

Laureando: Jacopo Eusepi (matricola 1200668)

Relatore: Prof. Paolo Viotti

Correlatore: Ing. Elisa Martorelli

Titolo della Tesi: *STUDIO DELL'UPSCALING PER TRASPORTO IN MEZZI POROSI: DALLA MICROSCALA ALLA MACROSCALA*

Laurea Magistrale in Ingegneria per l'Ambiente e il Territorio (DM 270/04)

Sessione Marzo 2015 indirizzo TUTELA DELL' AMBIENTE (A)

SSD ICAR03

Obiettivo della tesi è lo sviluppo di un modello numerico in grado di simulare il trasporto di soluti passivi all'interno di mezzi porosi saturi, utilizzando la teoria dei modelli a reticolo di Boltzmann non nella loro formulazione tradizionale, bensì in una forma modificata in grado di ricostruire fenomeni a scale ingegneristiche e su griglie macroscopiche (UPSCALING) in modo tale da ridurre i costi computazionali pur preservando l'accuratezza dei risultati e le proprietà numeriche dei modelli numerici basati su tale approccio. L'obiettivo del lavoro è dunque stato l'implementazione di un modello matematico per la simulazione del trasporto di soluti all'interno di mezzi porosi.

I modelli Lattice Boltzmann (LBM) sono modelli cinetici a particelle sviluppati a partire dall'equazione cinetica di Boltzmann discretizzata ad un set limitato di direzioni di propagazione ed implementata su reticoli regolari. Questi modelli studiano il moto di qualsiasi fluido partendo dalla *microscala* (scala *mesoscopica* nel caso di termine generalmente impiegato nella letteratura specifica del settore, dell'ordine dei micron nel caso di mezzi porosi) in cui le particelle, soggette ad una forza esterna, si propagano tra i vari nodi del reticolo e collidono conservando massa e quantità di moto.

L'equazione fondamentale alla base dei modelli LB è un'equazione di rilassamento $f_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) - f_i(\mathbf{r}, t) = (f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t))/\tau$ in cui le f_i sono le funzioni di distribuzione a singola particella e τ è il tempo di rilassamento in un approccio SRT (*single relaxation time*), attraverso il quale le particelle propendono a tasso costante verso una distribuzione di equilibrio f_i^{eq} , definita dalla distribuzione di Maxwell-Boltzmann. Scegliendo un reticolo regolare, ad esempio un reticolo a 2 dimensioni e 9 direzioni (D2Q9), e applicando all'equazione LB l'espansione multiscala Chapman-Enskog, è possibile ottenere le equazioni di Navier-Stokes. Così definiti questi modelli ricostruiscono il moto alla scala del micron per cui, facendo riferimento alla loro applicazione ad un mezzo poroso, sono generalmente impiegati al fine di studiare il moto di dettaglio all'interno dei singoli pori. Nonostante questi modelli presentino una serie di innumerevoli vantaggi, tra cui la semplicità di scrittura, l'accuratezza in sistemi complessi, la possibilità di considerare

contorni e domini articolati, la semplicità ed efficacia di ricostruzione di sistemi a singola fase e multifasici, la stabilità numerica rispetto ad altri modelli (a patto che le velocità siano inferiori a 0.1 volte il numero di Mach), la semplicità di scrittura dell'algoritmo per calcolo in parallelo e l'assenza di diffusività numerica, presentano lo svantaggio di avere costi computazionali elevati per simulazioni di domini di grandi dimensioni e, conseguentemente, tempi di impiego troppo lunghi. È proprio al fine di limitare questi svantaggi che è stata sviluppata una procedura di *Upscaling*, ovvero una sequenza di passaggi teorici e non e modifiche all'approccio generale, che permetta di ricostruire il moto su domini più estesi ma con un numero di nodi inferiore e quindi consentendone l'uso anche con i normali processori.

La risoluzione del passaggio di scala consente infatti l'applicazione di questi modelli a scale di lavoro tipiche dell'ingegneria.

In una prima fase il modello generale è stato modificato in modo tale da ricostruire un moto in un mezzo poroso (alla scala di Darcy). È stata introdotta una forzante di permeabilità $\mathbf{f}_m = -\epsilon v/k \mathbf{u} + \epsilon \mathbf{G}$ che incorpora le eterogeneità del mezzo poroso attraverso la funzione di distribuzione delle k e dipendente dalla microstruttura; è stata considerata una funzione di distribuzione troncata al primo ordine alla luce delle basse velocità che si hanno nei mezzi porosi $f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho (1 + \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{eq}/c_s^2)$; è stata derivata una nuova relazione per la conservazione della quantità di moto $\rho \mathbf{u} = \frac{\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha + \frac{\Delta t}{2} \epsilon \rho \mathbf{G}}{(1 + \frac{\epsilon \Delta t v}{2k})}$ ed impiegata una nuova formula al fine del calcolo della velocità di equilibrio $\mathbf{u}^{eq} = 2\tau \mathbf{u} + (1 - 2\tau) \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha / \rho$, ovvero della velocità in presenza di forzanti esterne, poi applicata all'interno della funzione di distribuzione di equilibrio. In questo modo viene ricostruito il moto alla scala di Darcy (o di Brinkman) e non più il moto alla scala del singolo poro. Il modello così ottenuto naturalmente è stato validato con soluzioni analitiche e tramite confronti diretti con situazioni studiate da altri autori citati in bibliografia.

Tuttavia, anche così modificato, il livello di dettaglio impiegato può risultare troppo elevato per cui è stato effettuato un passaggio da un approccio a griglia fine ad un approccio a macro-griglia. Il dominio rappresentato per mezzo di una griglia fine viene diviso in più sottodomini ognuno dei quali sarà rappresentato da un punto della macro-griglia. Su ognuno di questi sottodomini vengono calcolate le grandezze medie, ottenute da simulazione su griglia fine, e calcolate le permeabilità equivalenti attraverso una relazione analitica in funzione dei valori di velocità mediati. Le permeabilità equivalenti vengono quindi associate ai rispettivi nodi della macro-griglia sui quali viene studiato il campo di moto, poi confrontato con quello mediato sugli stessi sottodomini su griglia fine. I risultati ottenuti sono stati più che soddisfacenti.

Per la simulazione del trasporto è stata inserita nel modello una nuova funzione di distribuzione per tener conto di un soluto passivo $g_i(\mathbf{x}, t)$. La regola evolutiva è analoga a quella già introdotta, la velocità a cui è soggetta la specie è quella del fluido principale mentre la conservazione della massa diviene la concentrazione della nuova specie $C_k = \sum_i g_i$. L' introduzione della nuova regola evolutiva per il soluto è tale da verificare l'equazione del trasporto a scala macroscopica. In questo caso, il termine di rilassamento è correlato al coefficiente di dispersione (inizialmente isotropo). Il modello di trasporto è stato studiato sia su griglia fine che su macro-griglia seguendo gli stessi passaggi del caso a singola fase ed i risultati sono stati ottimi anche nei confronti con le soluzioni analitiche.

Infine, considerando diversi valori di tempo di rilassamento per le varie direzioni del reticolo, è stata ricostruita anche l'equazione del trasporto con dispersione anisotropa. Anche in questo caso la validazione in 1D e in 2D ha mostrato risultati molto accurati.

Si può concludere che il modello sviluppato è in grado di ricostruire fedelmente la realtà fisica del processo di trasporto; il passaggio dalla scala del poro (micron) alla macro-scala (più utilizzabile per le simulazioni nel campo reale) ha fornito risultati più che soddisfacenti; i risultati sia per il solo campo di moto che per il trasporto sono stabili e presentano pochi problemi numerici; i risultati sono congruenti con le relative soluzioni analitiche ed è possibile ricostruire fenomeni di trasporto di qualsiasi tipo; il modello su macro-griglia, sia per il solo studio del campo fluidodinamico sia per lo studio del trasporto di un soluto, ha fornito risultati ottimi quando confrontato a quelli ottenuti con il modello su griglia fine e alle soluzioni analitiche. Ne consegue che l'enorme risparmio in termini computazionali rispetto all'approccio tradizionale, affiancato alla precisione dei risultati, fa sì che l'*Upscaling* accoppiato ai modelli LB sia uno strumento potentissimo e fondamentale al fine di studiare il moto di fluidi all'interno di mezzi porosi.