POLITECNICO DI TORINO

Corso di Laurea Magistrale

in Ingegneria Aerospaziale

Tesi di Laurea Magistrale Applicazioni del metodo reticolare di Boltzmann (LBM - Lattice Boltzmann Method) alla simulazione acustica



Relatore Renzo Arina

Candidato Monica Gily

Anno accademico 2019/2020

1 SOMMARIO

2	Lista	a dell	e figure	4		
3	Abst	tract		6		
4	Тео	Teoria cinetica dei fluidi				
	4.1	azioni di Navier Stokes e l'ipotesi del continuo	7			
	4.2	Intro	oduzione alla teoria cinetica di Boltzmann	7		
	4.2.	1	Gerarchia BBGKY (Born-Bogoliubov-Green-Kirkwood-Yvon)	8		
	4.2.2 4.2.3		Ritorno all'equazione di Boltzmann	9		
			Caos molecolare (Stosszahlanstaz)	. 10		
	4.2.4	4	Equilibrio locale e globale	. 11		
	4.3	Мос	delli dell'equazione di Boltzmann	. 12		
	4.3.	1	Equazione modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)	. 12		
5	Teo	ria ciı	netica reticolare	. 13		
	5.1	Latt	ice Gas Cellular Automata - LGCA	. 13		
	5.1.	1	Automazione di FHP (Frisch-Hasslacher-Pomeau)	. 13		
	5.1.	2	Automazione di HPP (Hardy-Pomeau-de Pazzis)	. 14		
	5.1.	3	Interazioni fra particelle	. 14		
	5.1.4	4	Vantaggi dei metodi LGCA	. 15		
	5.1.	5	Criticità dei metodi LGCA	. 16		
	5.2	Met	odo Lattice Boltzmann con microdinamica booleana	. 16		
	5.2.	1	LBE non lineare	. 16		
	5.2.	2	LBE quasi lineare	. 18		
	5.3	Met	odo Lattice Boltzmann senza microdinamica booleana	. 19		
	5.3.	1	LBE con collisioni potenziate	. 19		
6	Specificità del metodo LB			. 21		
	6.1	Unit	à reticolari (Lattice Units)	.21		
	6.1.	1	Similitudine fluidodinamica	. 23		
	6.2	Sche	emi di rilassamento del reticolo	. 24		
	6.2.	1	Tempo di rilassamento singolo (BGK)	. 24		
	6.2.2		Funzione di distribuzione all'equilibrio	. 25		
	6.2.	3	Tipi di reticoli	. 26		
	6.2.4	4	Schema a due tempi di rilassamento (TRT – Two Relaxation Time)	. 28		

	6.2	.5	Tempi di rilassamento multipli (MRT)	28
	6.2	.6	Altri schemi di rilassamento	31
	6.3	Stat	pilità degli schemi di rilassamento	31
	6.3	.1	Tempo di rilassamento singolo (BGK)	31
	6.3	.2	Tempo di rilassamento doppio (TRT)	32
	6.4	Con	dizioni al contorno	33
	6.4	.1	Condizioni iniziali	33
	6.4	.2	Formulazione generale per le condizioni al contorno della LBE	33
	6.4	.3	Panoramica delle varie condizioni al contorno	34
7	Pro	paga	zione acustica nei metodi LB	
	7.1	Suo	no nei fluidi viscosi	
	7.1	.1	Equazione d'onda viscosa	
	7.1	.2	La rappresentazione complessa delle onde	
	7.2	Suo	no nelle simulazioni LB	
	7.2	.1	Propagazione con modello BGK	
	7.2	.2	Sorgenti sonore	40
	7.2	.3	Condizioni al contorno per l'acustica - confini non riflettenti	40
8	Risu	ultati	e discussione	42
	8.1	PAL	ABOS	42
	8.2	Sim	ulazione di onde piane	42
	8.2	.1	Onde piane in dominio rettangolare	42
	8.2	.2	Diffrazione	51
	8.2	.3	Risuonatore di Helmholtz	55
	8.3	Sim	ulazione di una sorgente puntiforme	60
	8.3	.1	Caso $ au=1$	62
	8.3	.2	Caso $ au = 0.6$	64
	8.3	.3	Caso $oldsymbol{ au}=oldsymbol{0}$. $oldsymbol{ au}$, viscosità e velocità del suono reali	66
	8.4	Con	clusioni	69
9	Арр	pendi	ce A	71
	9.1	Da l	Boltzmann alle equazioni di Eulero	71
	9.1	.1	Equazione di conservazione della massa	71
	9.1	.2	Equazione di conservazione della quantità di moto	72
	9.1	.3	Equazione di conservazione dell'energia	72
	9.1	.4	Conclusioni	73

	9.2 Dal	la LBE a Navier-Stokes	73
	9.2.1	L'analisi di Chapman-Enskog	73
	9.2.2	Espansione di Taylor, perturbazione e separazione	74
	9.2.3	Momenti e ricombinazione	75
10	Biblio	grafia	77

2 LISTA DELLE FIGURE

Figura 1 - Definizione di gas diluito	. 10
Figura 2 - Reticolo FHP	. 13
Figura 3 - Reticolo HPP	. 14
Figura 4 – Reticoli D1Qm	. 26
Figura 5 - Reticoli D2Qm	. 27
Figura 6 - Reticolo D2Q9	. 27
Figura 7 - Reticolo D3Q19	. 28
Figura 8 - Reticoli D3Q19 e D3Q15	. 28
Figura 9 - Campo di stabilità al variare del tempo di rilassamento e della velocità	
massima per lo schema a singolo tempo di rilassamento	. 32
Figura 10 - Condizioni al contorno allineate con la griglia	. 34
Figura 11 - Condizioni al contorno non allineate con la griglia	. 34
Figura 12 - Schema di streaming e collisione per la riflessione completa (a) e la mezza	
riflessione (b) in caso di condizione al contorno di bounce-back	. 36
Figura 13 - Passo di straming per condizione al contorno di bounce-back con parete	
ferma	. 36
Figura 14 - Andamento della pressione	. 44
Figura 15 - Visualizzazione della pressione nel dominio	. 45
Figura 16 - Andamento della velocità	. 46
Figura 17 - Andamento della pressione	. 47
Figura 18 - Visualizzazione della pressione nel dominio	. 47
Figura 19 - Andamento della velocità	. 48
Figura 20 - Andamento della pressione	. 49
Figura 21 - Visualizzazione della pressione nel dominio	. 49
Figura 22 - Andamento della velocità	. 50
Figura 23 - Diffrazione attraverso una fenditura singola	. 51
Figura 24 - Diffrazione su un ostacolo	. 51
Figura 25 - Ostacolo senza diffrazione	. 51
Figura 26 - Diffrazione su sfere di diametro crescente	. 52
Figura 27 - Pressione sulla sezione a x=2.3 m	. 53
Figura 28 - Onde di pressione di frequenza variabile su sfera di diametro D=0.4m	. 54
Figura 29 - Pressione sulla sezione a x=2.3 m	. 55
Figura 30 - Risuonatore di Helmholtz, geometria	. 56
Figura 31 - Analogia fra il sistema massa-molla ed il risuonatore di Helmholtz	. 56
Figura 32 - Risuonatore simulato	. 57
Figura 33 - Coefficiente di perdita di trasmissione al variare della frequenza	. 58
Figura 34 - Visualizzazione delle onde di pressione nel dominio	. 58
Figura 35 - Andamento della pressione nel canale	. 59
Figura 36 - Visualizzazione della pressione nel risuonatore, sezione a x normale	. 59
Figura 37 - Andamento della pressione su una sezione verticale nel risuonatore	. 59
Figura 38 - Pressione nell'istante di massimo	. 62
Figura 39 - Pressione nell'istante di minimo	. 63

1
1
5
5
5
7
3
3
3
9

3 Abstract

Storicamente, per la risoluzione numerica di problemi fluidodinamici si sono sempre utilizzate le equazioni di Navier-Stokes variamente discretizzate. Questo modo di procedere comporta alcune limitazioni ereditate dalle ipotesi su cui si basano le Navier-Stokes stesse, in primo luogo l'ipotesi del continuo. Negli ultimi decenni del secolo scorso sono stati sviluppati vari approcci alternativi, fra questi troviamo gli antenati del moderno metodo reticolare di Boltzmann (*Lattice Boltzmann Method* – LBM). L'origine del metodo LB può essere ricondotta a due fonti:

- Ad una discretizzazione dell'equazione di Boltzmann della teoria cinetica dei fluidi
- Ad una evoluzione del metodo LGCA (*Lattice Gas Cellular Automata*) Entrambe le derivazioni vengono spiegate largamente in seguito.

La risoluzione numerica di problemi fluidodinamici con il metodo LB presenta diversi vantaggi (ed alcuni svantaggi) rispetto alla risoluzione con le Navier-Stokes discretizzate. Si è dimostrato che l'applicazione del metodo LB risulta particolarmente vantaggiosa in alcuni campi della fluidodinamica, come l'aeroacustica computazionale (CAA – *Computational Aero Acoustics*). Il vantaggio sta nel fatto che con il metodo LB il campo acustico può essere risolto in contemporanea a quello fluidodinamico, evitando di dover fare due calcoli distinti. Infatti, risolvendo il campo fluidodinamico con le Navier-Stokes discretizzate, tradizionalmente il campo aeroacustico viene ottenuto in un secondo momento con un calcolo di post-processing. Questo comporta una serie di svantaggi, fra questi il maggiore è l'assenza di feedback fra campo acustico e quello fluidodinamico. Adottando il metodo reticolare di Boltzmann per la simulazione aeroacustica risolviamo il problema alla radice.

Oggi esistono diversi codici per la simulazione LB, commerciali ed open-source; fra questi ultimi troviamo PALABOS (Parallel Lattice Boltzmann Simulator). Come molti dei codici LB open-source, PALABOS è pensato principalmente per risolvere problemi di fluidodinamica, ma modificandolo opportunamente è possibile adattarlo alla simulazione di onde acustiche. Di seguito viene illustrato come modificare il codice per ottenere la simulazione di onde acustiche piane e di una sorgente acustica monopolare in un dominio tridimensionale. In entrambi i casi abbiamo studiato la stabilità della simulazione al variare del tempo di rilassamento, inoltre nel caso delle onde piane vengono riportate due applicazioni. In tutte le prove la simulazione produce risultati coerenti con quelli attesi, anche se spesso ci troviamo al limite delle condizioni di stabilità. In particolare, proprio a causa dell'instabilità, per la simulazione della sorgente monopolare reale è necessario adottare uno schema di rilassamento diverso. Si conclude che il metodo reticolare di Boltzmann rappresenta un'ottima alternativa al metodo tradizionale per il calcolo acustico ed aeroacustico. Tuttavia, per simulare sistemi più complessi saranno necessari ulteriori approfondimenti sulla stabilità del metodo.

4 TEORIA CINETICA DEI FLUIDI

4.1 EQUAZIONI DI NAVIER STOKES E L'IPOTESI DEL CONTINUO

Le equazioni di Navier-Stokes si basano sull'ipotesi del continuo, cioè vedono il fluido come un mezzo continuo. In realtà microscopicamente il fluido è granulare, cioè è composto di piccole particelle discrete. Le particelle discrete di cui è composto il fluido sono piccolissime, quindi anche un volume molto piccolo di fluido contiene un numero quasi infinito di particelle, per questo è impensabile considerarle singolarmente. La disciplina che studia la risoluzione numerica delle equazioni di Navier-Stokes considerando il fluido un mezzo continuo è la CFD (Computational Fluid Dynamics). La maggior parte dei metodi CFD si basa sulla discretizzazione delle equazioni di NS con diversi metodi, quindi sulla loro risoluzione come un sistema di equazioni differenziali non lineari alle derivate parziali. Tale risoluzione si complica parecchio con la presenza delle non linearità, essendo queste ultime presenti quando il moto diventa turbolento. La transizione al turbolento avviene quando il numero di Reynolds supera un certo margine. Consideriamo che:

$$Re = rac{UL}{v}$$
; $M = rac{U}{c_s}$; $Kn = rac{l_\mu}{L}$

Considerando che $l_{\mu}=rac{
u}{c_{s}}$, vale allora $u=l_{\mu}c_{s}$, quindi

$$Re = \frac{UL}{l_{\mu}c_s} = \frac{M}{Kr}$$

Affinchè l'ipotesi del continuo si valida deve valere $Kn \ll 1$, quindi il Reynolds risulta piuttosto alto e la transizione alla turbolenza avviene facilmente.

4.2 INTRODUZIONE ALLA TEORIA CINETICA DI BOLTZMANN

I metodi Lattice Boltzmann sono vantaggiosi perché consentono la risoluzione del campo di moto senza discretizzare direttamente le equazioni di Navier-Stokes. L'idea di base è descrivere il comportamento di una serie di particelle rappresentative fittizie attraverso alcune regole, lasciando che il comportamento macroscopico emerga naturalmente. Bisogna considerare che diversi sistemi microscopici possono dare vita allo stesso stato macroscopico, possiamo quindi imporre una microdinamica non coerente con quella reale, che però provoca una macrodinamica realistica.

Nella teoria cinetica di Boltzmann la funzione $f(\vec{x}, \vec{v}; t)$ è chiamata funzione di distribuzione e rappresenta la densità di probabilità di trovare una molecola in posizione \vec{x} al tempo t con una certa velocità \vec{v} .

Nel 1872 Boltzmann ricavò un'equazione in grado di descrivere l'evoluzione della funzione di distribuzione considerando le interazioni fra le particelle, cioè la microdinamica del sistema.

L'equazione di Boltzmann è:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = C_{12}$$

Dove:

- $\vec{a} = \vec{F}/m$ è l'accelerazione delle particelle dovuta a forze esterne o interne
- \vec{x} è la posizione
- \vec{v} è la velocità
- $f(\vec{x}, \vec{v}; t)$ è la funzione di distribuzione di Boltzmann
- C₁₂ operatore di collisione

La parte destra dell'equazione, coincidente con l'operatore di collisione C_{12} , rappresenta gli effetti della collisione fra due particelle.

La parte sinistra dell'equazione rappresenta il flusso di particelle lungo le traiettorie associate al campo di forze \vec{F} , cioè rappresenta la propagazione, lo *streaming* delle particelle. Questo termine riflette perfettamente la dinamica Newtoniana, infatti può essere riscritto come la derivata Lagrangiana della funzione di distribuzione:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$$

Usando l'equazione di Newton $\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \vec{v} e \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{\vec{F}}{m} = \vec{a}$, otteniamo esattamente il LHS dell'equazione di Boltzmann. È bene notare che il termine $\vec{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$ è non nullo solo nel caso in cui sia presente una forza esterna. Di seguito tale termine viene eliminato perché si tratta la derivazione del metodo LBM a partire dall'equazione di Boltzmann in assenza di forze esterne.

4.2.1 Gerarchia BBGKY (Born-Bogoliubov-Green-Kirkwood-Yvon)

Il termine al RHS dell'equazione di Boltzmann modellizza lo scambio di informazioni fra diverse particelle attraverso l'interazione intermolecolare. L'operatore di collisione, C_{12} , rappresenta la collisione fra due corpi (*two body collision*), cioè l'interazione fra la molecola 1, presente nella posizione \vec{x}_1 con velocità \vec{v}_1 al tempo t, e la molecola 2, presente in posizione \vec{x}_2 con velocità \vec{v}_2 al tempo t. La funzione di distribuzione dei due corpi è:

$f_{12}(\vec{x}_1,\vec{v}_1,\vec{x}_2,\vec{v}_2;t)$

Tale funzione esprime la probabilità congiunta di trovare una molecola in posizione \vec{x}_1 con velocità \vec{v}_1 al tempo t ed una molecola in posizione \vec{x}_2 con velocità \vec{v}_2 al tempo t. Tuttavia, si deve considerare che in un sistema di N corpi possono esserci collisioni di tutti gli ordini: a partire dalle collisioni binarie (fra due corpi) fino alle collisioni di ordine N (fra N corpi). Le collisioni di ordine diverso non sono indipendenti fra loro, infatti la funzione di distribuzione fra i due corpi coinvolti in una collisione binaria $f_{12}(\vec{x}_1, \vec{v}_1, \vec{x}_2, \vec{v}_2; t)$ dipende dalla funzione di distribuzione dei corpi di una collisione a tre (f_{123}) che a sua volta dipende da f_{1234} e così via. Questa dipendenza gerarchica prende il nome di gerarchia BBGKY (Bogoliubov, Born, Green, Kickwood, Yvon), dal nome degli scopritori. Se si riuscisse a risolvere completamente la gerarchia di BBGKY, si otterrebbe una conoscenza statistica completa del problema Newtoniano degli N corpi. Questo è impossibile, quindi bisogna di fare alcune approssimazioni. La perdita di informazioni associata a tale approssimazione è responsabile dell'irreversibilità che caratterizza l'operatore di collisione.

Considerare le sole collisioni binarie non è un'approssimazione eccessiva, infatti la probabilità di un'interazione simultanea fra k molecole decade molto veloce all'aumentare del numero di molecole, k. Vale la seguente proporzionalità:

probabilità interazione simultanea $\propto \left(\frac{s}{d}\right)^{-3k}$

Dove:

- s è dimensione lineare della particella
- *d* è la separazione intermolecolare media

Possiamo definire inoltre:

- n, numero di densità. È legato alla dimensione lineare della particella dalla relazione $nd^3 = 1$, che indica che in un cubo di volume d^3 è presente in media una sola particella
- $\tilde{n} = \left(\frac{s}{d}\right)^3 = ns^3$, la granularità, che fornisce una misura del grado di diluizione del sistema

In un sistema di densità n ogni molecola occupa un volume di dimensione d^3 , ed \tilde{n} è la frazione di volume occupata effettivamente dalla molecola di dimensione lineare s. Sostituendo la definizione di granularità nella proporzione precedente:

probabilità interazione simultanea $\propto \tilde{n}^{-k}$

L'interazione fra gli N corpi è comandata dalla granularità del sistema: per granularità che tende ad azzerarsi non ci sono interazioni fra i corpi.

4.2.2 Ritorno all'equazione di Boltzmann

Quest'ultima considerazione ci fornisce una via d'uscita per evitare di essere costretti a rappresentare l'intera gerarchia BBGKY all'interno dell'operatore di collisione nell'equazione di Boltzmann. Per farlo è necessario imporre alcune stringenti ipotesi sulla natura del sistema fisico descritto. Le ipotesi sono le seguenti:

- Il gas deve essere diluito
- Le molecole possono essere descritte come elementi puntiformi privi di struttura
- Le interazioni fra le particelle avvengono a corto raggio e solo fra due particelle alla volta

Sotto queste condizioni le interazioni intermolecolari possono essere descritte solamente in termini di collisioni locali binarie, mentre per tutto il resto del tempo le particelle restano indipendenti ed inconsapevoli una dell'altra.

È importante notare che la definizione di gas diluito per Boltzmann non coincide con la definizione di diluito in senso comune, cioè non significa che il gas deve avere bassa densità, n. Un gas diluito per Boltzmann è un gas in cui la dimensione lineare della singola molecola, s, viene fatta tendere a zero tenendo però costante il prodotto $ns^2 = 1$. È chiaro che se $s \rightarrow 0$ allora $n \rightarrow \infty$, cioè la taglia delle molecole va a zero, la densità va ad infinito ed il libero cammino medio rimane costante. Considerando inoltre che

$$\tilde{n} = \left(\frac{s}{d}\right)^3 = ns^3$$

In un gas diluito la granularità tende ad annullarsi.

Per riassumere, un gas è diluito in senso di Boltzmann se:



Figura 1 - Definizione di gas diluito

Ricordando che la probabilità di interazione fra k corpi può essere scritta come

probabilità interazione simultanea $\propto \tilde{n}^{-k}$

Per un gas diluito tale probabilità è trascurabile, quindi è accettabile considerare le sole collisioni binarie.

4.2.3 Caos molecolare (Stosszahlanstaz)

A questo punto abbiamo chiarito che l'ipotesi di gas diluito è necessaria per poter considerare solo le collisioni binarie, in tal modo è possibile evitare la risoluzione della gerarchia BBGKY. Dobbiamo ancora spiegare come avvengono queste collisioni binarie, quindi scrivere l'operatore di collisione C_{12} .

Supponendo valide le ipotesi prima elencate, possiamo scrivere l'operatore di collisione come:

$$C_{12} = \int (f_{1'2'} - f_{12}) v_r \sigma (v_r, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{v}_2$$

Dove:

- v_r è il modulo della velocità relativa delle particelle 1 e 2
- $\vec{\Omega}$ è l'angolo solido associato alla scattering conseguente alla collisione
- σ è la sezione differenziale trasversale, cioè l'area effettiva presentata da una particella nel piano passante per il suo centro e perpendicolare alla velocità relativa
- $f_{1'2'}$ sta per $f_{12}(\vec{x}_{1'}, \vec{v}_{1'}, \vec{x}_{2'}, \vec{v}_{2'}; t)$, dove l'apice indica le condizioni successive alla collisione

Con l'assunzione di gas diluito le 4 coordinate pre e post collisionali possono essere considerate coincidenti: $\vec{x}_1 = \vec{x}_2 = \vec{x}_{1'} = \vec{x}_{2'}$. Si può inoltre dimostrare che l'unico effetto della collisione è quello di ruotare il vettore della velocità relativa ($\vec{v}_r = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$) di un angolo χ (angolo di scattering) nel piano dove avviene la collisione, essendo tale piano definito dai vettori $\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ e $\vec{v}_r = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$. Il modulo della velocità relativa risulta inalterato, $\vec{v}_r = \vec{v}_r'$.

Per chiudere il problema è necessaria l'ipotesi del caos molecolare, o stosszahlanstaz: si assume che non ci siano correlazioni fra le molecole che stanno per collidere. Vale allora:

$$f_{12} = f_1 f_2 = f(\vec{x}_1, \vec{v}_1; t) f(\vec{x}_2, \vec{v}_2; t)$$

E lo stesso per $f_{1'2'} = f_{1'}f_{2'}$.

In conclusione, l'equazione di Boltzmann, sotto l'assunzione di caos molecolare (ed in assenza di forze esterne), risulta:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \int (f_{1'}f_{2'} - f_1f_2)v_r \sigma(v_r, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{v}_2$$

Il LHS rispecchia la dinamica Newtoniana reversibile di una singola particella, mentre il RHS descrive l'interazione intermolecolare sotto l'approssimazione del caos molecolare.

 $C_{12} = G - L$

4.2.4 Equilibrio locale e globale

La funzione di collisione C_{12} può essere vista come la differenza di una funzione di guadagno ed una di perdita.

Con:

Guadagno,
$$G = \int f_{1'2'} v_r \sigma(v_r, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{v}_2$$

Perdita, $L = \int f_{12} v_r \sigma(v_r, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{v}_2$

Quando la funzione di guadagno e quella di perdita sono uguali la funzione di collisione si annulla e ci troviamo nelle condizioni di equilibrio locale:

$$C_{12} = G - L = 0$$

Ne ricaviamo che la condizione di equilibrio locale corrisponde a:

$$f_{1'2'} - f_{12} = 0$$
; $f_{1'2'} = f_{12}$

Che, per l'ipotesi del caos molecolare, corrisponde a sua volta a:

$$f_{1'}f_{2'} - f_1f_2 = 0 \ ; \ f_{1'}f_{2'} = f_1f_2$$

L'equilibrio locale non corrisponde ad una situazione in cui non avvengono collisioni, ma piuttosto ad una situazione nella quale ogni collisione è bilanciata esattamente da una collisione con effetto inverso, così da non produrre nessun effetto apprezzabile sulla dinamica macroscopica. L'equilibrio locale si conserva anche in presenza di variazioni nel tempo o nello spazio del campo macroscopico, a patto che esse avvengano su scale maggiori del libero cammino medio.

Abbiamo detto che la condizione di equilibrio locale è tale da rendere l'operatore di collisione nullo, questo non implica che anche l'operatore di streaming lo debba essere. Quest ultimo risulta nullo solo nel caso in cui il campo macroscopico risulti totalmente omogeneo e stazionario, cioè costante nel tempo e nello spazio, condizione che viene definita di equilibrio globale.

Possiamo fare alcune considerazioni:

- L'operatore di collisione promuove l'equilibrio microscopico, portando la funzione di distribuzione ad essere più vicina alla distribuzione di Maxwell-Boltzmann.
- L'operatore di streaming è non nullo solo in presenza di non-omogeneità, le non-omogeneità spaziali e temporali corrispondono ad una condizione di nonequilibrio globale.

L'operatore di streaming lavora in senso opposto a quello di collisione, distruggendo il delicato equilibrio stabilito attraverso le interazioni intermolecolari, e promuovendo il non equilibrio attraverso la creazione di non omogeneità.

4.3 MODELLI DELL'EQUAZIONE DI BOLTZMANN

L'equazione di Boltzmann è la seguente:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \int (f_{1'}f_{2'} - f_1f_2)v_r \sigma(v_r, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{v}_2$$

Si può intuire che non è di facile risoluzione. Solitamente si opta per risolvere dei modelli semplificati della stessa, in particolare ciò che si vuole semplificare è l'operatore di collisione. I modelli devono riuscire a rappresentarne alcune proprietà specifiche:

- 1. All'equilibrio locale l'operatore di collisione si annulla: $C(f^{eq}) = 0$.
- 2. Conservazione di massa quantità di moto energia: $\int C(f, f) \{1, \vec{v}, v^2\} d\vec{v} = 0$
- 3. Teorema H: $\int C(f, f)h(f)d\vec{v} \leq 0$, dove h(f) può essere qualsiasi funzione convessa (ad esempio log f)

4.3.1 Equazione modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)

L'operatore di collisione più semplice che soddisfa queste proprietà è il modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook), per il quale:

$$C_{BGK}(f) = \frac{f^{eq} - f}{\tau} = \omega(f^{eq} - f)$$

Dove:

- *f*^{eq} è la funzione di distribuzione dall'equilibrio locale (Maxwelliana)
- $\tau > 0$ è la tipica scala temporale associata all'equilibrio locale, cioè il tempo di rilassamento
- $\omega = \frac{1}{\tau}$ è la frequenza di collisione o fattore di rilassamento

L'operatore così scritto rappresenta il rilassamento della funzione di distribuzione f verso il suo valore di equilibrio f^{eq} .

Con tale approssimazione, l'equazione di Boltzmann può essere scritta come:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla f = \frac{1}{\tau} (f^{eq} - f)$$

Nei metodi LB l'equazione precedente è assunta valida lungo le direzioni che connettono due nodi ed è discretizzata. L'equazione di Boltzmann discretizzata può essere scritta come:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \nabla f_i = \frac{1}{\tau} \left(f_i^{eq} - f_i \right)$$

Questa equazione è il fulcro dei metodi LB, così come le equazioni di Navier-Stokes variamente discretizzate sono il fulcro della CFD. Possiamo trasformare la derivata temporale nella sua forma discreta:

$$\frac{Df_i}{Dt} = \frac{1}{\tau} \left(f_i^{eq} - f_i \right)$$
$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \frac{\Delta t}{\tau} \left[f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t) \right]$$

La funzione di distribuzione all'equilibrio locale, $f_i^{eq}(x, t)$, ed il tempo di rilassamento determinano il tipo di problema che deve venire risolto.

Il vantaggio dell'equazione precedente risiede nella semplicità con cui può essere applicata a diversi sistemi fisici, semplicemente specificando una diversa funzione di distribuzione all'equilibrio ed eventualmente un termine sorgente (forza esterna).

5 TEORIA CINETICA RETICOLARE

5.1 LATTICE GAS CELLULAR AUTOMATA - LGCA

I metodi a LGCA (Lattice Gas Cellular Automata) sono dei metodi che sfruttano un certo tipo di automazione molecolare Booleana per simulare il moto fluido. Sono i precursori dei metodi reticolari di Boltzmann (LBM). Esistono diversi tipi di metodi LGCA che si distinguono per il tipo di reticolo su cui si possono muovere le particelle ed il tipo di automazione, di seguito vedremo solo quelli di maggiore successo.

5.1.1 Automazione di FHP (Frisch-Hasslacher-Pomeau)

Si considera un reticolo a simmetria esagonale, tale per cui ogni nodo è circondato da altri 6 nodi. Ogni nodo può ospitare fino a 6 particelle. Per quanto riguarda l'automazione, valgono le seguenti regole:

- 1. Tutte le particelle hanno la stessa massa
- 2. Le particelle si possono muovere solo lungo le direzioni che collegano due nodi
- Durante uno step temporale le particelle si possono spostare solo in uno dei 6 nodi adiacenti, non più lontano e non più vicino (tutte le particelle hanno la stessa energia)



Figura 2 - Reticolo FHP

4. Due particelle presenti inizialmente nello stesso nodo non possono muoversi nella stessa direzione (principio di esclusione)

Per qualche motivo, una dinamica microscopica basata su queste semplici regole è in grado di riprodurre una dinamica macroscopica fedele a quella reale.

La caratteristica interessante di questa dinamica è che è booleana, cioè lo stato di ogni particella può essere scritto in termini di 'si' o 'no', 'presente' o 'non presente' in un nodo, oppure '0' o '1'. L'intero stato del reticolo è dato da un numero di bit pari a 6N, con N numero di nodi del reticolo. In particolare, possiamo definire il numero di occupazione di ogni particella n_i , tale che

 $n_i(\vec{x},t) = \begin{cases} 0 & se \ la \ particella \ e \ assente \ nella \ posizione \ \vec{x} \ al \ tempo \ t \\ 1 & se \ la \ particella \ e \ presente \ nella \ posizione \ \vec{x} \ al \ tempo \ t \end{cases}$

L'insieme di tutti i numeri di occupazione del reticolo costituisce un campo instazionario Booleano di dimensione 6N la cui evoluzione avviene nello spazio delle fasi Booleano consistente in 2^{6N} stati discreti. Questo campo prende il nome di Cellular Automation (CA).

È importante notare che la microdinamica Booleana precedentemente descritta non è pensata per riprodurre fedelmente la dinamica molecolare reale a nessun livello di accuratezza. Tuttavia, bisogna considerare che diversi sistemi microscopici possono dare vita allo stesso stato macroscopico: per questo la dinamica del LGA è parzialmente in grado di replicare un movimento idrodinamico realistico. 5.1.2 Automazione di HPP (Hardy-Pomeau-de Pazzis) Un altro tipo di reticolo che è stato proposto in alternativa a quello esagonale è quello quadrangolare. L'LGCA con questo reticolo prende il nome di automazione di HPP (Hardy-Pomeaude Pazzis), dal nome degli inventori. Tuttavia, è possibile dimostrare che tale reticolo è inadatto alla riproduzione di una macrodinamica realistica perché non rispetta una condizione basilare di simmetria delle equazioni di Navier Stokes, cioè l'invarianza rotazionale. Questa condizione è molto stringente e toglie dai giochi la maggior parte dei reticoli possibili.



5.1.3 Interazioni fra particelle

Le particelle compiono, ad ogni step temporale, due azioni:

1. Propagazione o *streaming*, cioè lo spostamento delle particelle da un sito all'altro con velocità discreta $\vec{c_i}$, di modulo tale per cui la particella arriva al nodo adiacente, e di direzione e verso che collegano il nodo di partenza a quello di arrivo. Il modulo della velocità, $|c_i|$, prende il ruolo della velocità della luce nel sistema discreto, cioè nel reticolo nessun segnale può propagare più velocemente di c_i . L'espressione

$$n_i(\vec{x}, t) = n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + dt)$$

Indica che la particella che inizialmente si trova al sito \vec{x} al tempo t si è spostata al sito $\vec{x} + \vec{c_i}$ al tempo t + dt. Possiamo definire un operatore di free streaming come:

$$\Delta_i n_i = n_i (\vec{x} + \vec{c}_i, t + dt) - n_i (\vec{x}, t)$$

Questa è la trascrizione discreta dell'operatore di free streaming che compariva nell'equazione di Boltzmann ($\partial_t + v_i \partial_i$).

- Collisione, che avviene quando due particelle arrivano sullo stesso nodo da direzioni diverse. Queste collisioni devono condividere due caratteristiche con le collisioni reali
 - a. Il numero di particelle si conserva (2 prima e 2 dopo)
 - b. La quantità di moto totale si conserva (0 prima e 0 dopo)

Tali condizioni sulle collisioni sono necessarie, ma non sufficienti affinché il modello funzioni. Possiamo definire un operatore di collisione

$$C_i(\underline{n}) = n'_i - n_i$$

 $\underline{n} = [n_1, n_2, n_3, \dots n_6]$ è il set di numeri di occupazione su un nodo del reticolo. n'_i è il numero di occupazione dopo la collisione.

Si può definire una stringa *s* contenente i 6 numeri di occupazione di un nodo prima della collisione ed una stringa *s*' contenente i 6 numeri di occupazione del nodo dopo la collisione. Possiamo quindi scrivere una matrice di transizione

$$A(s,s') = \begin{cases} 1 \ collisione \ consentita \\ 0 \ collisione \ proibita \end{cases}$$

Dove per collisione proibita si intende che non rispetta le leggi di conservazione di quantità di moto ed energia. La matrice di transizione rispetta la condizione di equilibrio semi-dettagliato:

$$\sum A(s,s') = 1$$

Questo implica che ogni stato destinazione può essere raggiunto da almeno uno stato sorgente. In realtà, ogni stato sorgente può effettivamente evolvere in due stati destinazione, entrambi coerenti con le leggi di conservazione. Si può definire la probabilità di avere <u>s</u> come stato di input con i numeri di occupazione <u>n</u>:

$$P(s,n) = \prod_{i=1}^{6} n_i \overline{n}_i^{s} \overline{n}_i^{s_i}$$

 \overline{n}_i denota il complemento ad 1 di n_i , cioè $\overline{n_i} = 1 - n_i$. con questi preparativi, possiamo finalmente scrivere l'operatore di collisione come la differenza di guadagno e perdita, che a livello discreto risulta:

$$C_i = \sum_{(s,s')} (s'_i - s_i) P(\underline{s}, \underline{n}) A(\underline{s}, \underline{s}')$$

Si può verificare che C_i è una funzione che ammette tre uscite:

- o 0, nessuna azione
- o 1, generazione
- -1, annientamento

L'operatore di collisione preserva la natura Booleana del numero di occupazione.

La regola di aggiornamento per l'LGCA (Lattice Gas Cellular Automata) risulta:

 $\Delta_i n_i = C_i$

5.1.4 Vantaggi dei metodi LGCA

La simulazione fluidodinamica con i metodi LGCA presenta alcuni vantaggi rispetto alla risoluzione tradizionale CFD delle equazioni di NS. Fra questi:

- Si usa esclusivamente logica Booleana, senza mai usare i numeri floating point (cioè i numeri reali). Questo semplifica notevolmente il calcolo, evitando spiacevoli fenomeni come la cancellazione numerica.
- È molto adatto ad essere implementato con il calcolo parallelo. Per calcolo parallelo si intende il risolvere un grande problema, prima dividendolo in tanti piccoli problemi da risolvere indipendentemente, quindi incollare insieme le soluzioni ed ottenere la soluzione al problema di partenza. In generale, un algoritmo numerico è ottimo per il calcolo parallelo se i vari sotto-problemi in cui si divide il problema principale hanno bisogno di poca o nessuna comunicazione per essere risolti. L'LGCA è ottimo per il calcolo parallelo perché la collisione, che è lo step numericamente più lungo e complicato, è completamente locale, quindi non necessita di nessuna comunicazione. Possiamo dimostrare che la collisione è un fenomeno completamente locale definendo un flag collisionale

$$\mathcal{M} = \frac{1 - la \text{ collisione avviene}}{0 - la \text{ collisione non avviene}}$$

Dove

$\mathcal{M} = n_1 \text{ AND } \bar{n}_2 \text{ AND } \bar{n}_3 \text{ AND } n_4 \text{ AND } \bar{n}_5 \text{ AND } \bar{n}_6$

Dove la barra sopra indica la negazione. Una volta che il flag collisionale è stato definito su ogni nodo del reticolo otteniamo la maschera collisionale del

reticolo. A questo punto, possiamo ottenere lo stato post-collisionale di ogni particella

$$n_i' = n_i + C_i$$

Attraverso la maschera collisionale

$$n'_i = \mathcal{M} XOR n_i$$

Questa semplice procedura è applicata contemporaneamente a tutti i nodi del reticolo. Ogni nodo è aggiornato indipendentemente da tutti gli altri, rendendo lo schema ideale per il calcolo parallelo.

5.1.5 Criticità dei metodi LGCA

I metodi LGCA non sono generalmente usati al giorno d'oggi, questo è dovuto alla presenza di numerosi problemi invalidati. Fra questi:

- Mancanza di invarianza galileiana. L'invarianza galileiana consiste nel fatto che uno stesso fenomeno fisico debba accadere nello stesso modo in tutti i sistemi inerziali (cioè nei sistemi che si muovono con velocità relativa costante)
- Dipendenza anomala delle velocità dalla pressione del fluido
- Rumore statistico, cioè fluttuazioni statistiche. Il rumore statistico è accentuato dal fatto che i calcoli per i metodi LGCA sono generalmente svolti su dei general computer, cioè dei computer specializzati nei calcoli con numeri floating point, non nei calcoli booleani.

C'è anche un lato positivo: il rumore statistico generato dal LGCA ha molto in comune con il vero rumore presente nei sistemi termodinamici. Questo mette i metodi LGCA in posizione privilegiata per lo studio della moderna microidrodinamica statistica.

- Alta viscosità (bassi numeri di Reynolds). Il numero di Reynolds massimo raggiungibile è controllato dal libero cammino medio minimo che si può raggiungere nel reticolo, quindi dal massimo numero di collisioni per unità di tempo che il computer è in grado di sopportare.
- Complessità esponenziale delle regole di collisione
- Invarianti spuri. In assenza di sorgenti o pozzi esterni i fluidi continui conservano la massa, la quantità di moto e l'energia. I fluidi discreti potrebbero avere altri invarianti che nascono dalla sola discretizzazione. Questi invarianti sono delle specie di 'patologie' della discretizzazione e quindi vengono chiamati invarianti spuri.

5.2 METODO LATTICE BOLTZMANN CON MICRODINAMICA BOOLEANA

I metodi reticolari di Boltzmann con dinamica Booleana di fondo sono gli antenati dei moderni LB. Sono stati creati per risolvere alcuni dei problemi tipici dei metodi LGCA.

5.2.1 LBE non lineare

Il primo metodo LB con microdinamica Booleana fu proposto nel 1988 da McNamara e Zanetti con lo scopo particolare di superare il problema del rumore statistico presente nei metodi LGCA. A tal fine, si sostituisce al numero di occupazione n_i la media di insieme della popolazione. Si pone quindi:

 $f_i = \langle n_i \rangle$

Invece di tracciare il movimento di una singola particella, ci accontentiamo di tracciare i movimenti di un insieme di particelle. Questo cambio di prospettiva è esattamente lo stesso fatto nel passaggio al continuo nella CTK (Continuum Kinetic Theory). Per implementare tale metodo è conveniente dividere il numero di occupazione nella sua media (f_i) e nella parte fluttuante (g_i):

$$n_i = f_i + g_i$$

Dove $\langle g_i \rangle = 0$ perché per definizione la media della parte fluttuante è nulla. Inserendo quindi questa decomposizione nella equazione di aggiornamento per il metodo LGCA ($\Delta_i n_i = C_i$), troviamo:

$$\Delta_i f_i = C_i \left(\underline{f} \right) + G_i$$

Il LHS della espressione sovrastante è la trascrizione diretta della sua controparte Booleana, con la sostituzione

$$n_i \to f_i, \qquad \Delta_i n_i = \Delta_i f_i$$

Questo riflette la linearità dell'operatore di streaming. Al contrario, la non linearità dell'operatore di collisione fa in modo che compaiano due termini al RHS.

$$C_i(\langle n_i \rangle) = C_i(f_i) = C_i(\underline{f}) + G_i$$

In particolare, G_i rappresenta il contributo delle correlazioni fra le particelle e \underline{f} indica il set completo delle popolazioni discrete. Facendo l'ipotesi di caos molecolare possiamo dire che le correlazioni fra le particelle sono nulle, quindi risulta:

$$G_i = 0$$
;

Ci ritroviamo con un'equazione chiusa, non lineare ed a differenze finite per la funzione di distribuzione della singola particella f_i :

$$\Delta_i f_i = C_i \left(\underline{f} \right)$$

$$\Delta_i f_i = C_i (f_1, \dots, f_b), i = 1, \dots b$$

Quest'ultima prende il nome di equazione di Boltzmann non lineare per sottolineare la natura non lineare dell'operatore di collisione.

I vantaggi del passaggio dal metodo LGCA alla LBE non lineare sono:

- Eliminazione del rumore statistico. Il rumore statistico è eliminato perché f_i è per definizione una quantità media
- È di facile uso su qualsiasi computer, non richiede potenza computazionale mostruosa
- Conserva alcuni lati positivi del modello LGCA, come lo streaming esatto
- Può rappresentare alcuni sistemi fisici macroscopici non facilmente accessibili a modelli basati sull'ipotesi del continuo

D'altra parte, gli svantaggi sono:

- La natura Booleana ed esatta del modello LGCA è persa, infatti $f_i = \langle n_i \rangle$ è un numero reale
- Si perde la fisica delle correlazioni fra molti corpi (ipotesi di caos molecolare)

La LBE non lineare riesce a riprodurre i fenomeni di trasporto lineari, ma non è mai stata testata per riprodurre flussi più complessi.

Eccetto l'eliminazione del rumore statistico, tutti gli altri problemi legati ai metodi LGCA rimangono. In particolare, resta l'incapacità di simulare flussi 3D a causa dell'eccessiva

potenza computazionale richiesta dall'operatore di collisione (complessità esponenziale dell'operatore di collisione).

NOTA: se nella teoria di Boltzmann si era fatta l'ipotesi di fluido rarefatto con sole interazioni a corto raggio che portava al poter trascurare le collisioni multi-particella, qui non sussiste tale ipotesi. Infatti, non ci sono correlazioni multi-particella, ma ci possono essere collisioni non binarie. Queste collisioni non binarie non possono essere trascurate, perché sono necessarie per avere un libero cammino medio piccolo, molto più piccolo di quello che si avrebbe con sole collisioni fra due corpi.

5.2.2 LBE quasi lineare

Come accennato in precedenza, la versione non lineare della LBE non è adatta a descrivere problemi tridimensionali perchè persiste il problema della complessità esponenziale dell'operatore di collisione. Per risolverlo, riprendiamo l'assunzione di basso numero di Knudsen e di piccolo libero cammino medio, fondamentale nella trattazione di Capman-Enskog (vedi appendice A). In campo discreto queste assunzioni permettono di scrivere:

$$f_i = f_i^e + f_i^{ne}$$

Cioè possiamo scomporre la media di insieme dei numeri di occupazione in un contributo di equilibrio ed in uno di non equilibrio. La componente di non equilibrio è di ordine O(Kn), ed essendo Kn piccolo, è piccola. Possiamo quindi riscrivere

$$f_i = f_i^{e0} + f_i^{e1} + f_i^{e2} + f_i^{ne} + O(kM^2)$$

Dove si è fatta un'espansione del termine di equilibrio rispetto al numero di Mach. Si può inoltre fare un'espansione dell'operatore di collisione intorno all'equilibrio globale f_i^{e0} :

$$C_{i}(f) = C_{i}^{0} + C_{ij}^{0}\phi_{j} + \frac{1}{2}C_{ijk}^{0}\phi_{j}\phi_{k}$$

Dove $\phi_i = f_i - f_i^{e0}$, $C_{ij} = \frac{\partial C_i}{\partial f_j}$, $C_{ijk} = \frac{\partial^2 C_i}{\partial f_j \partial f_k}$. Si ricorda che $C_i^0 = 0$ perché all'equilibrio il termine di collisione si annulla. Trascurando i termini di ordine superiore di $O(kM^2)$, si ottiene:

$$C_i(f) = C_{ij}^0 f_j^1 + \frac{1}{2} C_{ijk}^0 f_j^1 f_k^1 + C_{ij} f_j^{ne}$$

Si riferisce quindi l'equazione alle condizioni di equilibrio locale per cui $f_i = f_i^e e f_i^{ne} = 0$:

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

Questo permette di esprimere il termine Hessiano come una funzione della Jacobiana, il che ci lascia con l'espressione più semplice

$$C_i = C_{ij}^0 f_j^{ne} = C_{ij}^0 (f_j - f_j^e)$$

Questo ci conduce infine alla forma quasi lineare della LBE

$$\Delta_i f_i = A_{ij} \left(f_j - f_j^e \right)$$

Dove $A_{ij} = C_{ij}^0 = \left(\frac{\partial C_i}{\partial f_j}\right)_{f^{e0}}$ è la matrice di scattering.

Possiamo fare alcune considerazioni:

- L'equazione ha forma quasi-lineare, ma è decisamente lontana dall'essere lineare: infatti, essa descrive la stessa dinamica non lineare descritta dalle Navier-Stokes.
- La matrice di scattering A_{ij} ha ancora una relazione molto stretta con la dinamica microscopica del modello LGCA, visto che è la derivata seconda (Hessiana) dell'operatore di collisione non lineare C_i, che al momento risulta ancora essere di natura Booleana, come imposto nel metodo LGCA.

Visto che l'Hessiana è calcolata in condizioni di equilibrio globale, f_i^{e0} , la matrice di scattering può essere calcolata analiticamente dalla matrice di transizione A(s, s') dell'LGCA.

Una volta nota la matrice di transizione, la matrice di scattering può essere calcolata una volta per tutte. Questo comporta una drammatica riduzione di complessità che rende possibile l'applicazione del metodo LBE a casi tridimensionali.

La matrice di scattering ha alcune proprietà:

- a. È ciclica e isotropa: A_{ij} dipende solo da |i j|
- b. È simmetrica (conseguenza dell'isotropia)
- c. È definita negativa

Il fatto che sia definita negativa assicura l'aderenza di questo modello al secondo principio della termodinamica (teorema H).

Si è abbattuta la barriera della tridimensionalità, ma rimane il limite sul Reynolds basso, cioè rimane il vincolo di alta viscosità.

5.3 METODO LATTICE BOLTZMANN SENZA MICRODINAMICA BOOLEANA

Nel capitolo precedente abbiamo imparato come sono stati superati due dei maggiori problemi dei metodi LGCA: il rumore statistico e la complessità esponenziale dell'operatore di collisione. Tuttavia, rimane la limitazione di bassi numeri di Reynolds a causa del basso numero di collisioni per unità di tempo dovuto alla natura della microdinamica del LGCA. La barriera della alta viscosità fu abbattuta quando si realizzò come ottenere i modelli LB con approccio top-down, cioè un approccio basato sulla macrodinamica che si vuole ottenere, piuttosto che sul modello microdinamico di partenza. L'approccio top-down si è dimostrato molto utile per molte successive applicazioni di metodi LB.

5.3.1 LBE con collisioni potenziate

L'obbligo di alta diffusività è una limitazione ereditata dal LGCA attraverso la corrispondenza uno ad uno fra la matrice di transizione A(s, s') e la matrice di scattering A_{ij} . In parole povere, né la LBE non lineare, né la LBE quasi lineare sono in grado di permettere delle collisioni che il LGCA non permetterebbe. D'altra parte, si sa che la LBE quasi-lineare conduce alle equazioni di Navier Stokes (attraverso la trattazione di Chapman-Enskog), quindi è possibile considerarla un modello matematico a sé stante del comportamento fluidodinamico, ignorando la sua origine Booleana microscopica. Questo è vero a patto che si imponga che la matrice di scattering abbia le dovute

simmetrie, in modo da assicurarsi che il suo limite macroscopico coincida con le Navier-Stokes. In particolare, vogliamo che A_{ij} sia:

- Conservativa
- Isotropa e simmetrica
- Definita negativa

Le proprietà spettrali (autovalori) di A_{ij} , che controllano i coefficienti di trasporto, non sono più dettate della micro dinamica Booleana, ma sono da considerarsi dei parametri indipendenti. Di conseguenza, tali parametri possono essere controllati in modo da ottenere viscosità minima, quindi maggiori numeri di Reynolds.

Noti gli autovalori e gli autovettori, qualunque matrice può essere ricostruita attraverso una decomposizione spettrale:

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

Dove P_{ij}^k è il coefficiente di proiezione lungo il k-esimo autovettore E_i^k . La relazione fra il primo autovalore diverso da zero e la diffusività dinamica è ancora data dalla relazione ottenuta dall'analisi di Chapman-Enskog:

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

Dovremmo quindi procedere con l'analisi spettrale della matrice di scattering, $A_{ij} \in \mathbb{R}^{24 \times 24}$. Gli autovalori sono reali perché la matrice di scattering è simmetrica e stanno nell'intervallo [-2, 0] per ragioni di stabilità numerica.

L'espressione che lega la viscosità del fluido con il primo autovalore non nullo della matrice di scattering A_{ij} è uno dei risultati fondamentali dell'analisi spettrale. Qui l'autovalore λ_1 non è più imposto dalla microdinamica di fondo, ma diventa un parametro libero che può essere regolato per minimizzare la viscosità del fluido. In linea di principio, potremmo raggiungere viscosità nulla imponendo $\lambda_1 = -2$, che corrisponde alla situazione in cui la diffusività collisionale venga perfettamente bilanciata dalla viscosità di propagazione negativa $v_p = -1/2$. In realtà, si trova che la viscosità minima raggiungibile dal fluido è imposta dalla risoluzione della griglia e non dalle limitazioni intrinseche delle collisioni nel LGCA. In altre parole, il problema della bassa collisionalità è risolto, e la viscosità può essere abbassata di tanto quanto permesso dal reticolo adottato.

Oltre a questo, si risolve anche il problema dell'invarianza Galileiana, perché l'equilibrio locale può essere scelto liberamente (all'interno dei limiti idrodinamici) senza essere vincolati a delle distribuzioni statistiche specifiche della fisica del continuo. Eliminati i problemi di bassa collisionalità e dell'invarianza Galileiana la LBE con collisioni potenziate diventa un metodo con potenzialità alla pari con la CFD tradizionale.

6 SPECIFICITÀ DEL METODO LB

6.1 UNITÀ RETICOLARI (LATTICE UNITS)

All'interno del metodo LB non vengono usate le grandezze fisiche, ma viene usata una loro particolare normalizzazione. Le grandezze normalizzate prendono il nome di unità reticolari (*lattice units*).

Sappiamo che nel sistema internazionale sono tre le grandezze fisiche fondamentali: massa, tempo e spazio. Scegliendo una massa, un tempo ed uno spazio caratteristico con cui normalizzare le tre grandezze fondamentali siamo in grado di ottenere tutte le altre grandezze caratteristiche con cui normalizzare gli altri parametri del sistema. La scelta delle tre grandezze da cui far partire la normalizzazione del sistema non è univoca, possiamo scegliere varie combinazioni. Nelle simulazioni LB solitamente si usano:

- Densità, $ho_P =
 ho_{LB} * d
 ho$
- Spazio, $x_P = x_{LB} * dx$
- Tempo, $t_P = t_{LB} * dt$

Oppure:

- Densità, $ho_P=
 ho_{LB}*d
 ho$
- Spazio, $x_P = x_{LB} * dx$
- Velocità, $u_P = u_{LB} * du$

Nel primo caso tutte le altre grandezze si normalizzeranno con una combinazione del $d\rho$, $dx \ e \ dt$, mentre nel secondo caso la normalizzazione verrà effettuata con il $d\rho$, $dx \ e \ du$.

In entrambi i casi è necessario definire il $d\rho \ e \ dx$, partiamo quindi dalla loro definizione.

Per decidere quale valore di dx è migliore per il nostro problema dobbiamo conoscere una lunghezza caratteristica del problema. Per esempio, nel caso di un cilindro nella corrente la lunghezza caratteristica è il diametro del cilindro, D. Dobbiamo quindi decidere che discretizzazione vogliamo, cioè in quante celle vogliamo che sia divisa la lunghezza. Supponendo di volere N celle:

$$dx = \frac{D}{N-1}$$

Dove N è la risoluzione della griglia.

Per quanto riguarda la densità, solitamente si impone che la densità media in unità reticolari sia unitaria. Vale quindi:

$$ho_{LB}=1
ho_P=
ho_{LB}*d
ho,
ho_P=d
ho$$

Il d
ho è quindi determinato dalla densità fisica del problema da simulare.

Nel caso si adotti il tempo come terza grandezza fondamentale il passo successivo è definire il dt. Varrà

$$t_P = t_{LB} * dt$$

Ma il dt non può essere scelto del tutto liberamente. Infatti, nel caso si adotti l'operatore di collisione BGK, vale la relazione:

$$v_{LB} = c_{s_{LB}}^2 \left(\tau_{LB} - \frac{1}{2} \right)$$

Dove

 $au_{LB} = \frac{\tau}{dt}$ è il tempo di rilassamento in unità reticolari

- $c_{S_{LB}}^2$ è la velocità del suono al quadrato in unità reticolari. Vedremo in seguito che tale velocità è determinata dal tipo di reticolo adottato. Per la maggior parte dei reticoli vale $c_{S_{LR}}^2 = \frac{1}{2}$

 $v_{LB} = v_P * \frac{dt}{dx^2}$ è la viscosità cinematica in unità reticolari

La viscosità cinematica fisica, ν_P , è determinata dal tipo di fluido che vogliamo simulare, risulta quindi fissata. La velocità del suono in unità reticolari è fissata una volta fissato il tipo di reticolo. Il tempo di rilassamento in unità reticolari è legato alla stabilità dello schema. Possiamo quindi riscrivere la relazione precedente come:

$$v_P = c_{s_{LB}}^2 \left(\tau_{LB} - \frac{1}{2} \right) * \frac{dx^2}{dt}$$

Fissati v_P , $c_{S_{LR}}^2$ e τ_{LB} , risulta:

$$dt \propto dx^2$$

In realtà, come si vedrà in seguito, per l'acustica vale

$$au_{LB}
ightarrow rac{1}{2}$$

Che è una condizione limite per la stabilità. In questo caso lo scaling più adeguato è $dt \propto dx$

In alternativa, è possibile adottare la velocità come terza grandezza fondamentale. Vale:

$$u_P = u_{LB} * du$$

Anche in questo caso la scelta del du non è completamente arbitraria. Infatti, la velocità in unità reticolari è soggetta ad alcuni vincoli. In primis, tutte le velocità nel reticolo devono essere minori della velocità del suono, cioè deve valere

$$u_{LB} \ll c_{s_{LB}}$$

Quindi $u_{LB} \ll \frac{1}{\sqrt{3}} = 0.578.$

In secondo luogo, la scelta della velocità reticolare è legata al tempo di rilassamento, quindi alla stabilità del metodo. In particolare, man mano che τ_{LB} diminuisce e si allontana dall'unità, il requisito sulla velocità reticolare diventa più stringente. Vale quindi che:

- per $\tau_{LB} = 1$ deve valere $u_{LB} \ll c_{s_{LB}}$
- per $0.55 < au_{LB} < 1$ deve valere $u_{LB} < 0.4$
- per $\tau_{LB} < 0.55$ deve valere $u_{LB} < 8\left(\tau_{LB} \frac{1}{2}\right)$

in generale vale che $u_{LB} \rightarrow 0$ per $\tau_{LB} \rightarrow \frac{1}{2}$.

Un'altra grandezza la cui conversione può essere di interesse è la pressione. Nelle simulazioni LB la densità e la pressione sono legate fra loro dalla relazione:

$$p = \rho * c_s^2$$

Che vale sia in unità fisiche ($p_P = \rho_P * c_{s_P}^2$) che in unità reticolari ($p_{LB} = \rho_{LB} * c_{s_{LB}}^2$). Vale inoltre:

 $p_P = p_{LB} * dp$

Quindi:

$$\rho_{P} * c_{S_{P}}^{2} = \rho_{LB} * c_{S_{LB}}^{2} * dp$$

$$\rho_{LB} * d\rho * c_{S_{LB}}^{2} * \frac{dx^{2}}{dt^{2}} = \rho_{LB} * c_{S_{LB}}^{2} * dp$$

$$dp = d\rho * \frac{dx^{2}}{dt^{2}} = \rho_{P} * \frac{dx^{2}}{dt^{2}}$$

Tuttavia, è bene considerare che solitamente non si è interessati alla pressione assoluta, quanto piuttosto alla variazione di pressione rispetto ad una pressione di riferimento. Solitamente si scrive

$$p'_{LB} = c_{s_{LB}}^2 * \rho'_{LB} = c_{s_{LB}}^2 * (\rho_{LB} - \rho_{0_{LB}}), \qquad \rho_{0_{LB}} = 1$$

6.1.1 Similitudine fluidodinamica

Sappiamo che in fluidodinamica spesso non viene simulato il sistema reale, ma un sistema che è in similitudine con quello reale. Due sistemi sono in similitudine fluidodinamica quando:

- Sono caratterizzati degli stessi parametri adimensionali
- Sono in similitudine geometrica

Per capire da quanti e quali parametri adimensionali è caratterizzato il sistema si applicano il teorema di Buckingam e l'analisi dimensionale. Il primo dice che un sistema descritto da un'equazione in cui compaiono n grandezze fisiche può essere descritto attraverso n - k parametri adimensionali, con k numero delle grandezze fisiche fondamentali (solitamente 3: massa, tempo, spazio). Attraverso l'analisi dimensionale delle n grandezze fisiche si trovano le espressioni dei parametri adimensionali. Due parametri adimensionali che compaiono spesso nelle simulazioni fluidodinamiche sono

- Il numero di Reynolds,
$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} = \frac{UL}{v}$$

- Il numero di Mach, $M = \frac{U}{c_s}$

Dove il numero di Mach è rilevante solo se si vuole lavorare in regime compressibile (M < 0.3), mentre il Reynolds è rilevante solo se gli effetti viscosi non prevalgono su quelli inerziali (Re > 1).

I parametri adimensionali sono gli stessi se calcolati in unità fisiche o in unità reticolari. Nelle simulazioni LB solitamente si desidera trattare fluidi incompressibili, quindi non è importante che il Mach della simulazione e quello reale siano uguali. Tuttavia, se si volessero simulare fenomeni compressibili, come le onde acustiche, il Mach deve essere lo stesso e questo aggiunge un vincolo al sistema. Il Mach in unità reticolari è

$$M_{LB} = \frac{u_{LB}}{c_{s_{LB}}}$$

Sappiamo che $c_{S_{LB}}$ è determinata dal reticolo, quindi l'uguaglianza del Mach impone un vincolo sulla velocità in unità reticolari. In particolare dovrà valere

$$\frac{u_{LB}}{c_{s_{LB}}} = \frac{u_P}{c_s}, \qquad u_{LB} = u_P * \frac{c_{s_{LB}}}{c_s}$$

Se $c_s = 340 \frac{m}{s}$ e $c_{s_{LB}} = 0.578$, dovrà valere $u_{LB} = u_p * 0.0017$. Se la velocità non è fra le grandezze fondamentali scelte il vincolo si può tradurre sul dt come segue:

$$\frac{u_{LB}}{u_P} = \frac{dt}{dx} = \frac{c_{s_{LB}}}{c_s} = 0.0017$$

Quindi dt = 0.0017 * dx, cioè $dt \propto dx$ come accennato in precedenza.

6.2 SCHEMI DI RILASSAMENTO DEL RETICOLO

6.2.1 Tempo di rilassamento singolo (BGK)

Come accennato nel capitolo 5.3, nella LBE senza microdinamica Boolena di fondo la matrice di scattering e l'equilibrio locale possono essere considerati dei parametri liberi della teoria, parametri che possiamo cambiare a piacimento, tenendo conto dei limiti imposti dalle leggi di conservazione e dalla stabilità numerica. La viscosità del fluido è controllata da un unico parametro, cioè dal primo autovalore non nullo della matrice di scattering:

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

I rimanenti autovalori sono scelti in modo tale da minimizzare l'interferenza dei modi non idrodinamici (modi fantasma). Considerando che il trasporto è legato ad un unico autovalore, si può semplificare ulteriormente la situazione scegliendo una matrice di scattering con un unico parametro. Possiamo cioè scegliere una matrice di scattering diagonale nella forma:

$$A_{ij} = -\omega \delta_{ij}$$

Dove il parametro $\omega > 0$ è l'inverso del tempo di rilassamento all'equilibrio locale, costante. Questo implica il passare da uno schema con più tempi di rilassamento ad uno con un unico tempo di rilassamento dove tutti i modi si rilassano con una stessa scala temporale $\tau = 1/\omega$.

Con questo cambiamento, la LBE diagonale risulta la seguente:

$$\Delta_i f_i = -\omega \left(f_i - f_i^e \right)$$

Che può essere riscritta come:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c_i}dt, t + dt) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau_{LB}} \left[f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t) \right]$$

Visto il collegamento diretto con il famoso modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) dell' equazione di Boltzmann nella teoria cinetica del continuo, l'equazione sovrastante prende il nome di Lattice BGK, o anche LBGK.

La diagonalizzazione dell'operatore di collisione implica che tutti i modi decadano con la stessa velocità, situazione non fisica. Inoltre, visto che le leggi di conservazione non sono più contenute all'interno della matrice di scattering, non c'è modo che una matrice diagonale soddisfi le regole di somma ottemperate della matrice A_{ij} , quindi queste dovranno necessariamente essere contenute nell'equilibrio locale. Come risultato, dovrà esplicitamente essere richiesto che all'equilibrio locale si abbia la stessa densità e quantità di moto della vera funzione di distribuzione. Dovranno quindi valere le due seguenti condizioni sulla funzione di distribuzione all'equilibrio:

$$\sum_{i} f_i^{eq} = \sum_{i} f_i = \rho$$
$$\sum_{i} f_i^{eq} c_i = \sum_{i} f_i c_i = \rho u$$

Si noti che queste uguaglianze non devono essere rispettate dalla LBE quasi-lineare perché le regole di somma della matrice di scattering prendono automaticamente in considerazione le leggi di conservazione.

L'LBGK rappresenta l'ultima frontiera dell'LBE in termini di semplicità, che spiega perché la maggior parte delle applicazioni della LBE ne fa ancora uso.

Il maggior difetto del LBGK è che tutti i modi decadono alla stessa velocità, che è chiaramente un fenomeno non fisico. Dipendentemente dalle condizioni iniziali ed al contorno, questo può anche implicare oscillazioni a corto raggio che degradano la stabilità numerica nei regimi a bassa viscosità. Nel capitolo 6.3.1 si affronteranno in modo più approfondito le problematiche relative della stabilità di questo schema. Infine, un unico tempo di rilassamento implica che il trasporto di massa, di quantità di moto e di l'energia avvengono tutti alla stessa velocità, cosa che è vera solo per i gas ideali.

6.2.2 Funzione di distribuzione all'equilibrio

Affrontando il compito di definire l'equilibrio nel LBGK, dovremmo aspirare ad una generalità maggiore di quella precedentemente ottenuta nella LBE. In particolare, sappiamo che una grande limitazione ereditata dal metodo LGCA è il fatto che tutte le particelle all'interno del reticolo si devono muovere alla stessa velocità discreta, c_i . Se si riuscisse a imporre la presenza di più livelli energetici nel reticolo si riuscirebbe a togliere la limitazione per cui tutte le velocità discrete devono avere lo stesso modulo. Si può dimostrare che la funzione di distribuzione all'equilibrio può essere riscritta come:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left(1 + \frac{\vec{c_i} \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{(\vec{u} \cdot \vec{c_i})^2}{2c_s^4} - \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{2c_s^2} \right)$$

Dove:

- *w_i* sono chiamati pesi, permettono di avere diverse velocità nel reticolo. In
 particolare, per ogni reticolo avremo un diverso set di velocità e di relativi pesi
- *c_s* è la velocità del suono nel reticolo

I pesi possono essere definiti in diversi modi. Si possono definire i pesi imponendo che questi rispettino la conservazione della massa e della quantità di moto, e che valga l'isotropia rotazionale del reticolo. Il grado di isotropia necessario è determinato dal tipo di simulazione che vogliamo fare. Se si vogliono simulare le Navier-Stokes deve essere valida l'isotropia fino al quinto ordine. In questo caso vale:

$$\sum w_{i} = 1$$

$$\sum w_{i}c_{ia} = 0$$

$$\sum w_{i}c_{ia}c_{ib} = c_{s}^{2}\delta_{ab}$$

$$\sum w_{i}c_{ia}c_{ib}c_{ic} = 0$$

$$\sum w_{i}c_{ia}c_{ib}c_{ic}c_{id} = c_{s}^{4}(\delta_{ab}\delta_{cd} + \delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ab}\delta_{bc})$$

$$\sum w_i c_{ia} c_{ib} c_{ic} c_{id} c_{ie} = 0$$

Inoltre i pesi w_i devono essere non negativi. Inserendo il set di velocità $\{\vec{c}_i\}$ nel sistema soprastante otteniamo come output

- Il set di pesi, w_i
- La velocità del suono nel reticolo, c_s

Spesso solo alcune velocità sono imposte e quindi il sistema risulta sotto determinato. Questo implica che per uno stesso set di velocità possiamo trovare più di un set di pesi che rispetta i requisiti necessari. In questo caso è opportuno scegliere i pesi e la velocità del suono del reticolo in modo tale che, oltre a soddisfare i requisiti di base, sia anche ottimizzata la stabilità del reticolo.

6.2.3 Tipi di reticoli

Per ogni reticolo esistente, di varia dimensione, esistono diversi set di velocità discrete che soddisfano le leggi di conservazione, questo perché, come accennato, i gradi di libertà del sistema sono di più dei vincoli.

È quindi possibile classificare i reticoli con la dicitura DnQm, dove m sono le velocità discrete e n sono le dimensioni dei reticoli (1D, 2D o 3D).

Si fa di seguito una panoramica dei reticoli più frequentemente utilizzati. Si assume dx = dt, in tal modo si ottengono velocità unitarie.

- 1. Reticoli unidimensionali: D1Qm.
 - a. D1Q3. In ogni istante in ogni nodo non possono esserci più di tre particelle. Di queste particelle una è stagnante (velocità nulla, $c_3 = 0$) e rimane fissa sul nodo, mentre le altre due hanno velocità $c_1 = 1, c_2 =$ -1 e si muovono verso destra e sinistra del nodo rispettivamente. I pesi delle velocità discrete sono rispettivamente (w_1, w_2, w_3) = $(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{4}{6})$. La velocità del suono in questo reticolo vale $c_s = 1/\sqrt{3}$.
 - b. D1Q2. In ogni istante nel nodo non possono esserci più di due particelle. Durante lo step di streaming le particelle si muovono verso destra e verso sinistra con velocità $c_1 = 1, c_2 = -1$. I pesi delle velocità discrete sono rispettivamente $(w_1, w_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. La velocità del suono in questo reticolo vale $c_s = 1/\sqrt{2}$.





- 2. Reticoli bidimensionali: D2Qm.
 - a. D2Q5. In ogni istante possono esserci fino a 5 particelle in un nodo. Di queste particelle una è stagnante (velocità nulla, $c_5 = (0,0)$), mentre le altre quattro si muovono verso destra, sinistra, alto e basso rispetto al nodo con velocità $c_1 = (1,0), c_2 = (-1,0), c_3 = (0,1), c_4 = (0,-1)$. I pesi delle velocità discrete sono rispettivamente (w_1, w_2, w_3, w_4, w_5) =

 $\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{2}{6}\right)$. Questo schema non è applicabile per la simulazione fluidodinamica.

- b. D2Q4. Uguale allo schema precedente, ma senza particella stagnante sul nodo. I pesi in questo caso sono $(w_1, w_2, w_3, w_4) = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Può essere usato per la simulazione fluidodinamica.
- c. D2Q9. Su ogni nodo possono esserci fino a 9 particelle. Di queste, una è stagnante (velocità nulla, $c_9 = (0,0)$), mentre le altre si muovono verso i nodi adiacenti con velocità $c_1 = (1,0), c_2 = (-1,0), c_3 = (0,1), c_4 = (0,-1), c_5 = (1,1), c_6 = (1,-1), c_7 = (-1,-1), c_8 = (-1,1).$ I pesi delle velocità discrete sono rispettivamente

$$(w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, w_7, w_8, w_9) = \left(\frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36}$$



Figura 6 - Reticolo D2Q9

- 3. Reticoli tridimensionali: D3Qm.
 - a. D3Q15. Ogni nodo è collegato ai nodi adiacenti con 14 tratti percorribili dalle particelle. Una particella resta stagnante sul nodo di partenza.
 - D3Q19. Ogni nodo è collegato ai nodi adiacenti con 18 tratti percorribili dalle particelle. Una particella resta stagnante sul nodo centrale. Questo reticolo è un parente stretto della proiezione tridimensionale del FCHC, tuttavia con pesi diversi.



Figura 7 - Reticolo D3Q19



Figura 8 - Reticoli D3Q19 e D3Q15

6.2.4 Schema a due tempi di rilassamento (TRT – Two Relaxation Time) Si divide la funzione di distribuzione in parte simmetrica e parte antisimmetrica:

$$f_i^s = \frac{1}{2}(f_i + f_{-i}), \qquad f_i^a = \frac{1}{2}(f_i - f_{-i})$$

Dove vale

$$f_i = f_i^a + f_i^s, \qquad f_{-i} = f_i^a - f_i^s f_i^a = -f_{-i}^a, \qquad f_i^s = -f_{-i}^s$$

L'equazione con l'operatore di collisione con tempo di rilassamento doppio risulta:

$$f_i(x + c\Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_s} \left(f_i^s(x, t) - f_i^{s, eq} \right) - \frac{1}{\tau_a} \left(f_i^a(x, t) - f_i^{a, eq} \right)$$

Si nota che se $\tau_s = \tau_a$ si ritrova lo schema a tempo di rilassamento singolo. Lo step di streaming è lo stesso adottato nello schema a tempo di rilassamento singolo. L'equazione sopra può essere riscritta come:

$$f_i(x+c\Delta t,t+\Delta t) - f_i(x,t) = -\frac{1}{2}(\omega_s + \omega_a)f_i^{s,eq} - \frac{1}{2}(\omega_s - \omega_a)f_i^{a,eq}$$

Dove $\omega_a = \frac{1}{\tau_a}, \omega_s = \frac{1}{\tau_s}$. Il coefficiente di rilassamento simmetrico, ω_s , modula la viscosità, mentre il coefficiente di rilassamento antisimmetrico, ω_a , modula la dipendenza della viscosità dalla velocità.

6.2.5 Tempi di rilassamento multipli (MRT)

Nei primi anni 2000 l'approccio alla matrice di scattering della LBE è stato rivisto nell'ottica di aumentarne la stabilità e l'accuratezza. Questi sviluppi hanno guadagnato il nome di MRT, Multi-Relaxation Time.

Il punto di partenza è eliminare la principale limitazione del LBGK, cioè il fatto che tutti i modi decadono con la stessa velocità.

L'operatore di collisione può essere scritto in forma generale come:

 $f_i(x + c\Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -A_{ij}[f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)]$ Dove A_{ij} è la matrice di collisione (scattering). Lo step di collisione è di difficile implementazione nello spazio delle velocità, è più conveniente realizzare la collisione nello spazio dei momenti. In questo modo l'equazione sopra può essere trasformata come segue:

$$f_i(x + c\Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -M^{-1}S[\vec{m}(x, t) - \vec{m}^{eq}(x, t)]$$

Dove $m(x, t) \in m^{eq}(x, t)$ sono vettori di momenti, $\vec{m} = (m_0, m_1, m_2 \dots m_n)^T$. La matrice S di rilassamento è diagonale. La trasformazione da spazio delle velocità a spazio dei momenti può essere eseguita attraverso una trasformazione lineare:

$$\vec{m} = M\vec{f}, \qquad \vec{f} = M^{-1}\vec{m}$$

Seguendo questa via si ottiene uno schema numerico molto elegante, dove il passo di streaming avviene nello spazio delle velocità discrete, mentre il passo della collisione avviene nello spazio dei momenti. Questa forma si riconduce al LBGK quando tutti gli elementi della diagonale della matrice di rilassamento S, cioè gli autovalori, vengono fatti collassare su uno stesso valore.

Il vantaggio principale dell'MRT è che, attraverso un'opportuna scelta dei vari autovalori, si può calibrare con precisione le proprietà lineari dello schema numerico, cioè la dispersione, la dissipazione, l'isotropia, l'invarianza Galileina e la stabilità lineare. Tuttavia, l'MRT non è privo di criticità. Infatti, l'analisi della stabilità dell'MRT è, per costruzione, ristretta al regime lineare. Come risultato, non c'è nessuna sicurezza che un set di parametri di rilassamento attentamente scelti per ottimizzare la stabilità lineare possa anche provvedere all'ottimizzazione nel regime non lineare.

6.2.5.1 Schema MRT per il reticolo D2Q9

Abbiamo detto che nello schema collisionale MRT la collisione avviene nello spazio dei momenti, pertanto è necessario conoscere la matrice di trasformazione M. Per trovarla, possiamo usare:

- I polinomi di Hermite
- La procedura di Gram-Schmidt

Vogliamo trovare M per il reticolo D2Q9. Per questo reticolo

$$c_s^2 = \frac{1}{3}$$

Assumiamo dx = dt per semplicità.

Seguendo l'approccio dei polinomi di Hermite, i vettori riga della matrice di trasformazione M corrispondono ai polinomi di Hermite delle velocità reticolari c_i . Per il reticolo scelto, vale:

$$\begin{split} M_{\rho,i} &= H^{(0)} = 1 \\ M_{j_{x},i} &= H_x^{(1)} = c_{ix}, \qquad M_{j_{y},i} = H_y^{(1)} = c_{iy} \\ M_{p_{xx}}, i &= H_{xx}^{(2)} = c_{ix}c_{iy} - c_s^2, \qquad M_{p_{yy},i} = H_{yy}^{(2)} = c_{iy}c_{iy} - c_s^2 \\ M_{p_{xy},i} &= H_{xy}^{(2)} = c_{ix}c_{iy} \\ M_{\gamma x,i} &= H_{xyy}^{(3)} = c_{ix}c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}, \qquad M_{\gamma y,i} = H_{yxx}^{(3)} = c_{iy}c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy} \end{split}$$

$$M_{\gamma,i} = H_{xxyy}^{(4)} = c_{ix}^2 c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}^2 + c_s^4$$

I primi sei momenti (ρ , j_x , j_y , p_{xx} , p_{xy} , p_{yy}) corrispondono alla densità macroscopica, al vettore della quantità di moto ed al tensore delle pressioni (o degli sforzi). Gli ultimi tre momenti (γ_x , γ_y , γ) sono momenti di ordine superiore che non hanno influenza sull'idrodinamica a livello delle Navier-Stokes e vengono generalmente chiamati momenti fantasma. I nove vettori riga che compongono la matrice di transizione sono fra loro ortogonali. Sostituendo i valori numerici delle velocità discrete per il reticolo D2Q9, possiamo riscrivere la matrice di trasformazione come:

Il vettore dei momenti all'equilibrio può essere calcolato dalla relazione

$$\vec{m}^{eq} = M\vec{f}^{eq}$$

La matrice di trasformazione inversa, M^{-1} , può essere ottenuta invertendo analiticamente la matrice di trasformazione.

Manca quindi la matrice di rilassamento, *S*. Si può dimostrare attraverso la procedura di Chapman-Enskog che, affinchè la LBE sia ancora riconducibile alle Navier-Stokes, la matrice di rilassamento deve avere la forma seguente:

Dove il rateo di rilassamento dei momenti conservativi (massa e quantità di moto) sono arbitrari, e qui sono scelti pari a zero. La pressione, la viscosità cinematica e la *bulk viscosity* sono date dalle seguenti relazioni:

$$p = c_s^2 \rho, \qquad v = \rho c_s^2 \left(\frac{1}{\omega_v} - \frac{1}{2}\right), \qquad v_B = \rho c_s^2 \left(\frac{1}{\omega_\zeta} - \frac{1}{2}\right) - \frac{v}{3}$$

A differenza del modello BGK, la viscosità cinematica e la *bulk viscosity* possono essere scelte indipendentemente. Questo è particolarmente utile nel caso di simulazioni ad alto Reynolds (quindi a bassa viscosità cinematica), nelle quali aumentare la *bulk viscosity* può stabilizzare la simulazione attenuando le onde di pressione spurie più velocemente.

l ratei di rilassamento dei modi fantasma, $\omega_{\gamma\alpha} e \omega_{\gamma}$, possono essere scelti al fine di aumentare l'accuratezza e la stabilità del metodo.

6.2.6 Altri schemi di rilassamento

Negli scorsi anni sono stati sviluppati molte varianti degli schemi di rilassamento che migliorano le limitazioni precedentemente discusse. Fra questi:

- LBGK regolarizzato. L'idea di base è di proteggere i modi di trasporto da interferenze non volute da parte dei modi fantasma di ordine superiore. A questo scopo, una strategia semplice ed efficace consiste nel filtrare i modi fantasma dopo il completamento del passo di streaming, quindi prima del passo di collisione. Questa regolarizzazione ha effetti benefici sulla stabilità numerica dello schema, con un costo computazionale e di programmazione minimo.
- LBE a cascata. Risolve la mancanza di invarianza Galileiana per gli schemi di ordine superiore nel numero di Mach.

6.3 STABILITÀ DEGLI SCHEMI DI RILASSAMENTO

6.3.1 Tempo di rilassamento singolo (BGK)

Fra la LBGK discreta e continua sussiste una differenza fondamentale: mentre nell'ultima f evolve sempre verso f^{eq} , nell'altra f_i può evolvere immediatamente in f_i^{eq} oppure addirittura oltre f_i^{eq} . Per capire il perché, guardiamo alla LBE discreta con operatore di collisione BGK supponendo omogeneità spaziale:

$$f_i(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) f_i(t) + \frac{\Delta t}{\tau} f_i^{eq}$$

Dipendentemente dalla scelta del parametro $\frac{\tau}{\Delta t'}$ possiamo notare che f_i si rilassa in tre modi diversi:

- Sotto-rilassamento, $\frac{\tau}{\Delta t} > 1$, in questo caso f_i decade esponenzialmente verso f_i^{eq} come nel caso della LBGK continua.
- Rilassamento completo, $\frac{\tau}{\Delta t} = 1$, in questo caso f_i decade direttamente in f_i^{eq} .
- Sovra-rilassamento, $\frac{1}{2} < \frac{\tau}{\Delta t} < 1$, in questo caso f_i oscilla attorno a f_i^{eq} con ampiezza che diminuisce esponenzialmente.

Un quarto caso, instabile, può essere identificato nella condizione $\frac{\tau}{\Delta t} < \frac{1}{2}$, nel quale f_i oscilla attorno a f_i^{eq} con ampiezza che aumenta esponenzialmente. Per studiare più a fondo la stabilità della LBGK è bene distinguere fra condizioni necessarie e condizioni sufficienti alla stabilità; $\frac{\tau}{\Delta t} \ge \frac{1}{2}$ è una condizione necessaria per la stabilità dell'operatore di collisione BGK, per questo non può assicurare da sola la stabilità della collisone. Per avere la certezza della stabilità è necessario trovare una condizione sufficiente. Per l'operatore di collisione BGK una condizione sufficiente per la determinazione della stabilità è la non negatività delle popolazioni di equilibrio. Affinché le popolazioni all'equilibrio siano non negative è necessario imporre una condizione sulla velocità u. In particolare, la condizione sulla velocità varia al variare del tipo di reticolo adottato

$$|u_{max}| < \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t} \ per \ D1Q3 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t} \ per \ D2Q9, D3Q15, D3Q19 \end{cases}$$

Riassumendo, per l'operatore di collisione BGK a tempo di rilassamento singolo la condizione di stabilità ottimale è

$$\frac{\tau}{\Delta t} \ge 1$$
$$f_0^{eq} > 0$$

Che porta ad una condizione sul modulo della velocità massima:

$$|u| < \sqrt{\frac{2}{3} \frac{\Delta x}{\Delta t}}$$

Per $\frac{1}{2} < \frac{\tau}{\Delta t} \le 1$ il modulo della velocità massima raggiungibile è una complicata funzione del tempo di rilassamento τ . In generale la condizione d stabilità si deteriora per viscosità decrescente, cioè vale

$$|u_{max}| \to 0 \ per \frac{\tau}{\Delta t} \to \frac{1}{2}$$



Figura 9 - Campo di stabilità al variare del tempo di rilassamento e della velocità massima per lo schema a singolo tempo di rilassamento

In generale, per trovare il confine di stabilità per viscosità decrescente si procede in modo empirico. Si parte con una certa velocità massima $|u_{max}|$ ed un certo tempo di rilassamento τ , sempre rispettando la condizione $\frac{\tau}{\Delta t} > \frac{1}{2}$. Se la simulazione risulta instabile, si cambiano u_{max} e τ e si eseguono diverse simulazioni, finchè si ottiene la curva di stabilità $u_{max}(\tau)$. Procedere in modo empirico è l'opzione più semplice e sensata perché la curva di stabilità tende a cambiare al variare del problema fluidodinamico simulato.

6.3.2 Tempo di rilassamento doppio (TRT)

Nello schema a due tempi di rilassamento esiste una certa combinazione dei due tempi di rilassamento τ_a e τ_s che governa la stabilità e l'accuratezza della simulazione:

$$\Lambda = \left(\frac{\tau_s}{\Delta t} - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{\tau_a}{\Delta t} - \frac{1}{2}\right)$$

Dove Λ viene chiamato storicamente il parametro magico. Una scelta generalmente stabile di tale parametro risulta essere $\Lambda = \frac{1}{4}$, che corrisponde alla scelta $\frac{\tau}{\Delta t} = 1$ nello schema BGK. Per ogni scelta del tempo di rilassamento simmetrico τ_s , esiste un valore del tempo di rilassamento antisimmetrico τ_a tale per cui $\Lambda = \frac{1}{4}$. Il vantaggio dello schema TRT è che la condizione sulla stabilità e la viscosità cinematica $\nu = c_s^2 \left(\tau_s - \frac{\Delta t}{2}\right)$ risultano disaccoppiate. Di conseguenza, possiamo avere stabilità per ogni valore di viscosità, cosa impossibile se si adotta lo schema BGK.

6.4 CONDIZIONI AL CONTORNO

La dinamica dei fluidi è altamente dipendente dall'ambiente circostante, la cui influenza è descritta matematicamente attraverso le condizioni al contorno.

6.4.1 Condizioni iniziali

Come sappiamo, le condizioni iniziali sono le condizioni al contorno rispetto al tempo. Le condizioni iniziali influenzano la dinamica transitoria dei flussi complessi, cioè il modo in cui essi raggiungono il loro stato stazionario (se questo accade). Solitamente nell'LBM si inizializzano le popolazioni discrete all'equilibrio locale corrispondente ad un certo stato del campo idrodinamico:

Dove

$$f_i(\vec{x}; t = 0) = f_i^{eq}[\rho_0(\vec{x}), u_0(\vec{x})]$$

$$\rho_0(\vec{x}) = \rho(\vec{x}, t = 0), \qquad \vec{u}_0(\vec{x}) = \vec{u}(\vec{x}, t = 0)$$

Nella maggior parte dei casi la densità viene fissata ad un valore costante per tutta la simulazione (se siamo in campo incompressibile), mentre il campo di velocità viene scelto il più vicino possibile al campo di velocità in condizioni stazionarie, al fine di minimizzare la durata del transitorio.

6.4.2 Formulazione generale per le condizioni al contorno della LBE

Si consideri un fluido che scorre in un dominio Ω limitato dal suo contorno $\partial\Omega$. In generale, il problema nel formulare le condizioni al contorno con il formalismo della LBE consiste nel trovare una relazione appropriata che esprima la popolazione in entrata (dal contorno al fluido, sconosciuta) f_i^{in} come funzione di quella in uscita (dal fluido al contorno, nota) f_i^{out} .

La popolazione in uscita dal punto di confine \vec{x} è definita attraverso la condizione $\vec{c}_i \cdot \vec{n}(\vec{x}) > 0$

Dove $\vec{n}(\vec{x})$ è la normale uscente dal punto di confine \vec{x} . La popolazione entrante è definita dalla stessa disuguaglianza, ma con segno opposto. La relazione fra le due popolazioni può essere espressa come:

$$f_i^{in}(\vec{x}) = \sum_{y} \sum_{j} B_{ij}(\vec{x} - \vec{y}) f_j^{out}(\vec{y})$$

Questo operatore di confine esprime l'interazione fra le molecole di fluido e le molecole che stanno sul confine. Coerentemente con questa visione molecolare, le condizioni al

contorno possono essere interpretate come collisioni speciali (a volte persino più semplici) fra le molecole di fluido interne al dominio e le molecole che stanno sul contorno del dominio.

6.4.3 Panoramica delle varie condizioni al contorno

Possiamo distinguere due tipi principali di condizioni al contorno:

- Allineate con la griglia (*grid-aligned*), quando il confine fisico è allineato con le coordinate della griglia. La loro caratteristica distintiva è che il bordo del dominio non passa attraverso le celle della griglia.
- Che tagliano la griglia (*grid-cutting*), quando il bordo del dominio passa attraverso le celle della griglia. Possono essere utili per descrivere geometrie complesse.



Figura 11 - Condizioni al contorno non allineate con la griglia

Le condizioni al contorno per bordi allineati con la griglia possono essere formulate attraverso operazioni geometriche elementari, mentre per le condizioni al contorno per bordi che tagliano la griglia servono delle tecniche più complesse (interpolazione, estrapolazione ...).

Queste condizioni al contorno si applicano al campo di velocità, tuttavia per molti flussi di interesse ingegneristico è più appropriato definire delle condizioni al contorno miste di velocità e pressione. Visto che la LBE originale è intrinsecamente un metodo debolmente compressibile, le condizioni al contorno di pressione sono particolarmente sensibili e vanno considerate separatamente.

Vediamo quindi i vari tipi di condizioni al contorno:

Condizioni periodiche. Le condizioni al contorno periodiche si applicano in conseguenza a considerazioni specifiche sulla simmetria del flusso e sono volte a isolare un comportamento del fluido all'interno di un sistema ciclico. È importante non confondere la periodicità del flusso con la periodicità della geometria. Imporre condizioni al contorno periodiche implica che il flusso che lascia il dominio da un lato rientra istantaneamente nel dominio dal lato opposto. Di conseguenza, le condizioni al contorno periodiche conservano sempre la massa e la quantità di moto.

L'implementazione delle condizioni al contorno periodiche è piuttosto semplice nei metodi LB. Infatti, si impone semplicemente che la popolazione entrante da un lato sia pari alla popolazione uscente dal dominio dall'altro lato. Supponendo che i due confini distino L:

$$f_i^{in}(x,t) = f_i^{out}(x+L,t)$$

In particolare, le condizioni al contorno periodiche possono essere implementate con l'ausilio di uno strato aggiuntivo di nodi virtuali oppure senza. Nel primo caso, prima del passo di streaming, la popolazione uscente f_i^{out} viene copiata nei nodi virtuali vicini al lato opposto del dominio, quindi durante lo streaming tale popolazione entra nel dominio. Questi nodi vengono chiamati virtuali perché essi esistono a causa di una comodità computazionale, non perché fanno parte del dominio simulato effettivo.

 Pareti solide, condizione di *bounce-back*. In idrodinamica, la condizione più diffusa per l'interfaccia fluido-solido è la condizione di aderenza. Per questo, la modellizzazione dell'aderenza è cruciale per la simulazione di moti fluidi che coinvolgono pareti solide.

Il metodo più vecchio per modellizzare la condizione al contorno su una parete solida è il *bounce-back*. Il principio fondamentale di questo metodo è che le particelle che colpiscono il muro solido vengono riflesse indietro rispetto alla loro direzione di provenienza. La riflessione delle particelle implica l'assenza di flusso attraverso la parete, quindi si può dire che la parete è impermeabile al flusso. Allo stesso modo, il fatto che le particelle siano riflesse indietro piuttosto che riflesse specularmente (*bounce-forward*) implica che non ci sia moto relativo trasversale fra la particella e la parete, quindi che ci sia aderenza (*no-slip*). Esistono due metodi per l'implementazione della condizione di *bounce-back*:

- Riflessione completa, *fullway bounce-back*. In questo caso si considera che le particelle percorrano tutta la distanza che collega il nodo di confine al nodo solido durante lo step di streaming, la velocità della particella viene quindi invertita al passo di collisione successivo.
- Mezza riflessione, *half-way bounce-back*. In questo caso si considera che le particelle percorrano solo metà della distanza che separa il nodo di confine dal nodo solido, l'inversione della velocità della particella avviene sempre durante il passo di streaming.

La riflessione completa implica la modifica dello step di collisione sui nodi solidi, mentre il passo di streaming rimane inalterato. Nella mezza riflessione viene modificato il passo di streaming, mentre la collisione rimane inalterata.


Figura 12 - Schema di streaming e collisione per la riflessione completa (a) e la mezza riflessione (b) in caso di condizione al contorno di bounce-back

È bene notare che sia la riflessione completa sia la mezza riflessione implicano che il confine con la parete sia localizzato circa a metà fra il nodo solido ed il nodo di confine, non sul nodo solido stesso.

Supponendo di adottare una mezza riflessione, analizziamo il caso di una parete ferma. Le particelle che lasciano il nodo di confine x_b al tempo t con velocità c_i , impattano sulla superfice della parete al tempo $t + \frac{\Delta t}{2}$. In questo istante vengono riflesse indietro con velocità $c_i^{bb} = -c_i$ ed arrivano al nodo di partenza x_b al tempo $t + \Delta t$. Per queste particelle il passo di streaming è sostituito dalla seguente espressione:



Figura 13 - Passo di straming per condizione al contorno di bounce-back con parete ferma

- Condizioni di scorrimento senza attrito (*free-slip*). Vengono adottate condizioni di *free slip* quando al confine c'è contatto fra due fluidi e l'attrito fra essi risulta trascurabile. Sui nodi di confine si impone che la velocità tangenziale venga trasportata normalmente nel passo di streaming senza essere alterata, mentre la velocità normale è impostata a zero.
- Condizioni di scorrimento con attrito (*frictional-slip*). Questa situazione corrisponde all'avere velocità normale nulla a parete e velocità tangenziale smorzata dall'attrito.
- Condizioni di Dirichelt a parete. Le condizioni di Dirichlet (velocità a parete data, $u(W) = u_w$) vengono implementate attraverso il metodo Inamuro.

 Condizioni al contorno di inlet e outlet. È necessario imporre condizioni al contorno di inlet o di outlet dove il flusso entra o esce dal dominio, in particolare bisogna imporre un profilo di velocità o di densità entrante o uscente. Fisicamente, la difficoltà nasce dal fatto che le grandezze imposte al contorno del dominio computazionale devono essere compatibili e coerenti con quello che accade nel cuore del dominio. Nei metodi LB i contorni del dominio di inlet e outlet possono anche essere complicati dalla presenza di onde di pressione, che, se non trattate opportunamente, possono essere riflesse nel dominio computazionale ed inficiare la simulazione. Per evitare questa situazione sono state create apposite condizioni al contorno non riflettenti.

7 PROPAGAZIONE ACUSTICA NEI METODI LB

7.1 SUONO NEI FLUIDI VISCOSI

Le onde sonore emergono spontaneamente dalla risoluzione delle equazioni di conservazione per flussi compressibili. Lo studio scientifico dell'acustica è largamente basato sulle equazioni di Eulero linearizzate, che portano ad un'equazione d'onda lineare, ideale e priva di perdite (modello inviscido). Se invece si considerano le equazioni di Navier-Stokes linearizzate si arriva ad un'equazione d'onda in cui viene tenuta in conto l'attenuazione viscosa del suono. Le onde sonore che osserviamo nelle simulazioni LB sono solitamente molto influenzate della viscosità del fluido, essendo impossibile raggiungere la condizione di viscosità nulla (soprattutto se si adotta uno schema di collisione BGK). Al fine di abbassare la viscosità il più possibile c'è bisogno di impostare un tempo di rilassamento $\tau/\Delta t$ molto vicino a ½; in caso contrario le onde sonore verrebbero attenuate troppo velocemente e non risulterebbero visibili. Tuttavia, avere un tempo di rilassamento $\frac{\tau}{\Delta t} \rightarrow \frac{1}{2}$ comporta problemi di instabilità della simulazione, per questo dovremo bilanciare accuratamente l'abbassamento della viscosità.

7.1.1 Equazione d'onda viscosa

A partire dalle equazioni di Navier-Stokes compressibili linearizzate è possibile ricavare l'equazione d'onda per fluidi viscosi:

$$\frac{1}{c_s^2}\partial_t^2 p - (1 + \tau_{vi}\partial_t)\nabla^2 p = 0$$

Dove gli effetti della viscosità sulla propagazione sonora sono espressi attraverso il tempo di rilassamento viscoso, definito come

$$\tau_{vi} = \frac{1}{c_s^2} \left(\frac{4}{3} v + v_B \right)$$

L'equazione d'onda ideale, quella derivata dalle equazioni di Eulero, può essere ritrovata semplicemente ponendo $\tau_{vi} = 0$.

$$\frac{1}{c_s^2}\partial_t^2 p - \nabla^2 p = 0$$

Il tempo di rilassamento viscoso può essere visto come un tempo caratteristico della stabilizzazione dei processi viscosi. Per i fluidi reali risulta essere tipicamente dell'ordine di $10^{-10}s$ per i gas e $10^{-12}s$ per i liquidi. Attraverso l'analisi di Chapman-Enskog con l'operatore di collisione BGK ricaviamo che la viscosità può essere legata al tempo di rilassamento con la seguente espressione:

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \qquad \nu_B = \frac{2}{3} v$$

Inserendo questa definizione della viscosità nell'espressione del tempo di rilassamento viscoso possiamo legare τ_{vi} con il tempo di rilassamento del modello BGK nel modo seguente:

$$\tau_{vi} = 2\left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right)$$

7.1.2 La rappresentazione complessa delle onde

La natura lineare della equazione d'onda ci permette di usare la rappresentazione complessa delle grandezze oscillanti. Le soluzioni stazionare con una stessa pulsazione ω , legata al periodo dell'onda come $T = \frac{2\pi}{\omega}$, sono solitamente espresse in notazione complessa.

La soluzione dell'equazione d'onda più semplice è un'onda piana infinita, che è una soluzione unidimensionale che non è localizzata nello spazio e nel tempo. In forma complessa, la soluzione all'equazione d'onda ideale ($\tau_{vi} = 0$) è

$$\hat{p}(x,t) - p_0 = \hat{p}'(x,t) = \hat{p}^\circ e^{i(\omega_0 t \mp k_0 x)}$$

Dove la pulsazione ω_0 ed il numero d'onda k_0 sono legati dalla relazione $\frac{\omega_0}{k_0} = c_s$.

Ovviamente, la pressione fisica non è complessa, ma può essere trova direttamente dalla parte reale della pressione complessa:

$$\hat{p}'(x,t) = \Re(\hat{p}'(x,t)) = |\hat{p}^{\circ}| \cos(\omega_0 t \mp k_0 x + \varphi_P)$$

Dove φ_P è la fase, cioè $\hat{p}^{\circ} = |\hat{p}^{\circ}| e^{i\varphi_P}$.

La soluzione della equazione d'onda per fluidi viscosi è simile, ma sono presenti:

- un numero d'onda complesso, $\hat{k}=k-ilpha_x$
- una pulsazione complessa, $\widehat{\omega} = \omega + i\alpha_t$

Per un'onda piana che si propaga nella direzione x positiva in un fluido viscoso la soluzione risulta:

$$\hat{p}(x,t) = \hat{p}^{\circ} e^{i\left(\hat{\omega}t + \hat{k}x\right)} = p^{\circ} e^{-\alpha_t t} e^{-\alpha_x x} e^{i\left(\omega t - kx\right)}$$

Dove $\alpha_t \ e \ \alpha_x$ rappresentano l'attenuazione temporale e spaziale. La velocità di fase dell'onda sonora è data da $c_P = \frac{\omega}{k}$, che può differire dalla velocità del suono $c_s = \frac{\omega_0}{k_0}$. Questo implica che la propagazione sonora nei fluidi viscosi è dispersiva: la discrepanza fra $c_P \ e \ c_s$ aumenta con la frequenza e τ_{vi} . La dispersione delle onde può essere osservata spesso nelle simulazioni LB; le onde sonore solitamente si muovono a velocità più o meno diverse da c_s . Tuttavia, la dispersione nelle simulazioni LB è anche parzialmente dovuta ad un errore numerico.

7.2 SUONO NELLE SIMULAZIONI LB

7.2.1 Propagazione con modello BGK

seguente uguaglianza

Le onde sonore che compaiono nelle simulazioni fluidodinamiche LB solitamente

Non propagano alla velocità del suono c_s. In particolare, la velocità del suono nel reticolo dipende dal tipo di reticolo (DnQm). Il valore della velocità del suono nel reticolo è fissato dal requisito di isotropia di quest ultimo. Per esempio, per i reticoli D2Q9 e D3Q19 la velocità del suono è pari a 1/√3.
 È bene notare che è la velocità del suono in unità reticolari ad essere determinata dal reticolo, mentre la velocità del suono fisica è ottenibile con la

 $c_{s,P} = c_{s,LB} * \frac{\Delta x}{\Delta t}$

Per ottenere una velocità del suono fisica $c_{s,P} = 340 \frac{m}{s}$ è necessario avere $\frac{\Delta x}{\Delta t} = 588.9 \frac{m}{s}$, quindi il Δt deve risultare minore del Δx . Nelle simulazioni LB per

l'acustica deve esserci uno scaling acustico per cui

$$dx \propto dt$$

Al contrario dello scaling diffusivo, $\Delta t \propto \Delta x^2$.

Nelle simulazioni è possibile trovare valori della velocità di propagazione delle onde che differiscono leggermente dalla velocità del suono per quel reticolo. Questo è dovuto al fatto che le onde sonore in un mezzo viscoso sono dispersive ad alte frequenze, per questo la velocità di propagazione può variare.

 Sono attenuate molto velocemente, questo perché è difficile abbassare la viscosità a livelli fisici. La viscosità è legata al tempo di rilassamento come segue:

$$\nu = c_{SLB}^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) = c_{SLB}^2 \Delta t \left(\frac{\tau}{\Delta t} - \frac{1}{2} \right)$$

Per avere viscosità nulla dovremo avere $\frac{\tau}{\Delta t} = \frac{1}{2}$, ma questa è una condizione limite per la stabilità dello schema BGK. Per la stabilità il valore ideale sarebbe $\frac{\tau}{\Delta t} = 1$, ma questo implica l'avere una viscosità molto più alta di quella fisica.

7.2.2 Sorgenti sonore

Ci sono molte ragioni per cui le onde sonore possono comparire all'interno di una simulazione LB:

- Intenzionalmente: le condizioni iniziali della simulazione possono essere impostate in modo tale da contenere delle onde. Le onde libere possono essere inizializzate con un'unica lunghezza d'onda in un sistema periodico. Le onde forzate possono essere inizializzate con una distribuzione di densità non omogenea (Gaussiana).
- Non intenzionalmente: quando si imposta un campo di moto come condizione iniziale per una simulazione. Tipicamente questa condizione iniziale sarà un misto di campo di moto incompressibile e campo acustico.
- Rumore aerodinamico: il suono può essere generato da campi di moto non stazionari e dalla loro interazione con delle superfici. Visto che questo fenomeno è una conseguenza delle equazioni di conservazione del fluido può essere naturalmente catturato in una simulazione LB.
- Fonti di rumore artificiali: è anche possibile creare delle fonti sonore nella simulazione che generino artificialmente rumore durante la simulazione. Queste possono essere dentro il dominio, oppure essere implementate come condizioni al contorno.

7.2.3 Condizioni al contorno per l'acustica - confini non riflettenti

Le condizioni al contorno più utilizzate per le pareti di inlet e di outlet nelle simulazioni LB consistono nello specificare la velocità o la densità del fluido. Queste condizioni al contorno non sono ideali per la simulazione acustica, infatti così facendo le onde acustiche vengono riflesse indietro. Di conseguenza, l'onda acustica generata nel sistema non uscirebbe dal dominio, ma, riflessa, inquinerebbe il risultato della simulazione. In particolare, il campo di densità risulterebbe fortemente disturbato, così come il campo di pressione (valendo la relazione $p' = c_s^2 \rho'$). Questo non è un problema specifico dei metodi LB, ma è un problema generale di tutti i solutori per fluidi compressibili. Per risolverlo, si sono sperimentate varie soluzioni. Fra queste, ricordiamo:

- l'imposizione di condizioni al contorno caratteristiche (CBCs), nelle quali le equazioni del fluido sono decomposte nei nodi di bordo in modo tale da consentire la soppressione delle onde riflesse.
- la creazione di strati assorbenti. In questo caso il dominio è circondato da uno strato assorbente spesso diversi nodi. In questo strato, l'LBM è modificato in modo tale da attenuare le onde sonore mentre esse ci passano attraverso. In particolare, si vuole massimizzare l'attenuazione e minimizzare la riflessione delle onde. La performance di uno strato assorbente solitamente migliora con lo spessore dello strato.

Il tipo più semplice di strato assorbente è lo strato spugna viscoso (*viscous sponge zone*), nel quale il sistema simulato è circondato da uno strato a viscosità maggiore rispetto al resto del dominio. La viscosità cresce in modo continuo a partire dalla viscosità dell'interno del dominio verso la viscosità, molto maggiore, imposta al confine del sistema. Gli strati spugna viscosi sono molto semplici da implementare: basta che il valore di τ (che determina la viscosità) sia una funzione locale dello spazio dentro lo strato assorbente, per il resto l'LBM lavora normalmente.

8 **RISULTATI E DISCUSSIONE**

8.1 PALABOS

PALABOS (*Parallel Lattice Boltzmann Solver*) è un software sviluppato nel 2010 che implementa uno schema LB (*Lattice Boltzmann*) per la risoluzione di vari tipi di campi fluidodinamici. Il software è scritto in C++ ed è basato sull'esecuzione parallela implementata con MPI. Il C++ è un linguaggio di programmazione a oggetti e questa sua caratteristica viene sfruttata ampiamente in PALABOS.

PALABOS non è l'unico software per la fluidodinamica che implementa un metodo LB. I metodi Lattice Boltzmann (LBM) hanno preso piede nella comunità fluidodinamica nell'ultimo decennio. Sono solitamente usati per la simulazione di flussi non stazionari debolmente compressibili o incompressibili in regime DNS (*Direct Numerical Simulation*) o LES (*Large Eddy Simulation*). Uno dei loro principali vantaggi è l'abilità di rappresentare fenomeni fisici complessi.

Se i metodi LB offrano davvero molti vantaggi rispetto alla tradizionale CFD è ancora oggetto di discussione. Fra gli sviluppatori di PALABOS prevale il punto di vista secondo il quale il vantaggio principale sarebbe la maggiore efficienza computazionale della simulazione LBM. Inoltre, è stato dimostrato che le prestazioni degli LBM sono particolarmente notevoli in alcuni campi specifici della CFD, come nella risoluzione di problemi di aeroacustica.

Come accennato in precedenza, PALABOS non è l'unico software open-source che implementa un metodo LB. Fra gli altri, ricordiamo:

- HemeLB e HemoCell, per la simulazione nel campo della biomedicina computazionale
- Musubi e waLBerla, per la simulazione ingegneristica

Rispetto agli altri software, una caratteristica di spicco di PALABOS è la sua aspirazione alla generalità, la volontà di offrire un solutore per un ampio range di situazioni di interesse in campo scientifico. Questa generalità è ottenuta attraverso una combinazione delle forme statiche e dinamiche del C++.

La storia di PALABOS inizia nel 2007 con il software openLB, essendo quest ultimo originariamente sviluppato dagli stessi creatori. Lo scopo di PALABOS è quello di estendere il campo di azione di openLB ad un range più ampio di applicazioni. Anche se non condivide il codice in sé con openLB, PALABOS implementa una filosofia simile usando delle *data structures* più generali.

8.2 SIMULAZIONE DI ONDE PIANE

8.2.1 Onde piane in dominio rettangolare

Uno degli esempi forniti da PALABOS è 'externalFlowAroundObstacle'. In questo esempio viene simulato il flusso esterno attorno ad un corpo. Il dominio di calcolo è un semplice rettangolo sulle cui pareti possiamo, di default, imporre condizioni

- Periodiche
- Di free-slip

Il corpo attorno a cui si simula il flusso è passato al codice C++ attraverso un file .stl e di default è una sfera di diametro tale per cui il Reynolds della simulazione risulta essere pari a 10. Sull'outlet del dominio è presente uno strato a spugna viscoso, il cui spessore è regolabile in base alle esigenze al fine di minimizzare la riflessione delle onde sonore nel dominio. Lo schema di collisione adottato è a singolo tempo di rilassamento, cioè si utilizza lo schema BGK.

Il nostro scopo è modificare l'esempio in modo da imporre la presenza di onde sonore piane come condizione di inlet del dominio. Inizialmente si è provato ad ottenere il campo sonoro desiderato imponendo velocità di inlet oscillante con piccola ampiezza attorno ad un valore nullo, ma questa modifica non produce onde piane regolari. Se invece si pone densità oscillante in inlet si ottiene il campo di moto desiderato. In particolare, si pone:

$$\rho_{inlet} = \rho_{LB} + \rho' * \sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$$

Dove $\rho_{LB} = 1$ è la densità media nel dominio in unità reticolari. Come accennato nella sezione relativa alle unità reticolari, solitamente si impone $\rho_{LB} = 1$ in modo che valga $\rho_P = \rho_{LB} * d\rho = d\rho$. La densità in unità fisiche non è un parametro che è possibile impostare direttamente, ma può essere dedotta dalla pressione risultante della simulazione.

Il risultato della simulazione è molto legato alla scelta dei vari parametri di discretizzazione. In particolare, ricordiamo che nello schema BGK la viscosità cinematica, v, ed il tempo di rilassamento, τ, sono dipendenti fra loro. Il nostro scopo è ottenere viscosità cinematica il più bassa possibile, in tal modo le onde sonore propagheranno nel dominio a lungo senza risultare smorzate ed i risultati ottenuti si avvicineranno di più a quelli previsti dall'equazione d'onda non viscosa. Tuttavia, sappiamo anche che vale (in unità fisiche):

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right)$$

Per cui si ha $\nu \rightarrow 0$ se $\frac{\tau}{\Delta t} \rightarrow \frac{1}{2'}$ che è la condizione limite di stabilità. Per evitare fenomeni di instabilità non solo non possiamo impostare viscosità nulla, ma non possiamo nemmeno impostare una viscosità che si avvicina alla viscosità fisica dell'aria ($\nu = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$), ma dovremo imporre viscosità molto maggiore. Oltre a questo, è bene prendere in considerazione la velocità di propagazione delle onde, che noi vorremmo impostare pari alla velocità del suono in aria, $c_s = 340 \frac{m}{s}$. Nella simulazione viene usato il reticolo D3Q19 nel quale la velocità del suono in unità reticolari risulta $c_{s,LB} = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Possiamo ricavare la velocità del suono fisica con la classica conversione:

$$c_{s,P} = c_{s,LB} * \frac{dx}{dt}$$

Che corrisponde a:

$$\frac{c_{s_P}}{c_{s_{LB}}} = \frac{dx}{dt} = \frac{u_P}{u_{LB}}$$

Volendo imporre $c_{s,P} = 340 \frac{m}{s}$ dovrebbe valere $\frac{dx}{dt} = 588.89 \frac{m}{s}$. In realtà, nel nostro caso il parametro da impostare non è il dt, bensì il du, quindi la condizione è sulla velocità

$$\frac{u_P}{u_{LB}} = \frac{c_{s_P}}{c_{s_{LB}}} = 588.89 \frac{m}{s}$$

Normalmente il requisito di stabilità sulla velocità in unità reticolari è u_{LB} < c_{SLB} (poiché nessuna velocità può essere maggiore della velocità del suono nel reticolo), ma in questo caso il requisito diventa molto più stringente. Infatti, valendo $u_P \ll$ c_{S_P} deve anche valere

$$u_{LB} \ll c_{s_{LB}}$$

Si è quindi dimostrato che sia la condizione di bassa viscosità che la condizione di velocità del suono pari a quella fisica, $c_{s_P} = 340 \frac{m}{s}$, sono difficilmente raggiungibili con lo schema BGK per questioni legate all'instabilità.

8.2.1.1 Caso $\tau \cong 1$

Dal capitolo dedicato alla stabilità dell'operatore di collisione BGK sappiamo che la condizione $\tau = 1$ porta ad una simulazione sempre stabile. Tale condizione si ottiene impostando:

$$dx = 0.01139 m$$
, $u_{LB} = 0.02$, $u_P = 0.015 \frac{m}{s}$, $v_P = 0.0015 \frac{m^2}{s}$

In tal modo otteniamo

$$dt = 0.01519 \, s, \qquad \tau_{LB} = \frac{\tau}{\Delta t} = 1.027, \qquad c_{s,P} = 0.433 \frac{m}{s}$$

Si vede che sia la viscosità che la velocità del suono sono totalmente diverse da quelle fisiche. Per quanto riguarda l'oscillazione, si è impostato:

$$\rho' = 0.01$$
$$T_{LB} = 15$$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = T_{LB} * dt = 0.228 s$, quindi ad una frequenza $f_P = 4.39 Hz$.



L'andamento della pressione nel dominio risulta:

Figura 14 - Andamento della pressione



Figura 15 - Visualizzazione della pressione nel dominio

La pressione oscilla intorno allo zero con ampiezza $\Delta p = 1.7 \times 10^{-3} Pa$, a cui corrisponde un sound pressure level (SPL) di:

$$SPL = 20 \log\left(\frac{p'_{rms}}{2 \times 10^{-5}}\right) = 38.6 \ dB$$

La natura altamente viscosa del mezzo è resa evidente dalla velocissima diminuzione dell'ampiezza dell'onda. A partire dal dp in unità fisiche è possibile ricavare il fattore di conversione per la densità. Vale:

$$dp_P = d\rho_P * c_{S_P}^2, \qquad d\rho_P = \frac{dp_P}{c_{S_P}^2}$$

Dove $c_{S_P} = 0.433 \frac{m}{s} e dp_P = 1.7 \times 10^{-3} Pa$. Vale quindi $d\rho_P = 0.01 \frac{Kg}{m^3}$.

Misurando dall'animazione si trova che la lunghezza d'onda è $\lambda = 0.1 m$, da cui possiamo ricavare la velocità di propagazione dell'onda:

$$c_p = \frac{\lambda}{T} = 0.43 \frac{m}{s}$$

In linea con il valore di velocità del suono ottenuto in precedenza, $c_{s,P} = 0.433 \frac{m}{s}$. Per quanto riguarda l'andamento della velocità, risulta:



Figura 16 - Andamento della velocità

La velocità oscilla intorno al valore della velocità di inlet che noi abbiamo fornito, $u_P = 0.015 \frac{m}{s}$, con ampiezza $\Delta u = 4 \times 10^{-3} \frac{m}{s}$.

8.2.1.2 Caso $\tau \cong 0.6$

La simulazione precedente è caratterizzata da una viscosità molto alta, abbassandola diminuisce anche il valore del tempo di rilassamento, che scende sotto l'unità. Impostiamo:

$$dx = 0.01139 m$$
, $u_{LB} = 0.02$, $u_P = 0.005 \frac{m}{s}$, $v_P = 0.0001 \frac{m^2}{s}$

È necessario abbassare anche la velocità di inlet per fare in modo che il tempo di rilassamento assuma valore tale da garantire la stabilità della simulazione. In tal modo otteniamo

$$dt = 0.04557 \, s$$
, $\tau_{LB} = \frac{\tau}{\Delta t} = 0.605$, $c_{s,P} = 0.144 \frac{m}{s}$

L'ampiezza dell'oscillazione di densità e il periodo in unità di reticolo rimangono gli stessi della simulazione precedente:

$$\rho' = 0.01$$
$$T_{LB} = 15$$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = T_{LB} * dt = 0.68 s$, quindi ad una frequenza $f_P = 1.46 Hz$.

L'andamento della pressione nel dominio risulta:



Figura 17 - Andamento della pressione



Figura 18 - Visualizzazione della pressione nel dominio

La pressione oscilla intorno allo zero con ampiezza $\Delta p = 2 \times 10^{-4} Pa$, che corrisponde ad un sound pressure level di

$$SPL = 20 \log \left(\frac{\Delta p}{2 \times 10^{-5}}\right) = 20 \ dB$$

Più basso rispetto al caso precedente. Questo è dovuto al fatto che

$$p_P = p_{LB} * \left(\frac{dx}{dt}\right)^2$$

Abbassando la velocità di inlet nella simulazione il dx è rimasto lo stesso, mentre il dt è aumentato. Si può apprezzare l'effetto della minore viscosità osservando che l'onda si propaga nel dominio per una distanza maggiore. Tuttavia, la viscosità è ancora molto alta, circa un ordine di grandezza maggiore di quella fisica.

Come prima, $\lambda = 0.1 m$, da cui si ricava la velocità di propagazione dell'onda

$$c_p = \frac{\lambda}{T} = 0.146 \frac{m}{s}$$

Ancora una volta in linea con la velocità del suono calcolata in precedenza, $c_{s,P} = 0.144 \frac{m}{s}$.

Per quanto riguarda l'andamento della velocità:



Si ha un'oscillazione di ampiezza $\Delta u = 1.3 \times 10^{-3} \frac{m}{s}$ attorno al valore di inlet $u_P = 5 \times 10^{-3} \frac{m}{s}$.

8.2.1.3 Caso $\tau \cong 0.5$, velocità del suono e viscosità reali

Come si è accennato in precedenza, imporre $v_P = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$ e $c_{s_P} = 340 \frac{m}{s}$ porta all'avere tempo di rilassamento $\tau_{LB} = 0.5$, condizione limite per la stabilità. Tuttavia, abbassando opportunamente la velocità reticolare risulta possibile eseguire una simulazione con risultati stabili a queste condizioni. Impostiamo:

dx = 0.01225 m, $u_{LB} = 0.002$, $u_P = 1.178 \frac{m}{s}$, $v_P = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$

In tal modo otteniamo

$$dt = 2.08 \times 10^{-5} s$$
, $\tau_{LB} = \frac{\tau}{\Delta t} = 0.5$, $c_{s,P} = 340.06 \frac{m_{s,P}}{s}$

La viscosità e la velocità del suono coincidono con i valori fisici per l'aria. Per quanto riguarda l'oscillazione, si è impostato:

$$\rho' = 0.01$$
$$T_{LB} = 40$$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = T_{LB} * dt = 8.32 \times 10^{-4} s$, quindi ad una frequenza $f_P = 1.2 \times 10^3 Hz = 1.2 kHz$. Sappiamo che l'orecchio umano percepisce vibrazioni con frequenza dai 20 Hz ai 20 kHz, quindi la frequenza della nostra oscillazione si trova finalmente nel campo dell'udibile.

L'andamento della pressione è il seguente:



Figura 20 - Andamento della pressione



Figura 21 - Visualizzazione della pressione nel dominio

La pressione oscilla attorno al valore nullo con ampiezza $\Delta p=1.2 imes10^3 Pa$, che corrisponde ad un SPL di

$$SPL = 20 \log\left(\frac{\Delta p}{2 \times 10^{-5}}\right) = 155.5 \, dB$$

Decisamente maggiore dei casi precedenti. Nella figura sopra è evidenziata la lunghezza d'onda $\lambda = 0.28 m$, la velocità di propagazione dell'onda può essere calcolata come:

$$c_p = \frac{\lambda}{T} = 340.32 \frac{m}{s}$$

Del tutto coerente con quanto impostato in precedenza.

Possiamo proseguire con il calcolo della densità. Vale:

 $dp_P = d\rho_P * c_{S_P}^2, \qquad d\rho_P = \frac{dp_P}{c_{S_P}^2}$ Dove $c_{S_P} = 340 \frac{m}{s} e \, dp_P = 1.2 \times 10^3 \, Pa$. Vale quindi $d\rho_P = 0.01 \frac{kg}{m^3}$ che corrisponde a quanto impostato in unità reticolari. Vale quindi $\rho_P = d\rho * \rho_{LB}, d\rho = 1 \frac{kg}{m^3}$. Riportiamo per completezza l'andamento della velocità:



Figura 22 - Andamento della velocità

La velocità oscilla intorno a $u_P = 1.178 \frac{m}{s}$ con ampiezza $\Delta u_P = 3.3 \frac{m}{s}$.

Come si può vedere dagli andamenti sovrastanti, sia la pressione che la velocità aumentano leggermente verso la fine del dominio. Questo è dovuto alla presenza della zona di assorbimento viscoso prima della parete di outflow che, se non funziona come dovrebbe, può causare la riflessione delle onde uscenti all'interno del dominio stesso. L'andamento delle grandezze nella zona di assorbimento può essere alterato rispetto al resto del dominio anche perché le condizioni fisiche al suo interno sono diverse (la viscosità è molto maggiore).

Le onde piane generate in quest ultimo caso ($\tau = 0.5$) propagano in un mezzo con viscosità pari a quella dell'aria e ad una velocità pari a quella del suono in aria, possono quindi essere considerate onde sonore a tutti gli effetti. La simulazione risulta stabile solo in alcuni casi, ma è comunque possibile simulare alcune situazioni d'interesse che coinvolgono le onde sonore piane. Nel seguito si riportano i risultati.

8.2.2 Diffrazione

Inserendo un ostacolo nella simulazione è possibile osservare il fenomeno della diffrazione delle onde piane. Il caso più comune in cui si verifica la diffrazione dell'onda piana è il passaggio dell'onda attraverso una fenditura di diametro comparabile con la lunghezza d'onda o minore. Le onde al di là della fenditura risultano sferiche, la fenditura si comporta come una sorgente puntiforme.



Figura 23 - Diffrazione attraverso una fenditura singola

Si può avere diffrazione anche quando l'onda incontra un ostacolo, a patto che l'ostacolo abbia lunghezza caratteristica (nel nostro caso il diametro della sfera) confrontabile o minore della lunghezza d'onda delle onde piane in entrata nel dominio. Gli spigoli dell'ostacolo si comportano come sorgenti acustiche puntiformi, cioè producono onde sferiche. L'interferenza delle onde sferiche generatasi sugli spigoli porta alla creazione di zone di interferenza costruttiva, dove i due fronti si sommano, e zone di interferenza distruttiva, dove i due fronti si sottraggono l'un l'altro.



Figura 24 - Diffrazione su un ostacolo

La diffrazione fa in modo che l'onda possa raggiungere dei punti nella scia dell'ostacolo che altrimenti non sarebbero raggiunti: infatti, se l'ostacolo è molto più grande della lunghezza d'onda dietro di esso si forma una zona d'ombra dove il suono non perviene.



Figura 25 - Ostacolo senza diffrazione

8.2.2.1 Studio della diffrazione: frequenza costante e diametro variabile Consideriamo delle onde piane con:

$$T_{LB} = 40,$$
 $T_P = T_{LB} * dt = 8.54 \times 10^{-4} s,$ $f_P = \frac{1}{T_P} = 1.17 \times 10^3 Hz$

La lunghezza d'onda è $\lambda = 0.28 m$.

Vogliamo studiare il comportamento di queste onde su un ostacolo sferico di diametro variabile. Considereremo sei diametri diversi compresi fra $D_1 = 0.1 m e D_6 = 0.6 m$. Il dominio è un parallelepipedo di dimensioni $x \times y \times z = 2.95m \times 2m \times 2 m$, il centro della sfera è sempre il punto (x, y, z) = (1.5 m, 1 m, 1 m).

La visualizzazione delle onde di pressione è la seguente:



Figura 26 - Diffrazione su sfere di diametro crescente

Nel caso della sfera più piccola, $D_1 = 0.1 m$, l'ostacolo è troppo piccolo e viene scavalcato dall'onda senza provocare diffrazione. Nel caso $D_2 = 0.2 m$ la diffrazione è presente, ma molto debole: l'ostacolo è ancora troppo piccolo. All'aumentare del diametro della sfera la diffrazione diventa più evidente. Nella parte posteriore della sfera possiamo notare come le onde piane tendano a diventare sferiche. Anche se la sfera è priva di spigoli, l'onda sente la presenza dell'ostacolo come una discontinuità e questo causa l'incurvamento dell'onda. L'interferenza delle due onde sferiche generatasi porta alla creazione di due fasce di interferenza distruttiva nella porzione di dominio successiva alla sfera. L'inclinazione delle fasce diminuisce all'aumentare del diametro della sfera. Si può dimostrare che l'inclinazione delle fasce di interferenza distruttiva può essere scritta come

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d}, \qquad n = \pm 1, \pm 3, \pm 5 \dots$$

Con d distanza fra le due sorgenti puntiformi. Assumendo nel nostro caso $d \approx D_i$, cioè che la distanza fra le due sorgenti sia circa uguale al diametro della sfera, vale che

Coerentemente con quanto trovato nelle simulazioni.

d

All'aumentare del diametro della sfera le onde nel resto del dominio risultano più disturbate, meno regolari. Questo può essere dovuto all'imposizione di condizioni al contorno periodiche, ma anche alla presenza di fenomeni di scattering e riflessione dell'onda. Quando un'onda incide su un corpo possiamo avere riflessione speculare o riflessione diffusa. Nella riflessione speculare l'onda viene riflessa con lo stesso angolo dell'onda incidente. Al contrario, nel caso della riflessione diffusa, o scattering, l'onda viene riflessa in tutte le direzioni. Lo scattering dell'onda si verifica quando la superficie del corpo ha irregolarità superficiali di dimensione paragonabile alla lunghezza d'onda del suono incidente. Nel nostro caso la dimensione delle irregolarità superficiali della sfera è definita dalla triangolazione usata per costruire la mesh.

Anche nel caso in cui la sfera è più grande, $D_6 = 0.6 m$, la dimensione dell'ostacolo non è tale da causare la presenza di una zona d'ombra dietro l'ostacolo stesso.



Possiamo inoltre riportare l'andamento della pressione su una sezione posta a x = 2.3 m, quindi dopo la sfera.

Figura 27 - Pressione sulla sezione a x=2.3 m

Ritroviamo quanto detto in precedenza. L'intensità dei picchi di interferenza costruttiva e distruttiva aumenta all'aumentare del diametro della sfera. I due picchi di interferenza distruttiva si allontanano dal centro man mano che diminuisce il diametro della sfera. Il campo intorno alla sfera risulta più disturbato con sfere di diametro maggiore.

8.2.2.2 Studio della diffrazione: diametro costante e frequenza variabile

Consideriamo lo stesso dominio del caso precedente (di dimensioni $x \times y \times z = 2.95m \times 2m \times 2m$) con una sfera di diametro D = 0.4m il cui centro coincide con il punto (x, y, z) = (1.5m, 1m, 1m). Vogliamo studiare il comportamento di onde piane di varia frequenza su questo ostacolo. In particolare, consideriamo cinque diverse onde:

$T_{LB_1} = 20,$	$\lambda_1 = 0.14 m$
$T_{LB_2} = 30,$	$\lambda_2 = 0.22 m$
$T_{LB_3} = 40,$	$\lambda_3 = 0.28 m$
$T_{LB_4} = 50,$	$\lambda_4 = 0.36 m$
$T_{LB5} = 60,$	$\lambda_5 = 0.44 m$

La visualizzazione delle onde di pressione è la seguente:



Figura 28 - Onde di pressione di frequenza variabile su sfera di diametro D=0.4m

Nell'ultima immagine, $\lambda_5 = 0.44 m$, le onde passano sull'ostacolo senza alterarsi, la diffrazione è quasi nulla. Man mano che la lunghezza d'onda diminuisce, la diffrazione diventa più evidente. Si può notare l'incurvamento delle onde nella parte posteriore della sfera, maggiormente visibile nel caso $\lambda_1 = 0.14 m$.

Dietro alla sfera si creano due fasce di interferenza distruttiva, la cui inclinazione diminuisce al diminuire della lunghezza d'onda. Come nel caso precedente, possiamo considerare la relazione:

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d}, \qquad n = \pm 1, \pm 3, \pm 5 \dots$$

In cui poniamo d = D = 0.4 m. Risulta:

$$\lambda\downarrow$$
, $\sin\theta\downarrow$, $\theta\downarrow$

Coerentemente con quanto trovato nelle simulazioni.

Il campo intorno alla sfera risulta più disturbato al diminuire della lunghezza d'onda. Come nel caso precedente, questo può essere imputato all'imposizione di condizioni al contorno periodiche ed alla presenza di fenomeni di riflessione e scattering. Lo scattering aumenta al diminuire di λ perché le imperfezioni superficiali del corpo diventano dello stesso ordine di grandezza della lunghezza d'onda.



Figura 29 - Pressione sulla sezione a x=2.3 m

Si ritrova quanto detto in precedenza. Nel caso $\lambda_1 = 0.14 m$ il picco centrale è più evidente e i due picchi negativi di interferenza distruttiva sono più vicini al centro. Man mano che la lunghezza d'onda cresce il picco centrale si appiattisce e le due fasce di interferenza distruttiva si allontanano dal centro. Il campo intorno alla sfera risulta tanto più disturbato quanto più diminuisce la lunghezza d'onda.

Il valore medio della pressione varia ad ogni frequenza perché, a fissata ascissa ed istante, varia il punto dell'onda piana in cui ci si trova.

8.2.3 Risuonatore di Helmholtz

Un risuonatore di Helmholtz è una particolare cavità risonante acustica, che, inserita lungo un canale, può essere utilizzata per bloccare la propagazione di una certa frequenza al suo interno.

8.2.3.1 Richiami teorici nel caso inviscido

Un risuonatore di Helmholtz è costituito da una cavità di volume Ω collegata ad un condotto di lunghezza L e sezione S.



Figura 30 - Risuonatore di Helmholtz, geometria

Assumendo trascurabile la viscosità dell'aria (modello inviscido), quando un'onda sonora entra dentro il risuonatore esso si comporta come un sistema massa-molla, dove:

- La molla è l'aria contenuta nel volume Ω
- La massa è l'aria contenuta nel condotto di sezione S e di lunghezza L



Figura 31 - Analogia fra il sistema massa-molla ed il risuonatore di Helmholtz

È possibile dimostrare che l'equazione caratteristica del risuonatore è

$$\hat{p}_1 = i \left(\omega^2 - \frac{c_0^2 S}{\Omega L} \right) \frac{\hat{Q}L}{\omega S}$$

Dove $\hat{Q}(Q = \hat{Q}e^{i\omega t})$ è la portata, ω è la pulsazione dell'onda e $\hat{p_1}(p_1 = \hat{p_1}e^{i\omega t})$ è la pressione in entrata al condotto. L'equazione caratteristica del sistema massa-molla non forzato è noto essere

$$m\frac{d^2\eta}{dt^2} + k\eta = 0$$

Dove η è lo spostamento, m è la massa e k è la costante elastica della molla. Usando la formulazione in frequenza può essere riscritta come:

$$m\omega_R^2 - k = 0$$

Da cui possiamo ricavare la frequenza di risonanza di un sistema massa-molla:

$$f_{R_{m-m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}, \qquad \omega_{R_{m-m}} = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

In analogia, la frequenza di risonanza del risuonatore è

$$f_{R_H} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{c_0^2 S}{\Omega L}}, \qquad \omega_R = \sqrt{\frac{c_0^2 S}{\Omega L}}$$

Ricordando l'equazione caratteristica del risuonatore, si nota che

$$\omega \to \omega_R$$
, $\hat{p}_1 \to 0 * \frac{\hat{Q}L}{\omega S}$

La pressione deve avere valore finito, quindi deve valere

$$\omega
ightarrow \omega_R$$
, $\widehat{Q}
ightarrow \infty$

Cioè quando la frequenza dell'onda entrante si avvicina alla frequenza di risonanza l'ampiezza delle oscillazioni di portata all'interno del risuonatore cresce di molto. Grandi oscillazioni di portata fanno venir meno l'ipotesi acustica di piccole perturbazioni, gli effetti viscosi diventano non trascurabili. Proprio a causa degli effetti viscosi si ha smorzamento dell'oscillazione di portata all'interno del risuonatore, che quindi può essere usato come silenziatore per onde di frequenza pari alla sua frequenza di risonanza. Modificando opportunamente la geometria della cavità e del condotto è possibile ottenere la frequenza di risonanza desiderata.

8.2.3.2 Simulazione

La geometria su cui si è effettuata la simulazione è la seguente:



Figura 32 - Risuonatore simulato

Lungo un canale di sezione costante $A = 0.1 m^2$ si è inserito un risuonatore di Helmholtz con

$$\Omega = 9 \times 10^{-2} m^3$$
, $S = 0.1 m^2$, $L = 0.1 m$

Nel canale vengono introdotte delle onde acustiche piane. Quando le onde incontrano il risuonatore, questo è sentito come una discontinuità. Parte dell'onda incidente viene riflessa e parte trasmessa. Possiamo definire il coefficiente di perdita di trasmissione come il rapporto, in deciBel, fra la potenza acustica incidente e quella trasmessa:

$$L_T = 10 \log \frac{(P_W)_I}{(P_W)_T}$$

Si può dimostrare che per il risuonatore di Hemlholtz vale

$$L_T = 10 \log \left[1 + \frac{1}{4A} \left(\frac{c_0}{\omega \Omega} - \frac{\omega L}{c_0 S} \right)^{-2} \right]$$

Quindi per $\omega \rightarrow \omega_R$, $L_T \rightarrow \infty$.



Figura 33 - Coefficiente di perdita di trasmissione al variare della frequenza

Nel nostro caso la pulsazione di risonanza del risuonatore risulta

$$\omega_R = 1.13 \times 10^3 \frac{rad}{s}$$

Nel codice è necessario impostare il periodo dell'onda piana in unità reticolari. Possiamo ricavarlo come segue:

$$f_R = \frac{\omega_R}{2\pi}$$
, $T_R = \frac{1}{f_R}$, $T_{R_{LB}} = \frac{T_R}{dt} = 286.6$

I risultati sono i seguenti:



Figura 34 - Visualizzazione delle onde di pressione nel dominio



Figura 35 - Andamento della pressione nel canale

In corrispondenza del risuonatore l'onda di pressione presenta una discontinuità ed una netta diminuzione di ampiezza che passa dall'essere $\hat{p}_1 = 2.3 \times 10^3 Pa$ prima del risuonatore, all'essere $\hat{p}_1 = 10^3 Pa$. Possiamo analizzare più precisamente quello che accade all'interno del risuonatore:



Figura 36 - Visualizzazione della pressione nel risuonatore, sezione a x normale



Figura 37 - Andamento della pressione su una sezione verticale nel risuonatore

Quando l'onda entra nel risuonatore l'oscillazione di pressione mantiene ampiezza finita, mentre l'oscillazione di portata viene amplificata fino a causare l'insorgere di effetti dissipativi legati alla viscosità. Nella simulazione, all'interno della cavità tende ad instaurarsi dell'instabilità, che abbiamo smorzato aumentando la risoluzione della griglia (quindi diminuendo il dx) e aumentando il tempo di simulazione. Procedendo nel tempo per più cicli le instabilità sono assorbite dal segnale che si instaura nella cavità.

8.3 SIMULAZIONE DI UNA SORGENTE PUNTIFORME

In acustica esistono tre tipi di sorgenti:

- Monopolo
- Dipolo
- Quadrupolo

Noi siamo interessati alla riproduzione di un monopolo acustico. Un monopolo acustico è una sorgente che emette uniformemente in ogni direzione, può essere rappresentato come una sfera pulsante il cui raggio tende allo zero. Rappresentare matematicamente lo spostamento pulsatile della superficie è complesso, quindi solitamente si impone che la superficie della sfera sia ferma e che su di essa si abbia una velocità pulsatile nella forma

$$u_r'(a,t) = u_0 e^{i\omega t}$$

Dove a è il raggio della sfera ($a \rightarrow 0$ per il monopolo), u_0 è l'ampiezza dell'oscillazione e $f = \frac{\omega}{2\pi}$ è la frequenza dell'oscillazione. A causa dell'oscillazione di velocità sulla superficie della sfera, nel dominio viene periodicamente immessa e sottratta massa. Il monopolo può quindi essere visto come una sorgente di massa oscillante e puntiforme.

Per capire come modellizzare un monopolo all'interno di una simulazione LB, è per prima cosa opportuno trovare un modo per rappresentare una sorgente di massa. Il modo più corretto di imporre la presenza di una sorgente di massa in un algoritmo LB è imporre un operatore di collisione nella forma:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c_i} \cdot dt, t + dt) - f_i(\vec{x}, t) = C_i + \Delta C_i$$

Dove, se si sceglie uno schema collisionale a singolo tempo di rilassamento risulta:

$$C_i = C_{i_{BGK}} = -\frac{1}{\tau} \left(f_i - f_i^{eq} \right)$$

Il termine ΔC_i rappresenta le correzioni che è necessario apportare all'operatore di collisione BGK per includere forze e sorgenti. Possiamo infatti scrivere:

$$\Delta C_i = \Delta C_i^F + \Delta C_i^q$$

Dove ΔC_i^F è la correzione per le forze esterne e ΔC_i^q è la correzione per le sorgenti di massa. Vale:

$$\Delta C_i^F = w_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{(c_{ia})F_a}{c_s^2} + \frac{Q_{iab}(u_a)F_b}{c_s^2} \right) dt$$
$$\Delta C_i^q = w_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(1 + \frac{(c_{ia})(u_a)}{c_s^2} + \frac{Q_{iab}(u_a)(u_b)}{2c_s^2} \right) qdt$$

Dove q è la sorgente/pozzo di massa. La conservazione della massa e della quantità di moto verrà quindi imposta come segue:

$$\sum_{i} f_{i}(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t) - \frac{1}{2}q(\vec{x}, t)dt$$
$$\sum_{i} f_{i}(\vec{x}, t)c_{ia} = \rho(\vec{x}, t)u_{a}(\vec{x}, t) - \frac{1}{2}[F_{a}(\vec{x}, t) + q(\vec{x}, t)u_{a}(\vec{x}, t)]dt$$

Dalle due uguaglianze sovrastanti possiamo ottenere la densità ($\rho(\vec{x}, t)$) e la densità di quantità di moto ($\rho(\vec{x}, t)u_a(\vec{x}, t)$) macroscopiche del fluido. Se deriviamo l'espressione della sorgente $q(\vec{x}, t)$ a partire dalla conservazione della massa, otteniamo:

$$q(\vec{x},t) = \frac{2}{dt} \left[\rho(\vec{x},t) - \sum_{i} f_i(\vec{x},t) \right]$$

Che, considerando la relazione $p(\vec{x}, t) = c_s^2 \rho(\vec{x}, t)$, può essere riscritta come:

$$q(\vec{x},t) = \frac{2}{dt} \left[p(\vec{x},t)c_s^{-2} - \sum_i f_i(\vec{x},t) \right]$$

Imporre una sorgente con questa espressione corrisponde a fissare la pressione (o la densità) in un punto del dominio. Si può dimostrare che una sorgente inserita in questo modo rispetta il requisito di invarianza Galileiana.

Un monopolo è una sorgente di massa puntiforme e pulsante, pertanto possiamo inserire il monopolo imponendo densità oscillante su un singolo nodo del dominio:

$$\rho = \rho_{LB} + \rho' \sin\left(2\pi \frac{t}{T_{LB}}\right)$$

Dove $\rho_{LB} = 1$ è la densità media in unità reticolari, ρ' è l'ampiezza dell'oscillazione e T_{LB} è il periodo in unità reticolari. L'oscillazione di densità ρ' deve essere piccola rispetto alla densità media ρ_{LB} per evitare l'insorgere di fenomeni non lineari: $\rho' \ll \rho_{LB}$.

In PALABOS imponiamo questa oscillazione attraverso la funzione initializeAtEquilibrium. Come si è spiegato nella simulazione precedente dell'onda piana, adottando uno schema a singolo tempo di rilassamento è molto difficile ottenere una velocità del suono ed una viscosità con valori realistici perché questo diminuirebbe di molto la stabilità dello schema. In seguito vengono illustrati i risultati ottenuti da simulazioni con diversi tempi di rilassamento.

8.3.1 Caso au = 1

In questo caso impostiamo:

$$dx = 0.011834 m$$
, $u_{LB} = 0.02$, $u_P = 0.005 \frac{m}{s}$, $v_P = 0.0005 \frac{m^2}{s}$

In tal modo otteniamo

$$dt = 0.04734 \, s, \qquad \tau_{LB} = \frac{\tau}{\Delta t} = 1.007, \qquad c_{s,P} = 0.1443 \frac{m}{s}$$

Come si è visto nel caso dell'onda piana, per avere tempo di rilassamento unitario sia la viscosità che la velocità del suono devono essere diverse da quelle fisiche. Per quanto riguarda l'oscillazione, si è impostato:

$$\rho' = 0.02$$
$$T_{LB} = 40$$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = T_{LB} * dt = 1.8935 s$, quindi ad una frequenza $f_P = 0.5281 Hz$.

La densità (quindi la pressione) sul nodo dove è posizionata la sorgente oscilla sinusoidalmente, quindi raggiunge periodicamente un massimo ed un minimo. Riportiamo nelle immagini sottostanti l'andamento della pressione su una sezione radiale nell'istante di massimo ed in quello di minimo.



Figura 38 - Pressione nell'istante di massimo



Figura 39 - Pressione nell'istante di minimo

Possiamo quindi riportare l'andamento della pressione nel dominio:



Figura 40 - Visualizzazione della pressione nel dominio

Analogamente, possiamo riportare l'andamento della velocità su una sezione radiale (istante di massimo e di minimo).



Figura 42 - Velocità nell'istante di minimo

Gli andamenti sono coerenti con quelli reali, ma, per via dell'altissima viscosità, sono molto smorzati.

8.3.2 Caso $\tau = 0.6$

Impostiamo tutti i parametri uguali al caso precedente, ma abbassiamo la viscosità di un ordine di grandezza:

$$dx = 0.011834 m$$
, $u_{LB} = 0.02$, $u_P = 0.005 \frac{m}{s}$, $v_P = 1.5 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$

In tal modo otteniamo

$$dt = 0.04734 \, s, \qquad \tau_{LB} = \frac{\tau}{\Delta t} = 0.652, \qquad c_{s,P} = 0.1443 \, \frac{m}{s}$$

Il tempo di rilassamento è sceso ampiamente sotto l'unità, determinando una diminuzione di stabilità. Per quanto riguarda l'oscillazione, si è impostato:

$$\rho' = 0.02$$
$$T_{LB} = 40$$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = T_{LB} * dt = 1.8935 s$, quindi ad una frequenza $f_P = 0.5281 Hz$.

Come nel caso precedente, riportiamo l'andamento della pressione nell'istante di massimo e di minimo, oltre che la pressione nel dominio.



Figura 44 - Pressione nell'istante di minimo



Figura 45 - Visualizzazione della pressione nel dominio

L'oscillazione è meno smorzata del caso precedente, ma risulta ancora molto più smorzata del caso reale.

8.3.3 Caso $\tau = 0.5$, viscosità e velocità del suono reali

Rispetto ai casi precedenti per ottenere un'onda sonora realistica è necessario abbassare la viscosità del mezzo ed aumentare moltissimo la velocità di propagazione.

Possiamo procedere in modo analogo a quanto fatto in precedenza con le onde piane, cioè possiamo mantenere lo schema collisionale a singolo tempo di rilassamento e trovare una combinazione di parametri opportuna. Sfortunatamente, in questo caso la simulazione risulta troppo instabile e non è possibile procedere per questa strada. Un'alternativa è adottare uno schema di rilassamento diverso che permetta di svolgere la simulazione con valori realistici, pur mantenendo una stabilità maggiore. In particolare, quando si vuole aumentare la stabilità della simulazione solitamente si passa ad uno schema collisionale a tempo di rilassamento multiplo (MRT – *Multiple Relaxation Time*).

In PALABOS possiamo trovare un esempio di simulazione con lo schema MRT in "navierStokesModels" con il codice "allModels2d". Il codice inizialmente simula il flusso su un cilindro in un canale in due dimensioni, con un profilo di Pouseille come condizione di inlet. Modificando opportunamente il codice è possibile riadattarlo per simulare un monopolo acustico posto al centro del dominio. Per farlo, come nel caso precedente, si impone che un nodo del dominio abbia densità oscillante, pari a

$$\rho = \rho_{LB} + \rho' \sin\left(2\pi \frac{t}{T_{LB}}\right)$$

Dove $\rho_{LB} = 1$, $\rho' = 0.01$, $T_{LB} = 40$.

In questo codice l'impostazione dei parametri avviene in modo diverso da 'externalFlowAroundObstacle': è possibile impostare la velocità in unità reticolari (u_{LB}) , il Reynolds (Re), la risoluzione (N) e la dimensione del dominio in unità fisiche (l_x, l_y) . Da questi è possibile calcolare

$$dx = rac{L_{rif}}{N}$$
, $dt = rac{u_{LB}}{u_P} * dx$, $v_{LB} = rac{u_{LB} * \left(rac{L_{rif}}{dx}
ight)}{Re}$

Dove è implicito che valga $L_{rif} = 1 m$, $u_P = 1 \frac{m}{s}$, $c_{s_{LB}} = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Da questi parametri possiamo quindi ricavare:

$$v_P = v_{LB} * \frac{dx^2}{dt}, \qquad c_{s_P} = c_{s_{LB}} * \frac{dx}{dt}$$

Possiamo ottenere condizioni reali $\left(v_P = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}, c_{s_P} = 340 \frac{m}{s}\right)$ impostando:

$$u_{LB} = 1.7 \times 10^{-3}$$
, $Re = 66500$, $N = 100$

Il dominio è un quadrato di $l_x \times l_y = 5 \times 5 m$. I fattori di conversione sono:

$$dx = 0.01 m$$
, $dt = 1.7 \times 10^{-5} s$

Per l'oscillazione impostiamo:

$$\rho_{LB} = 1$$
, $\rho' = 0.01$, $T_{LB} = 40$

Che corrisponde ad un periodo reale di $T_P = 6.8 \times 10^{-4} s$, quindi ad una frequenza di $f_P = 1.47 \times 10^3 Hz = 1.47 kHz$.

Otteniamo il seguente andamento per la velocità:



Figura 46 - Velocità nell'istante di minimo



Figura 47 - Velocità nell'istante di massimo



Figura 48 - Visualizzazione della velocità nel dominio

Ed il seguente andamento per la densità:



Figura 49 - Densità nell'istante di massimo



Figura 50 - Densità nell'istante di minimo

Dall'andamento della densità possiamo ricavare la pressione. Abbiamo impostato $\rho'_{LB} = 0.01$, che corrisponde a $p'_{LB} = \rho'_{LB} * c^2_{s_{LB}}$. Possiamo quindi ricavare la pressione in unità fisiche:

$$p'_{P} = p'_{LB} * \left(\frac{dx}{dt}\right)^{2} = 1153.4 \ Pa = 1.15 \ kPa$$

8.4 CONCLUSIONI

Il metodo reticolare di Boltzmann è già ampiamente utilizzato in fluidodinamica ed in acustica per simulare sistemi complessi. Tuttavia, molti dei codici per la simulazione acustica LB sono commerciali, quindi privati. Nelle pagine precedenti si è mostrato come è possibile partire da un codice open-source, come PALABOS, e riadattarlo per la simulazione di alcuni semplici modelli acustici.

Abbiamo simulato delle onde piane in un dominio 3D, variando i parametri della simulazione in modo da avvicinarci al caso reale. In particolare, abbiamo dimostrato che è possibile simulare onde sonore piane anche con lo schema di collisione a singolo tempo di rilassamento (BGK), ma nel farlo si corre il rischio rendere la simulazione instabile. Se il tempo di rilassamento $\tau \rightarrow 0.5$, per avere qualche possibilità di avere simulazione stabile è necessario abbassare molto il valore della velocità reticolare.

Ottenute delle onde piane realistiche, abbiamo studiato il loro comportamento in due applicazioni acustiche: la diffrazione su una sfera ed un risuonatore di Helmholtz posto lungo un canale. In entrambi i casi si sono ottenuti risultati coerenti e soddisfacenti.

Abbiamo inoltre simulato una sorgente sonora monopolare. In questo caso si è adottato lo schema collisionale BGK per i casi $\tau = 1 \ e \ \tau = 0.6$, ma non è stato possibile usare lo stesso schema per il caso $\tau = 0.5$ perché la simulazione risulta instabile. Per quest ultimo caso è stato necessario utilizzare uno schema collisionale a multiplo tempo di rilassamento, riadattando un altro codice di PALABOS. La simulazione è coerente, sebbene presenti qualche accenno di instabilità anche in questo caso.

Infine, per future applicazioni acustiche (o aeroacustiche) più complesse del metodo LB sarà sicuramente necessario effettuare studi più approfonditi sull'operatore di collisione che è più opportuno adottare per evitare instabilità. Considerando la semplicità del metodo, il miglior modo per comprenderlo più capillarmente sarà scrivere un codice *ex novo* che non si basi su librerie esterne.

9 APPENDICE A

9.1 DA BOLTZMANN ALLE EQUAZIONI DI EULERO

Le equazioni di conservazione macroscopiche della fluidodinamica possono essere derivate direttamente dall'equazione di Boltzmann non discretizzata.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}}{\rho} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \Omega(f)$$

Questo è possibile considerando il momento dell'equazione, cioè moltiplicandola per una funzione della velocità ed integrando nello spazio delle velocità. Introduciamo la seguente notazione:

$$\Pi_{0} = \int f d^{3}c = \rho, \qquad \Pi_{\alpha} = \int c_{\alpha}f d^{3}c = \rho u_{\alpha}$$
$$\Pi_{\alpha\beta} = \int c_{\alpha}c_{\beta}f d^{3}c, \qquad \Pi_{\alpha\beta\gamma} = \int c_{\alpha}c_{\beta}c_{\gamma}f d^{3}c$$

I primi due momenti sono già noti come momento della massa e della quantità di moto. È possibile dimostrare che il momento del secondo ordine $\Pi_{\alpha\beta}$ è il tensore del flusso della quantità di moto.

9.1.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione più semplice che è possibile ricavare dall'equazione di Boltzmann è l'equazione di continuità, che descrive la conservazione della massa. Integrando direttamente l'equazione di Boltzmann nello spazio delle velocità, troviamo

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d^3 c + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \int c_{\beta} f d^3 c + \frac{F_{\beta}}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial c_{\beta}} d^3 c = \int \Omega(f) d^3 c$$

Dove il terzo termine del LHS è non nullo solo nel caso in cui sia presente una forza esterna. Gli integrali possono essere risolti considerando il legame fra la funzione di distribuzione e la massa e la quantità di moto macroscopiche:

$$\rho(\vec{x},t) = \int f(\vec{x},\vec{c},t)d^3c$$
$$\rho(x,t)u(x,t) = \int \vec{c}f(\vec{x},\vec{c},t)d^3c$$

Considerando le forze esterne nulle, troviamo quindi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_{\beta})}{\partial x_{\beta}} = 0$$
Che è l'equazione di conservazione della massa. Si nota che questa equazione dipende solamente dai momenti conservativi $\rho \ e \ \rho u_{\beta}$, ma non dipende dalla forma particolare della funzione di distribuzione f.

9.1.2 Equazione di conservazione della quantità di moto

Analogamente a quanto fatto prima, se consideriamo il momento primo dell'equazione di Boltzmann, cioè se moltiplichiamo per $c_{i\alpha}$ prima di integrare sullo spazio delle velocità, troviamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int c_{\alpha} f d^{3}c + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \int c_{\alpha} c_{\beta} f d^{3}c + \frac{F_{\beta}}{\rho} \int c_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial c_{\beta}} d^{3}c = \int c_{\alpha} \Omega(f) d^{3}c$$

Che, in assenza di forze esterne ed in condizioni di equilibrio locale, porta a:

$$\frac{\partial(\rho u_{\alpha})}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} = 0$$

Dove $\Pi_{\alpha\beta}$ è il tensore del flusso della quantità di moto. Quest'ultimo può essere scritto come:

$$\Pi_{\alpha\beta} = \rho u_{\alpha} u_{\beta} + \int v_{\alpha} v_{\beta} f d^3 c$$

Avendo considerato la seguente decomposizione della velocità della particella: $\vec{c} = \vec{u} + \vec{v}$. Poniamo quindi:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\int v_{\alpha}v_{\beta}fd^{3}c$$

Che è il tensore degli sforzi e dipende da f. L'equazione di conservazione di quantità di moto in assenza di forze esterne risulta:

$$\frac{\partial(\rho u_{\alpha})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_{\alpha} u_{\beta})}{\partial x_{\beta}} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}}$$

9.1.3 Equazione di conservazione dell'energia

Infine, è possibile ricavare l'equazione della conservazione dell'energia dalla traccia del momento secondo. In altre parole, si moltiplica l'equazione di Boltzmann per $c_{\alpha}c_{\alpha}$ prima di integrare nello spazio delle velocità:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int c_{\alpha} c_{\alpha} f d^{3} c + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \int c_{\alpha} c_{\alpha} c_{\beta} f d^{3} c + \frac{F_{\beta}}{\rho} \int c_{\alpha} c_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial c_{\beta}} d^{3} c = \int c_{\alpha} c_{\alpha} \Omega(f) d^{3} c$$

Considerando che:

$$\rho(\vec{x},t)E(\vec{x},t) = \frac{1}{2} \int |\vec{c}|^2 f(\vec{x},\vec{c},t) d^3 c$$

In equilibrio ed in assenza di forze esterne, risulta:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Pi_{\alpha \alpha \beta}}{\partial x_{\beta}} = 0$$

Possiamo espandere il secondo termine al LHS

$$\frac{1}{2}\frac{\partial\Pi_{\alpha\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} = \frac{\partial(\rho u_{\beta}E)}{\partial x_{\beta}} - \frac{\partial(u_{\alpha}\sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial q_{\beta}}{\partial x_{\beta}}$$

Dove:

$$q_{\beta} = \frac{1}{2} \int v_{\alpha} v_{\alpha} v_{\beta} f d^3 c$$

È il flusso di calore in direzione β . L'equazione di conservazione dell'energia si piò scrivere come:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_{\beta} E)}{\partial x_{\beta}} = \frac{\partial(u_{\alpha} \sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_{\beta}} - \frac{\partial q_{\beta}}{\partial x_{\beta}}$$

9.1.4 Conclusioni

L'aver trovato le leggi di conservazione macroscopiche a partire dall'equazione di Boltzmann non discretizzata dimostra che:

- La massa è un invariante esatto (poiché la sua legge di conservazione non dipende dalla funzione di distribuzione)
- Le equazioni della quantità di moto e dell'energia dipendono dal tensore degli sforzi e dal flusso di calore che dipendono da *f*, non sono pertanto invarianti esatti

Può essere dimostrato che imponendo che la funzione di distribuzione sia pari al suo valore all'equilibrio, $f = f^{eq}$, le equazioni di conservazione della quantità di moto e dell'energia trovate vanno a coincidere con le equazioni di Eulero per la quantità di moto e l'energia. Infatti, sia le equazioni di Eulero che quelle trovate in precedenza non presentano il tensore degli sforzi viscosi σ' e il flusso di calore nella forma in cui esso si presenta nelle Navier-Stokes.

Il fatto che si trovino le equazioni di Eulero ponendo $f = f^{eq}$ fa capire che i fenomeni della dissipazione viscosa e della diffusività termica sono legati al non equilibrio, cioè alla deviazione di f da f^{eq} . Per trovare anche le componenti di non equilibrio, e ricondurci quindi alle Navier-Stokes, è necessario fare un'analisi più approfondita dell'equazione di Boltzmann. Questa analisi prende il nome di analisi di Chapman-Enskog.

9.2 DALLA LBE A NAVIER-STOKES

9.2.1 L'analisi di Chapman-Enskog

Attraverso l'analisi di Capman-Enskog possiamo partire dalla equazione reticolare di Boltzmann (LBE – Lattice Boltzmann Equation) discretizzata ed arrivare alle Navier-Stokes. Come abbiamo visto prima, molti dei termini che compiono nelle NS sono termini legati al non equilibrio, che quindi scomparirebbero imponendo $f_i = f_i^{eq}$. Per tenere conto di questi termini, cominciamo facendo un'espansione della funzione di distribuzione attorno all'equilibrio con come parametro di espansione il numero di Knudsen:

$$Kn = \frac{l_{\mu}}{l_{M}} = \epsilon$$
$$f_{i} = f_{i}^{eq} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} + \cdots$$

Fermandosi all'ordine zero ($f_i = f_i^{eq}$) troviamo le equazioni di Eulero. I termini di ordine superiore possono essere visti come termini correttivi, così come il tensore degli sforzi viscosi presente nelle NS può essere visto come una correzione delle equazioni di Eulero. Durante la derivazione considereremo per semplicità il modello BGK dell'operatore di collisione.

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f^{eq}(\vec{x}, t) \right)$$

Come tutti gli altri operatori di collisione, l'operatore BGK deve rispettare la conservazione della massa e della quantità di moto:

$$\sum f_i^{neq} = 0, \qquad \sum \vec{c}_i f_i^{neq} = 0$$

Che possono essere riscritte per l'espansione di f_i :

$$\sum f_i^{(n)} = 0$$
, $\sum \vec{c}_i f_i^{(n)} = 0$, $n \ge 1$

Queste prendono il nome di condizioni di solvibilità.

9.2.2 Espansione di Taylor, perturbazione e separazione

Procediamo facendo un'espansione di Taylor della LBE discretizzata:

$$\Delta t(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i + \frac{\Delta t^2}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 f_i + O(\Delta t^3) = -\frac{\Delta t}{\tau}f_i^{neq}$$

Nel seguito, trascureremo tutti i termini con derivate di ordine tre o maggiore. La spiegazione, in breve, è che tali termini risultano molto piccoli e non hanno influenza sul comportamento macroscopico. Questo è vero se si assume che i cambiamenti di f_i siano lenti. Possiamo inoltre liberarci delle derivate di secondo ordine sottraendo il termine che si ottiene applicando $\left(\frac{\Delta t}{2}\right)(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_{\alpha})$ all'equazione stessa. L'equazione risultante è:

$$\Delta t \left(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha\right)f_i = -\frac{\Delta t}{\tau}f^{neq} + \Delta t \left(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha\right)\frac{\Delta t}{2\tau}f_i^{neq}$$

A questo punto è necessario fare un'espansione di f_i intorno al valore di equilibrio sia nel tempo che nello spazio. Le derivate temporale e spaziale diventano, rispettivamente:

$$\Delta t \partial_t f_i = \Delta t \left(\epsilon \partial_t^{(1)} f_i + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} f_i + \cdots \right), \qquad \Delta t c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Delta t \left(\epsilon c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} \right) f_i$$

Queste derivate prendono il nome di espansioni multiscala, sono usate anche nella teoria delle perturbazioni generale per espansioni che altrimenti avrebbero termini di ordine troppo diverso (che quindi cancellerebbero gli altri). Ora applichiamo le due derivate scritte sopra e l'espansione scritta inizialmente ($f_i = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \cdots$) alla espansione di Taylor della LBE. Il risultato, separando i termini con diverso ordine di numero di Knudsen, è il seguente:

$$O(\epsilon): \left(\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha}\partial_\alpha^{(1)}\right) f_i^{eq} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}$$
$$O(\epsilon^2): \ \partial_t^{(2)} f_i^{eq} + \left(\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha}\partial_\alpha^{(1)}\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}$$

9.2.3 Momenti e ricombinazione

Manipolando la prima delle due equazioni trovate sopra, è possibile ottenere le equazioni per i momenti di ordine $O(\epsilon)$:

$$\partial_t^{(1)} \rho + \partial_{\gamma}^{(1)} (\rho u_{\gamma}) = 0$$
$$\partial_t^{(1)} (\rho u_{\alpha}) + \partial_{\beta}^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{eq} = 0$$
$$\partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{eq} + \partial_{\gamma}^{(1)} \Pi_{\alpha\beta\gamma}^{eq} = -\frac{1}{\tau} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$$

Dove:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{eq} = \sum c_{i\alpha}c_{i\beta}f_i^{eq} = \rho u_{\alpha}u_{\beta} + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}$$
$$\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{eq} = \sum c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}f_i^{eq} = \rho c_s^2 (u_{\alpha}\delta_{\beta\gamma} + u_{\beta}\delta_{\alpha\gamma} + u_{\gamma}\delta_{\alpha\beta})$$
$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum c_{i\alpha}c_{i\beta}f_i^{(1)}$$

Possiamo inoltre ottenere le equazioni dei momenti di ordine $O(\epsilon^2)$:

$$\partial_t^{(2)} \rho = 0$$

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0$$

Ricombinando opportunamente queste equazioni è possibile ottenere le Navier-Stokes come le conosciamo. In particolare, è possibile dimostrare che il momento $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ può essere riscritto come:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\rho c_s^2 \tau \left(\partial_{\beta}^{(1)} u_{\alpha} + \partial_{\alpha}^{(1)} u_{\beta} \right) + \tau \partial_{\gamma}^{(1)} \left(\rho u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} \right)$$

Se non ci fosse il secondo termine al RHA corrisponderebbe esattamente al tensore degli sforzi viscosi delle Navier-Stokes. Si può dimostrare che è possibile trascurare il secondo

termine se $u^2 \ll c_s^2$, che è equivalente alla condizione $Ma^2 \ll 1$. Per questo motivo, il metodo LB è valido solo per fenomeni debolmente compressibili e non per fenomeni fortemente compressibili (flussi trans e supersonici). Fra i fenomeni debolmente compressibili di interesse troviamo la propagazione del suono. Le onde sonore causano una fluttuazione della pressione, della densità e della velocità del fluido, tuttavia, tale fluttuazione è tanto debole da implicare $M = \frac{u}{c_s} \ll 1$ per tutti i suoni nel campo dell'udibile.

È quindi possibile ricondurre l'equazione di Boltzmann discretizzata con operatore di collisione BGK alle Navier Stokes classiche:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) = 0$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta [\rho v (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)]$$

Questo è vero se consideriamo:

$$p = \rho c_s^2$$
, $\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right)$, $\nu_B = \frac{2}{3}\nu$

Dove ν è la viscosità cinematica e ν_B è la bulk viscosity.

Da questo risultato emerge che deve vale $\frac{\tau}{\Delta t} \ge \frac{1}{2}$ affinchè si abbia stabilità, questo perché $\frac{\tau}{\Delta t} < \frac{1}{2}$ porterebbe all'avere viscosità negativa, che sarebbe chiaramente una situazione non fisica.

10 BIBLIOGRAFIA

[1] "The Lattice Boltzmann Equation for Complex States of Flowing Matter", Sauro Succi, Oxford University Press, USA (2018)

[2] "Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes", A. A. Mohamad, Springer, London (2011)

[3] "The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice", Timm Krüger, Halim Kusumaatmaja, Alexandr Kuzmin, Orest Shardt, Goncalo Silva, Erlend Magnus Viggen, Springer (2017)

[4] "The Lattice Boltzmann Method with Applications in Acoustics", Erlend Magnus Viggen, NTNU Department of Physics (2009)

[5] "Viscously damped acoustic waves with the lattice Boltzmann method", Erlend Magnus Viggen, Dept. of Electronics and Telecomm., Norwegian University of Science and Technology (2011)

[6] "Sound generation by flow over multiple shallow cavities", Ayman Shaaban, Mcmaster University (2018)

[7] "PALABOS: Parallel Lattice Boltzmann Solver", Jonas Latt, Orestis Malaspinas, Dimitrios Kontaxakis, Andrea Parmigiani, Daniel Lagrava, Federico Brogi, Mohamed Ben Belgacem, Yann Thorimbert, Sébastien Leclaire, Sha Li, Francesco Marson, Jonathan Lemus, Christos Kotsalos, Raphaël Conradin, Christophe Coreixas, Rémy Petkantchin, Franck Raynaud, Joël Beny, Bastien Chopard; Department of Computer Science, University of Geneva, FlowKit-Numeca Group Ltd, Switzerland, Department of Mechanical Engineering, Polytechnique Montréal

[8] "Acoustic multipole sources for the lattice Boltzmann method", Erlend Magnus Viggen, Department of Electronics and Telecommunications, NTNU (2013)

[9] "Aeroacoustic investigation of a flow pipe with a small cavity using the lattice Boltzmann method", Daniel Mazzoni (Laboratoire de Mechanique et d'Acoustique, Marseille, France), Ulf Kristiansen, Anders Bakke Krogvig (Acoustics Research Center, Department of Electronics and Telecommunications, Norwegian University of Science and Technology)

[10] "Noise source identification with the lattice Boltzmann method", Etienne Vergnault, Orestis Malaspinas, Pierre Sagaut, Institut Jean Le Rond d'Alembert, Paris, France (2013)

[11] "An Attempt to Calculate Acoustic Directivity Using LBM", R. C. K. LEUNG, R. M. C. SO, E. W. S. KAM, X. M. LI, The Hong Kong Polytechnic University, Hong Kong (2006)

[12] "Review of Lattice Boltzmann Method Applied to Computational Aeroacoustics", Weidong SHAO (Institute of Turbomachinery, Xi'an Jiaotong University), Jun LI (Collaborative Innovation Centre of Advanced Aero-Engine Beijing, China)

[13] "Simulation of Sound Waves Using the Lattice Boltzmann Method for Fluid Flow: Benchmark Cases for Outdoor Sound Propagation", Erik M. Salomons, Walter J. A. Lohman, Han Zhou, TNO Netherlands Organization of Applied Scientific Research (2015)

[14] "Numerical simulation of free surface flow in channels with variable geometry via PALABOS", ChetibiMeriem, Mezali Farouk, Saadia Benmamar, Taleb Bahmed Ali, Ali Berreksi, Laboratoire de Recherche des Sciences de l'Eau/école national polytechnique, Alger (2013)

[15] Appunti del corso di Aeroacustica, Renzo Arina, Dipartimento di Ingegneria Meccanica ed Aerospaziale, Politecnico di Torino

[16] "Linear lattice Boltzmann schemes for acoustic: Parameter choices and isotropy properties", Loïc Gouarin, Benjamin Graille, Adeline Augier (Université Paris-Sud, Laboratoire de Mathématiques, Orsay, France), François Dubois (Conservatoire National des Arts et Métiers, Department of Mathematics, Paris, France), (2012)

[17] "Acoustic equations of state for simple lattice Boltzmann velocity sets", Erlend Magnus Viggen, Acoustics Research Centre, Department of Electronics and telecommunications, Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Trondheim

[18] "Palabos User Guide, Release 1.0 r1", Jonas Latt, Orestis Malaspinas, Dimitrios Kontaxakis, Andrea Parmigiani, Daniel Lagrava, Yann Thorimbert, Christos Kotsalos, Francesco Marson, Joel Beny, and Bastien Chopard; University of Geneva (2019)

[19] "On the inclusion of mass source terms in a single-relaxation-time lattice Boltzmann method", Olav Aursjø, Espen Jettestuen, Jan Ludvig Vinningland (International Research Institute of Stavanger (IRIS), Stavanger, Norway), and Aksel Hiorth (The National IOR Centre of Norway, University of Stavanger, Norway) (2018)

[20] "Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions", Pierre Lallemand (Laboratoire ASCI, Universite' Paris-Sud, Orsay Cedex, France), and Li-Shi Luo (ICASE, NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia, USA) (2003)

[21] "A new scheme for source term in LBGK model for convection–diffusion equation", Baochang Shi, Rui Du (State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, China), Bin Deng, Xingwang Chen (Department of Mathematics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, China)

[22] "Simultaneous incorporation of mass and force terms in the multi-relaxation-time framework for lattice Boltzmann schemes", Z. L. GUO (National Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, China), A. KUZMIN AND A. A. MOHAMAD (Department of Mechanical and Manufacturing Engineering, University of Calgary, University Drive NW, Calgary, Canada) (2011)