Lattice Boltzmann methods

Ettore Canonici

In fluidodinamica computazionale, i metodi reticolari di Boltzmann (LBM) sono un insieme di tecniche usate per la simulazione dei fluidi. Invece di risolvere le equazioni di Navier-Stokes, l'equazione di Boltzmann viene risolta per simulare il flusso di un fluido newtoniano mediante modelli di collisione. Simulando l'interazione di un limitato numero di particelle, il comportamento del flusso viscoso emerge automaticamente dal movimento intrinseco delle particelle stesse e dai processi di collisione che ne conseguono. Al contrario dei tradizionali metodi, che risolvono numericamente le equazioni di conservazione di proprietà macroscopiche (come la massa, la quantità di moto e l'energia), nei modelli reticolari di Boltzmann il fluido è costituito da particelle fittizie, e queste particelle operano consecutivamente processi di propagazione e collisione, spostandosi su una griglia reticolare discreta. A causa di questa natura particellare e dei processi dinamici locali, gli LBM hanno diversi vantaggi in più rispetto ai convenzionali metodi.
Una diversa interpretazione dell'equazione reticolare di Boltzmann è l'equazione di Boltzmann con velocità discreta. I metodi numerici per la soluzione del sistema di equazioni differenziali parziali genera in questo caso una mappa discreta.

Dettagli

L'equazione di Boltzmann è un'equazione che coinvolge una funzione di distribuzione di probabilità per una singola particella $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \Omega \tag{1}$$

dove $\mathbf{F}$ è una forzante esterna e Ω è un integrale di collisione.
I metodi LBM si basano sulla discretizzazione della (1) usando come spazio un reticolo e come spazio delle velocità un insieme discreto di velocità.
Discretizzando si ottiene:

$$f_{\mathrm{i}}(x + v_{\mathrm{i}}, t + 1) - f_{\mathrm{i}}(x, t) + F_{\mathrm{i}} = \Omega. \tag{2}$$

Spesso una buona approssimazione è usare come operatore di collisione un operatore di collisione BGK:

$$\Omega = \frac{1}{\tau}(f_{\mathrm{i}}^0 - f_{\mathrm{i}}), \tag{3}$$

con f_{i}^0 distribuzione di equilibrio locale.
E' interessante notare che i momenti di f_{i} forniscono le quantità conservate localmente:

- la densità è $\rho = \sum_i f_{\mathrm{i}}$;
- il momento è $\rho u = \sum_i f_{\mathrm{i}} v_{\mathrm{i}}$.

In generale queste sono le due quantità locali conservate, tuttavia in particolari versioni di LBM ci possono essere altre quantità conservate, ad esempio l'energia $\rho\theta + \rho uu = \sum_i f_{\mathrm{i}} v_{\mathrm{i}} v_{\mathrm{i}}$.
Inoltre si deve tenere presente che l'operatore Ω deve rispettare le leggi di conservazione, pertanto f_{i}^0 deve avere gli stessi momenti conservati di f_{i}.

Classificazione

I modelli lattice Boltzmann possono essere implementati su diversi tipi di reticoli, sia cubici che triangolari, con o senza particelle rimanenti nella funzione di distribuzione discreta. Un modo tipico per classificare i differenti metodi che utilizzano un reticolo è lo schema $DnQm$. Dn significa n dimensioni mentre Qm significa m velocità.

Unità di conversione reticolari

L'unità base per la spaziatura del reticolo Δx viene scelta in modo tale che se il dominio rappresentato da L cm ha N unità reticolari, allora l'unità di spazio viene semplicemente definita come $\Delta x = L/N$; inoltre le velocità sono tipicamente date in unità di velocità del suono C_{S}.
Invece l'unità di tempo discreta può essere definita come $\Delta t = \frac{\Delta x}{C_{\mathrm{S}}}$. In realtà nei casi particolari di flussi su piccola scala (come quelli presenti nei materiali porosi), usare la velocità del suono può portare ad avere Δt troppo piccoli. È perciò prassi comune aumentare il numero di Mach del reticolo a qualcosa di più grande rispetto al numero di Mach reale, compensando allo stesso modo la viscosità per preservare il numero di Reynolds.

Vantaggi

LBM è stato ideato per essere lanciato su clusters e architetture parallele, questa caratteristica ha permesso di applicare con successo questo tipo di algoritmi a problemi che fino a quel momento non potevano essere risolti numericamente (o non potevano essere risolti numericamente con una precisione soddisfacente).
Inoltre questi algoritmi funzionano bene anche in presenza di geometrie complesse e di mezzi porosi.

Svantaggi

Al momento gli algoritmi LBM non funzionano bene quando si ha a che fare con fluidi ad elevati numeri di Mach.