36,4\%$$

Inoltre, è utile avere una stima della variazione di porosità se si aggiunge o si toglie un grammo di caffè costringendolo, però, nello stesso volume. Questo dato ci occorre per confrontare i risultati sperimentali della prova descritta nel paragrafo 6.2.5, con i risultati numerici. Infatti, nel nostro modello non si può specificare la quantità di caffè in grammi, ma soltanto la sua percentuale rispetto al volume considerato.

Se 13,7 gr. di caffè occupano un volume di  $V_t \text{ cm}^3$ , con una concentrazione del 36,4 %, allora lo spazio effettivamente e interamente occupato dalla polvere di caffè (come se fosse sotto vuoto), è dato da

$$(1 - \xi)V_t = 0,364 \cdot 28,3 \text{ cm}^3 = 10,3 \text{ cm}^3.$$

Dunque, un grammo di caffè occupa (sotto vuoto)

$$\frac{10,3 \text{ cm}^3}{13,7 \text{ gr}} \cdot 1 \text{ gr} = 0,752 \text{ cm}^3,$$

che corrisponde a circa il 2,7% del volume totale.

Ne segue che l'aggiunta (o la diminuzione) di un grammo di caffè fa aumentare (o diminuire) la concentrazione del caffè stesso di circa il 2,7%, a patto che la polvere occupi lo stesso volume e sia, dunque, pressata diversamente.

### 6.2.3 Misura della percentuale di bagnazione nella fase di preinfusione

La fase di preinfusione è quel periodo di 4 secondi in cui la pressione dell'acqua rimane ad 1 bar. Durante questi 4 secondi, non tutto lo strato di caffè viene bagnato dall'acqua. La misura del livello a cui l'acqua arriva nella prima fase è un dato importante, perchè ci permette di valutare se l'andamento del fronte d'acqua simulato è corretto.

La misurazione di questo valore è stata eseguita iniziando la preparazione di un caffè e interrompendo forzatamente il processo dopo 2 e 4 secondi, rispettivamente. A questo punto si è eseguito un carotaggio del filtro, usando un piccolo tubicino di vetro e si è misurata la parte bagnata rispetto a quella asciutta.



La misura risulta poco precisa per via degli errori inevitabilmente commessi, come, ad esempio, il fatto che l'acqua continui a scendere per qualche istante prima che il carotaggio venga eseguito, la difficoltà di distinguere nettamente la parte asciutta da quella bagnata e il fatto che il fronte non avanza in modo esattamente uguale in ogni punto.

Per riuscire ad avere dei valori indicativi, la prova è stata ripetuta più volte e si sono, così, determinati degli intervalli entro i quali è contenuta la percentuale di bagnazione a 2 e 4 secondi. I risultati sono riportati in Tab. 6.1

*Tabella 6.1: Valori minimi e massimi misurati della percentuale di bagnazione a 2 e 4 secondi.*

t (s)	Bagnazione Min. misurato	Bagnazione Max. Misurato
2	45 %	49 %
4	58 %	63 %

#### 6.2.4 Misura del flusso di caffè in uscita

Un altro importante valore che può essere misurato è il volume di caffè che esce dal filtro, in funzione del tempo.

Questa misura è stata eseguita prelevando, ogni 4 secondi, il caffè in uscita con delle provette diverse e misurando il volume del caffè raccolto in ciascuna provetta.

Anche in questo caso, le fonti di errore erano molteplici, prima fra tutte la necessità di cambiare la provetta dopo 4 secondi perdendo, inevitabilmente, qualche goccia di caffè. Si è cercato di limitare l'errore ripetendo più volte la prova.

Visto che il recipiente graduato utilizzato per effettuare la misura aveva, come minima unità, il  $cm^3$  e considerando gli elevati errori di misurazione, si è ritenuto ragionevole assumere, come errore sulla misura,  $\pm 1 cm^3$ . In Tab. 6.2 sono riportati i valori medi delle varie misurazioni per ciascun intervallo di 4 secondi; il valore del volume tra 28 e 30 secondi è stato calcolato dimezzando il volume misurato tra 28 e 32 secondi). In Tab. 6.3, è riportato il volume accumulato in funzione del tempo.

Tabella 6.2: Volume medio di caffè in uscita misurato a intervalli di 4 secondi.

t (s)	Volume medio ( $\pm 1 \text{ cm}^3$ )
0-4	0
4-8	2,5
8-12	3,5
12-16	4,0
16-20	4,0
20-24	5
24-28	3,5
28-30	1,75

### 6.2.5 Misura del flusso in uscita al variare della quantità di caffè

Il volume di caffè che si ottiene in uscita, dipende, naturalmente, dalla quantità di caffè presente nel filtro a parità di volume, cioè dalla concentrazione del caffè stesso.

Per riuscire a determinare come questo fattore incidesse sul flusso in uscita, abbiamo messo, nello stesso filtro, tre diverse quantità di caffè: 6, 7 ed 8 grammi. Il caffè è stato pressato con una leva meccanica che lo costringeva ad occupare sempre lo stesso volume.

Il processo di estrazione del caffè espresso è stato poi eseguito normalmente raccogliendo il caffè in uscita in un unico contenitore. I volumi ottenuti nei tre casi sono riportati in Tab. 6.4

## 6.3 Passaggio dalle unità fisiche alle unità di griglia

I modelli lattice Boltzmann sono definiti in modo tale da lavorare principalmente con delle grandezze scalate che non hanno un'immediata corrispondenza fisica.

Così, il passo spaziale della griglia  $\delta x$ , e il passo temporale  $\delta t$ , sono fissati ad 1 per semplicità. Naturalmente, questi valori non sono espressi in unità fisiche, ma in quelle che si chiamano, comunemente, unità di griglia.

Se si vogliono, però, confrontare i risultati del modello lattice Boltzmann

Tabella 6.3: Volume di caffè che esce dal filtro, in funzione del tempo.

t (s)	Volume medio ( $\pm 1 \text{ cm}^3$ )
0	0
4	0
8	2,5
12	6
16	10
20	14
24	19
28	22,5
30	24,25

Tabella 6.4: Volume di caffè che esce dal filtro al variare della quantità di polvere di caffè inserita nel filtro, mantenendo costante il volume.

Quantità di polvere di caffè (gr.)	Volume di caffè in uscita ( $\pm 1 \text{ cm}^3$ )
6	53
7	36
8	25

con dei risultati sperimentali, si devono necessariamente convertire i valori espressi in unità di griglia, nelle unità fisiche.

Per quanto riguarda lo spazio, la procedura è semplice: se stiamo rappresentando una lunghezza di  $L$  metri e utilizziamo  $N$  punti nodali, la nostra unità spaziale  $\Delta x$  sarà

$$\Delta x = \frac{L}{N - 1} \text{ (metri)}.$$

Allora, 1 unità spaziale di griglia  $\delta x$ , corrisponde a  $\Delta x$  metri.

Veniamo ora all'unità di tempo,  $\Delta t$ . Nel modello lattice Boltzmann, il time step  $\delta t$  è legato a  $\delta x$  dalla relazione  $\delta x / \delta t = c = 1$ , con questa unità di misura viene definita la velocità del suono nel fluido,  $c_s$ , ed essa vale  $1/\sqrt{3}$  nei modelli D2Q9 e D3Q19.

Sia  $C_s$ , la velocità del suono espressa in  $m/s$ ,  $C_s$  è collegata a  $c_s$  come segue:

$$C_s = c_s \frac{\Delta x}{\Delta t} \text{ (metri/secondi).}$$

Da cui

$$\Delta t = \frac{c_s}{C_s} \Delta x \text{ (secondi).}$$

Quindi, 1 unità temporale di griglia  $\delta t$ , corrisponde a  $\Delta t$  secondi.

In generale, ai fluidi simulati viene assegnata una densità iniziale  $\tilde{\rho}(= 1)$  espressa in unità di griglia, che indichiamo come  $\delta m/(\delta x)^3$ . Sia, invece,  $\rho$  la densità effettiva del fluido espressa in  $kg/m^3$ . L'unità di massa  $\Delta m$  espressa in  $Kg$ , può, dunque, essere ricavata dalla seguente relazione:

$$\tilde{\rho} \frac{\Delta m}{(\Delta x)^3} = \rho.$$

Nota  $\rho$ , si ha

$$\Delta m = \frac{\rho}{\tilde{\rho}} (\Delta x)^3 \text{ (chilogrammi).} \quad (6.1)$$

Così, ad unità di massa  $\delta m$ , corrispondono  $\Delta m$  chilogrammi.

A partire da queste tre grandezze ( $\Delta x$ ,  $\Delta t$  e  $\Delta m$ ), si possono convertire in unità fisiche tutte le altre: velocità, viscosità, coefficiente di tensione superficiale, operando, semplicemente, un cambiamento di unità di misura.

## 6.4 Setting delle simulazioni

Il procedimento, descritto nel paragrafo precedente, è stato applicato alla simulazione dell'estrazione del caffè nelle due "direzioni": da unità fisiche ad unità di griglia e da unità di griglia ad unità fisiche.

**Dati di input:** sono convertiti dalle unità fisiche in cui sono espressi, alle unità di griglia. Questa conversione ci permette di calcolare i parametri da inserire nel modello.

**Risultati in output:** si ottengono, dal modello, in unità di griglia e vengono convertiti nelle unità fisiche per poter essere confrontati con i risultati sperimentali.

Per quanto riguarda i dati di input, nel caso in esame essi sono:

- velocità dell'acqua nelle fasi di preinfusione ed infusione ( $u_1$  e  $u_2$ , rispettivamente);
- viscosità cinematica dell'acqua e dell'aria ( $\nu_w$  e  $\nu_a$ , rispettivamente);
- raggio del filtro e altezza dello strato di caffè ( $R$  ed  $h$ );
- durata del processo di infusione ( $T$ );
- coefficiente di tensione superficiale acqua/aria ( $\sigma_{w/a}$ )

Tutti questi dati sono raccolti in Tab. 6.5 espressi nelle unità di misura fisiche.

I risultati ottenuti in output, e la loro conversione in unità fisiche, verranno

*Tabella 6.5: Parametri relativi al processo di estrazione del caffè espressi in unità fisiche.*

Parametro	Valore
$u_1$ (m/s)	0,011
$u_2$ (m/s)	0,037
$\nu_w$ (m <sup>2</sup> /s)	$10^{-6}$
$\nu_a$ (m <sup>2</sup> /s)	$17 \times 10^{-6}$
$R$ (m)	$2 \times 10^{-2}$
$h$ (m)	$0,9 \times 10^{-2}$
$T$ (s)	30
$\sigma_{w/a}$ (N/m)	0,067

analizzati nel paragrafo 6.5.

Il raggio  $R$  è discretizzato con  $N = 47$  punti nodali. Seguendo lo schema presentato nel paragrafo precedente, si calcolano  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  e  $\Delta m$ , grazie ai quali è possibile convertire tutti i parametri raccolti in Tab. 6.5 in unità di griglia. Ad esempio, la velocità  $u_1$  (e, in modo del tutto equivalente, la velocità  $u_2$ ), viene trasformata in unità di griglia osservando che vale la seguente relazione:

$$u_1 = \tilde{u}_1 \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

dove  $\tilde{u}_1$  rappresenta la velocità espressa in unità di griglia.

In modo del tutto analogo, si possono convertire le altre grandezze: le due

viscosità e il coefficiente di tensione superficiale.  
In particolare,

$$\nu_{w,a} = \tilde{\nu}_{w,a} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t},$$

e

$$\sigma_{w/a} = \tilde{\sigma}_{w/a} \frac{\Delta m}{(\Delta t)^2},$$

dove  $\tilde{\cdot}$ , rappresenta le grandezze espresse in unità di griglia.

Si osservi che, dopo aver calcolato  $\tilde{\nu}_{w,a}$ , si possono determinare i corrispondenti parametri di rilassamento  $\omega_{w,a}$  grazie alla nota relazione

$$\tilde{\nu}_{w,a} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\omega_{w,a}} - \frac{1}{2} \right).$$

In seguito, si riterrà implicito questo passaggio e, quindi, nelle tabelle relative ai parametri espressi in unità di griglia, verranno direttamente riportati i valori di  $\omega_w$  ed  $\omega_a$ .

Eseguendo questo procedimento, si ottiene, tra gli altri parametri, il seguente passo temporale

$$\Delta t = 1,46 \times 10^{-6} \text{ (secondi)}.$$

Ne segue che, per simulare i 30 secondi del processo, occorrerebbero circa 20 milioni e mezzo di iterate. Evidentemente, vista anche la dimensione del dominio e la complessità dell'algoritmo, il tempo computazionale richiesto sarebbe troppo elevato.

Si effettua, allora, un riscaldamento di tutti i parametri mantenendo però fissi il numero di Reynolds e il numero di capillarità. Infatti, questi due indici caratterizzano il processo fisico, che presenta, quindi, le stesse caratteristiche a parità di questi valori.

Il numero di Reynolds e il numero di capillarità sono adimensionali, questo implica che non dipendono dalle unità di misura con cui lavoriamo, essi possono, dunque, essere calcolati indifferentemente utilizzando i parametri fisici o quelli del modello.

Nel caso in esame, abbiamo due numeri di Reynolds: quello nell'acqua e quello nell'aria, che sono definiti come segue:

$$Re_{w,a} = \frac{u h}{\nu_{w,a}}, \quad (6.2)$$

dove  $u$  è la velocità dell'acqua all'inlet.  
 Il numero di capillarità è, invece, dato da

$$C = \frac{u \nu_w \rho_w}{\sigma_{w/a}}. \quad (6.3)$$

Senza nessun fattore di scala, le velocità all'inlet espresse in unità di griglia, sono

$$\begin{aligned} \tilde{u}_1 &= 0,0000367 \delta x / \delta t, \\ \tilde{u}_2 &= 0,000123 \delta x / \delta t. \end{aligned}$$

Moltiplichiamo queste due velocità per un fattore di scala  $M$  ( $> 1$ ). Questo significa che le nostre velocità saranno  $M$  volte più elevate, ne segue che il fenomeno sarà  $M$  volte più veloce, cioè quello che accadeva prima in  $\tilde{T}$  iterate, accadrà ora in  $\tilde{T}/M$  iterate.

È chiaro, dalla (6.2) che un aumento di un fattore  $M$  delle velocità, implica un aumento di un fattore  $M$  dei numeri di Reynolds. Per mantenere lo stesso numero di Reynolds che avevamo in partenza, dobbiamo moltiplicare per  $M$  anche le viscosità cinematiche.

Dopo questo riscaldamento, dalla (6.3), deduciamo che il numero di capillarità è aumentato di un fattore  $M^2$  (un fattore  $M$  per la velocità e un altro per la viscosità). Allora, per riottenere il numero di capillarità iniziale, dobbiamo moltiplicare  $\sigma_{w/a}$  per un fattore  $M^2$ .

Per verificare la correttezza di questo scaling, abbiamo effettuato tre simulazioni in due dimensioni, per tre diversi valori del fattore  $M$ . In particolare, abbiamo posto  $M = 1, 10, 100$ .

Si è considerato un dominio rettangolare (che può essere pensato come la sezione trasversale di un filtro cilindrico), di larghezza  $2R = 4$  cm e altezza dello strato del mezzo poroso  $h = 0,9$  cm. La concentrazione del mezzo poroso è pari al 30% (in 2D, oltre il 35% l'acqua non riesce più a passare, si supera il limite di percolazione) di cui il 20% composto da rettangoli solidi  $2 \times 2$  e il restante 10% da rettangoli  $1 \times 1$ . La lunghezza  $2R$  è stata discretizzata con 94 punti nodali. Il tempo simulato corrisponde a circa un secondo, quindi, la simulazione è tutta relativa solo alla fase di preinfusione, cioè la velocità dell'acqua all'inlet rimane sempre al valore  $u_1$ .

Gli altri parametri sono stati convertiti in unità di griglia con la procedura che abbiamo appena descritto e i loro valori sono riportati in Tab. 6.6 al variare del parametro  $M$ .

Queste simulazioni non hanno lo scopo di essere realistiche, infatti, con questa concentrazione del mezzo poroso e lavorando in  $2D$ , basta 1 secondo per ottenere la bagnazione dello strato di caffè, in realtà, come abbiamo visto, dopo 4 secondi il processo di bagnazione non è ancora terminato. La loro utilità è solo quella di attestare che il procedimento di scaling dei parametri ci permette di simulare correttamente il fenomeno in un minor numero di iterate.

*Tabella 6.6: Parametri del modello lattice Boltzmann al variare del fattore di scala  $M$ . Tutti i valori sono espressi in unità di griglia.*

Parametri	$M$		
	1	10	100
$\tilde{u}_1$	0,0000367	0,000367	0,00367
$\omega_w$	1,9999	1,9991	1,9911
$\omega_a$	1,9985	1,9849	1,8589
$\tilde{\sigma}_{w/a}$	0,000166	0,00166	0,0166
$\tilde{T}$	670000	67000	6700
$\omega_\alpha$	1.990	1.904	1.330

Si osservi che in Tab. 6.6, è riportato il parametro di rilassamento della funzione colore  $\omega_\alpha$ . Questo parametro è relativo solo al modello, non ha un corrispondente fisico. Come abbiamo visto nel Capitolo 4, si cerca, in generale, di porre  $\omega_\alpha$  vicino a 2, per limitare l'effetto di diffusione del colore.

Dovendo, però, fare un confronto tra set di parametri ottenuti a diversi fattori di scala, anche il parametro  $\omega_\alpha$  va opportunamente scalato per ottenere risultati che siano in accordo tra di loro. Infatti, se per  $M = 1$  abbiamo un  $\omega_\alpha$  molto vicino a 2, questo significa che il fenomeno di diffusione del colore è molto limitato; cioè, ad ogni iterata, il fronte diffonde molto poco, però il numero di iterate è 10 o 100 volte più elevato che negli altri casi.

Così, anche se per  $M = 10$  o  $M = 100$ , la diffusione è più consistente (perché  $\omega_\alpha$  risulta più piccolo quando viene scalato), il numero di iterate per cui si verifica è  $M$  volte più basso e dunque si ottengono, per tempi corrispondenti, gli stessi risultati.

In pratica,  $\omega_\alpha^M$  (dove l'apice  $M$  sta ad indicare a quale fattore di scala il parametro è relativo) è stato scalato come segue: si è fissato, per  $M = 1$ , un valore  $\omega_\alpha^1$  che garantisca stabilità numerica; nei casi  $M \neq 1$ , si è moltiplicata



per  $M$  la quantità

$$\nu_\alpha^1 = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\omega_\alpha^1} - \frac{1}{2} \right),$$

ottenendo così  $\nu_\alpha^M = M\nu_\alpha^1$  e, infine, si è determinato  $\omega_\alpha^M$  invertendo la relazione

$$\nu_\alpha^M = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\omega_\alpha^M} - \frac{1}{2} \right),$$

in analogia con quanto avviene per i parametri di rilassamento delle distribuzioni di massa. Anche  $\nu_\alpha$ , come  $\omega_\alpha$ , non ha significato fisico.

Nelle simulazioni effettive, in cui fissiamo sempre  $M = 100$ ,  $\omega_\alpha$  è comunque scelto il più possibile vicino a 2 per avere una dinamica del fronte in accordo con la (4.1). Questo significa che un'analogia simulazione, per  $M < 100$ , e i parametri riscalati con questa stessa procedura, avrebbe un  $\omega_\alpha$  ancora più vicino a 2, e quindi, in alcuni casi, diventerebbe numericamente instabile.

In Fig. 6.3, sono riportati i fronti d'avanzamento dell'acqua nei tre casi in quattro istanti diversi. Viene rappresentata la funzione colore  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , dove in rosso si rappresentano i punti per cui  $\phi(\mathbf{x}, t) = 1$ , cioè quelli occupati dall'acqua, in blu quelli per cui  $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ , cioè quelli occupati dall'aria. Il mezzo poroso e le pareti del filtro sono rappresentati in azzurro. Si può osservare che i risultati sono, qualitativamente, in ottimo accordo tra di loro. In Fig. 6.4 sono riportate le curve di bagnazione nei tre casi. La curva di bagnazione è la percentuale di nodi di fluido raggiunta dall'acqua al variare del tempo. Come abbiamo visto nel paragrafo 5.3.1, un nodo di fluido  $\mathbf{x}$  si dice bagnato, quando  $\phi(\mathbf{x}, t)$  supera un valore di soglia  $\phi_{wet}$ . In queste simulazioni  $\phi_{wet} = 0.4$ .

La curva di bagnazione è, dunque, costruita calcolando la frazione di nodi fluidi raggiunti dall'acqua rispetto al numero totale di nodi di fluido. Si definisce così, l'*indice di bagnazione*  $ib(t)$ :

$$ib(t) = \frac{N_{wet}(t)}{N_{fluid}(t)}, \quad (6.4)$$

dove  $N_{wet}(t)$ , è il numero di punti nodali raggiunti dall'acqua al tempo  $t$  e  $N_{fluid}(t)$  è il numero di nodi di fluido al tempo  $t$  (anche  $N_{fluid}$ , in generale, è funzione del tempo, perché alcuni nodi di caffè possono diventare fluidi e nodi fluidi possono trasformarsi in nodi di caffè). Infine, in Fig. 6.5, sono riportate le velocità del flusso all'istante finale delle simulazioni, in ognuno dei tre casi.

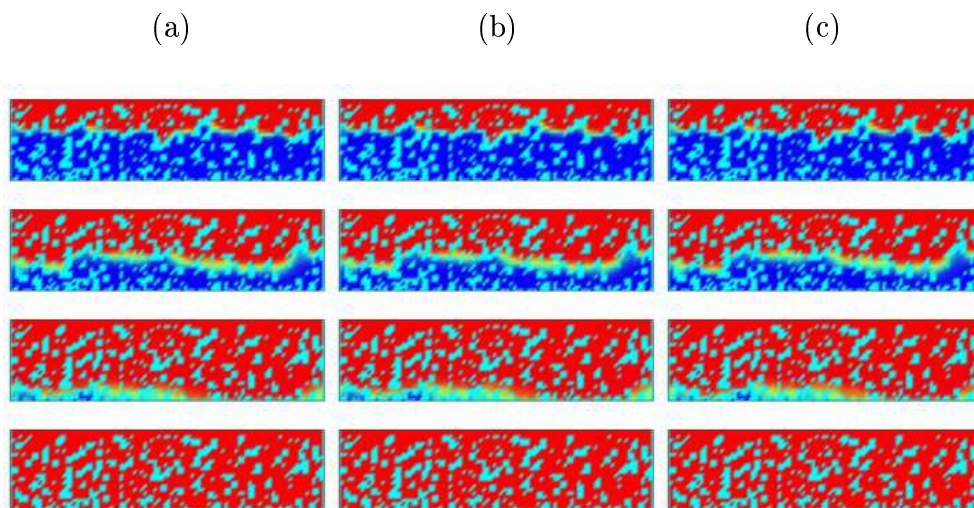


Figura 6.3: Fronte di avanzamento dell'acqua, in quattro istanti  $t = 0, 1; 0, 3, 0, 5, 0, 7$ , e per diversi valori del fattore di scala  $M$ : (a)  $M = 1$ ; (b)  $M = 10$ ; (c)  $M = 100$ .

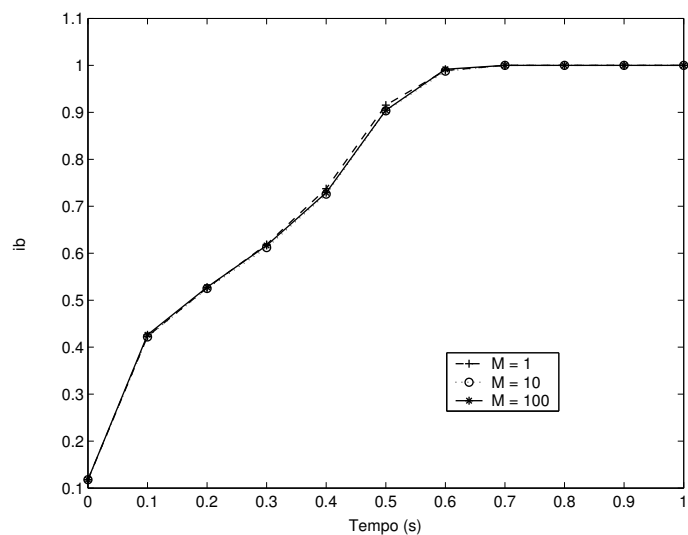
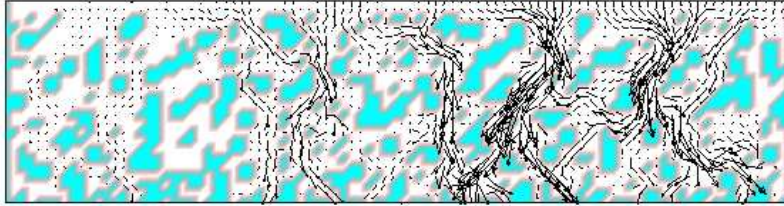
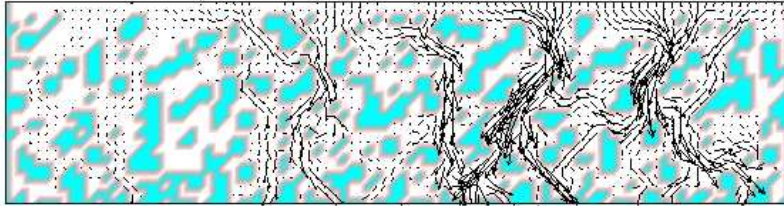


Figura 6.4: Curve di bagnazione per i tre valori di scala  $M = 1, 10, 100$ .

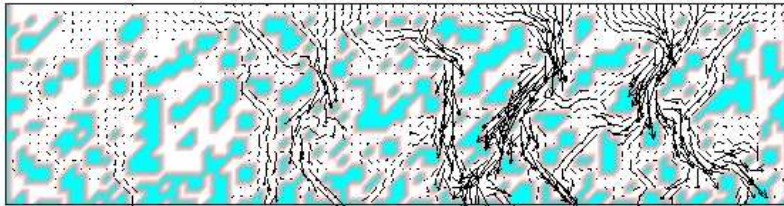
(a)



(b)



(c)



*Figura 6.5: Velocità del flusso all'istante  $t = 1$  secondo per i tre fattori di scala: (a)  $M = 1$ , (b)  $M = 10$ , (c)  $M = 100$ .*

Le simulazioni tridimensionali sono state effettuate con un fattore di scala  $M = 100$ , i parametri utilizzati sono raccolti in Tab. 6.7. Il mezzo poroso

*Tabella 6.7: Parametri del modello lattice Boltzmann utilizzati nelle simulazioni tridimensionali, sono stati ottenuti per un fattore di scala  $M = 100$ . Tutti i valori sono espressi in unità di griglia.*

Parametri	Valori
$\tilde{u}_1$	0,00367
$\tilde{u}_2$	0,0123
$\omega_w$	1,9911
$\omega_a$	1,8589
$\tilde{\sigma}_{w/a}$	0,0166
$\tilde{T}$	201000
$\omega_\alpha$	1,95
$\phi_{wet}$	0,4

simulato ha una concentrazione  $P_s = 37\%$  in accordo con il valore misurato (vedi paragrafo 6.2.2), di cui il 27% è composto da cubetti di dimensione  $2 \times 2 \times 2$ , mentre il restante 10% è costituito da cubetti  $1 \times 1 \times 1$ .

I parametri relativi al modello per l'erosione, il trasporto e il deposito di particelle, sono raccolti in Tab. 6.8, dove  $P_f$  indica la percentuale di nodi fluidificabili.

*Tabella 6.8: Parametri relativi all'algoritmo di erosione, trasporto e deposito delle polveri fini.*

Parametri	Valori
$N$	100
$N_{er}$	20
$P_f$	10%
$N_s$	75
$N_f$	25
$v_{max} (\delta x / \delta t)$	0,0123

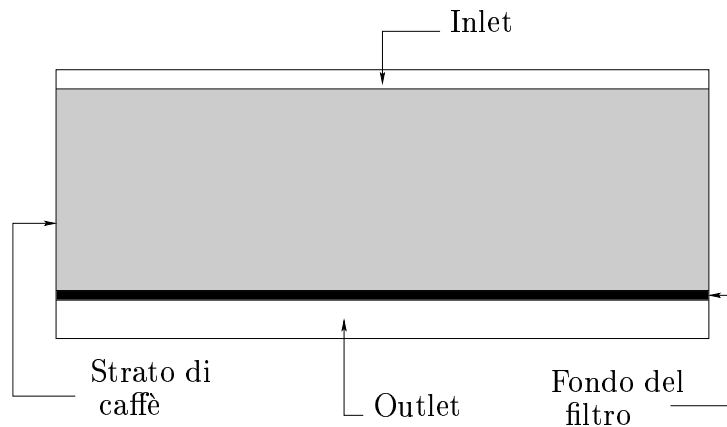
## 6.5 Risultati numerici

Dopo aver discusso il setting delle nostre simulazioni, presentiamo i risultati numerici ottenuti ed il confronto con i dati sperimentali raccolti e illustrati nel paragrafo 6.2. Se non è diversamente specificato, i parametri utilizzati sono quelli dati nel paragrafo precedente.

### 6.5.1 Discretizzazione del dominio

Per prima cosa, vediamo come si presenta il nostro dominio. Esso è un cilindro il cui raggio è costituito da 47 punti nodali e la cui altezza è discretizzata da 28 punti nodali. Andando dall'alto verso il basso del dominio, questi 28 punti nodali, sono così suddivisi (vedi Fig. 6.6):

- 2 livelli all'inlet sono liberi dal mezzo poroso;
- 21 livelli sono occupati dallo strato di caffè;
- 1 livello, subito sotto allo strato di caffè, è occupato dal fondo forato del filtro;
- 4 livelli si trovano al di sotto del filtro.

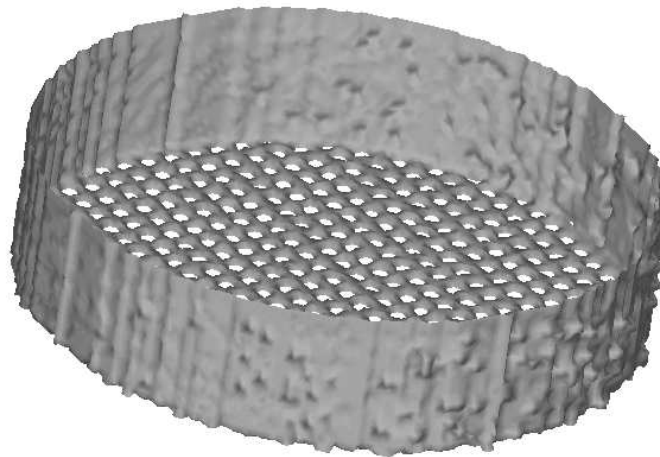


*Figura 6.6: Schema della suddivisione dei livelli del dominio cilindrico.*

I quattro livelli al di sotto del filtro servono per lasciare che la dinamica della fuoriuscita dell'acqua dal filtro, non sia influenzata dalle condizioni di outlet.

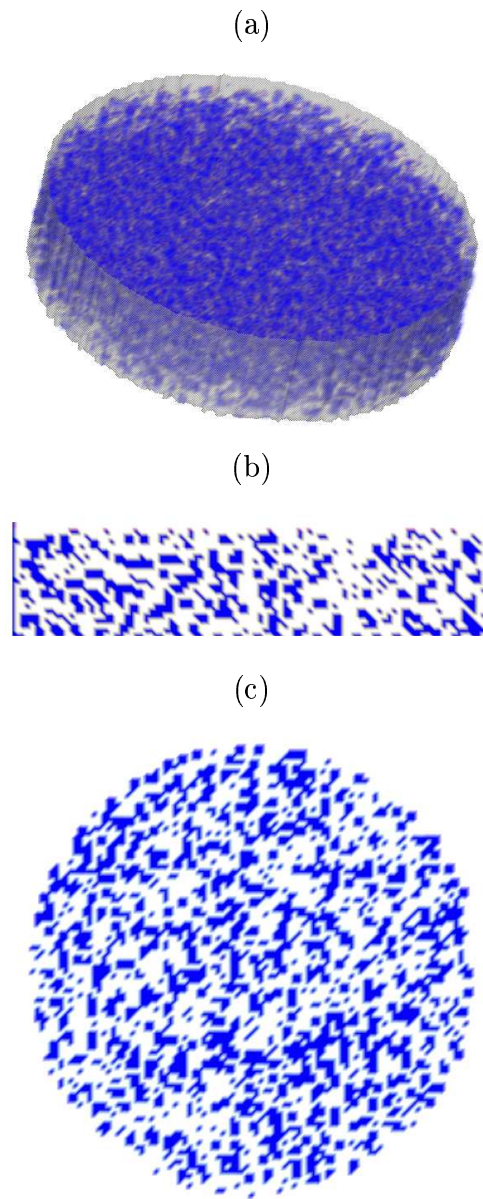
Inoltre, in questo modo, le condizioni di outlet, che hanno bisogno non solo dei dati dell'ultimo livello, ma anche di quelli dei due livelli sovrastanti, possono essere applicate senza il rischio di imbattersi in nodi di caffè che ne altererebbero il funzionamento. Nelle visualizzazioni e nel calcolo dei risultati, questi quattro strati sono generalmente ignorati, il loro ruolo è puramente tecnico.

Come abbiamo detto, il filtro reale ha, sul fondo, piccoli fori circolari. Con una griglia quadrata, non molto fine come la nostra, non era possibile simulare fori circolari. Inoltre, le condizioni di bounce back, che vengono applicate sul fondo del filtro, danno problemi se i bordi solidi sono molto curvi. I fori sono, quindi, stati approssimati con dei quadratini di lato  $2 \delta x$ . Il filtro è rappresentato in Fig. 6.7. Ricordiamo che il mezzo poroso è stato



*Figura 6.7: Filtro cilindrico con fondo forato utilizzato nelle simulazioni.*

posto ad una concentrazione  $P_s = 37\%$ , di cui il 27% composto da cubetti  $2 \times 2 \times 2$  e il restante 10% da cubetti  $1 \times 1 \times 1$ . In Fig. 6.8, possiamo vedere un'immagine tridimensionale del mezzo poroso, una sezione orizzontale e una verticale.



*Figura 6.8: Mezzo poroso simulato: (a) immagine 3D del mezzo poroso, in grigio semitrasparente è rappresentato il bordo del filtro; (b) sezione verticale del mezzo poroso; (c) sezione orizzontale del mezzo poroso.*

## 6.5.2 Pressione all'inlet e nell'interno del dominio

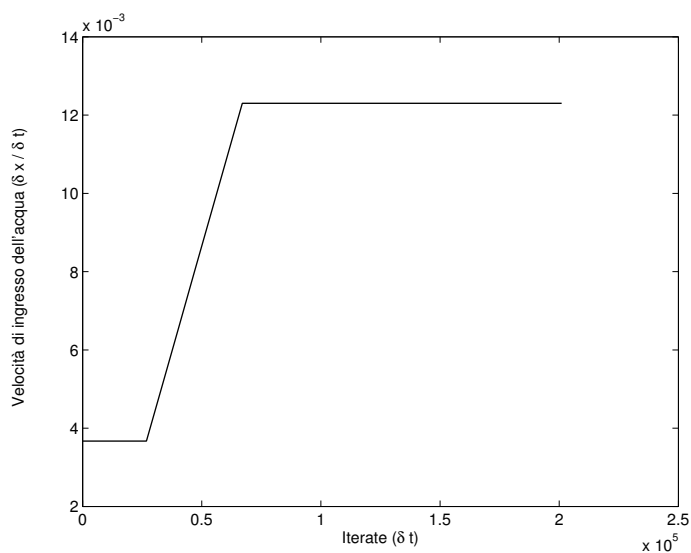
Un dato noto, nel processo di percolazione del caffè, è la pressione dell'acqua all'inlet. Essa segue il profilo mostrato in Fig. 6.1.

Le nostre condizioni di inlet, però, ci permettono di specificare la velocità del flusso. Così, con il procedimento illustrato nel paragrafo 6.2.1, abbiamo misurato le velocità corrispondenti ai due livelli di pressione in gioco: 1 *bar* e 9 *bar*.

La conversione dei parametri in unità di griglia, ci ha permesso di determinare le due velocità di inlet:

- $\tilde{u}_1 = 0,00367 \delta x / \delta t$ ;
- $\tilde{u}_1 = 0,0123 \delta x / \delta t$ .

In particolare, il profilo di velocità imposto all'inlet è quello rappresentato in Fig. 6.9. La velocità è inizialmente posta al valore  $\tilde{u}_1$ , rimane costante per



*Figura 6.9: Profilo della velocità del flusso all'inlet in funzione del numero di iterata.*

26800 iterate (equivalenti a 4 secondi), poi cresce linearmente da  $\tilde{u}_1$  a  $\tilde{u}_2$  in 40200 iterate (pari a 6 secondi) e, infine, rimane al valore  $\tilde{u}_2$  per le rimanenti 134000 iterate.



Questa velocità specificata all'inlet, genera una pressione. La pressione del fluido, espressa in unità di griglia, può essere calcolata come

$$\tilde{p}(\mathbf{x}, t) = c_s^2 (\tilde{\rho}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\varrho}), \quad (6.5)$$

dove  $\tilde{\varrho}$  è la densità media del fluido incomprimibile e  $\tilde{p}$  rappresenta la pressione espressa in unità di griglia.

Questa definizione di pressione è stata utilizzata da Manwart, Aaltosalmi, Koponen, Hilfer e Timonen [52] e da Kehrwald [53], per ottenere dei risultati confrontabili con valori fisici, cosa che, utilizzando la definizione  $\tilde{p}(\mathbf{x}, t) = c_s^2 \tilde{\rho}(\mathbf{x}, t)$ , non sarebbe possibile. È chiaro che le due definizioni di  $\tilde{p}$  sono in relazione tra di loro e, se si è interessati a risultati adimensionali (come spesso accade nelle simulazioni lattice Boltzmann), è indifferente utilizzare l'una o l'altra.

La pressione  $p$ , è misurata in Pascal =  $N/m^2 = Kg/(s^2m)$ , allora, da  $\tilde{p}$  si può ricavare  $p$ , grazie alla seguente relazione

$$p = \tilde{p} \frac{\Delta m}{(\Delta t)^2 \Delta x} \text{ (Pascal)}.$$

La pressione  $p$  viene poi convertita in *bar* moltiplicandola per  $10^{-5}$ .

Utilizzando questo procedimento, si ottiene che il profilo di pressione, che risulta imposto all'inlet, è quello rappresentato in Fig. 6.10. Nel grafico è riportata anche la curva misurata sperimentalmente. Si può osservare che le due curve sono molto vicine tra di loro.

Durante la simulazione, la pressione assume un profilo lineare dentro al mezzo poroso. In Fig. 6.11, possiamo vedere l'andamento della pressione in immagini tridimensionali e in sezioni trasversali del dominio. Il rosso corrisponde al livello più alto della pressione (circa 9 *bar*) e il blu al livello più basso (circa 1 *bar*), tutte le gradazioni dal rosso al blu rappresentano valori intermedi.

### 6.5.3 Fase di preinfusione e bagnazione del caffè

La fase di preinfusione è costituita dai primi 4 secondi del processo, in questi 4 secondi la pressione dell'acqua si mantiene ad 1 *bar*. Abbiamo già definito l'indice di bagnazione  $ib(t)$  (vedi equazione (6.4)), esso rappresenta una misura del livello a cui l'acqua è scesa.

In Tab. 6.9, sono riportati i valori di  $ib(t)$  a 2 e 4 secondi confrontati con gli intervalli misurati sperimentalmente. I nostri valori sono compresi tra i

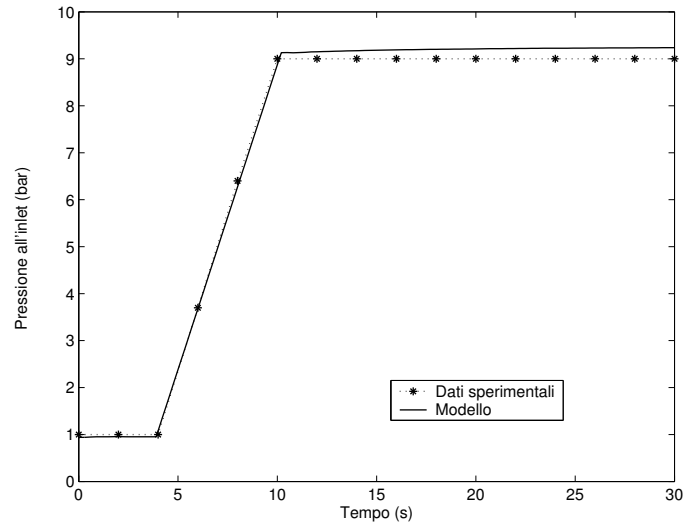


Figura 6.10: Profilo della pressione che risulta imposta all'inlet confrontato con l'andamento misurato sperimentalmente.

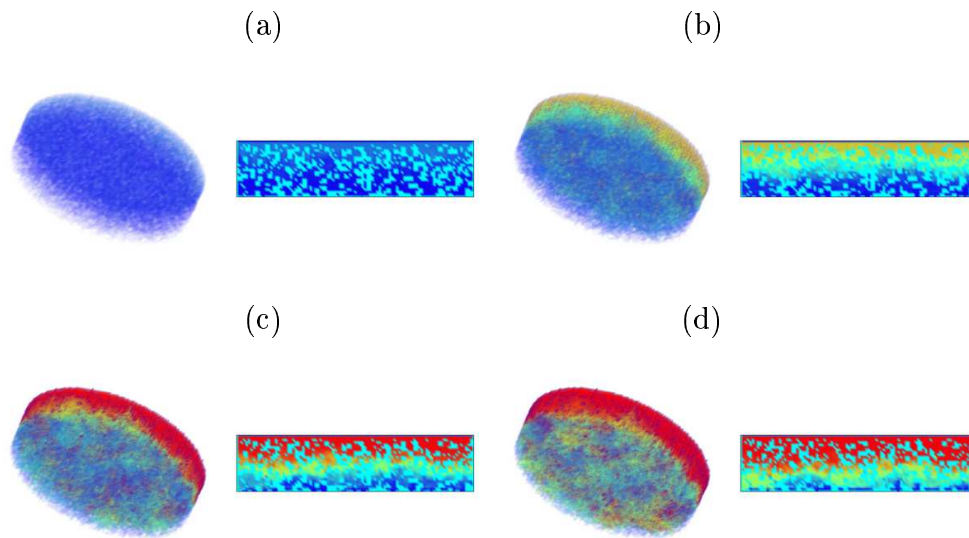


Figura 6.11: Andamento della pressione in diversi istanti. Il rosso corrisponde a circa 9 bar, mentre il blu rappresenta 1 bar. Gli istanti a cui le immagini si riferiscono sono: (a) 4 s; (b) 7 s; (c) 10 s; (d) 20 s.

Tabella 6.9: Indice di bagnazione calcolato dal modello e confronto con i valori sperimentali.

t (s)	Bagnazione Min. misurato	Bagnazione Max. Misurato	Bagnazione Modello
2	45 %	49 %	46,4 %
4	58 %	63 %	61,9 %

minimi e massimi valori misurati. In Fig. 6.12, possiamo vedere il fronte di avanzamento a 2 e 4 secondi.

Dopo 4 secondi, non tutto lo strato di caffè è stato bagnato. La pressione comincia a salire e l'acqua finisce di bagnare il caffè e comincia ad uscire dal filtro. Quando tutto il caffè è stato bagnato, termina la fase di bagnazione. In Fig. 6.13, possiamo vedere la curva di  $ib(t)$  durante tutto il processo. Naturalmente, questo indice di bagnazione è calcolato relativamente alla parte di dominio sopra al fondo del filtro (cioè la parte di dominio di interesse). Per ragioni implementative, si calcola anche un indice di bagnazione su tutto il dominio, quando questo secondo indice raggiunge il 98,5%, il modello viene automaticamente trasformato in un modello ad un fluido (cioè si pone  $\phi(\mathbf{x}, t) = 1$  per ogni  $\mathbf{x}$  nodo di fluido). Questo viene fatto per alleggerire il calcolo e assicurare maggiore stabilità al modello, infatti, le distribuzioni  $\alpha_i(\mathbf{x}, t)$ , per le quali non è previsto un modello MRT, potrebbero più facilmente diventare instabili.

#### 6.5.4 Calcolo del flusso di caffè in uscita

Vogliamo ora confrontare il volume di caffè in uscita, misurato sperimentalmente, con quello calcolato dal nostro modello.

Innanzitutto, ricordiamo che il flusso di un fluido, attraverso una superficie  $S$ , è dato da

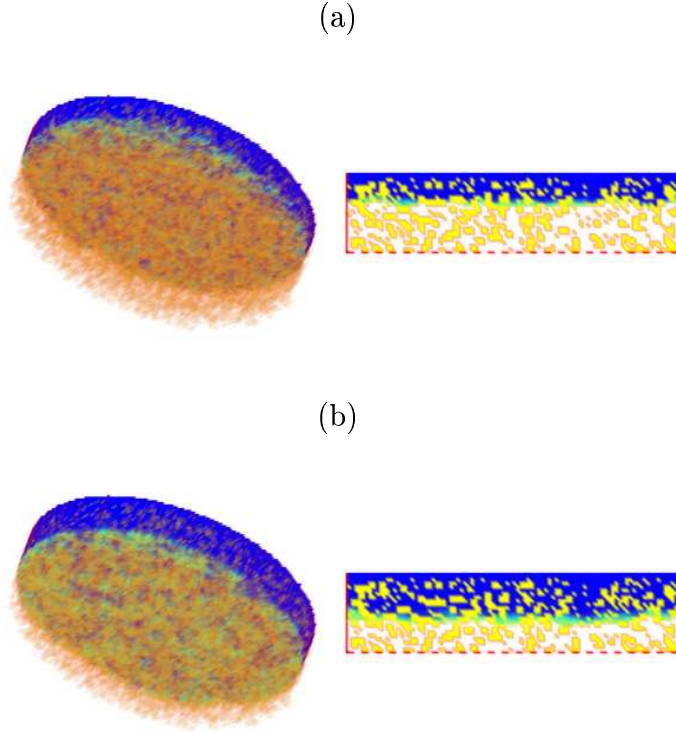
$$F(t) = \int_S \rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ds, \quad (6.6)$$

dove  $\mathbf{n}$  è il versore uscente normale alla superficie  $S$ .

Nel nostro caso,  $S$  è la superficie dei fori del filtro e  $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = -u_z$ , perché  $\mathbf{n} = (0, 0, -1)$ .

La massa di fluido che attraversa  $S$  in un tempo  $T$ , è data da

$$M(T) = \int_0^T F(t) dt. \quad (6.7)$$



*Figura 6.12: Bagnazione dello strato di caffè nella fase di preinfusione. In blu è rappresentata l'acqua che sta scendendo e, in giallo, il caffè. I due istanti considerati sono: (a) 2 s; (b) 4 s.*

La discretizzazione della (6.6), ci permette di calcolare il flusso in unità di griglia. In particolare, sia  $W$  l'insieme di tutti i nodi del fondo del filtro non solidi, allora il flusso in unità di griglia  $\tilde{F}(t)$ , è dato da

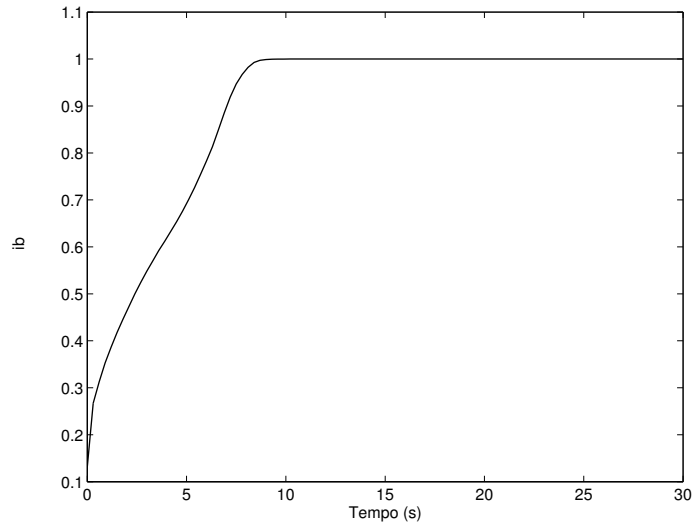
$$\tilde{F}(t) = - \sum_{x \in W} \tilde{\rho}(\mathbf{x}, t) \tilde{u}_z(\mathbf{x}, t) (\delta x)^2 = - \sum_{x \in W} \tilde{\rho}(\mathbf{x}, t) \tilde{u}_z(\mathbf{x}, t), \quad (6.8)$$

dove il simbolo  $\tilde{\cdot}$  indica le grandezze espresse in unità di griglia.

La seconda uguaglianza della (6.8) segue dal fatto che l'unità spaziale di griglia  $\delta x$ , è uguale ad 1, dunque  $ds = (\delta x)^2 = 1$ .

La massa di fluido che esce in un tempo pari a  $\tilde{T}$  iterate, si ottiene discretizzando la (6.7)

$$\tilde{M}(\tilde{T}) = \sum_{t=0}^{\tilde{T}} \tilde{F}(t) \delta t = \sum_{t=0}^{\tilde{T}} \tilde{F}(t),$$



*Figura 6.13: Curva di bagnazione.*

dove si utilizza il fatto che  $\delta t = 1$ .

La massa  $\widetilde{M}(\widetilde{T})$ , espressa in unità di griglia, viene trasformata in chilogrammi dall'usuale relazione

$$M(T) = \widetilde{M}(\widetilde{T})\Delta m,$$

dove  $\Delta m$  è dato dalla (6.1).

Si passa poi al volume dividendo per la densità del caffè che è circa uguale a quella dell'acqua  $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$ .

In questo modo, abbiamo calcolato il volume di caffè in uscita e lo abbiamo confrontato con i risultati sperimentali (vedi Tab. 6.3). Il grafico di confronto è riportato in Fig. 6.14. In particolare, i punti indicati con \*, sono i valori sperimentali, le barre verticali indicano l'errore sul dato misurato e la linea continua rappresenta il risultato del modello.

### **6.5.5 Flusso al variare della concentrazione del mezzo poroso**

La quantità di caffè che esce dal filtro dipende, naturalmente, anche da quanto lo strato di caffè è pressato. Questo fatto è confermato dalla prova sperimentale descritta nel paragrafo 6.2.5.

Nel nostro modello, non si può impostare la quantità di caffè in grammi,

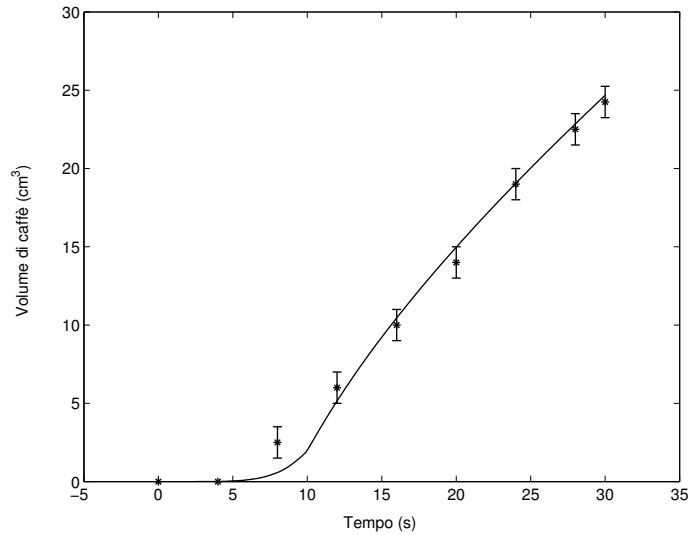


Figura 6.14: Volume di caffè che esce dal filtro in funzione del tempo.

ma soltanto la percentuale di nodi di caffè rispetto a tutti i punti nodali del dominio. Abbiamo, dunque, variato la concentrazione del mezzo poroso, a parità di tutte le altre condizioni, per ottenere l'andamento del flusso in uscita in funzione della concentrazione di caffè.

I risultati ottenuti sono raccolti nella tabella Tab. 6.10. Facendo un fit dei dati con un polinomio del secondo ordine, si osserva che i punti si distribuiscono lungo una parabola  $p(P_s)$ , di equazione

$$p(P_s) = 1756,0 P_s^2 - 1696,5 P_s + 412,5, \quad (6.9)$$

(vedi Fig. 6.15).

Quindi, all'aumentare della concentrazione il flusso diminuisce in modo quadratico.

A questo punto, vogliamo confrontare i nostri risultati numerici con i valori sperimentali. Il problema è che non conosciamo la concentrazione del caffè in nessuno dei casi sperimentali. Sappiamo, però, che, stabilita la concentrazione per uno dei tre esperimenti, le altre due si ottengono ricordando che l'aumento (diminuzione) di un grammo di caffè, fa aumentare (diminuire) la concentrazione del 2,7% (a patto che il volume dello strato di caffè rimanga costante).

Tabella 6.10: Volume di caffè che si ottiene in uscita al variare della concentrazione del mezzo poroso.

Concentrazione (%)	Volume ( $cm^3$ )
31	55,8
34	38,0
37	24,7
40	15,0
43	8,7
46	3,0

Così si considera il primo valore sperimentale, che ci dice che a 6 gr. di polvere di caffè, corrispondono 53  $cm^3$  di caffè in uscita (vedi Tab. 6.4). Dalla (6.9), si determina a quale concentrazione corrispondono 53  $cm^3$ , indichiamo questo valore con  $P_s^1$ , allora  $p(P_s^1) = 53$ . Le altre due concentrazioni,  $P_s^2$  e  $P_s^3$ , relative a 7 ed 8 grammi di caffè rispettivamente, si ottengono come segue:

- $P_s^2 = P_s^1 + 0,027$  (7 gr.);
- $P_s^3 = P_s^2 + 0,027 = P_s^1 + 2 \cdot 0,027$  (8 gr.).

A questi due punti corrispondono gli altri due volumi misurati (vedi Tab. 6.4). Ora possiamo riportare su di un grafico i valori del modello, la relativa curva dei minimi quadrati del secondo ordine e i punti sperimentali, come mostrato in Fig. 6.15. In particolare, i punti rappresentati da \* sono quelli sperimentali, quelli denotati da o sono i valori del modello e la curva continua è il polinomio di secondo grado che più si avvicina ai valori numerici.

### 6.5.6 Erosione, trasporto e deposito delle polveri fini

L'algoritmo di erosione, trasporto e deposito delle polveri fini influenza i risultati relativi al volume di caffè in uscita. Infatti, la formazione di uno strato più compatto di caffè sul fondo limita il flusso in uscita e lo scioglimento di alcuni nodi di caffè facilita il passaggio dell'acqua in alcune zone.

A titolo di esempio, diciamo che, se si diminuisce il numero di particelle che possono essere staccate dai nodi non fluidificabili  $N_{er}$  (a parità di tutti i parametri e anche della disposizione del mezzo poroso) e si pone  $N_{er} = 10$ , invece

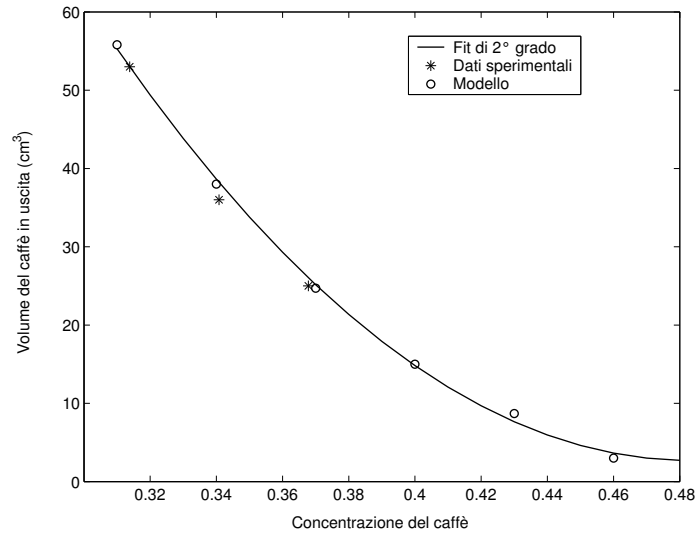


Figura 6.15: Volume di caffè che esce dal filtro in funzione della concentrazione del mezzo poroso. Confronto tra dati sperimentali e risultati numerici.

che  $N_{er} = 20$ , il volume di caffè in uscita passa da  $24,7 \text{ cm}^3$  a  $29,8 \text{ cm}^3$ . Questo significa che questa parte del modello influenza anche i risultati che abbiamo già illustrato, dunque, la loro correttezza dipende anche dal setting di questo automa cellulare.

Per quanto riguarda la valutazione quantitativa del fenomeno di distacco, trasporto e deposito, gli esperimenti sono tutt'ora in corso. È, infatti, estremamente difficile misurare come varia la concentrazione del caffè durante il processo e in funzione della distanza dal fondo del filtro. Gli approcci fin qui utilizzati, hanno portato a misure molto grossolane con errori troppo elevati perché i dati si possano considerare quantitativamente attendibili. Da un punto di vista qualitativo, quello che gli esperimenti sembrano confermare, è che si verifica una diminuzione della concentrazione del caffè nelle zone più alte del filtro e un accumulo piuttosto consistente verso il fondo.

Nel modello, per valutare la variazione della concentrazione di caffè, abbiamo suddiviso la parte del dominio occupata dal caffè in tre strati (composti da 7 punti nodali ciascuno, pari a circa 3 mm) e abbiamo calcolato la con-



centrazione del mezzo poroso in ogni strato in funzione del tempo. Ricordiamo che la concentrazione è data dal numero di nodi di caffè sul numero totale di punti dello strato. È chiaro che questa quantità varia con il tempo, per via dei nodi di caffè che possono formarsi o scomparire. La *variazione* della concentrazione del caffè si ottiene sottraendo, dalla concentrazione calcolata, il valore iniziale della concentrazione stessa. Il risultato ottenuto è mostrato in Fig. 6.16.

In Fig. 6.17, possiamo vedere delle sezioni del filtro in cui sono raffigurati

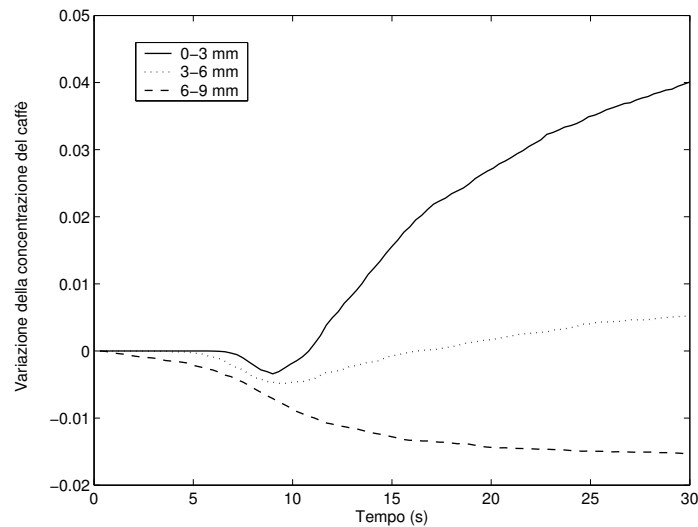
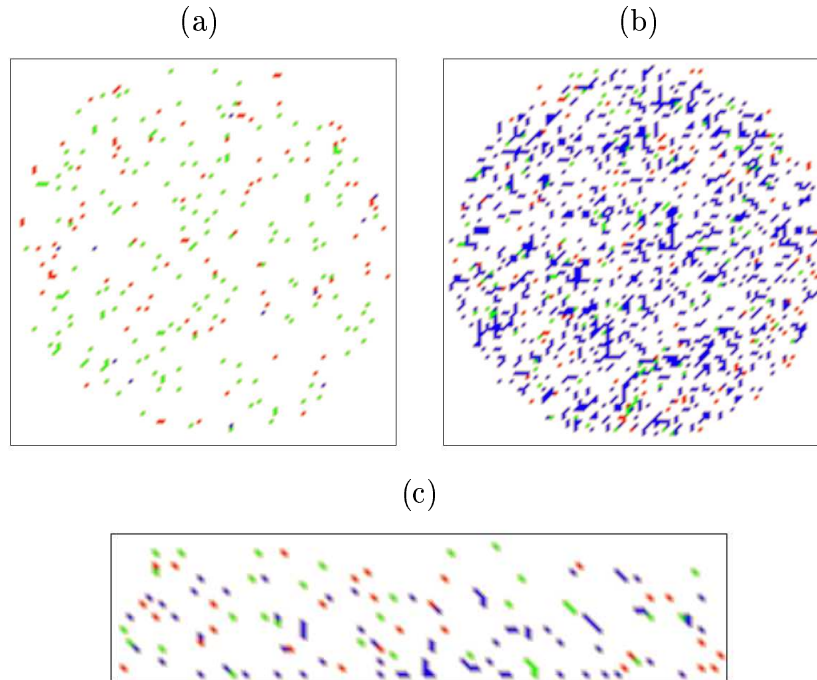


Figura 6.16: Variazione della concentrazione della polvere di caffè calcolata dal modello in tre strati in cui è suddiviso il dominio.

i nodi fluidificabili e i nodi che hanno effettivamente subito una trasformazione (da fluido a solido o da solido a fluido) alla fine della simulazione. In particolare, nelle immagini sono rappresentati

- **in rosso:** i nodi di caffè fluidificabili;
- **in verde:** i nodi di caffè che sono effettivamente diventati fluidi;
- **in blu:** i nodi fluidi che si sono trasformati in nodi di caffè.

La Fig. 6.17 (a) è una sezione orizzontale presa in prossimità dell'inlet (cioè molto in alto nello strato di caffè), come si può vedere molti sono i nodi fluidificabili che si sono effettivamente trasformati in nodi fluidi, mentre i nodi



*Figura 6.17: Sezioni del dominio in cui sono rappresentati i nodi fluidificabili (in rosso), i nodi di caffè che sono diventati fluidi (in verde) e i nodi di fluido che sono diventati di caffè (in blu). Sezioni orizzontali: (a) livello in prossimità dell'inlet; (b) livello immediatamente sopra al fondo del filtro. Sezione verticale: (c) presa nel mezzo del dominio.*

fluidi che sono diventati solidi sono pochissimi.

Al contrario, la Fig. 6.17 (b) è una sezione orizzontale in prossimità del fondo e si può osservare come il fenomeno di deposito sia molto consistente.

Queste osservazioni sono confermate dalla sezione verticale (Fig. 6.17 (c)).

Purtroppo, una verifica quantitativa di questi risultati non è ancora possibile, perché non sono state messe a punto delle tecniche che ci permettano di misurare in modo accurato la variazione di concentrazione della polvere di caffè alla fine del processo.

## 6.6 Risultati numerici al variare di alcuni parametri

Dopo aver simulato il caso realistico, vediamo in che modo alcune variazioni sui parametri influenzano i risultati.

Le variazioni che abbiamo considerato sono le seguenti:

- un diverso profilo di pressione all'inlet;
- una concentrazione di polvere di caffè non uniforme, in particolare più bassa vicino al bordo del filtro;
- un filtro a forma di tronco di cono;
- una geometria del dominio diversa da quelle in uso.

### 6.6.1 Un diverso profilo di pressione all'inlet

Naturalmente, il profilo di pressione all'inlet può essere modificato in un'infinità di modi. È chiaro, però, che non vogliamo qualcosa di completamente diverso da quello che viene attualmente utilizzato.

I tre profili che abbiamo messo a confronto sono quelli rappresentati in Fig. 6.18, dove con Profilo 1, Profilo 2 e Profilo 3 ci si riferisce ai profili con pressione finale 9, 10 e 11 *bar*, rispettivamente. In tutti e tre i casi la fase di preinfusione è identica: si rimane ad 1 *bar* per i primi due secondi, poi si passa linearmente da 1 a 3 *bar* in tre secondi. In questo modo, la fase di preinfusione è più lunga di un secondo e il livello di pressione è mediamente più alto che nel profilo usuale (vedi Fig. 6.1). A questo punto, i tre profili si diversificano: in cinque secondi si passa da 1 *bar* a 9, 10 e 11 *bar* rispettivamente e poi si rimane al livello raggiunto fino alla fine del processo.

Per imporre questi profili di pressione, abbiamo calcolato i corrispondenti profili delle velocità ottenendo i valori riportati in Tab. 6.11 (le velocità sono espresse in unità di griglia e sono riscalate per  $M = 100$ ). Tutti gli altri parametri non sono stati modificati e sono, dunque, quelli raccolti in Tab. 6.7 e Tab. 6.8.

Anche la concentrazione e la composizione del mezzo poroso sono quelle usuali descritte nel paragrafo 6.4. Inoltre, nei tre casi, il mezzo poroso utilizzato è esattamente lo stesso.

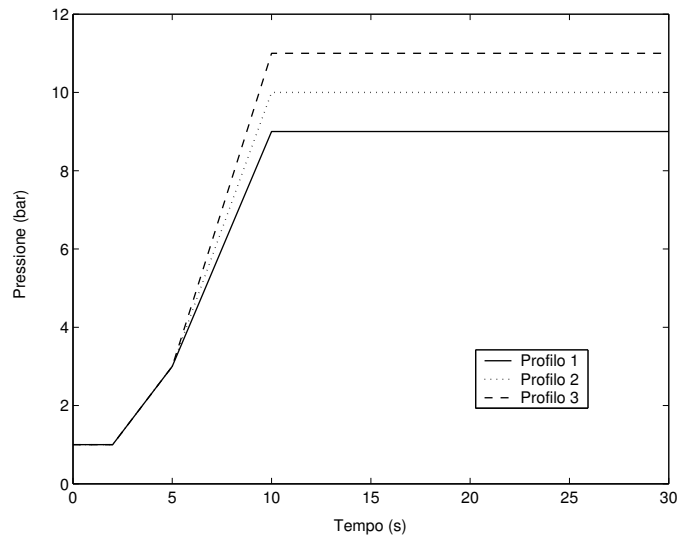


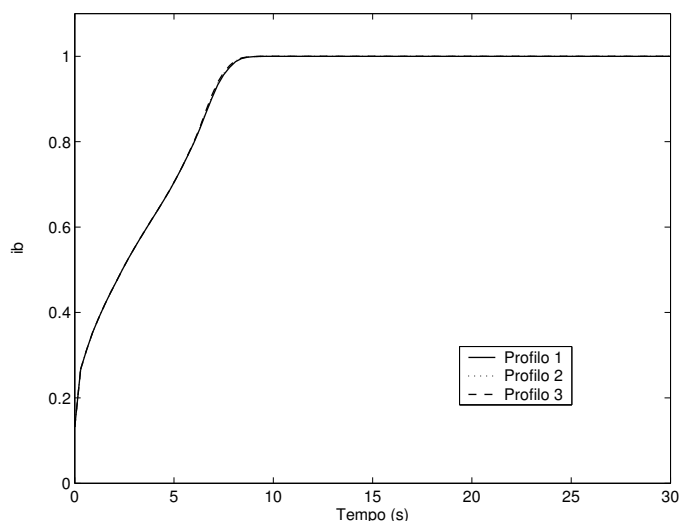
Figura 6.18: Profili della pressione dell'acqua all'ingresso del filtro.

Tabella 6.11: Valori della velocità corrispondenti ai livelli di pressione che caratterizzano i profili considerati.

Pressione (bar)	Velocità ( $\delta x / \delta t$ )
1	0,00367
3	0,00583
9	0,0123
10	0,0134
11	0,0145

Confrontiamo, innanzitutto, gli indici di bagnazione nei tre casi. Come si può notare dalla Fig. 6.19, i profili di bagnazione sono praticamente coincidenti, del resto la fase di preinfusione è identica in tutti i casi e la bagnazione totale si raggiunge attorno agli 8 secondi, cioè poco dopo che i profili cominciano a differenziarsi.

Vediamo ora che cosa è cambiato, per quel che riguarda la bagnazione, ri-



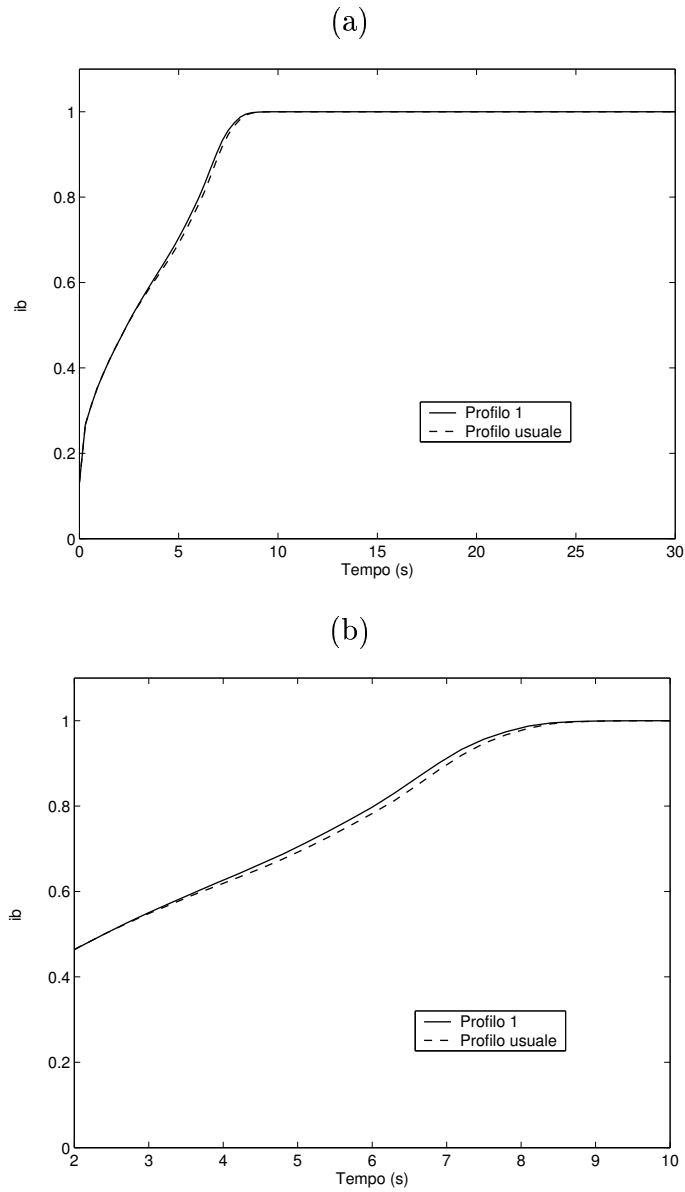
*Figura 6.19: Indici di bagnazione relativi ai tre profili di pressione considerati.*

spetto all'usuale profilo di pressione. Il grafico dell'indice di bagnazione per il Profilo 1 (pressione finale pari a 9 bar) e per il profilo classico di pressione (quello di Fig. 6.1) sono riportati in Fig. 6.20.

In particolare, in Fig. 6.20 (a) vediamo le curve durante tutto il processo e possiamo notare che sono molto simili, si discostano leggermente nell'intervallo tra i 2 e i 10 secondi. Questo intervallo è rappresentato in dettaglio in Fig. 6.20 (b). Il nuovo profilo di preinfusione non sembra, in conclusione, modificare sostanzialmente il processo di bagnazione.

Consideriamo ora il volume di caffè prodotto nei tre casi. È ragionevole aspettarsi che questo aumenti all'aumentare della pressione finale, perchè le velocità saranno, di conseguenza, più alte.

I risultati ottenuti nei tre casi sono riportati in Tab. 6.12 e le curve del volume

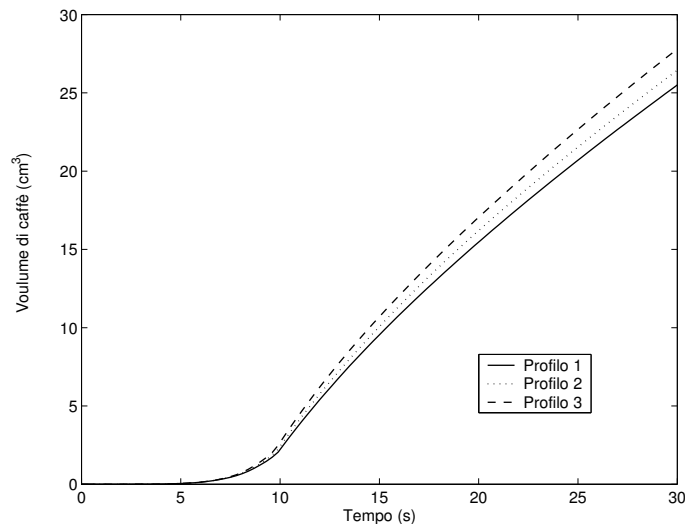


*Figura 6.20: Indice di bagnazione corrispondente al Profilo 1 a confronto con quello relativo al profilo di pressione usuale: (a)  $ib$  su tutto il processo, (b)  $ib$  nell'intervallo tra 2 e 10 secondi.*

di caffè in funzione del tempo sono riportate in Fig. 6.21. Come si può notare, il volume aumenta all'aumentare della pressione di infusione.

*Tabella 6.12: Volume di caffè in uscita per ognuno dei tre profili considerati.*

Profilo	Volume ( $cm^3$ )
1	25,5
2	26,4
3	27,8



*Figura 6.21: Volume di caffè in uscita in funzione del tempo.*

Veniamo, infine, al fenomeno di erosione, trasporto e deposito di particelle. In Fig. 6.22 (a), (b) e (c) sono riportate le curve di variazione della concentrazione del mezzo poroso per i tre strati in cui dividiamo lo spazio occupato dal caffè (0 – 3, 3 – 6 e 6 – 9 mm, rispettivamente). Possiamo osservare che il fenomeno di deposito sull'ultimo strato diventa più consistente all'aumentare della pressione di infusione (vedi Fig. 6.22 (a)). Del resto, la maggiore velocità dell'acqua tende a staccare più particelle e a trascinarle più velocemente. La differenza tra il Profilo 3 e il Profilo 2 si attenua e quasi

si annulla verso la fine della simulazione.

Per gli altri due strati (Fig. 6.22 (b) e (c)) non si evidenziano particolari differenze.

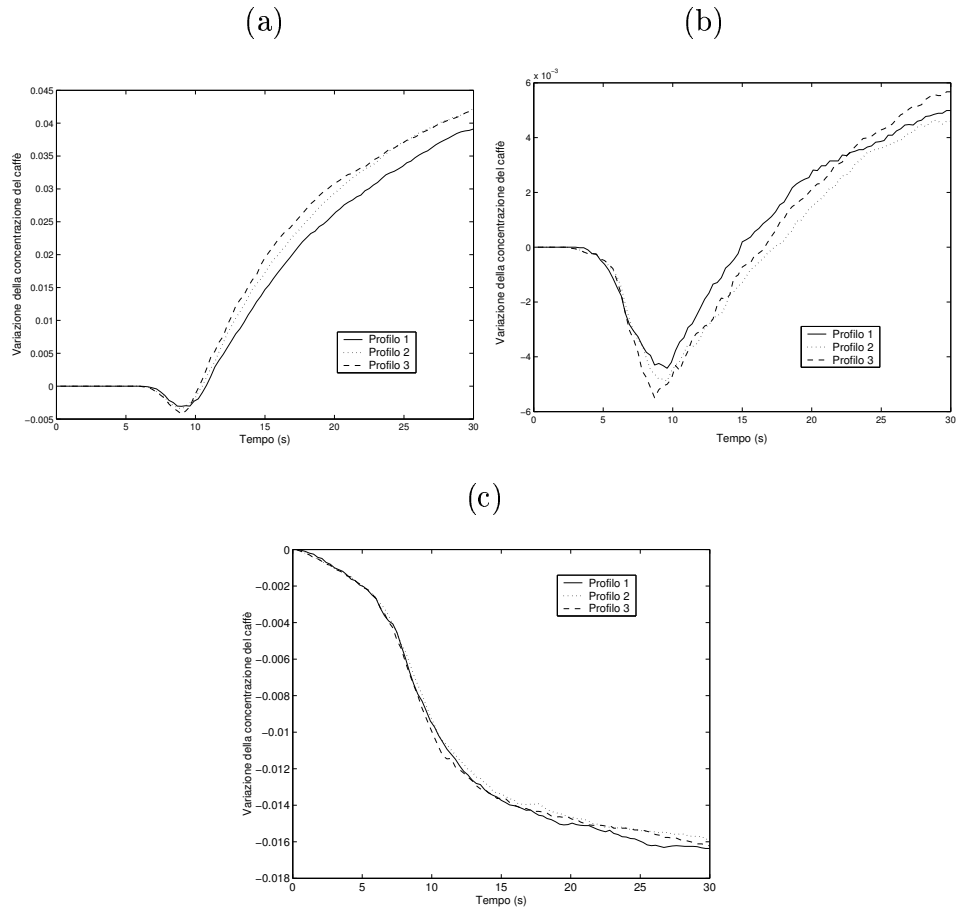


Figura 6.22: Variazione della concentrazione del mezzo poroso nei tre strati in cui viene diviso il volume occupato dalla polvere di caffè: (a) 0 – 3 mm, (b) 3 – 6 mm, (c) 6 – 9 mm.

## 6.6.2 Concentrazione non uniforme del caffè

Durante gli esperimenti svolti alla Nuova Simonelli, abbiamo osservato che l'acqua tende ad uscire inizialmente in prossimità del bordo del filtro. Abbiamo ipotizzato che questo fenomeno fosse dovuto ad una pressione non

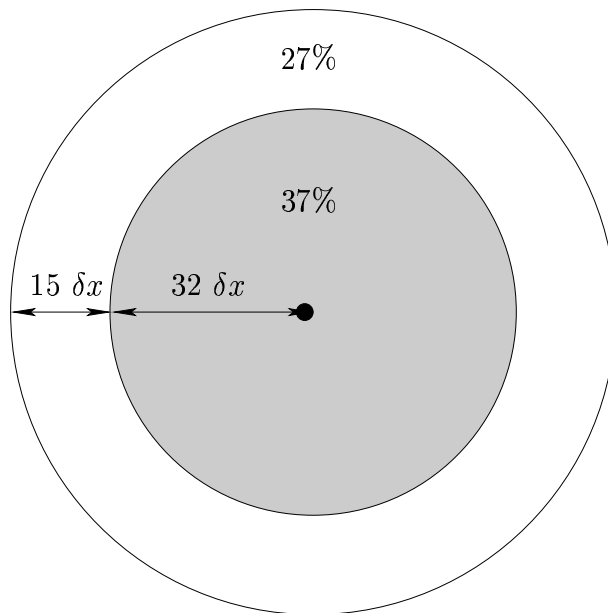


uniforme della polvere di caffè. Questa mancanza di uniformità potrebbe essere causata da due fattori:

1. il fatto che il pressino normalmente usato ha un raggio inferiore a quello del filtro, quindi le zone in prossimità del bordo possono essere pressate meno delle altre;
2. la forma del pressino stesso che non è piatto, ma leggermente convesso e quindi tende a pressare maggiormente la zona centrale.

Per verificare qualitativamente questa intuizione, abbiamo disposto il caffè in modo non uniforme dentro al filtro. Il fenomeno è stato volutamente esasperato per evidenziare i suoi effetti.

In particolare, in una corona circolare di ampiezza pari a 15 punti nodali è stata imposta una concentrazione di caffè pari al 27% (il 10% in meno della concentrazione usuale), mentre nel resto del dominio la concentrazione fissata è del 37% (vedi Fig. 6.23). Tutti gli altri parametri sono scelti come specificato in Tab. 6.7 e Tab. 6.8.



*Figura 6.23: Schema della distribuzione del mezzo poroso non uniforme.*

Per prima cosa, confrontiamo l'indice di bagnazione ottenuto in questa simulazione con quello relativo ad una concentrazione uniforme del 37%. Il grafico di confronto è riportato in Fig. 6.24. Come si può notare, il fenomeno di bagnazione è significativamente più veloce nel mezzo poroso non uniforme. Inoltre, accade esattamente quello che ci aspettavamo: l'acqua esce inizial-

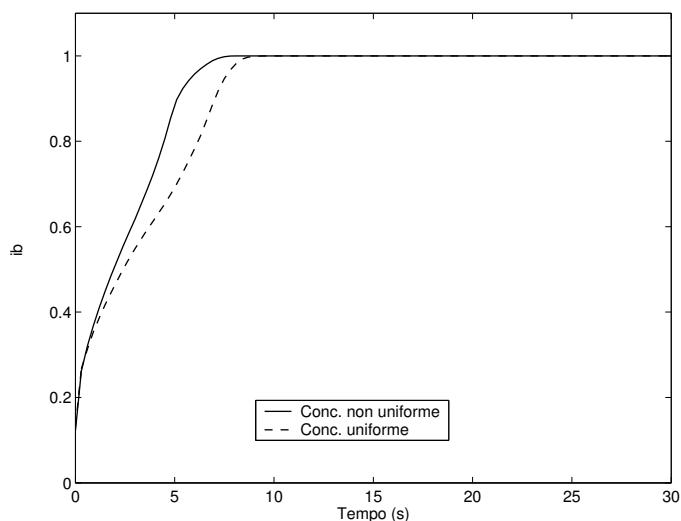
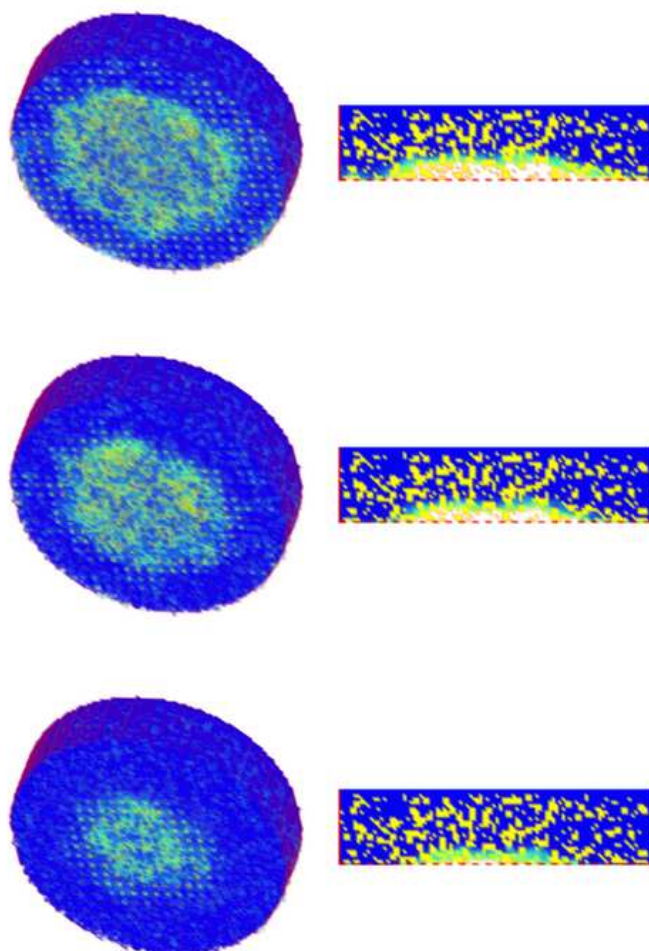


Figura 6.24: Indice di bagnazione per il mezzo poroso non uniforme a confronto con quello relativo al mezzo poroso uniforme.

mente dai bordi e, in un secondo momento, anche dal centro del dominio. In Fig. 6.25 possiamo osservare la fuoriuscita dell'acqua dal filtro nelle iterate corrispondenti a 5,4, 6 e 7 secondi (guardando le immagini dall'alto verso il basso).

Il volume di caffè prodotto è molto influenzato dalla non uniformità del mezzo poroso (vedi Fig. 6.26). Infatti, otteniamo ben  $61,1 \text{ cm}^3$  di caffè contro i  $24,7 \text{ cm}^3$  che si hanno con una concentrazione uniforme. La minore concentrazione del caffè sul bordo fa in modo che l'acqua raggiunga, in quella zona, velocità più alte che nel centro del dominio, quindi la quantità di caffè prodotto aumenta molto.

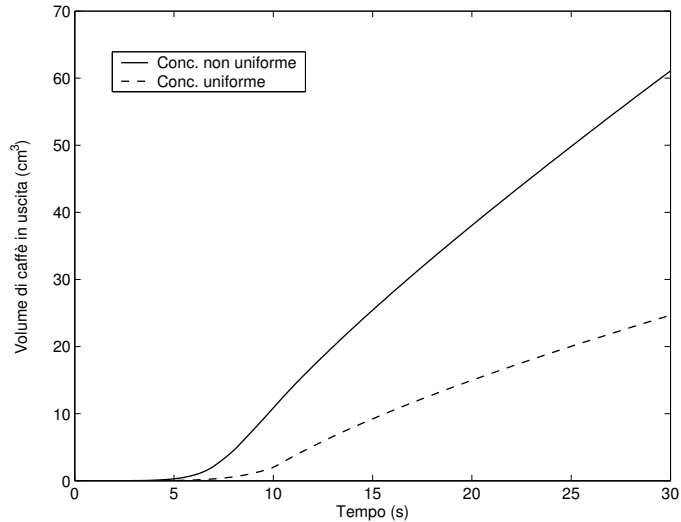
È ragionevole pensare che in questo caso, però, il caffè sia, in realtà, principalmente acqua, perchè la velocità troppo alta impedisce lo scioglimento degli olii e anche perchè l'acqua attraversa uno strato troppo rarefatto di



*Figura 6.25: Bagnazione in diversi istanti: 5,4, 6 e 7 secondi guardando le immagini dall'alto verso il basso.*

caffè.

In situazioni reali, naturalmente, la differenza di concentrazione non sarà così accentuata, ma comunque, sembra essere la causa della fuoriuscita iniziale del caffè nelle zone in prossimità del bordo.



*Figura 6.26: Volume di caffè in uscita in funzione del tempo. Curva per il mezzo poroso non uniforme a confronto con quella relativa al mezzo poroso uniforme.*

Anche la variazione della concentrazione del mezzo poroso è influenzata da questa modifica come mostrato in Fig. 6.27. In particolare, nello strato più basso, il fenomeno di deposito comincia prima perchè l'acqua raggiunge prima il fondo (vedi Fig. 6.27 (a)). In Fig. 6.28, è rappresentata una sezione del dominio presa sul livello immediatamente superiore al fondo del filtro in due istanti successivi (11 e 30 secondi). Ricordiamo che in rosso sono indicati i nodi fluidificabili, in verde i nodi di caffè che si sono effettivamente sciolti e in blu i nodi di fluido che sono diventati nodi di caffè.

Come abbiamo visto, per prima cosa l'acqua arriva sul bordo e infatti è lì che inizialmente si depositano le particelle (Fig. 6.28 (a)). Con il passare del tempo anche nell'interno cominciano a formarsi nodi solidi (Fig. 6.28 (b)), si può però osservare che comunque la concentrazione rimane più alta sul bordo, lì, infatti, le velocità sono più elevate e quindi il numero di particelle

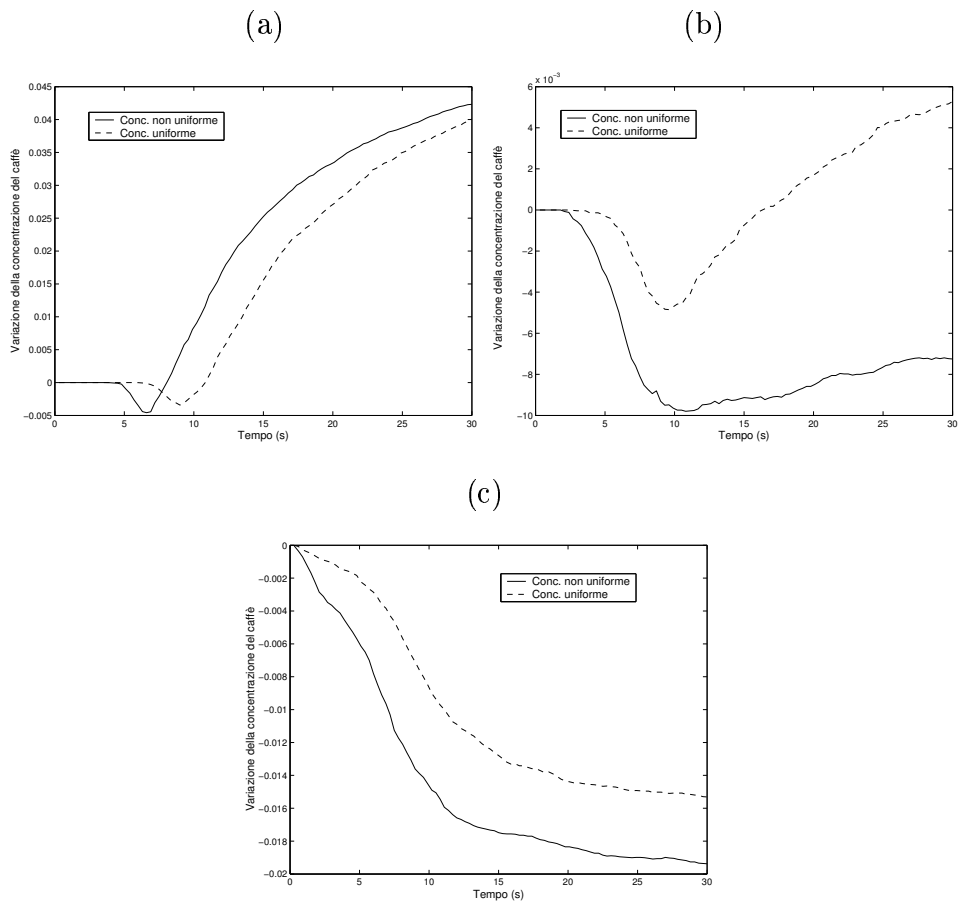
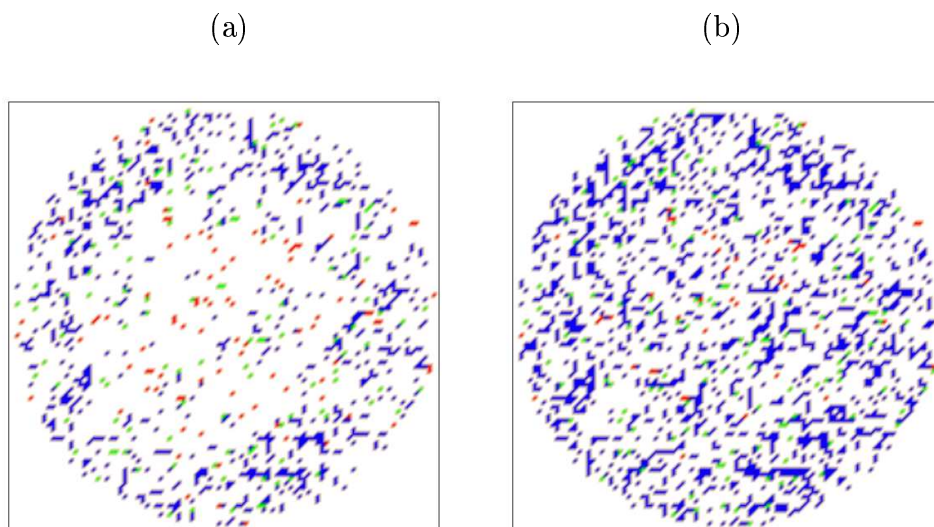


Figura 6.27: Variazione della concentrazione del mezzo poroso nei tre strati in cui viene diviso il volume occupato dalla polvere di caffè: (a) 0 – 3 mm, (b) 3 – 6 mm, (c) 6 – 9 mm. Le curve ottenute per il mezzo poroso non uniforme sono confrontate con quelle relative al mezzo poroso uniforme.



*Figura 6.28: Sezione del dominio presa in prossimità del fondo del filtro. Sono rappresentati i nodi fluidificabili (in rosso), i nodi di caffè che sono diventati fluidi (in verde) e i nodi di fluido che sono diventati di caffè (in blu). Si considerano due istanti: (a) 11 s, (b) 30 s.*

in movimento (cioè erose e trasportate) e che possono depositarsi è maggiore.

Nello strato centrale (Fig. 6.27 (b)), vediamo ancora due comportamenti distinti: nel caso del mezzo non uniforme c'è prima una diminuzione relativamente consistente (dell'ordine dell'1%) della concentrazione e poi un aumento piuttosto basso (poco più dello 0,2%), mentre con il caffè uniformemente distribuito abbiamo un iniziale abbassamento molto più contenuto (0,45%) e un successivo aumento dell'ordine dello 0,9%.

Nel mezzo non uniforme, infatti, le velocità più alte favoriscono l'erosione dei nodi di caffè e quindi anche lo scioglimento dei nodi fluidificabili, inoltre rendono più probabili i movimenti delle particelle ostacolando il deposito.

Questa maggiore tendenza a sciogliere nodi fluidificabili è ancora più evidente nello strato superficiale di caffè (vedi Fig. 6.27 (c)), dove possiamo notare che con il mezzo non uniforme si arriva a perdere quasi il 2% di nodi di caffè contro l'1,5% del mezzo uniforme.

Anche lo scioglimento, così come il deposito, inizia dal bordo (dove le velocità sono più alte), per estendersi poi anche verso il centro come mostrato in Fig. 6.29

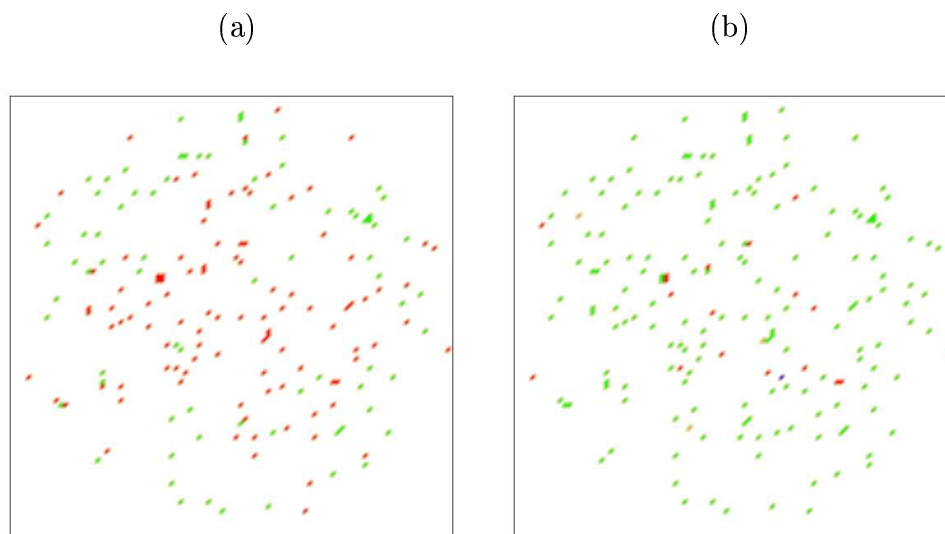


Figura 6.29: Sezione del dominio presa in prossimità dell'inlet. Sono rappresentati i nodi fluidificabili (in rosso), i nodi di caffè che sono diventati fluidi (in verde) e i nodi di fluido che sono diventati di caffè (in blu). Si considerano due istanti: (a) 7 s, (b) 30 s.

### 6.6.3 Filtri a forma di tronco di cono

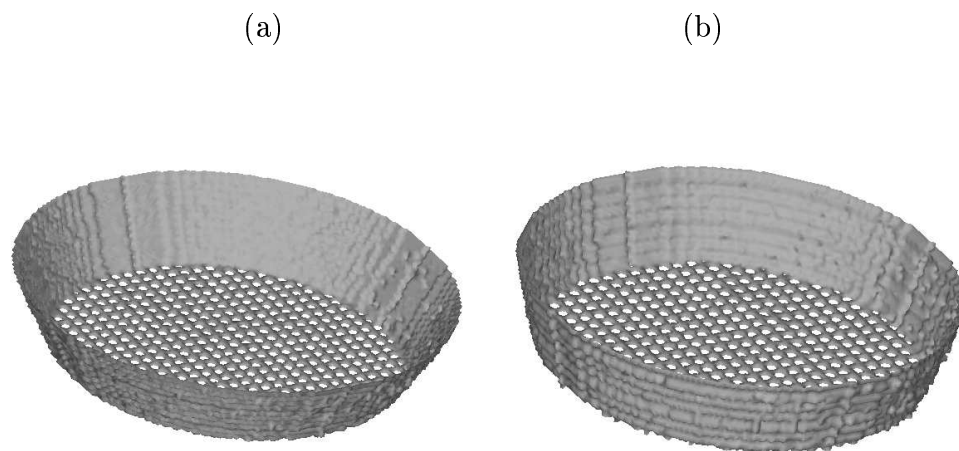
Abbiamo considerato un'altra forma generalmente usata per i filtri: il tronco di cono.

Il dominio è stato definito in modo tale da avere la stessa superficie d'uscita del cilindro e poi sono state fissate due diverse inclinazioni laterali.

In particolare, nel dominio indicato come *Cono 1* (Fig. 6.30 (a)), la differenza tra il raggio di inlet e il raggio di fondo è di 15 punti nodali, mentre nel dominio denominato *Cono 2* (Fig. 6.30 (b)), la differenza è di 8 punti nodali. Tutti gli altri parametri sono scelti come specificato in Tab. 6.7 e Tab. 6.8.

Confrontiamo gli indici di bagnazione dei due tronchi di cono con quello relativo al cilindro. Le tre curve sono rappresentate in Fig. 6.31. Come si può osservare, i due coni hanno una bagnazione più veloce rispetto al cilindro e, inoltre, il Cono 1 ha una bagnazione più rapida del Cono 2. Quindi, nonostante i tronchi di cono abbiano un volume più grande da bagnare, riescono a farlo più velocemente, probabilmente perchè la superficie da cui entra l'acqua è maggiore.

Infatti, il Cono 1, che ha la superficie di inlet più estesa, è quello che completa



*Figura 6.30: Domini a forma di tronco di cono con due diverse inclinazioni laterali. (a) Cono 1, (b) Cono 2*

per primo la bagnazione.

La maggiore superficie di inlet (e, quindi, la maggiore quantità di acqua che entra nel dominio) incide anche sulla quantità di caffè prodotto in uscita. Infatti, come si può osservare in Fig. 6.32, il Cono 1 distacca visibilmente sia il Cono 2 sia il cilindro raggiungendo  $27,5 \text{ cm}^3$  contro i  $25,5 \text{ cm}^3$  e  $24,7 \text{ cm}^3$  del Cono 2 e del cilindro rispettivamente.

Il fenomeno di deposito e scioglimento dei nodi di caffè è solo parzialmente influenzato dalla forma del dominio. In Fig. 6.33, possiamo osservare i grafici della variazione della concentrazione del caffè relativi ai tre strati in cui si suddivide il pannello di caffè.

L'accumulo nello strato inferiore (Fig. 6.33 (a)) è quasi coincidente nei tre casi. Analogamente, nello strato intermedio (Fig. 6.33 (b)), non si osservano sostanziali differenze.

Invece, il fenomeno di scioglimento sullo strato superiore è più accentuato nel cilindro rispetto ai tronchi di cono e, comunque, è più intenso nel Cono 2 che nel Cono 1 (Fig. 6.33 (c)).



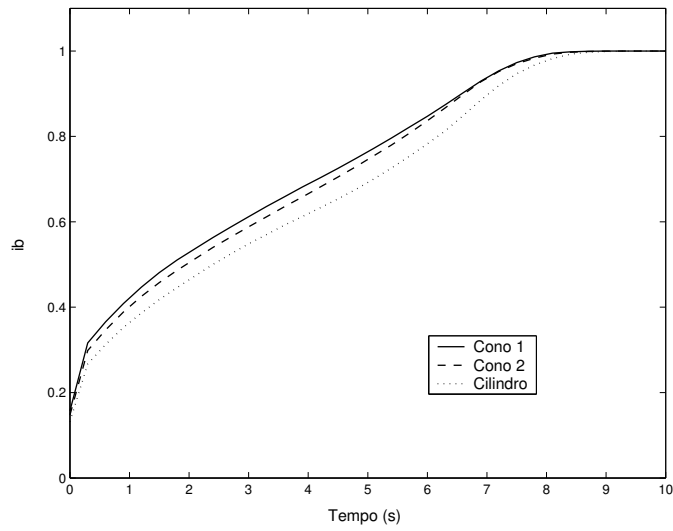


Figura 6.31: Curve di bagnazione per i tronchi di cono a confronto con quella relativa al cilindro.

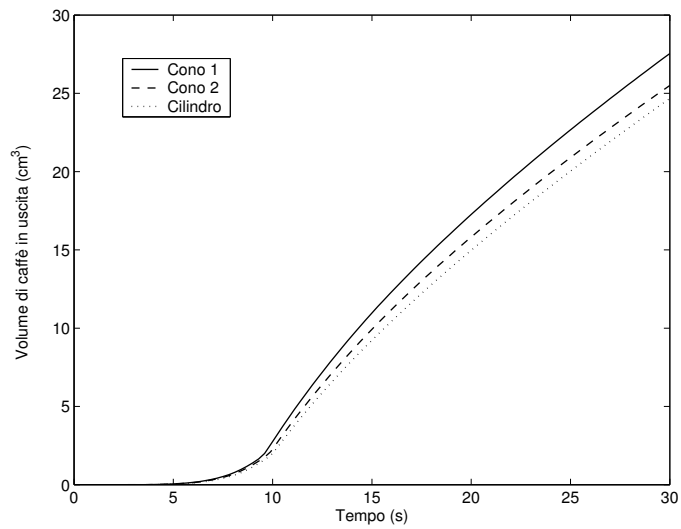
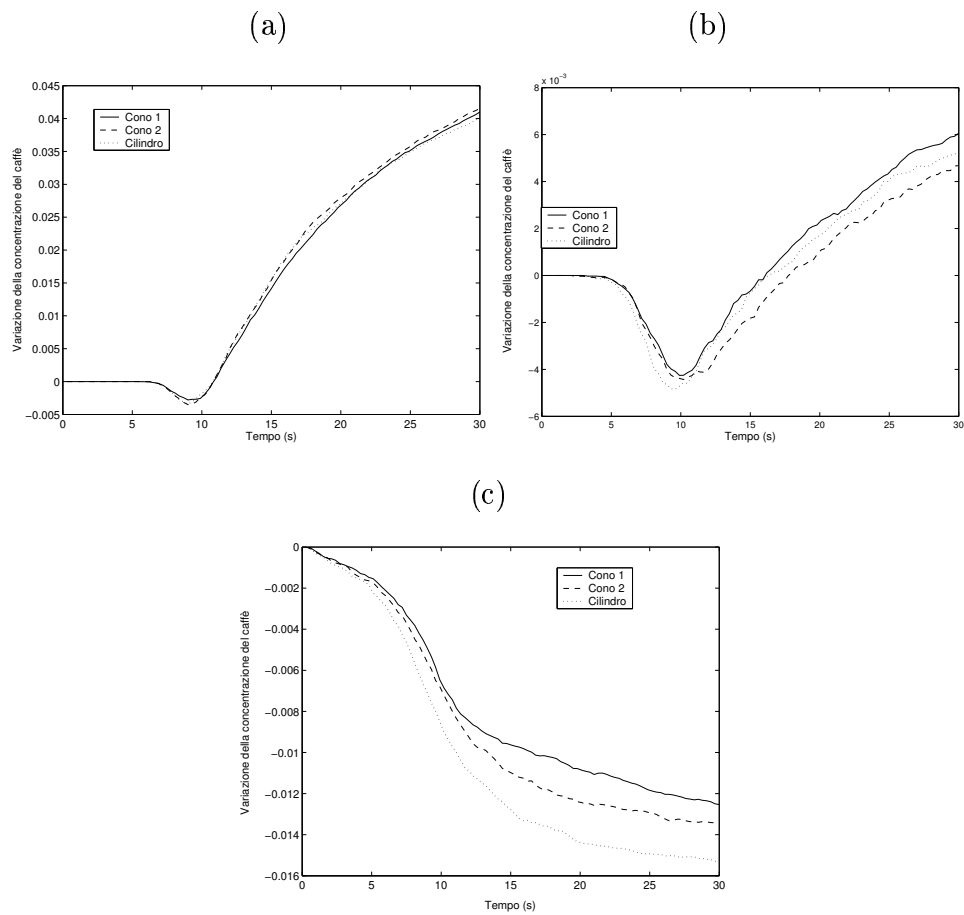


Figura 6.32: Volume di caffè in uscita in funzione del tempo. Curve per i tronchi di cono a confronto con quella relativa al cilindro.

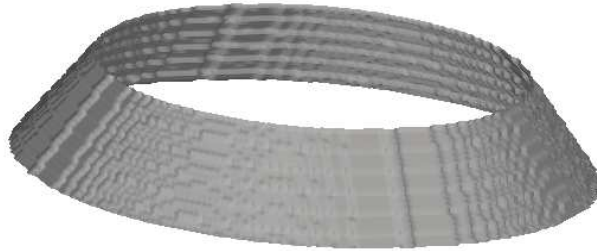


*Figura 6.33: Variazione della concentrazione del mezzo poroso nei tre strati in cui viene diviso il volume occupato dalla polvere di caffè: (a) 0 – 3 mm, (b) 3 – 6 mm, (c) 6 – 9 mm. Le curve ottenute per i tronchi di cono sono confrontate con quelle relative al cilindro.*

#### 6.6.4 Una diversa geometria del filtro

Consideriamo ora una nuova forma per il filtro, la geometria che proponiamo non è realmente utilizzata nella pratica.

Supponiamo che il nostro dominio sia un tronco di cono in cui, però, la base superiore ha raggio minore della base inferiore (vedi Fig. 6.34). Vediamo



*Figura 6.34: Superficie laterale del filtro considerato.*

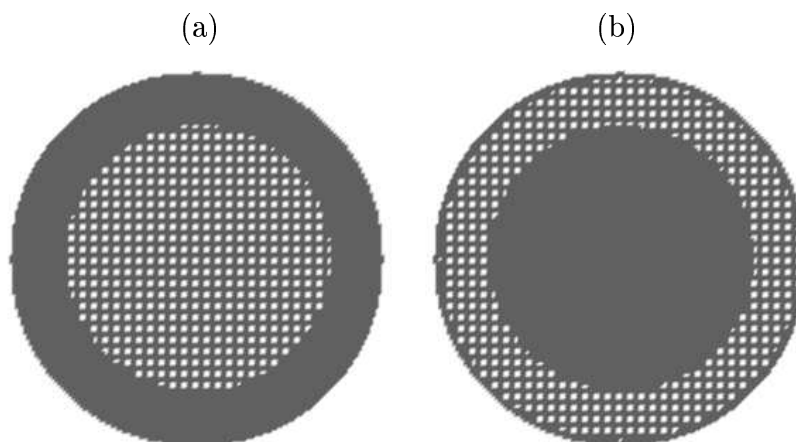
che cosa accade utilizzando i due diversi fondi rappresentati in Fig. 6.35. Abbiamo quindi due filtri (uno per ogni fondo considerato) denominati *Filtro 1* e *Filtro 2*.

**Filtro 1:** è composto dalla superficie laterale di Fig. 6.34 e dal fondo di Fig. 6.35 (a). In questo filtro la parte forata del fondo è quella centrale, mentre una corona circolare chiusa è posta sul bordo.

**Filtro 2:** è composto dalla superficie laterale di Fig. 6.34 e dal fondo di Fig. 6.35 (b). In questo filtro la parte forata del fondo è quella esterna, mentre al centro c'è una superficie chiusa.

Si osservi che la corona circolare ha un'ampiezza di 20 punti nodali, la parte centrale ha un raggio discretizzato con 47 punti, cioè la stessa uscita del filtro cilindrico reale. In questo modo, assumendo che la parte centrale abbia raggio 2 cm, la corona circolare e il disco interno hanno quasi la stessa superficie. La differenza tra il raggio di inlet e quello di outlet è di 15 punti nodali.

Gli altri parametri sono fissati come specificato in Tab. 6.7 e Tab. 6.8 e in entrambi i filtri viene inserito lo stesso mezzo poroso.



*Figura 6.35: Fondi dei filtri utilizzati nelle due simulazioni: (a) fondo relativo al Filtro 1; (b) fondo relativo al Filtro 2.*

Analizziamo, per prima cosa, il processo di bagnazione. In Fig. 6.36 sono riportate le curve di bagnazione nei due casi. Come si può notare, i due fenomeni procedono in maniera diversa. In particolare, il Filtro 2 raggiunge la totale bagnazione più lentamente e seguendo un profilo maggiormente irregolare.

Anche il volume di caffè in uscita è molto diverso nei due casi (vedi Fig. 6.37). Per il Filtro 1 otteniamo  $23,8 \text{ cm}^3$ , cioè siamo nei limiti di un volume normale di caffè; con il Filtro 2, invece, si hanno appena  $7,8 \text{ cm}^3$ . Nonostante la superficie di uscita sia la stessa, il liquido sembra raggiungere con maggiore difficoltà la zona di bordo del fondo e, inoltre, sembra uscire con minore velocità.

In Fig. 6.38 riportiamo le velocità su una sezione trasversale al termine della simulazione. Per il Filtro 1, si hanno velocità elevate al centro e quasi nulle nelle zone laterali. Viceversa, per il Filtro 2 le velocità sono alte sui lati e molto basse al centro. Si osservi, inoltre, che nel Filtro 1 la zona in cui le velocità sono elevate è molto più ampia che nel Filtro 2. Questo spiega come mai nel Filtro 1 il flusso in uscita sia molto superiore rispetto al Filtro 2.

La diversa disposizione delle velocità, oltre ad incidere sulla bagnazione e sul volume di caffè prodotto, influisce sul trasporto e deposito di particelle.

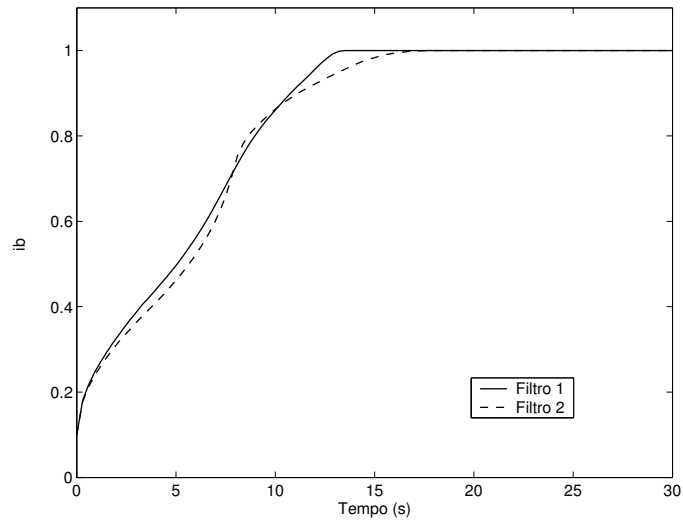


Figura 6.36: Curve di bagnazione per il Filtro 1 e il Filtro 2.

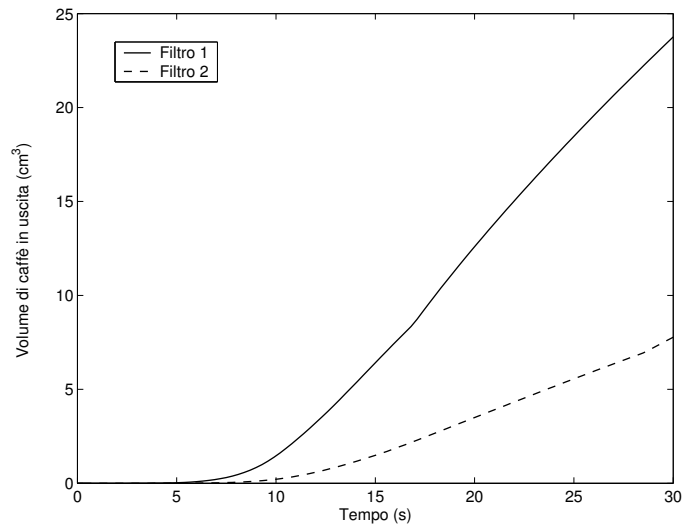
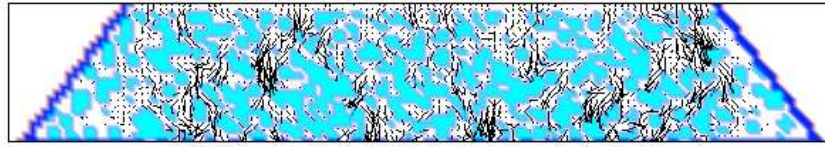
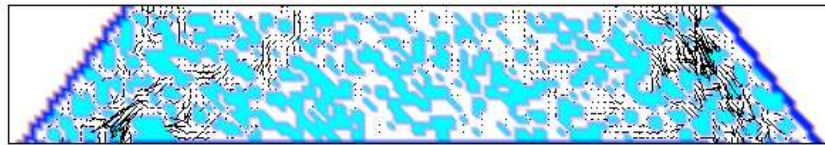


Figura 6.37: Volume di caffè in uscita in funzione del tempo per il Filtro 1 e il Filtro 2.

(a)



(b)



*Figura 6.38: Velocità nella sezione verticale e centrale dei domini. (a) Filtro 1; (b) Filtro 2.*

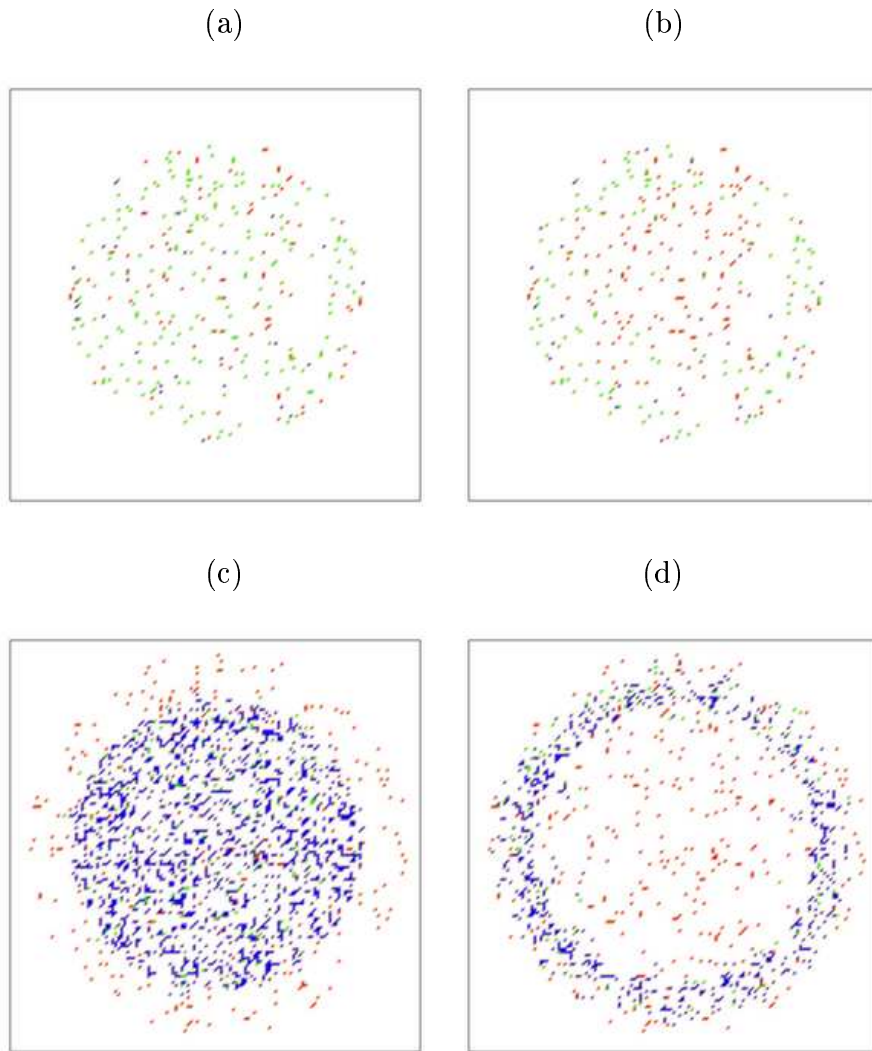
Così è ragionevole supporre che per il Filtro 1 i fenomeni di scioglimento e deposito dei nodi di caffè siano prevalentemente localizzati al centro, mentre, per il Filtro 2, ci si aspetta che avvengano maggiormente sul bordo.

In Fig. 6.39, possiamo osservare la situazione alla fine della simulazione in un livello in prossimità dell'inlet e in uno vicino al fondo.

Le immagini confermano le nostre previsioni, ad eccezione del fatto che, per il Filtro 1, lo scioglimento dei nodi fluidificabili all'inlet appare piuttosto uniforme e non localizzato nel centro (vedi Fig. 6.39 (a)).

Infine, in Fig. 6.40, abbiamo i grafici della variazione della concentrazione del caffè nei tre strati che usualmente consideriamo.

Nello strato  $0-3\text{ mm}$  (Fig. 6.40 (a)), si osserva che nel Filtro 1 il fenomeno di deposito è più consistente e inizia prima rispetto a quanto accade nel Filtro 2. Questo è in accordo con il fatto che nel Filtro 1 ci sono velocità maggiori che quindi staccano, trascinano e, di conseguenza, depositano più particelle. Lo strato intermedio (Fig. 6.40 (b)) mostra due andamenti simili, però la curva relativa al Filtro 2 è in ritardo rispetto a quella del Filtro 1 fino a poco prima dei 20 secondi, poi le curve si incontrano e l'accumulo nel Filtro 2 supera leggermente quello del Filtro 1.



*Figura 6.39: Sono rappresentati i nodi fluidificabili (in rosso), i nodi di caffè che sono diventati fluidi (in verde) e i nodi di fluido che sono diventati di caffè (in blu). (a) e (b): sezioni del dominio prese in prossimità dell'inlet per il Filtro 1 e per il Filtro 2, rispettivamente; (c) e (d): sezioni del dominio prese in prossimità del fondo per il Filtro 1 e per il Filtro 2, rispettivamente.*

Nello strato superiore (Fig. 6.40 (c)), si osserva ancora l'effetto delle maggiori velocità del Filtro 1. Nel Filtro 1, infatti, lo scioglimento dei nodi fluidificabili inizia prima e porta ad una perdita complessiva di quasi l'1,6% del mezzo poroso. Nel Filtro 2, invece, il fenomeno si manifesta più lentamente e porta ad un calo totale della concentrazione dello 0,8%.

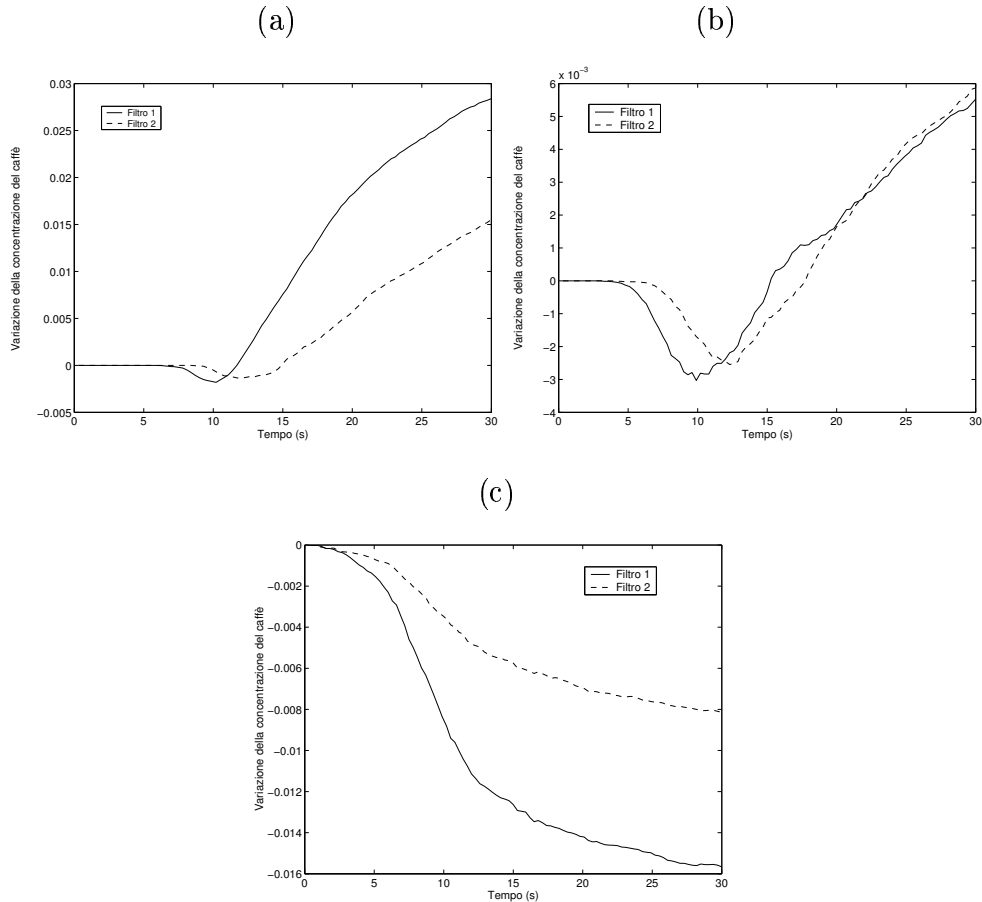


Figura 6.40: Variazione della concentrazione del mezzo poroso nei tre strati in cui viene diviso il volume occupato dalla polvere di caffè: (a) 0 – 3 mm, (b) 3 – 6 mm, (c) 6 – 9 mm. Le curve sono relative al Filtro 1 e al Filtro 2.



# Bibliografia

- [1] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation For Fluid Dynamics and Beyond*, Oxford Science Publications, Oxford University Press, (2001).
- [2] D. Wolf-Gladrow, *Lattice gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction*, Springer, (2000).
- [3] P. Bhatnagar, E. Gross, M. Krook, *A model for collisional process in gases I: small amplitude processes in charged and neutral one component system*, Phys. Rev. **94**, 511, (1954).
- [4] U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, *Lattice gas automata for the Navier–Stokes equations*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1505, (1986).
- [5] J. Hardy, O. de Pazzis, Y. Pomeau, *Molecular dynamics of a lattice gas: transport properties and time correlation functions*, Phys. Rev., **A 13**, 1949, (1973).
- [6] J. Hardy, O. de Pazzis, Y. Pomeau, *Time evolution of a two–dimensional model system I: invariant states and time correlation functions*, J. Math. Phys., **14**, 1746, (1976).
- [7] G. R. McNamara, G. Zanetti, *Use of the Boltzmann equation to simulate lattice gas automata*, Phys. Rev. Lett., **61**, 2332 (1988).
- [8] F. Higuera, J. Jiménez, *Boltzmann approach to lattice gas simulations*, Europhys. Lett., **9**, 663 (1989).
- [9] F. Higuera, S. Succi, R. Benzi, *Lattice gas dynamics with enhanced collisions*, Europhys. Lett., **9**, 345 (1989).
- [10] Y. H. Qian, D. d’Humières, P. Lallemand, *Lattice BGK models for Navier Stokes equation*, Europhys. Lett. **17**, 479 (1992).

- [11] R. Benzi, S. Succi, M. Vergassola, *The lattice Boltzmann equation theory and applications*, Phys. Reports, **222**, 145 (1992).
- [12] S. Chen, G. D. Doolen, *Lattice Boltzmann method for fluid flows*, Ann. Rev. Fluid Mech., **30**, 329 (1998).
- [13] D. Yu, R. Mei, L. S. Luo, W. Shyy, *Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation*, Prog. Aerospace Sci., **39**, 329 (2003).
- [14] D. d’Humières, *Generalized lattice Boltzmann equations*, In: D. Shizgal, D.P. Weaver (eds.), Rarefied Gas Dynamics: theory and simulations. Prog. Astronaut. Aeronaut., **159** 450, (1992).
- [15] P. Lallemand, L. S. Luo, *Theory of the lattice Boltzmann method: dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability*, Phys. Rev., **E61**, 6546 (2000).
- [16] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, L. S. Luo, *Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions*, Phil. Trans. R. Soc. Lond., **360**, 437 (2002).
- [17] P. J. Dellar, *Nonhydrodynamic modes and a priori construction of shallow water lattice Boltzmann equations*, Phys. Rev. **E65**, 036309, (2002).
- [18] J. S. Wu, Y. L. Shao, *Assessment of SRT and MRT Scheme in Parallel Lattice Boltzmann Method for Lid-Driven Cavity Flows*, The 10th National Computational Fluid Dynamics Conference, Tainan, Taiwan, August 2002.
- [19] J. S. Wu, Y. L. Shao, *Comparison of SRT and MRT Schemes in Lattice Boltzmann Method for Simulating the Flow Past a Square in a Channel*, The 20th National Conference on Mechanical Engineering, The Chinese Society of Mechanical Engineers, NTU, Taipei, Taiwan, December 2003.
- [20] Q. Zou, X. He, *On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model*, Phys. Fluids, **9**, 1591 (1997).
- [21] S. Maier, S. Bernard, W. Grunau, *Boundary conditions for the lattice Boltzmann method*, Phys. Fluids **8**, 1788 (1996).

- [22] P.A. Skordos, *Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method*, Phys. Rev., **E48**, 4823 (1992).
- [23] D. Yu, *Viscous flow computations with the lattice Boltzmann equation method*, Ph.D. Thesis, University of Florida (2002).
- [24] F. Lucentini *Condizioni al bordo per modelli lattice Boltzmann*, Tesi di Laurea, Università di Camerino (2004).
- [25] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, G. Zanetti, *Lattice Boltzmann model of immiscible fluids*, Phys. Rev. **A43**, 4320 (1991).
- [26] M. R. Swift, W. R. Osborn, J. M. Yeomans, *Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids*, Phys. Rev. Lett. **75**, 830 (1995).
- [27] X. Shan, H. Chen, *Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components*, Phys. Rev. **E47**, 1815 (1993).
- [28] N. S. Martys, H. Chen, *Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method*, Phys. Rev. **E53**, 743 (1996).
- [29] T. Inamuro, T. Miyahara, F. Ogino, *Lattice Boltzmann simulations of drop deformation and breakup in simple shear flow*, in: N. Satofuka (Ed.), Computational Fluid Dynamics 2000, Springer-Verlag, Berlin, 2001, pp. 499–504.
- [30] T. Inamuro, R. Tomita, F. Ogino, *Lattice Boltzmann simulations of drop deformation and breakup in shear flow*, Int. J. Mod. Phys. **B17**, 21 (2002).
- [31] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, N. Konoshi, *A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences*, J. Comput. Phys. **198**, 628 (2004).
- [32] L. Misici, S. Palpacelli, *A lattice Boltzmann approach for immiscible fluids with very different viscosities*, J. Modern Phys. C (to appear), **16**, 9 (2006).
- [33] B. J. Bentley, L. G. Leal, *An experimental investigation of drop deformation and breakup in steady, two-dimensional linear flows*, J. Fluid Mech. **167**, 241 (1986).

- [34] S. Shin, D. Juric, *Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity*, J. Comput. Phys., textbf180, **427** (2002).
- [35] D. Kehrwald, *Numerical Analysis of Immiscible lattice BGK*, Ph.D. thesis, University of Kaiserslautern, (2002).
- [36] G. I. Taylor, *The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid*, Proc. R. Soc. Lond. A **138**, 41 (1932).
- [37] G. I. Taylor, *The formation of emulsions in definable fields of flow*, Proc. R. Soc. Lond. A **146**, 501 (1934).
- [38] R. G. Cox, *The deformation of a drop in a general time-dependent fluid flow*, J. Fluid Mech. **37**, 601 (1969).
- [39] D. Barthès-Biesel, A. Acrivos, *Deformation and burst of a liquid droplet freely suspended in a linear shear field*, J. Fluid Mech. **61**, 1 (1973).
- [40] J. M. Rallison, *The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows*, Ann. Rev. Fluid Mech. **16**, 45 (1984).
- [41] H. A. Stone, *Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids*, Ann. Rev. Fluid Mech. **26**, 65 (1994).
- [42] G. I. Taylor, *Conical free surfaces and fluid interfaces*, Proc. Intl Congr. Appl. Mech. 11th, Munich, pp. 790–796 (1964).
- [43] J. D. Buckmaster, *Pointed bubbles in slow viscous flow*, J. Fluid Mech. **55**, 385 (1972).
- [44] J. D. Buckmaster, *The bursting of pointed drops in slow viscous flow*, Trans. ASME E: J. Appl. Mech. **40**, 18 (1973).
- [45] A. Acrivos, T. S. Lo, *Deformation and breakup of a single slender drop in an extensional flow*, J. Fluid. Mech. **86**, 641 (1978).
- [46] E. J. Hinch, A. Acrivos, *Steady long slender droplets in two-dimensional straining motion*, J. Fluid Mech. **91**, 401 (1979).
- [47] U. Frisch, D. d’Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, J. P. Rivet, *Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions*, Complex Systems, **1**, 649 (1987).

- [48] A. Masselot, B. Chopard, *A lattice Boltzmann model for particle transport and deposition*, Europhys. Lett. **42**, 259 (1998).
- [49] B. Chopard, A. Masselot, A. Dupuis, *A lattice gas model for erosion and particles transport in a fluid*, Comput. Phys. Comm. **129**, 167 (2000).
- [50] A. Masselot, *A new numerical approach to snow transport and deposition by wind: a parallel lattice gas model*, Ph.D. thesis, University of Geneva, (2000).
- [51] L. Misici, S. Palpacelli, R. Piergallini, R. Vitolo, *Lattice Boltzmann model for coffee percolation*, IMACS2005, Paris, France, Luglio 2005.
- [52] C. Manwart, U. Aaltosalmi, A. Koponen, R. Hilfer, J. Timonen, *Lattice-Boltzmann and finite-difference simulations for the permeability for three-dimensional porous media*, Phys. Rev. **E66**, 016702 (2002).
- [53] D. Kehrwald, *Lattice Boltzmann simulation of shear-thinning fluids*, extended version of a talk presented at ICMMES 2004, Braunschweig, Germany, Luglio 2004.