arXiv:2305.03911v2 [physics.flu-dyn] 8 Oct 2023

结合X射线显微断层成像与光滑粒子流体动力学模拟，探索咖啡基质微观结构与流动性质之间的联系

Chaojie Mo*[1,2]、Richard Johnston[3], Luciano Navarini[4], Furio Suggi Liverani[4], 和 Marco Ellero[1,5,6]

[1]巴斯克应用数学中心（BCAM），Mazarredo大道14号，48009 毕尔巴鄂，西班牙 n
[2]航空器与推进实验室，宁波理工学院，北京航空航天大学，宁波 315100，中华人民共和国[3]理学与工程学院，斯旺西大学，斯旺西，SA1 8EN，英国[4]Illycaff`e S.p.A，Flavia路110号，的里雅斯特 34147，意大利[5]Zienkiewicz计算工程中心（ZCCE），斯旺西大学，Bay校区，斯旺西 SA1 8EN，英国[6]IKERBASQUE，巴斯克科学基金会，Mar´ıa D´ıaz de Haro街3号，48013 毕尔巴鄂，西班牙

摘要

咖啡萃取涉及许多复杂的物理和传输过程，极难建模。在影响咖啡最终品质的众多因素中，咖啡基质的微观结构是最关键的因素之一。本文采用 X 射线微型计算机断层扫描（microCT）技术，捕捉咖啡基质在颗粒尺度上的微观细节，并基于三维重建数据，运用光滑粒子流体动力学方法（SPH）进行流体动力学模拟。由此，我们能够从模拟中获得基质的流动渗透率和曲折度等信息。我们发现，在意式浓缩咖啡冲煮的典型压力梯度条件下，惯性效应可能相当显著，这也为文献中渗透率测量结果不一致的现象提供了一种解释。我们还进一步考察了几种咖啡粉，揭示了它们各自不同的微观细节及由此产生的流动特征。通过比较萃取前后的咖啡基质显微CT图像，我们发现，萃取后总会形成孔隙率分布逐渐降低的现象（从底部出口到顶部入口）。这一反直觉现象可以用我们先前工作中提出的压力依赖型侵蚀模型加以解释。我们的研究不仅揭示了咖啡萃取中的一些重要流体动力学机制，还表明，微型计算机断层扫描能够为咖啡萃取建模提供有用的微观细节。微型计算机断层扫描为数据驱动数值框架奠定了基础，可用于探索咖啡粉微观结构与萃取动力学之间的联系；这是研究挥发性和非挥发性有机化合物随时间演变、进而研究咖啡冲煮液风味特征的先决条件。

1 引言

烘焙研磨咖啡基质是一种高度复杂的多孔介质，具有多尺度特征。用于制作双份浓缩咖啡的典型咖啡基质体积约为 15 ml，由数百万颗咖啡颗粒组成。这些咖啡颗粒由研磨烘焙咖啡豆制成，粒径分布大致呈双峰特征 [1]。分布曲线的第一个峰始终在约 $30 \sim 40$ μm 处，对应所谓的“细粉”，即内部细胞壁碎片（严格来说，这个峰之前还有少量亚微米组分）。第二个峰对应所谓的“粗粉”，其平均粒径取决于研磨机，数值范围为 $200 \sim 1000$ μm。此外，咖啡颗粒并非完全致密的固体，而是自身也具有多孔结构的材料，颗粒内部有许多尺寸为 $30 \sim 60$ μm 的细胞腔 [1]。最后，细胞壁在纳米尺度上也具有多孔结构。

*cmo@bcamath.org

在咖啡萃取过程中，水流经这一复杂的多孔结构，咖啡因、葫芦巴碱、多酚和多糖等许多化合物会从固体基质中扩散并被对流带出，最终进入杯中，决定饮品的品质（例如风味和口感）。

这种咖啡萃取过程尤其难以建模。这不仅是因为如上所述，咖啡床几何结构的多尺度特性带来了复杂的拓扑特征，还因为除简单的扩散和对流之外，过程中还伴随着许多其他物理过程。例如，多孔介质会因细粉迁移 [2], 颗粒侵蚀 [3, 4], 和颗粒膨胀 [3, 5]而发生几何变化；此外，还会发生许多亲水性物质的溶解 [6], 不溶性咖啡油的乳化 [7], 固体咖啡细胞壁碎片（细粉）的悬浮 [7], 以及 CO_2 脱气和过饱和 [8]。这些物理过程彼此相互关联，使咖啡萃取的建模极具挑战性。

为了预测咖啡品质并提出更优的冲煮方案先验，许多研究尝试采用各种模拟技术对萃取过程进行建模。早期的尝试包括使用基于元胞自动机的模型进行渗流模拟 [2, 9]。近年来，格子玻尔兹曼方法（LBM）也被用于模拟萃取动力学 [10] 并考虑膨胀和侵蚀效应 [4]。研究人员还提出了多尺度模型。在 Moroney等人 [11] 的研究中，采用升尺度过程来关联不同尺度下的守恒方程。该多尺度模型通过实验测得的咖啡床层参数进行参数化后，能够定量再现实验萃取曲线。在 Melrose等人 [12]和 Cameron等人 [13], 的研究中，提出了另一种能够纳入咖啡颗粒双峰特征的多尺度模型。该模型采用一维对流-扩散方程描述宏观质量传输，同时通过咖啡基质不同层中代表性咖啡颗粒内部的扩散方程对微观萃取进行建模。不同尺度下的方程通过源项和边界条件耦合。研究发现，该模型同样能够捕捉萃取动力学。除这些模型之外，近期还提出了基于光滑耗散粒子动力学（SDPD）的介观模型，以纳入咖啡萃取过程中的细粉迁移 [14], 颗粒侵蚀 [15] 和膨胀效应 [16] 。

然而，在上述大多数建模与模拟中，咖啡基质中的流体动力学要么用平均孔隙率和渗透率来表征 [10–13], 要么通过流体流经由许多球体/圆盘人工堆积而成的结构来解析 [4, 14–16]。这些模拟可能无法捕捉咖啡萃取中的某些重要特征。例如，咖啡颗粒的粒径通常呈平滑的双峰分布 [1] ，且颗粒并非球形 [3], ；因此，若使用简单的Carman-Kozeny关系和达西定律表征流动，或使用由理想球体/圆盘堆积形成的合成多孔介质进行渗流模拟，就会丢失许多细节。事实上，众所周知，粒径分布对咖啡的最终品质影响颇大 [17]。因此，在咖啡萃取模拟中准确模拟整个粒径范围十分重要。通过使用X射线显微断层成像（microCT）/X射线显微镜（XRM）扫描咖啡基质，并根据其三维重建的内部拓扑结构构建多孔介质模型，可以直接获得高分辨率映射，从而捕捉咖啡基质的所有微观细节 [18, 19]。这样不仅能考虑完整的粒径分布，还能捕捉基质中的空间渗透率波动。空间渗透率波动可能与“局部堵塞”现象相关，而这种现象可能导致极细咖啡粉的萃取率较低 [13]。

利用X射线显微计算机断层扫描，还可以对萃取前（干燥）咖啡基质和萃取后（湿润）咖啡基质进行扫描。对两者进行比较，或可揭示多孔结构在萃取过程中如何变化。这些信息可为模拟导致萃取过程中几何变化和基质重构的不同物理过程提供重要指导。据我们所知，显微CT重建尚未用于直接模拟咖啡基质微观结构中的咖啡萃取。这将是本文的研究主题。

在本文中，我们将使用 microCT 重建数据构建静态多孔介质模型，并采用光滑粒子流体动力学方法（SPH）模拟渗流过程。我们确定不同压力梯度下模拟介质的渗透率，并将其与文献中的实验数据进行比较。我们表明，在意式浓缩咖啡冲煮中通常考虑的压力梯度下，惯性效应具有相当大的影响。因此，文献中发现的许多咖啡基质渗透率结果之间的不一致性，可以用上述惯性效应来解释。我们还研究了几种类型的咖啡粉，并使用 SPH 模拟系统地测量其渗透率和曲折度。这有助于建立咖啡粉粒度分析及其他微观结构特征与萃取效率之间的联系。最后，我们还分析了萃取后咖啡基质的显微CT图像，结果显示，萃取后总会形成一种递减的孔隙率分布（从底部出口到顶部入口）。这一反直觉现象可以使用我们先前工作中提出的特定压力依赖型侵蚀模型加以解释 [15]。

本文的组织结构如下：第 2 节介绍所研究的咖啡粉（第 2.1 节）、粒径分析方法（第 2.2 节）、显微断层成像技术（第 2.3 节）以及基于SPH的渗流模拟技术（第 2.4 节）。第 3 节首先介绍粉体粒度分析结果（第 3.1 节）。随后，我们在第 3.2 节对 microCT 图像进行简要分析。第 3.3 节讨论咖啡基质的渗流和曲折度。第 3.4 节报告萃取后的显微CT图像分析结果。最后，第 4 节给出结论。

2 材料与方法

2.1 咖啡粉

使用同一款中度烘焙的 100% 阿拉比卡咖啡混合咖啡制备了四种不同类型的研磨咖啡：浓缩咖啡（E型），其粒径分布是传统浓缩咖啡冲煮的典型特征；IPSO（H型），是胶囊浓缩咖啡冲煮的典型类型；Refilly Moka（M型），是摩卡壶冲煮的典型类型；以及 PillowPack（F型），是滴滤冲煮的典型类型。H型还采用了深度烘焙程度。咖啡粉已包装在用于冲煮浓缩咖啡的单剂量胶囊中（Iperespresso®）。胶囊（单份浓缩咖啡）大致呈圆柱形，高约 14.6 毫米，宽约 32.5 毫米。每个胶囊含有 6.7±0.1 克咖啡粉。本实验所用的胶囊由 illycaff`e S.p.A. 提供。

2.2 粒径分析

采用激光衍射法对这些粉末进行检测，以获得其粒径特征。使用 Mastersizer 3000（Malvern Instrument，英国）进行测量。

2.3 X射线显微断层成像

采用X射线三维成像获取咖啡基质的内部微观结构。使用 Zeiss Xradia Versa 520（Carl Zeiss XRM，美国加利福尼亚州普莱森顿）进行高分辨率XRM无损成像；成像系统配备CCD（电荷耦合器件）探测器，并采用闪烁体耦合可见光光学系统和钨透射靶。三维扫描时，X射线管电压为80 kV，管电流为87 mA，曝光时间为3000 ms，共采集3201个投影。选用光学放大倍数为0.4x的物镜，像素合并设为1，得到的各向同性体素（三维像素）尺寸约为 16.8μm $\times 16.8\mu$m $\times 16.8\mu$m。使用Zeiss Microscopy商业软件包（XMReconstructor）和基于滤波反投影的自动生成锥束重建算法，从二维投影重建断层图像。粉末装在Illy Hyper Espresso胶囊中（详情见上文）。

通过选择全局灰度阈值对微型计算机断层成像进行二值化，从而完成分割。然而，微型计算机断层扫描的分辨率与较小的细粉处于同一数量级，而部分细粉占据了空气空间，因此空气空间的灰度实际上取决于空气和细粉的部分体积。此外，咖啡颗粒还具有许多与微型计算机断层扫描分辨率处于同一尺度的内部孔隙。因此，咖啡的灰度也取决于咖啡颗粒内部固体和空气的部分体积。因此，要确定区分咖啡与空气空间的合适灰度阈值颇具挑战性。此外，咖啡床层微型计算机断层成像的灰度分布呈单峰高斯形状，传统分割技术 [20,21]通常无法处理这类图像。这里，我们通过使微型计算机断层成像得到的床层孔隙率与比重瓶数据得到的孔隙率相匹配来确定灰度阈值。具体步骤如下：

1. 微型CT图像经过反相处理。在原始图像中，较亮的像素代表固体。我们首先对像素值进行反相处理。2. 假设灰度阈值已知为 T_g，使用该阈值对微型计算机断层成像进行二值化处理。3. 然后，使用连通区域标记算法 [22] 来识别连通空隙和孤立空隙。这些空隙簇将由一个体积非常大的主要簇和许多体积较小的次要簇组成。显然，主要簇代表颗粒间孔隙。孤立的次要簇是颗粒内部的封闭孔隙。根据这些簇的体积，可以得到床层孔隙率、封闭孔隙率和总孔隙率。4. 为避免处理咖啡饼的圆柱表面，我们从每个咖啡饼的微型计算机断层成像中提取一个由 $600 \times 600 \times 600$个像素（$1 \times 1 \times 1$厘米）组成的长方体。改变 T_g，即可确定该长方体样品在不同阈值下的孔隙率。通过处理微型计算机断层成像获得的一个示例

E 型粉末如图 1所示。从图中可以看出，总孔隙率与床层孔隙率几乎相同，颗粒间孔隙的总体积也比颗粒内闭孔高出几个数量级，这表明我们的微型计算机断层成像未能捕获大多数封闭孔隙。鉴于微型计算机断层成像的分辨率为 16.759μ米、^{3}/像素，而颗粒内孔隙的尺度与之相同，这是合理的。该分辨率不足以准确捕获颗粒内孔隙。因此，孔隙率几乎完全由咖啡饼的床层孔隙率构成。将从二值化图像中获得的床层孔隙率与文献中可获得的咖啡基质典型床层孔隙率进行匹配 [13,23], ，即可确定正确的灰度阈值，并使用该阈值对微型计算机断层成像进行二值化处理。在图 1所示的示例中，需要匹配的孔隙率为 0.17，由此可确定灰度阈值为 200。随后可使用该灰度阈值对微型CT图像进行二值化处理。

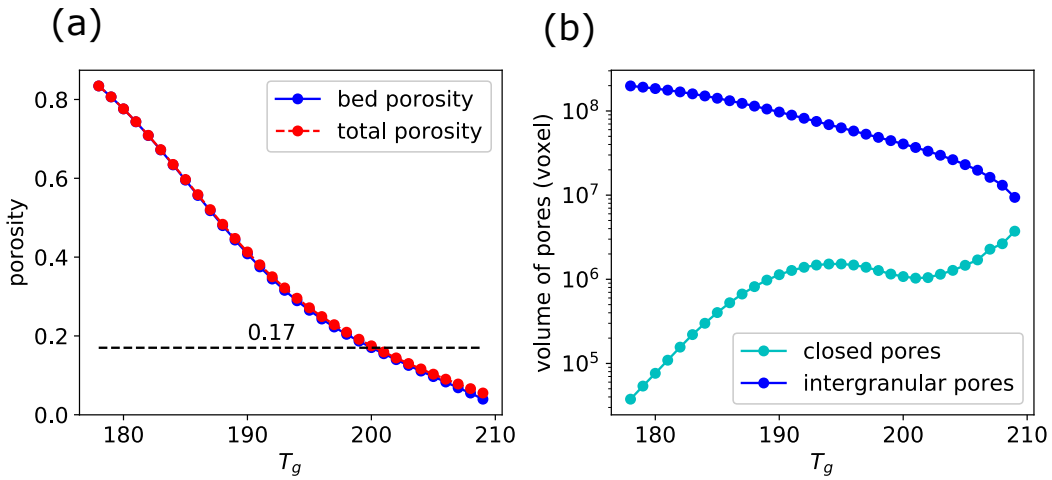


图 1: （a）不同灰度阈值下长方体样品的床层孔隙率和总孔隙率。黑色虚线表示真实咖啡基质的典型床层孔隙率。（b）不同灰度阈值下颗粒间孔隙和颗粒内闭孔的体积。

2.4 使用光滑粒子流体动力学进行渗流模拟

分割后，我们从体素模型得到一个标签矩阵，其中固体体素标记为 1，空隙/空气体素标记为 0。模拟采用光滑粒子流体动力学（SPH）方法（见补充材料）。将指定尺寸的模拟盒以指定数密度和某种晶格形式填满 SPH 粒子。通过将模拟盒映射到体素模型内部的一个三维区域，可对标签矩阵进行插值，从而将每个 SPH 粒子分类为流体粒子或固体粒子。完成分类后，基于 microCT 成像构建 SPH 粒子模型的过程即告完成。

按照上述流程生成的 SPH 粒子模型示例如图 2 所示。本例从 microCT 成像中截取了一个边长为 $L = 708\mu$m 的立方体，并用于上述流程。在顶部和底部均添加了缓冲流体区域。SPH 粒子密度设定为与体素数密度相同，粒子位于面心立方晶格点上。

准备好 SPH 粒子模型后，我们可以在所有边界设置周期性边界条件，并沿 y 方向施加体力，驱使流体渗流通过多孔介质。有关 SPH 形式体系以及我们模拟所用 SPH 参数的详情，请参阅补充材料。

3 结果与讨论

3.1 咖啡粉粒度分析

采用激光衍射测量得到的咖啡粉颗粒分布如图 3 所示。密度分布通常呈双峰特征，第一个峰代表细颗粒，第二个峰代表粗颗粒。第一个峰始终位于约 $25 \sim 50\mu$m 处，这是因为细粉由细胞碎片组成，而细胞尺寸范围为 $25 \sim 50\mu$m。随着研磨程度变粗，粗颗粒峰的位置会向右移动。激光衍射测量得到的更多结果，包括均匀度、比表面积、索特平均直径（d[3,2]）、德布鲁克雷

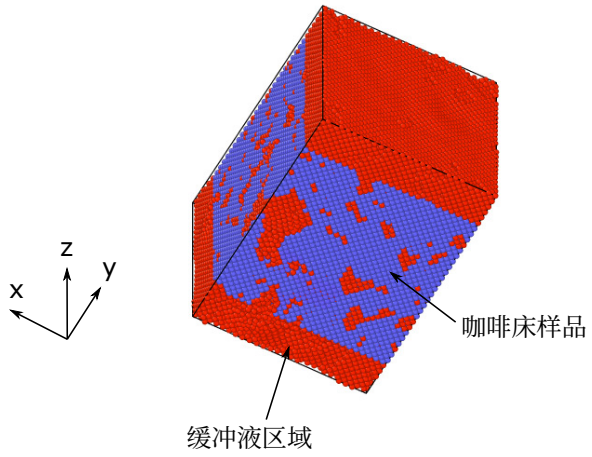


图 2：SPH 粒子模型示例，尺寸为 $L_x = L_z = 708\mu$m、 $L_y = 991\mu$m。蓝色颗粒：固体颗粒；红色颗粒：流体。

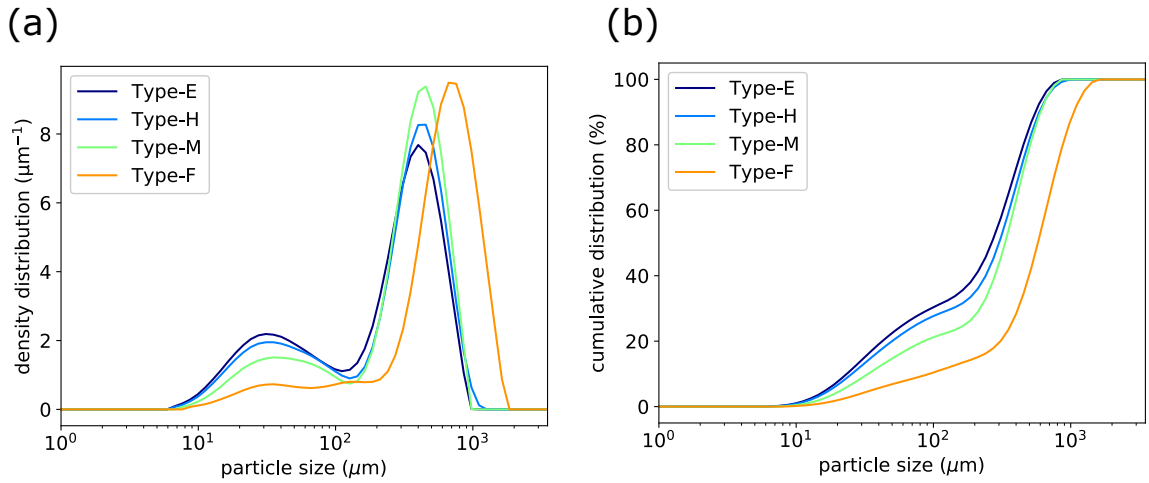


图 3：(a) 不同类型研磨咖啡的粒径密度分布。(b) 粒径累积分布。

平均直径（$d_{[4,3]}$）以及粒径小于 100μm 的颗粒体积分数，总结于表 1 中。从图 3 和表 1 均可看出，从 E 型到 F 型，细粉体积分数逐渐降低。假设所有小于 100μm 的颗粒均为细粉，则 E 型粉末中细粉含量为 29.21%，而 F 型粉末中仅为 9.7%。平均直径也从 E 型增加到 F 型，同时均匀度和比表面积随之降低。

3.2 X射线微型计算机断层扫描分析

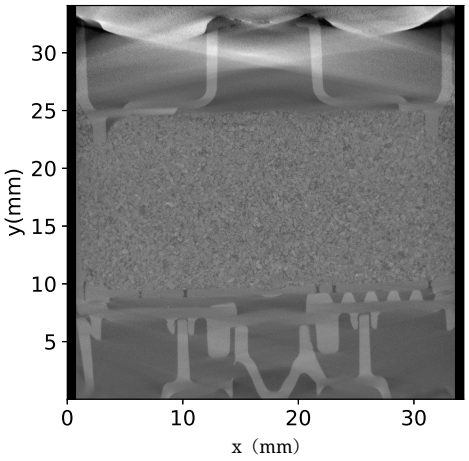
图 4 展示了 H型粉末微型CT/XRM成像数据的垂直数字切片（所有粉末的放大切片图像见补充材料）。图像中可以清晰地看到咖啡颗粒以及胶囊的塑料/金属结构骨架。

首先按照上述分割方案对微型计算机断层成像进行二值化。图5展示了微型计算机断层成像在分割前后的一些裁剪区域。请注意，图中分割前的图像已反转像素，使较亮的区域代表空隙。从图中可以看出，咖啡颗粒从E型到F型逐渐变粗。这与我们的粒径测量结果一致。

随后，利用二值化图像分析咖啡饼孔隙率的空间分布。由于咖啡饼呈圆柱形，我们将其划分为多个径向厚度相同的环形截面，并计算每个垂直层中的空隙体积分数，从而得到孔隙率随.....变化的曲线。

表1：不同类型咖啡粉的激光衍射结果

Type	均匀度	比表面积 (m²/kg)	d[3,2] μm	d[4,3] μm	低于 100 μm的体积
E	0.646	74.09	81.0	308	29.21%
H	0.600	66.60	90.1	341.6	27.52%
M	0.508	51.66	116	372	20.26%
F	0.473	28.05	214	673	9.7%



Fi图4：H型咖啡粉微型计算机断层成像的垂直剖切图。

不同径向距离处的垂直坐标如图 6 所示。可以看出，随着细粉体积分数降低，曲线从 (a) 到 (d) 波动更加明显，但每个胶囊中的基质孔隙率总体较为均匀。在大多数情况下，径向上没有明显的变化趋势。例外的是 H型胶囊，其顶部中心附近的孔隙率明显较高。这可能是胶囊输运条件不同所致。所有情况下，垂直方向上均没有明显的变化趋势。

3.3 渗透率和曲折度

首先，我们详细研究 H 型粉末的渗透率。使用光滑粒子流体动力学（SPH）模拟多孔介质流动。首先考察边长为 $L = 708\mu$m 的裁剪立方体样品。SPH 粒子模型如图 2 所示。在 y 方向添加总高度为 $L_{\mathrm{buf}} = 283\mu$m 的流体缓冲区域。当在$-y$ 方向施加体力 g 时，样品区域内的有效压力梯度为 $\rho g(1 + L_{\mathrm{buf}}/L)$。图 7 展示了有效压力梯度与 $-y$ 方向上的流量之间的关系。两者呈线性关系，并通过达西定律进行拟合：

$$\nabla P = -\frac{\mu}{k} q \tag{1}$$

其渗透率为 $k = 5.51 \times 10^{-13}\,\mathrm{m}^2$。该值低于 Gianino [24]（$k$ =$2.3 \times 10^{-12}\,\mathrm{m}^2$）和 King [25]（$k = 8.98 \times 10^{-13}\,\mathrm{m}^2$）的测量值，但高于 Navarini等人 [26]（$k = 0.7 \sim 4 \times 10^{-13}\,\mathrm{m}^2$）和 Corrochano等人 [27]（$k = 2.59 \times 10^{-14} \sim 3.36 \times 10^{-13}\,\mathrm{m}^2$）给出的估算值。结果不一致可能是由不同的超压（$\Delta P$ 跨越咖啡床层）造成的：在 Gianino [24] 和 King [25] 的实验中，超压仅约为 0.01 bar，而在 Navarini等人 [26] 和 Corrochano等人 [27] 的实验中，超压约为 1 bar。在本文的光滑粒子流体动力学模型（图 2）中，压力梯度 $8 \sim 40\,\mathrm{bar/m}$ 对应于高度为 2 cm 的咖啡床层上 0.16 bar 至 0.8 bar 的超压。因此，此处的超压处于中间水平，所得渗透率高于 Navarini等人 [26] 和 Corrochano等人 [27]的结果。当压力梯度显著增大时，如图 8 (a) 所示，使用达西定律得到的渗透率会随压力水头增加而降低，与 Navarini [26]和 Corrochano [27]的结果更加吻合。若咖啡床层高度为 2 cm，图 8 (a) 中的压力梯度从 50 bar/m 增至 400 bar/m 时，超压为 $1 \sim 8$ bar。随着压力水头增加，渗透率从约 5.2×10^{-13} 降至 $2.5 \times 10^{-13}\,\mathrm{m}^2$。Navarini的实验研究 [26]也报告了这种压力依赖性。

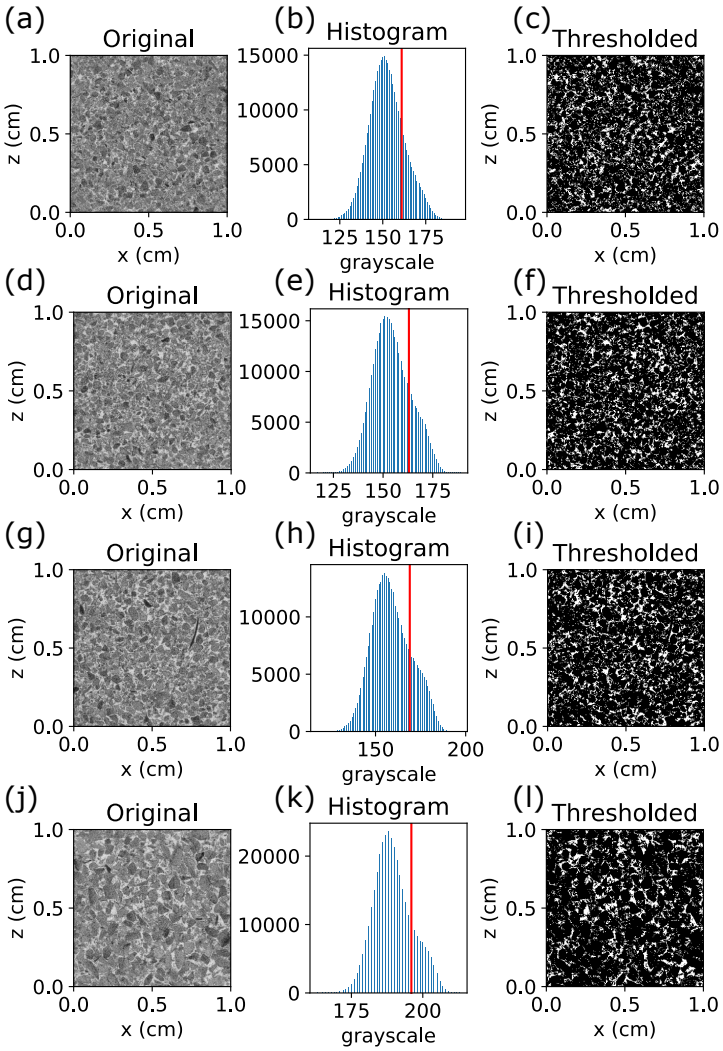


图5：分割前后微型计算机断层成像的水平切片裁剪图。(a)-(c) E 型粉末；(d)-(f) H型粉末；(g)-(i) M型粉末；(j)-(l) F型粉末。第一列显示原始微型计算机断层扫描图像。第二列显示灰度直方图。红线标示通过匹配床层孔隙率确定的灰度阈值。第三列显示阈值处理图像。

在实验中，渗透率对压力梯度的依赖性可能归因于床层在压力作用下发生变形。但在我们的模拟中，多孔咖啡床层是静止且不可变形的，仍然观察到了这种依赖性，因此不能将其完全归因于多孔床层在压力作用下的变形。我们认为，压力升高时渗透率降低，是流动惯性效应造成的。图 8 (b) 展示了不同压力梯度下的流量，以及采用达西定律和Forchheimer修正 [28] （式 2）进行的拟合。

$$\nabla P = -\frac{\mu}{k} q - \frac{\rho}{k_1} |q| q \tag{2}$$

拟合效果很好，得到的渗透率为（$k = 8.0 \times 10^{-13}\ \mathrm{m}^2$），附加惯性渗透率为 k_1 =$2.17 \times 10^{-13}\ \mathrm{m}^2$。惯性效应使流量的增长速率低于线性关系，因此使用达西定律时，会得到随压力梯度增大而降低的渗透率。如果采用 $d_{4,3} = 341.6\ \mu\mathrm{m}$ 作为特征长度，则图8中的雷诺数（$\mathrm{Re} = d_{4,3} \rho q / \mu$）介于0.84至3.86之间，表明在高压力梯度下惯性确实不可忽视。

假设不存在回流，则可通过追踪流体粒子的轨迹来确定所述咖啡床样品的曲折度：

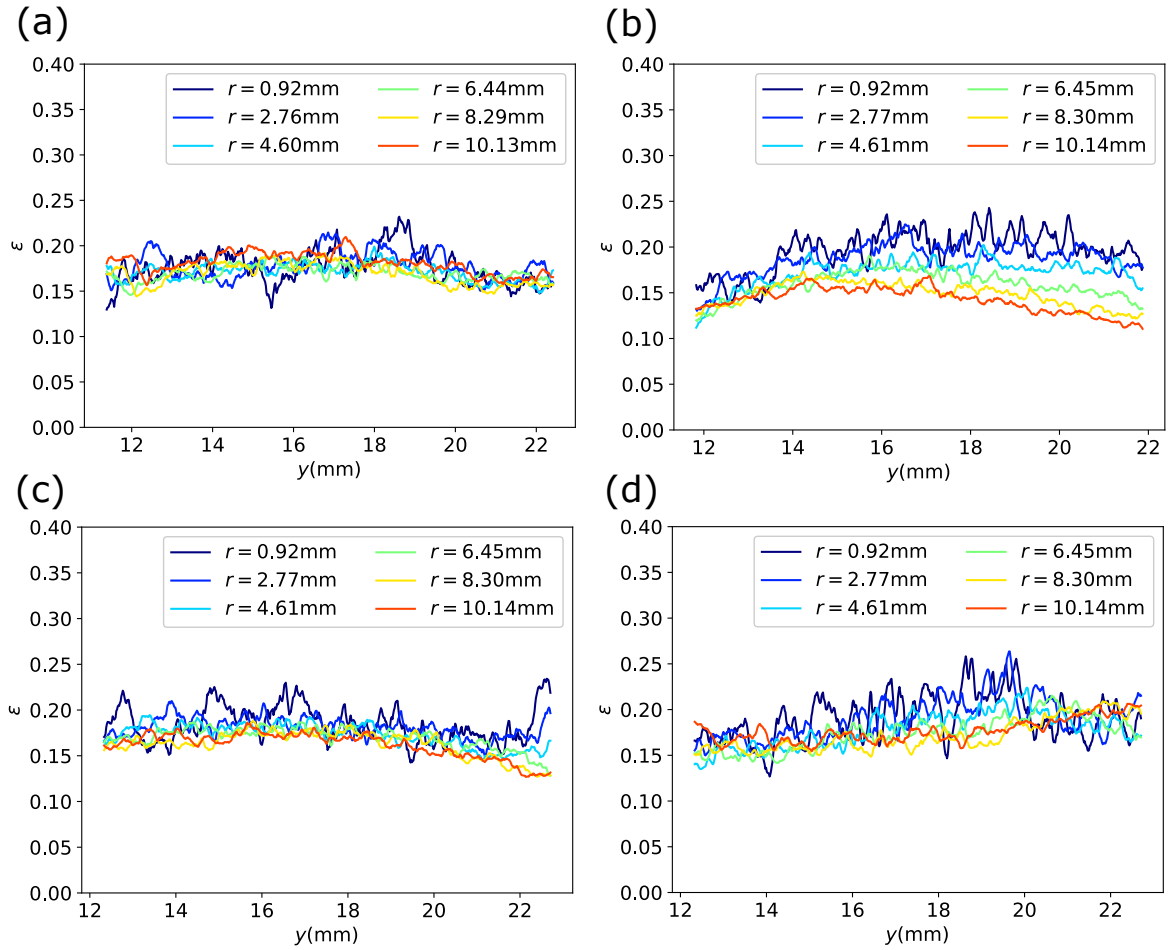


图6：咖啡饼在不同位置处的局部孔隙率。 y 为垂直位置， r 为距咖啡饼中心的径向距离。(a) E型；(b) H型；(c) M型；(d) F型。

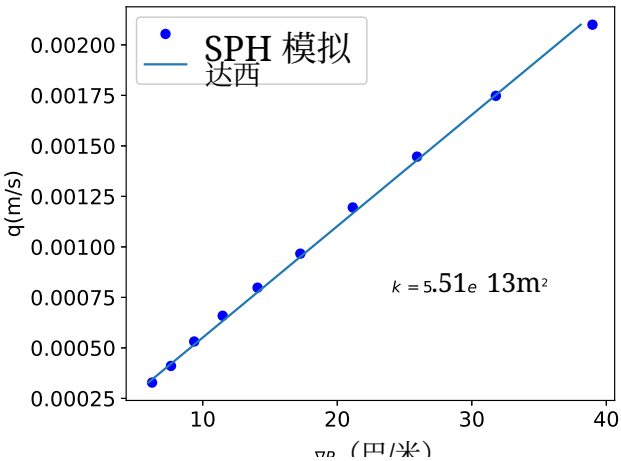


图7：不同压力梯度下的流量及使用达西定律进行的拟合。此处压力梯度相对较低。（H型粉末）

$$\tau = \frac{\sum_i^N \int_{\mathbf{x}_i \in \Omega_c} ||\mathrm{d}\mathbf{x}_i||}{\left| \sum_i^N \int_{\mathbf{x}_i \in \Omega_c} \mathrm{d}\mathbf{x}_i^\beta \right|}, \tag{3}$$

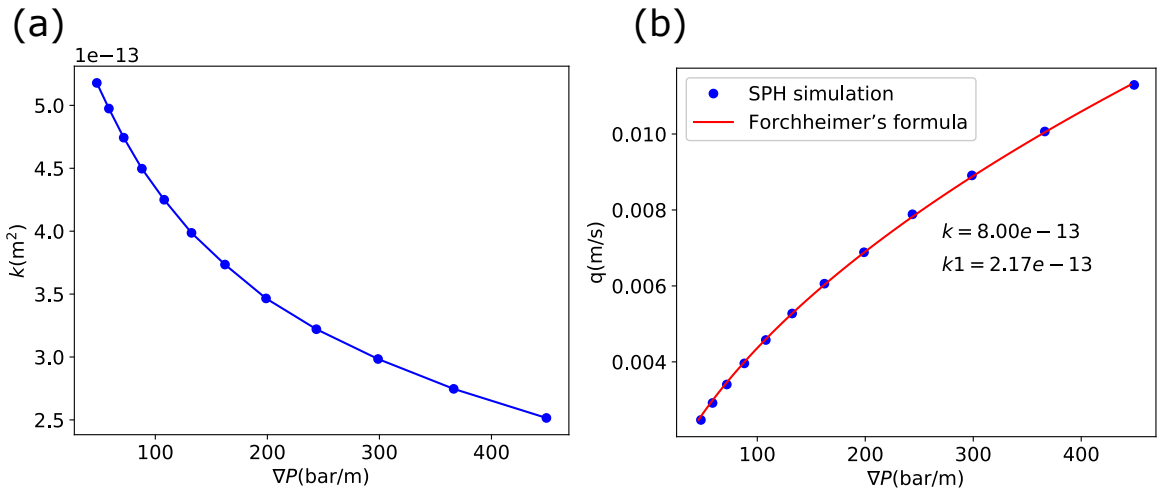


图8：（a）当压力梯度较高时，根据达西定律得到的渗透率取决于压力梯度。（b）不同压力梯度下的流量，以及采用含福希海默修正的达西定律进行的拟合。（H型粉末）

其中 τ 为曲折度， N 为流体粒子总数，Ω_c 为咖啡样品区域，$\mathbf{x}_i$ 为粒子i的轨迹， β 为过滤方向。

对于图8中的一次模拟，图9展示了3706个带标记粒子的轨迹，这些粒子的初始位置位于上方缓冲液区域的顶部。由于所有边界均为周期性边界，且坐标已展开，因此轨迹延伸到了模拟盒之外。利用公式3可确定曲折度为 $\tau = 1.80$。幂律关系常用于描述曲折度-孔隙率相关性[29]:

$$\tau = \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^n, \tag{4}$$

其中， n 是一个取决于堆积特性的参数。已知样品的孔隙率为 0.17，利用公式 4，可以确定 $n = -\log\ \tau / \log\ \epsilon = 0.33$。

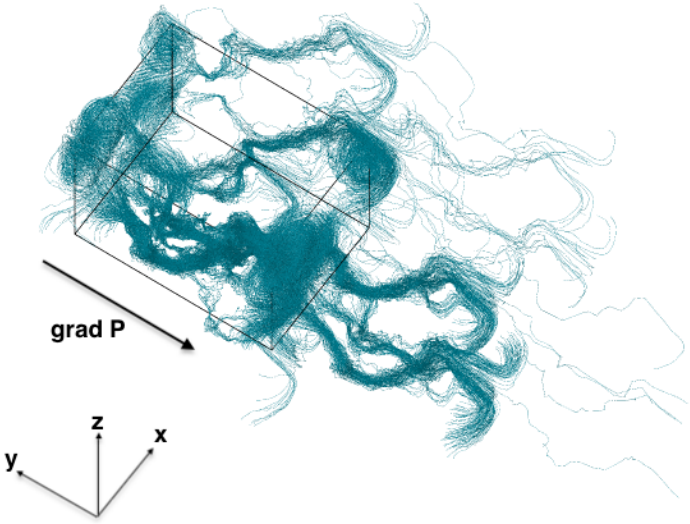


图9：流体粒子穿过咖啡床样品的轨迹。箭头标示压力梯度的方向。黑色边框为尺寸为 $L_x = L_z = 708\mu$m、$L_y = 991\mu$m的模拟盒，所有边界均为周期性边界，所有坐标均已展开。（H型粉末）

表2：咖啡样品（H型粉末）的性质汇总。参数 k^{D} 是在低 ∇P 流动状态下使用达西定律获得的渗透率， k^{F} 和 k_1^{F} 是在高 ∇P 流动状态下使用Forchheimer公式获得的渗透率。

样品	位置（毫米）	孔隙率	曲折度	k^{D} ($10^{-13}\mathrm{m}^2$)	k^{F} ($10^{-13}\mathrm{m}^2$)	k_1^{F} ($10^{-9}\mathrm{m}^2$)
1	(1.68, 20.35, 10.06)	0.170	1.80	5.59	7.95	4.21
2	(1.68, 16.76, 0)	0.183	1.91	2.58	9.15	0.41
3	(0, 14.45, 3.35)	0.226	1.56	35.1	67.1	68.9
4	(-3.35, 13.64, 6.73)	0.162	1.91	7.99	14.9	5.77
5	(0, 16.99, 0)	0.180	1.65	14.3	24.9	17.5
6	(-1.68, 18.67, 1.68)	0.180	1.78	18.6	29.4	39.3

上述结果仅来自整个咖啡床层中的一个小样品。然而，该床层相当不均匀，其孔隙率在整个床层的径向和轴向方向上都可能发生显著变化，如图 6 所示。因此，为了恰当地表征咖啡床层的性质，我们从床层中提取了更多样品，并对这些样品进行了模拟。样品的结果和位置总结于表 2 和图 10 中。在图 10 中，使用达西定律和 Forchheimer修正分别对不同样品在低 ∇P 状态和相对较高 ∇P 状态下的流出量—压力梯度关系进行了拟合。所有样品在相对较高 ∇P 状态下均表现出明显偏离达西定律的现象。然而，Forchheimer公式能够准确捕捉高 ∇P 状态下的 $q-\nabla P$ 关系。需要注意的是，在图 10 中，从达西状态到福希海默状态的转变并不对应于单一的临界雷诺数。水文学领域的其他研究人员也报道了这一现象：较粗的颗粒会导致较高的临界 Re [30]。利用达西定律在低 ∇P 状态下获得的渗透率在表 2 中表示为 k^{D}；利用 Forchheimer修正在相对较高 ∇P 状态下获得的渗透率在表 2 中表示为 k^{F} ，而 k_1^{F} 表示惯性渗透率。每个样品的孔隙率和曲折度也列于表 2 中。可以看出，孔隙率和曲折度均略有波动，并且孔隙率与测得的 k^{D} 之间存在很强的相关性。较高的孔隙率往往会导致更大的 k^{D}。

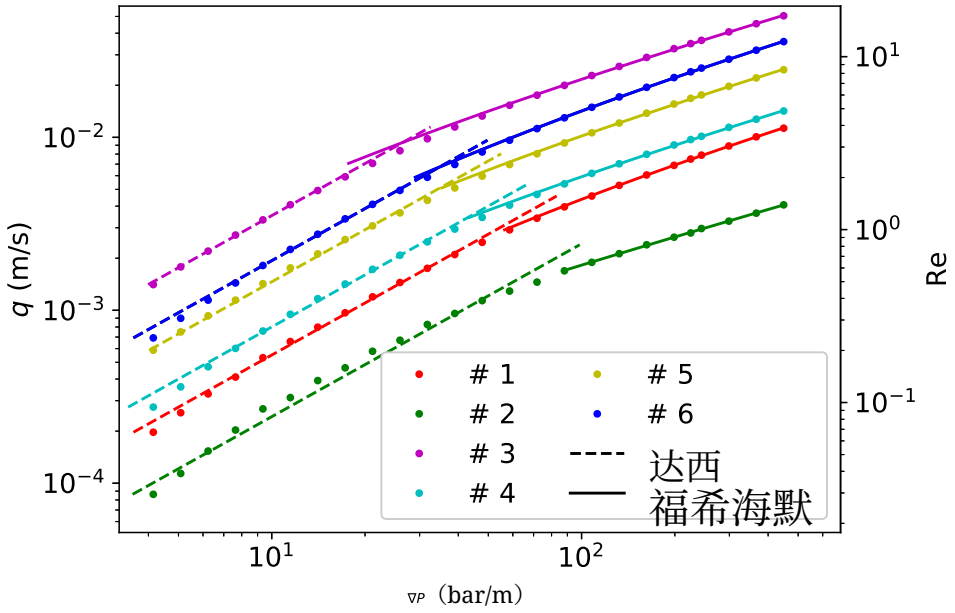


图10：不同截取咖啡样品在不同压力梯度下的流量。虚线为采用达西定律的拟合曲线，实线为采用Forchheimer公式的拟合曲线。（H型粉末）

还对 E、M 和 F 型粉末的样品进行了渗流模拟。结果汇总于表 3-5。图 11 还展示了低压力梯度下不同类型粉末的渗透率 k^{D} 。可以看出，随着咖啡颗粒变粗，平均渗透率增加，而渗透率的方差

表3：咖啡样品（E 型粉末）特性汇总。参数 k^{D} 是在低 ∇P 流动状态下使用达西定律获得的渗透率， k^{F} 和 k_1^{F} 是在高 ∇P 流动状态下使用 Forchheimer公式获得的渗透率。E 型粉末是最细的粉末，因此在某些区域，流动几乎完全堵塞。部分参数无法获得，我们在表中用短横线标记。

样品	位置（mm）	孔隙率	曲折度	k^{D} （10^{-13}米^2）	k^{F} （10^{-13}米^2）	k_1^{F} （10^{-9}米^2）
1	(0, 12.89, 0)	0.141	2.61	1.34	2.29	0.45
2	(3.35, 14.56, -5.02)	0.196	1.55	27.6	69.8	53.1
3	(-10.04, 16.24, 3.35)	0.204	1.60	13.4	28.8	20.7
4	(6.70, 17.91, -10.04)	0.132	2.71	0.27	-	-
5	(-1.67, 19.58, 3.35)	0.131	-	0	-	-
6	(-8.34, 20.42, 8.34)	0.164	1.76	4.59	7.40	2.17

表4：咖啡样品（M型粉末）性质汇总。参数 k^{D} 是在低 ∇P 区间使用达西定律得到的渗透率， k^{F} 和 k_1^{F} 是在高 ∇P 区间使用Forchheimer公式得到的渗透率。

样品	位置（mm）	孔隙率	曲折度	k^{D} (10^{-13}m^2)	k^{F} (10^{-13}m^2)	k_1^{F} (10^{-9}m^2)
1	(5.02, 21.18, -6.70)	0.193	1.66	38.5	93.5	79.4
2	(0, 19.51, 0)	0.149	2.36	1.74	3.17	0.46
3	(10.06, 17.83, -10.06)	0.236	1.40	29.4	121.0	45.1
4	(1.68, 16.99, 3.35)	0.169	1.64	10.3	17.6	8.91
5	(-5.03, 15.32, -3.35)	0.158	1.94	7.81	13.9	8.19
6	(10.06, 13.64, 3.35)	0.202	1.59	13.0	23.4	16.1

也会增加。

从上述结果可以看出，咖啡床层内的渗透率差异相当大。尽管如此，渗透率平均值的变化趋势（见图 11）与我们根据咖啡颗粒粗细程度作出的定性预测一致：细粉越多、比表面积越大，渗透率就越低。尽管分析所用的样品数量不多，不同粉末仍表现出定性差异。如果有足够的计算资源，就有可能对不同粉末的萃取动力学进行定量比较。

3.4 萃取后图像分析

为了研究微观结构变化与萃取之间的联系，我们进一步对另外两个 illy iperespresso 咖啡胶囊进行萃取，并分析萃取后微型计算机断层扫描成像。这些胶囊使用 X7.1 Iperespresso 胶囊咖啡机进行萃取，水温为 97 ± 3°C，压力为 13 ± 1 bar。我们分别在萃取前后对胶囊进行 microCT 扫描，以便通过比较研究萃取造成的形态变化。由于我们事先不知道萃取后咖啡饼的孔隙率，因此无法通过匹配孔隙率来确定分割阈值。然而，润湿后咖啡颗粒与颗粒间孔隙之间的区别更加显著，因此我们可以手动选择灰度阈值来捕捉相界面。图 12 (a) 展示了深度烘焙咖啡胶囊萃取后的 microCT 成像示例。可以看出，此处颗粒与空隙之间的边界清晰得多

表5：咖啡样品（F型粉末）的性质汇总。参数 k^{D} 是低 ∇P 流态下根据达西定律得到的渗透率， k^{F} 和 k_1^{F} 是高 ∇P 流态下根据Forchheimer公式得到的渗透率。

样品	位置（mm）	孔隙率	曲折度	k^{D} （10^{-13}米^2）	k^{F} （10^{-13}米^2）	k_1^{F} （10^{-9}米^2）
1	(1.68, 20.35, 10.06)	0.193	1.41	66.6	213.6	161.4
2	(0, 20.35, 0)	0.183	1.84	27.4	94.8	41.0
3	(10.06, 18.67, -10.06)	0.185	2.60	1.38	1.92	0.527
4	(-10.06, 15.32, 10.06)	0.211	1.62	20.7	66.2	24.1
5	(0, 14.48, 3.35)	0.182	1.56	32.1	60.3	75.1
6	(5.03, 12.80, -6.70)	0.171	2.41	1.19	1.98	0.43

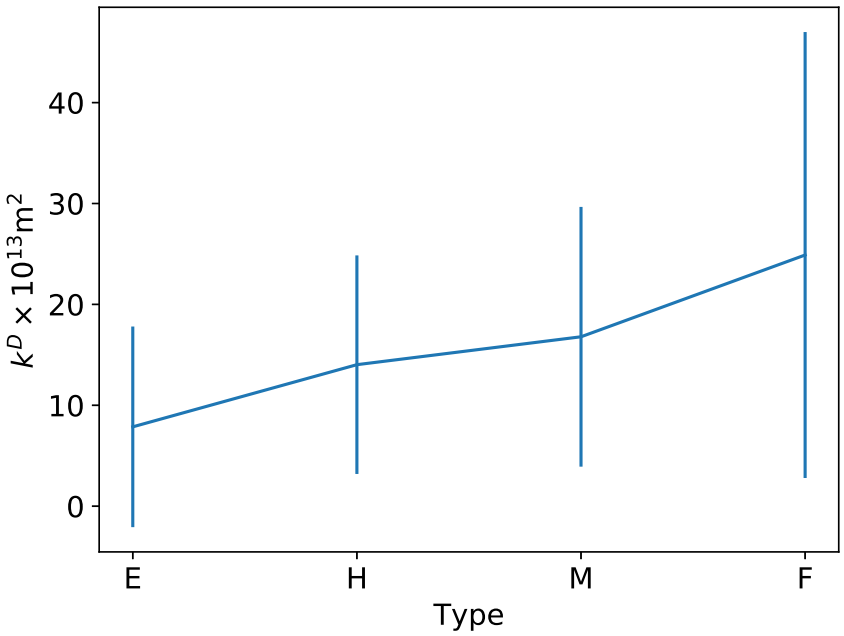


图11：不同粉末的渗透率。

比图5 (a)中的更.....图 12 (b)还显示，这幅微型CT图像中的灰度分布呈双峰。因此，我们可以手动选择阈值对微型CT图像进行二值化：将阈值设为两个分布峰之间的水平中心。以这种方式选取阈值，分割结果对阈值的取值最不敏感。图 12 (a)的分割结果如图 12 (c)所示。

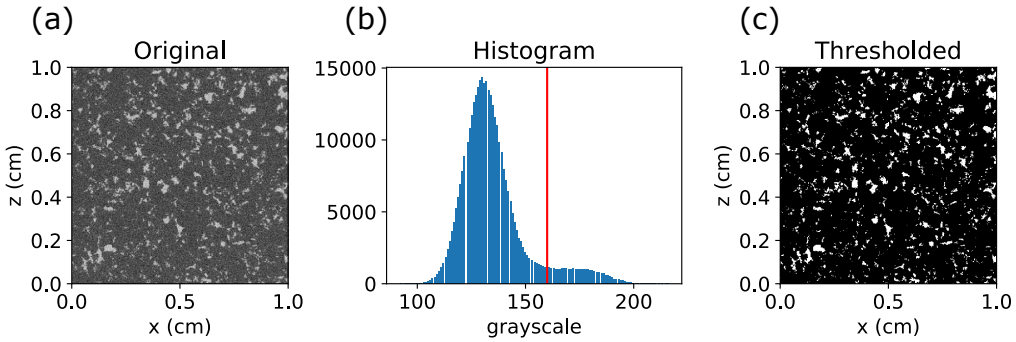


图12：（a）萃取后H型深度烘焙粉末的原始微型CT图像。（b）像素灰度直方图。红线标示手动选择的灰度阈值。（c）阈值处理后的图像。

一枚装有H型中度烘焙粉末的胶囊和一枚装有H型深度烘焙粉末的胶囊分别在萃取前后进行扫描。萃取前后的二值化微型CT图像对比如图 13和15所示。萃取前后的孔隙率对比如图 14和图16所示。可以看出，对于所有胶囊，萃取后咖啡饼的孔隙率降低，孔隙率显著下降。这是因为润湿后，咖啡颗粒膨胀 [3,31] 并与相邻颗粒粘连，液体填充了颗粒内孔隙以及大量颗粒间孔隙。microCT无法准确区分液相和固相，导致孔隙率被低估。然而，我们关注的是咖啡饼中相对的空间孔隙率变化，而非孔隙率的绝对值。图 14展示了H型中度烘焙粉末在萃取前和萃取后3天的孔隙率。萃取前，孔隙率相对均匀。相反，在萃取后3天，基质顶部中心的孔隙率明显高于其他区域。这可能是由于基质的干燥，即顶部中心的干燥速度更快。然而，对于远离中心的区域，底部（出口）的孔隙率始终高于顶部（入口）。这一现象有悖直觉，因为我们预计重力会驱使残余水和其他碎片向底部移动，使基质下部的孔隙率降低。

在萃取过程中，施加的外部压力也应使底部的基质得到更有效的压实。但令人惊讶的是，萃取后我们观察到下部（出口）的孔隙率高于上部（入口）。为了排除干燥的影响，图16展示了H型深度烘焙粉末在萃取前和萃取后即刻的孔隙率。在没有干燥过程引入的额外复杂性的情况下，我们清楚地看到，萃取后底部的孔隙率始终较高。我们还进行了更多实验，在萃取后1小时或24小时对萃取后的基质进行扫描，确认孔隙率分布曲线始终呈现出从基质底部向顶部逐渐降低的明显趋势。

除了干燥过程和压实之外，其他也可能影响基质几何形态的物理过程还包括碎片迁移 [2,14] 和颗粒膨胀 [3,5]。在我们先前的研究中，我们使用光滑粒子流体动力学模拟了细粉迁移 [14]和颗粒膨胀 [16]。不过，细粉迁移往往会导致底部附近的孔隙率降低，因为底部的滤网会阻止细粉离开胶囊。另一方面，如果顶部较早开始膨胀过程，则会导致基质顶部的孔隙率降低。实际情况确实如此，因为水是从顶部注入到底部的。然而，预计这种效应造成的孔隙率差异在萃取后较小，因为注水过程很快（≈ 1s），所有颗粒的膨胀过程最终会在约 4min [3], 内达到饱和，而我们在萃取后 1hr 仍能观察到孔隙率差异。

观察到的空间孔隙率分布最可能是由非均质侵蚀过程造成的。扫描电子显微镜观察表明，浸泡后的咖啡颗粒中有气体滞留 [31]。由于颗粒内部孔隙中滞留了大量气体，萃取过程中咖啡颗粒无法被完全润湿。因此，部分咖啡颗粒在萃取过程中仍保持干燥且易碎。对于脆性材料，其破坏准则通常取决于压力。值得注意的是，由于过滤过程的影响，咖啡基质中的压力也相当不均匀。萃取后孔隙率的非均质性可能与以下位置之间的压降相关

基质通过侵蚀材料的压力相关破坏准则发生变化。事实上，在我们此前的数值模拟研究中 [15], ，我们提出了一种基于 SPH 的自下而上介观侵蚀模型，该模型结合了莫尔-库仑屈服准则 [32, 33] 和简单剪切侵蚀模型 [4, 34]。使用该模型进行的模拟表明，压力相关侵蚀会导致过滤方向上的非均匀性：初始时相对均匀的孔隙率分布在过滤后变得高度不均匀，底部（流动出口）的孔隙率较高，顶部（流动入口）的孔隙率较低。非均匀程度主要由侵蚀材料的内摩擦角控制。本文报告的萃取后孔隙率分布曲线与我们的侵蚀模型 [15]的预测在定性上相符。这表明，我们提出的模型 [15] 适用于捕捉咖啡饼侵蚀的特殊特征。

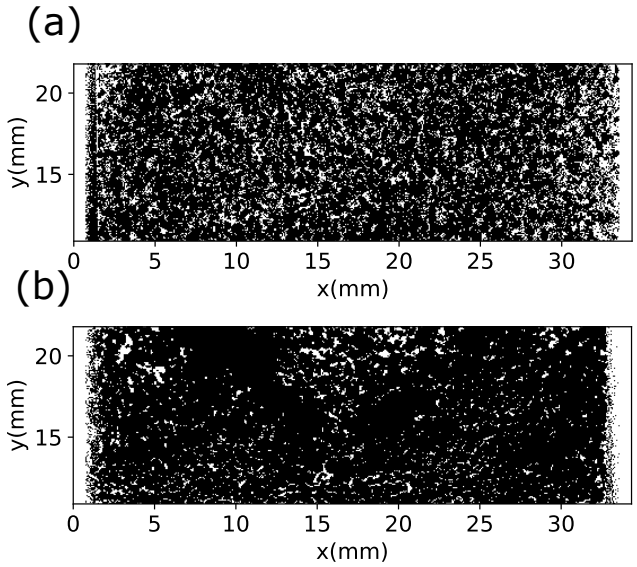


图13：(a) H型中度烘焙粉末萃取前的阈值化微型CT图像，(b) 萃取后3天。

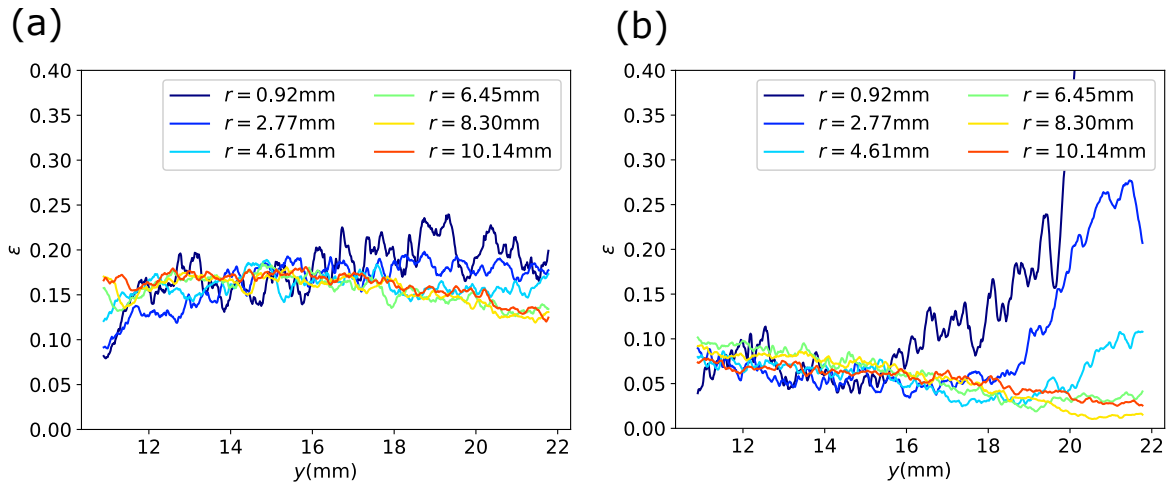


图14：孔隙率　　H型中度烘焙粉末的，（a）萃取前，（b）萃取3天后　　.

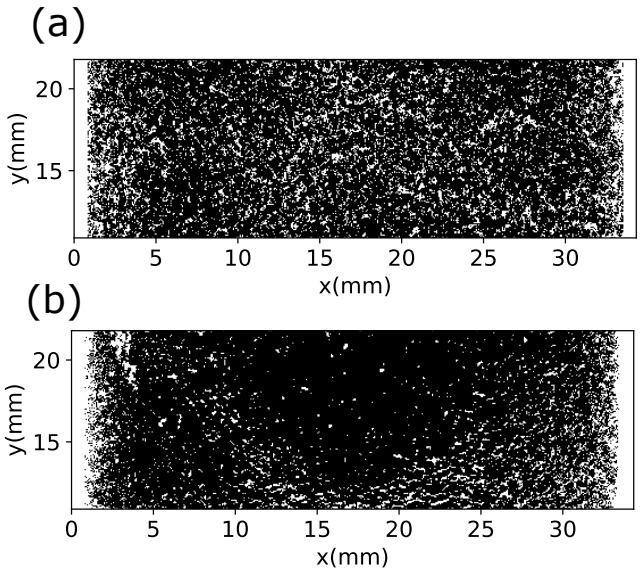


图15：（a）阈值化微型　　H型深度烘焙粉末的CT图像，（a）萃取前，（b）萃取后立即。

4 总结与结论

总而言之，我们采用高分辨率 X 射线微型计算机断层扫描技术，捕捉颗粒尺度咖啡基质的微观细节。随后利用三维重建数据，为渗流过程构建基于 SPH 的数字孪生体。

我们从两个角度探讨微观结构与流动性质之间的联系：1）**渗透率和曲折度。** 通过结合三维显微CT重建数据与光滑粒子流体动力学渗流模拟，可以确定基质的渗透率和曲折度。我们发现，在意式浓缩咖啡冲煮的正常压力梯度下，惯性效应实际上相当显著。文献中已有一些报告指出，较大的压力梯度似乎会导致咖啡基质渗透率降低。本文通过考虑惯性效应，证明了这一现象可以得到合理解释。我们还研究了几种不同类型的咖啡粉，并利用SPH模拟系统地测量了其渗透率和曲折度。结果表明，同一基质不同位置的渗透率存在较大差异，而且咖啡粉颗粒越粗，渗透率的差异就越大。尽管如此，随着粉末颗粒逐渐变粗，其平均渗透率仍呈稳定上升趋势。2）**萃取后微观结构。** 我们分析了萃取后咖啡基质的显微CT图像，发现萃取后总会形成一种孔隙率递减的分布（从底部出口到顶部入口）。这一反直觉现象可以通过采用我们在此前论文 [15] 中提出的压力依赖型侵蚀模型来解释。研究表明，咖啡粉的侵蚀在一定程度上依赖于压力。这种压力依赖性可能源于

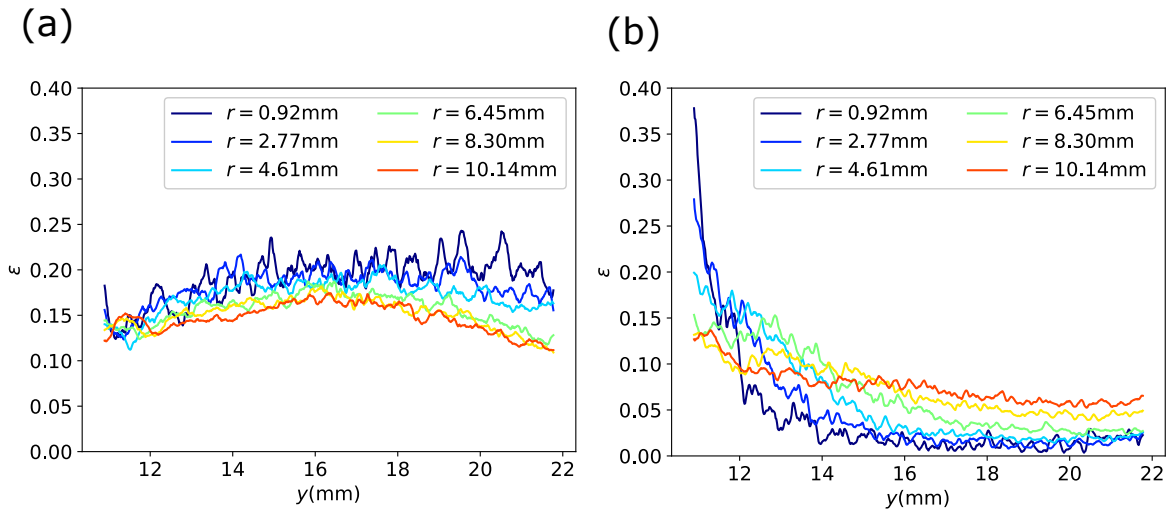


图16：H型深度烘焙粉末的孔隙率，（a）萃取前，（b）萃取后立即。

咖啡颗粒内部滞留的气体：未被充分润湿的颗粒仍会保持足够的脆性，而脆性材料的破坏通常取决于压力。另一种与这种压力依赖型侵蚀模型相一致的物理情形，与单个细粉通过静电作用附着在粗颗粒表面有关。当流动产生的流体动力法向力和切向力克服其表面吸引力时，这些细粉便会被移除。

总而言之，借助 microCT 和 SPH 模拟，我们获得了两项关键发现：识别出达西-福希海默转变，以及萃取后沿过滤方向呈现非均匀的孔隙率分布。达西-福希海默转变表明，许多实验中观察到的高萃取压力下渗透率降低，可能归因于惯性效应。这有助于厘清不同研究团队实验结果之间的差异，并为新的测量实验提供指导。萃取后沿过滤方向呈现的非均匀性表明，咖啡颗粒的侵蚀可能取决于压力。这凸显了水动力作用下咖啡颗粒侵蚀机制所发挥的作用。

我们主要以定性的方式探索了 microCT 获得的微观结构与流动性质之间的联系。受计算资源限制，我们无法模拟完整真实尺寸的三维模型来建立定量联系。尽管如此，我们的结果表明，微型计算机断层扫描能够为我们提供有关咖啡基质的许多微观细节。若要准确模拟渗流过程，这些信息至关重要。此外，通过比较萃取前后的扫描结果，我们可以获得关于萃取过程中几何结构如何变化的一些关键信息。这进而能够揭示咖啡萃取过程中相互关联的复杂物理过程如何发展的一些细节，并帮助我们提出更好的建模方法来描述这些过程。

致谢

本研究由 illycaff`e S.p.A. 通过“介观尺度上的意式浓缩咖啡萃取建模与模拟”项目提供支持。我们还感谢 BERC 2022—2025 计划以及西班牙国家研究署通过 BCAM Severo Ochoa 卓越认证 CEX2021-001142-S/MICIN/AEI/10.13039/501100011033 和项目 PID2020-117080RB-C55（“软物质实验的微观基础：计算纳米流体动力学”，简称“Compu-Nano-Hydro”）提供的资金支持。

microCT 工作得到先进成像材料（AIM）核心设施（EPSCR 资助编号 EP/M028267/1）以及欧洲社会基金（ESF）的支持；后者通过由威尔士政府管理的欧盟融合计划（80708）提供资金。

利益冲突声明

隶属于 illycaff`e S.p.A. 的共同作者声明，他们没有已知的竞争性经济利益或可能影响本文所报告研究的个人关系。其他所有作者也声明没有

利益冲突。

数据可用性

本研究中使用和/或分析的数据集可应合理请求向通讯作者获取。

参考文献

[1] Megan J Povey、Melvin J Holmes、Sameera Rafiq、Elena Simone、Michael Rappolt 和 Mat Francis, 编者。《食品制造物理学》。2053-2563。IOP出版社，2020年。[2] M Petracco 和 F Suggi Liverani。意式浓缩咖啡冲煮动力学：数学与计算模型的开发。载于 Colloque Scientifique International sur le Cafe，第15卷，第702–702页。ASIC国际科学协会，1993年。[3] Verena Bernadette Hargarten、Michael Kuhn 和 Heiko Briesen。烘焙咖啡颗粒的膨胀特性。《食品与农业科学杂志》，100(10):3960–3970，2020年。[4] Andr´e F.V. Matias、Rodrigo C.V. Coelho、Jos´e S. Andrade 和 Nuno A.M. Ara´ujo。随时间演变的多孔介质中的流动：膨胀与侵蚀。《计算科学杂志》，53(2021年1月)，2021年。[5] Matthew J. Maille、Kyle Sala、David M. Scott 和 Hannah Zukswert。对研磨咖啡润湿过程中颗粒膨胀的批判性考察。《食品工程杂志》，295:110420，2021年。[6] A Voilley 和 D Simatos。咖啡冲煮过程中溶解过程的建模。《食品加工工程杂志》，3(4):185–198，1980年。[7] Andrea Illy 和 Rinantonio Viani。意式浓缩咖啡：品质科学。学术出版社，2005年。[8] Ernesto Illy 和 Luciano Navarini。被忽视的食品气泡：意式浓缩咖啡泡沫。《食品生物物理学》，6(3):335–348，2011年。[9] R. Cappuccio、G. Cattaneo、G. Erbacci 和 U. Jocher。基于元胞自动机的咖啡渗滤模型的并行实现。《并行计算》，27(5):685–717，2001年。[10] R. H. Rosa、G. V. Von Atzingen、V. Belandria、A. L. Oliveira、S. Bostyn 和 J. A. Rabi。在高压系统中利用格子玻尔兹曼模拟从生咖啡豆中萃取咖啡醇和咖啡白脂。《食品工程杂志》，176:88–96，2016年。[11] K. M. Moroney、W. T. Lee、S. B.G. O’Brien、F. Suijver 和 J. Marra。利用多尺度方法对冲煮过程中的咖啡萃取进行建模：经实验验证的模型。《化学工程科学》，137(12月):216–234，2015年。[12] John Melrose、Borja Roman-Corrochano、Marcela Montoya-Guerra 和 Serafim Bakalis。迈向21世纪的新冲煮控制图。《农业与食品化学杂志》，66(21):5301–5309，2018年。[13] Michael I. Cameron、Dechen Morisco、Daniel Hofstetter、Erol Uman、Justin Wilkinson、Zachary C. Kennedy、Sean A. Fontenot、William T. Lee、Christopher H. Hendon 和 Jamie M. Foster。系统性改进意式浓缩咖啡：数学建模与实验带来的启示。《Matter》，2(3):631–648，2020年。[14] M. Ellero 和 L. Navarini。意式浓缩咖啡萃取的介观建模与模拟。《食品工程杂志》，263(5月):181–194，2019年。[15] Chaojie Mo、Richard Johnston、Luciano Navarini 和 Marco Ellero。咖啡过滤过程中流动诱发的机械侵蚀效应建模。《流体物理学》，33(9)，2021年。[16] Chaojie Mo、Luciano Navarini、Furio Suggi Liverani 和 Marco Ellero。利用光滑粒子流体动力学对咖啡萃取过程中的膨胀效应进行建模。《流体物理学》，34(4):043104，2022年。[17] Michael Kuhn、Sandra Lang、Franziska Bezold、Mirjana Minceva 和 Heiko Briesen。不同粒径和填压压力下，从细磨意式浓缩咖啡中进行咖啡因和葫芦巴碱的时间分辨萃取。《食品工程杂志》，206:37–47，2017年。[18] C. D’Onofrio、R. van Loon、S. Rolland、R. Johnston、L. North、S. Brown、R. Phillips 和 J. Sienz。根据微型CT扫描重建的血液氧合器三维计算模型。《医学工程与物理》，47:190–197，2017年。[19] H. C. Burridge、G. Wu、T. Reynolds、D. U. Shah、R. Johnston、O. A. Scherman、M. H. Ramage 和 P. F. Linden。液体在针叶木中的输运：作为模型多孔介质的木材。《科学报告》，9(1):1–14，2019年。[20] M.-O. Baradez、C.P. McGuckin、N. Forraz、R. Pettengell 和 A. Hoppe。稳健且自动化的单峰直方图阈值分割及其潜在应用。《模式识别》，37(6):1131–1148，2004年。

[21] Nicolas Coudray、Jean Luc Buessler 和 Jean Philippe Urban。针对单峰直方图图像的稳健阈值估计。《模式识别快报》，31(9):1010–1019，2010年。[22] Itseez。开源计算机视觉库，2015年。[23] Borja Roman-Corrochano。推进对咖啡萃取的工程学理解。博士论文，伯明翰大学，2015年。[24] Concetto Gianino。意大利咖啡壶“摩卡壶”的实验分析。《美国物理学杂志》，75(1):43–47，2007年1月。[25] Warren D King。炉顶式浓缩咖啡机的物理原理。《美国物理学杂志》，76(6):558–565，2008年。[26] L. Navarini、E. Nobile、F. Pinto、A. Scheri 和 F. Suggi-Liverani。在炉顶式咖啡壶中利用蒸汽压力萃取咖啡的实验研究。《应用热工程》，29(5-6):998–1004，2009年。[27] B. R. Corrochano、J. R. Melrose、A. C. Bentley、P. J. Fryer 和 S. Bakalis。一种估算填充床中烘焙研磨咖啡稳态渗透率的新方法。《食品工程杂志》，150:106–116，2015年。[28] A. Bejan。对流传热。Wiley，2013年。[29] Ricardo Dias、Jos´e A. Teixeira、Manuel Mota 和 Alexander Yelshin。低密度二元颗粒床中的曲折度变化。《分离与纯化技术》，51(2):180–184，2006年。[30] Zhongxia Li、Junwei Wan、Hongbin Zhan、Xi Cheng、Wei Chang 和 Kun Huang。粒径分布对多孔介质中福希海默流及流动状态转变的影响。《水文学杂志》，574(4月):1–11，2019年。[31] Maria L. Mateus、Martine Rouvet、Jean C. Gumy 和 R´emy Liardon。结合物理测定研究润湿过程中水与烘焙研磨咖啡的相互作用。《农业与食品化学杂志》，55(8):2979–2984，2007年。[32] Richard M. Christensen。《材料失效理论》。牛津大学出版社，2013年。[33] Joseph F Labuz 和 Arno Zang。莫尔–库仑破坏准则。载于《国际岩石力学学会岩石表征、测试与监测推荐方法：*2007–2014*》，第227–231页。施普林格，2012年。[34] Shang Huan Chiu、M. N.J. Moore 和 Bryan Quaife。侵蚀性多孔介质中的黏性输运。《流体力学杂志》，893，2020年。