

# LIMITI DELL'EQUAZIONE DI BOLTZMANN LINEARIZZATA PER IL FLUSSO ALLA COUETTE

JON MATTEO CHURCH [709752]

## INDICE

1. Introduzione	1
2. Soluzione analitica	1
2.1. L'equazione di Boltzmann	1
2.2. Condizioni al contorno	3
2.3. Metodo variazionale	4
3. Simulazione diretta col metodo Monte Carlo	7
3.1. Distribuzioni iniziali all'equilibrio	7
3.2. Collisioni	8
3.3. Campionamento delle quantità macroscopiche	11
4. Confronto	12
5. Codice	15
Riferimenti bibliografici	28

## 1. INTRODUZIONE

Le proprietà macroscopiche (densità, velocità, temperatura, ecc.) di un gas che si muove fra due pareti piane parallele dipendono dalle sue proprietà microscopiche per via delle forze intermolecolari e delle interazioni gas-superficie alla pareti.

L'approccio più semplice per descrivere le forze intermolecolari è il modello BGK per cui si sostituisce al processo collisionale una distribuzione statistica secondo la quale la velocità delle molecole dopo l'urto è indipendente dalle velocità delle molecole incidenti. In questa approssimazione la velocità delle molecole riemesse è approssimata da una maxwelliana locale.

Per semplificare l'interazione gas-superficie assumiamo che le particelle incidenti la parete vengano riemesse per diffusione. Nella riemissione per diffusione si assume che le particelle riemesse dalla parete siano caratterizzate da una distribuzione maxwelliana che descriva le proprietà della parete (cioè velocità e temperatura).

Queste due approssimazioni, ovvero i modelli BGK e di rierissione per diffusione, ci permettono di riscrivere l'equazione di Boltzmann in una forma molto semplificata. Se, inoltre, supponiamo che il gas sia soggetto solamente a piccole perturbazioni, l'equazione di Boltzmann può essere linearizzata e quindi ne possiamo fornire una soluzione analitica approssimata.

Per verificare i limiti delle ipotesi introdotte per la risoluzione analitica dell'equazione di Boltzmann abbiamo eseguito alcune simulazioni dirette col metodo Monte Carlo.

## 2. SOLUZIONE ANALITICA

**2.1. L'equazione di Boltzmann.** Consideriamo un gas confinato tra due pareti piane parallele al piano  $x = 0$ ; sia la prima in corrispondenza del piano  $x = \frac{d}{2}$  ed in moto con velocità costante  $\frac{w}{2}$  lungo la direzione dell'asse  $z$  e sia la seconda in corrispondenza del piano  $x = -\frac{d}{2}$  ed in moto con velocità costante  $-\frac{w}{2}$  lungo la stessa direzione. Supponiamo inoltre che la temperatura,  $T$ , sia la stessa per entrambe le pareti.

Supponiamo inoltre che sia  $w \ll 1$ ; in tal modo possiamo linearizzare l'equazione di Boltzmann. A tal fine introduciamo il seguente sviluppo per la funzione di distribuzione del gas

$$f = f^{(0)}[1 + h(x, \mathbf{c})]$$

intorno alla maxwelliana

$$f^{(0)} = \rho^{(0)} (2\pi RT)^{-\frac{3}{2}} e^{-c^2}$$

dove  $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)^T$  è la velocità molecolare scalata per il fattore  $\sqrt{2RT}$  e  $\rho^{(0)}$  rappresenta la densità del gas in corrispondenza del piano  $x = 0$ .

Introducendo tale sviluppo nell'equazione di Boltzmann e trascurando i termini di ordine superiore al primo otteniamo la seguente equazione integro-differenziale (nelle variabili non scalate)

$$(1) \quad c_x \frac{\partial h}{\partial x} = Lh$$

dove  $L$  è l'operatore d'urto linearizzato. Se adottiamo il modello BGK per l'operatore d'urto possiamo scrivere

$$(2) \quad h(x, \mathbf{c}) = wc_z Y(x, c_x)$$

dove  $Y(x, c_x)$  soddisfa la seguente equazione integro-differenziale

$$(3) \quad c_x \frac{\partial Y}{\partial x} + Y = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{c}_x^2} Y(x, \tilde{c}_x) d\tilde{c}_x$$

a patto di scalare le lunghezze per il fattore  $\theta\sqrt{2RT}$ , essendo  $\theta$  il tempo medio che intercorre fra due collisioni.

Il modello BGK ci permette infatti di scrivere l'operatore d'urto scalato per il fattore  $\sqrt{2RT}$  linearizzato nella forma

$$Lh = \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{\theta} \left[ \int e^{-\tilde{c}^2} h(x, \tilde{\mathbf{c}}) d\tilde{\mathbf{c}} + 2\mathbf{c} \cdot \int \tilde{\mathbf{c}} e^{-\tilde{c}^2} h(x, \tilde{\mathbf{c}}) d\tilde{\mathbf{c}} + \frac{2}{3} \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) \int \left( \tilde{c}^2 - \frac{3}{2} \right) e^{-\tilde{c}^2} h(x, \tilde{\mathbf{c}}) d\tilde{\mathbf{c}} \right] - \frac{h(x, \mathbf{c})}{\theta}$$

da cui assumendo che  $h$  sia della forma (2) otteniamo

$$\begin{aligned} Lh = \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{\theta} & \left\{ w \iiint \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \right. \\ & + 2wc_x \iiint \tilde{c}_x \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \\ & + 2wc_y \iiint \tilde{c}_y \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \\ & + 2wc_z \iiint \tilde{c}_z^2 Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \\ & \left. + \frac{2}{3} w \left( c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - \frac{3}{2} \right) \left[ \iiint \tilde{c}_x \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \right. \right. \end{aligned}$$

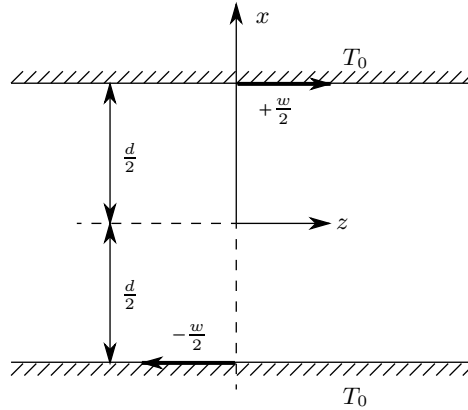


FIGURA 1. Schema del problema del flusso alla Couette

$$\begin{aligned}
& + \iiint \tilde{c}_y^2 \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \\
& + \iiint \tilde{c}_z^3 Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z + \\
& - \frac{3}{2} \iiint \tilde{c}_z Y(x, \tilde{c}_x) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z \Big] + \\
& - \frac{wc_z}{\theta} Y(x, c_x) \\
& = \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{\theta} \left\{ w \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \right. \\
& + 2wc_x \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_x Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \\
& + 2wc_y \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_y e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \\
& + 2wc_z \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z^2 e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \\
& + \frac{2}{3} w (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - \frac{3}{2}) \left[ \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_x^2 Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \cdot \right. \\
& \cdot \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \cdot \\
& \cdot \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_y^2 e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] + \\
& + \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \cdot \\
& \cdot \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z^3 e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] - \frac{3}{2} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \cdot \\
& \cdot \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] \Big] - \frac{wc_z}{\theta} Y(x, c_x) \\
& = \frac{wc_z}{\theta} \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x - Y(x, c_x) \right]
\end{aligned}$$

e quindi, introducendo le variabili scalate, la (1) diviene

$$\sqrt{2RT} c_x \frac{1}{\theta \sqrt{2RT}} \frac{\partial}{\partial x} [wc_z Y(x, c_x)] = \frac{wc_z}{\theta} \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x - Y(x, c_x) \right]$$

ovvero

$$c_x \frac{\partial Y(x, c_x)}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x - Y(x, c_x)$$

da cui la (3).

**2.2. Condizioni al contorno.** Le condizioni al contorno per il problema del flusso alla Couette si scrivono

$$(4) \quad Y\left(-\frac{\delta}{2} \operatorname{sgn} c_x, c_x\right) = -\operatorname{sgn} c_x$$

dove  $\delta = \frac{1}{\sqrt{2RT}} \frac{d}{\theta}$ . Infatti, limitandoci al caso di diffusione completa possiamo riscrivere le condizioni al contorno per un problema generico

$$h_B^+ = h_0 + K h_B^-$$

Osserviamo che in questo caso si ha  $h_0 = 2c_z \left| \frac{w}{2} \right|$ , a patto di scalare la velocità delle pareti per il fattore  $\sqrt{2RT}$ . Inoltre si ha che

$$\begin{aligned}
Kh_B^- &= \int_{\tilde{c}_x < 0} |\tilde{\mathbf{c}} \cdot \mathbf{n}| f_w(\tilde{\mathbf{c}}) h_B^-(\tilde{\mathbf{c}}) d\tilde{\mathbf{c}} \\
&= \rho \pi^{-\frac{3}{2}} w \iiint_{\tilde{c}_x < 0} \tilde{c}_x \tilde{c}_z Y\left(\pm \frac{d}{2}, \tilde{c}_x\right) e^{-(\tilde{c}_x^2 + \tilde{c}_y^2 + \tilde{c}_z^2)} d\tilde{c}_x d\tilde{c}_y d\tilde{c}_z \\
&= \rho \pi^{-\frac{3}{2}} w \left[ \int_{-\infty}^0 \tilde{c}_x Y\left(\pm \frac{d}{2}, \tilde{c}_x\right) e^{-\tilde{c}_x^2} d\tilde{c}_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tilde{c}_y^2} d\tilde{c}_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}_z e^{-\tilde{c}_z^2} d\tilde{c}_z \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

quindi la condizione al bordo si riscrive

$$h(\pm \frac{d}{2}, \mathbf{c}) = c_z |w|$$

da cui

$$wc_z Y(\pm \frac{d}{2}, \mathbf{c}) = c_z |w|$$

e quindi la (4).

**2.3. Metodo variazionale.** Consideriamo il funzionale<sup>1</sup>

$$(5) \quad J(\tilde{h}) = \langle \tilde{h} | P(D - L) \tilde{h} \rangle + \langle \tilde{h}^+ - K \tilde{h}^- - 2h_0 | P \tilde{h}^- \rangle_B$$

e funzioni test della forma

$$(6) \quad \tilde{h} = 2c_z(\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x)$$

dove  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  sono costanti.

Valutiamo i termini che compaiono in (5)

$$D\tilde{h} = c_x \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x} = 2\alpha c_x c_z$$

$$\begin{aligned} L\tilde{h} &= \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{\theta} \left\{ \int 2\tilde{c}_z(\alpha x + \beta \tilde{c}_x + \gamma \operatorname{sgn} \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}^2} d\tilde{\mathbf{c}} + \right. \\ &\quad \left. + 2\mathbf{c} \cdot \int 2\tilde{\mathbf{c}} \tilde{c}_z(\alpha x + \beta \tilde{c}_x + \gamma \operatorname{sgn} \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}^2} d\tilde{\mathbf{c}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{3} \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) \int 2 \left( \tilde{c}^2 - \frac{3}{2} \right) \tilde{c}_z(\alpha x + \beta \tilde{c}_x + \gamma \operatorname{sgn} \tilde{c}_x) e^{-\tilde{c}^2} d\tilde{\mathbf{c}} \right\} + \\ &\quad - \frac{2c_z}{\theta} (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \\ &= \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{\theta} \left\{ 0 + 2c_z \pi^{\frac{3}{2}} \alpha x + 0 \right\} - \frac{2c_z}{\theta} (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \\ &= \frac{2}{\theta} \alpha x c_z - \frac{2}{\theta} c_z (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(D - L)\tilde{h} &= P(D - L)\tilde{h} \\ &= P \left[ 2\alpha c_x c_z - \frac{2}{\theta} \alpha x c_z + \frac{2}{\theta} c_z (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \right] \\ &= 2\alpha c_x c_z + \frac{2}{\theta} \alpha x c_z - \frac{2}{\theta} c_z (\alpha x - \beta c_x - \gamma \operatorname{sgn} c_x) \\ &= 2 \left( \alpha + \frac{\beta}{\theta} \right) c_x c_z + 2 \frac{\gamma}{\theta} c_z \operatorname{sgn} c_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{h} | P(D - L) \tilde{h} \rangle &= C \pi^{-\frac{3}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \int \tilde{h} P(D - L) \tilde{h} e^{-c^2} d\mathbf{c} \\ &= C \pi^{-\frac{3}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \iiint 4(\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \left( \alpha + \frac{\beta}{\theta} \right) c_x c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z dx \\ &\quad + C \pi^{-\frac{3}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \iiint 4(\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) \frac{2}{\theta} c_z^2 \operatorname{sgn} c_x e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z dx \\ &= 4C \alpha \left( \alpha + \frac{\beta}{\theta} \right) \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} x dx \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_x e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] + \\ &\quad + 4C d \beta \left( \alpha + \frac{\beta}{\theta} \right) \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_x^2 e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] + \\ &\quad + 4C d \gamma \left( \alpha + \frac{\beta}{\theta} \right) \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} |c_x| e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] + \\ &\quad + 4C \frac{\alpha \gamma}{\theta} \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} x dx \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sgn} c_x e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] + \end{aligned}$$

<sup>1</sup>utilizziamo le seguenti notazioni

$$\langle g|h \rangle := \int g h f^{(0)} d\mathbf{c} \quad \langle g|h \rangle_B := \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} g h f^{(0)} |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| d\mathbf{c} \quad \langle g|h \rangle := \int_{\Omega} \langle g|h \rangle d\mathbf{x} \quad \langle g|h \rangle_B := \int_{\partial\Omega} \langle g|h \rangle_B d\gamma$$

$$\begin{aligned}
& + 4Cd \frac{\beta\gamma}{\theta} \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} |c_x| e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] + \\
& + 4Cd \frac{\gamma^2}{\theta} \pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_x^2} dc_x \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_y^2} dc_y \right] \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \right] \\
& = Cd\beta(\alpha + \frac{\beta}{\theta}) + 2Cd\gamma(\alpha + \frac{\beta}{\theta})\pi^{-\frac{1}{2}} + 2Cd \frac{\beta\gamma}{\theta} \pi^{-\frac{1}{2}} + 2Cd \frac{\gamma^2}{\theta} \\
& = C \frac{d}{\theta} \left[ \alpha\beta\theta + \beta^2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\alpha\gamma\theta + \frac{4}{\sqrt{\pi}}\beta\gamma + 2\gamma^2 \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{h}^+ - K\tilde{h}^- - 2h_0 | P\tilde{h}^- \rangle_B & = C\pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} (\tilde{h}^+ - 2h_0)(P\tilde{h}^-) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| e^{-c^2} d\mathbf{c} \right]_{x=+\frac{d}{2}} + \\
& + C\pi^{-\frac{3}{2}} \left[ \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} (\tilde{h}^+ - 2h_0)(P\tilde{h}^-) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| e^{-c^2} d\mathbf{c} \right]_{x=-\frac{d}{2}} \\
& = C\pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} [2c_z(\alpha \frac{d}{2} + \beta c_x - \gamma) - 2c_z w] \\
& \quad [-2c_z(\alpha \frac{d}{2} - \beta c_x + \gamma)] (-c_x) e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& + C\pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x > 0} [2c_z(-\alpha \frac{d}{2} + \beta c_x + \gamma) + 2c_z w] \\
& \quad [-2c_z(-\alpha \frac{d}{2} - \beta c_x - \gamma)] c_x e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
& = 4C(\alpha \frac{d}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{d}{2} + \gamma) \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& + 4C\beta(2\gamma + w) \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x^2 c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& - 4C\beta^2 \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x^3 c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& - 4C(\alpha \frac{d}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{d}{2} + \gamma) \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& + 4C\beta(2\gamma + w) \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x^2 c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z + \\
& + 4C\beta^2 \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint_{c_x < 0} c_x^3 c_z^2 e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
& = -4C(\alpha \frac{d}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{d}{2} + \gamma) \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi}{4} + 4C\beta(2\gamma + w) \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{8} + \\
& + 4C\beta^2 \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi}{4} - 4C(\alpha \frac{d}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{d}{2} + \gamma) \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi}{4} + \\
& + 4C\beta(2\gamma + w) \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{8} + 4C\beta^2 \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi}{4} \\
& = C \left[ -\frac{2}{\sqrt{\pi}}(\alpha \frac{d}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{d}{2} + \gamma) + \beta(2\gamma + w) + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^2 \right]
\end{aligned}$$

Otteniamo quindi che il funzionale (5) valutato per funzioni test della forma (6) diviene introducendo l'adimensionalizzazione  $\delta = \frac{d}{\theta}$

$$\begin{aligned}
J(\tilde{h}) & = C\delta \left[ \alpha\beta + \beta^2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\alpha\gamma + \frac{4}{\sqrt{\pi}}\beta\gamma + 2\gamma^2 \right] + \\
& + C \left[ -\frac{2}{\sqrt{\pi}}(\alpha \frac{\delta}{2} - \gamma - w)(\alpha \frac{\delta}{2} + \gamma) + \beta(2\gamma + w) + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^2 \right] \\
& = C \left[ -\frac{\delta^2}{2\sqrt{\pi}}\alpha^2 + (\frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta)\beta^2 + 2(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta)\gamma^2 + \delta\alpha\beta + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}}\alpha\gamma + 2(1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}})\beta\gamma + \frac{w\delta}{\sqrt{\pi}}\alpha + w\beta + \frac{2w}{\sqrt{\pi}}\gamma \right]
\end{aligned}$$

Possiamo quindi calcolare la soluzione al problema del flusso alla Couette minimizzando il funzionale (5) rispetto ai parametri  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  in (6).

$$\begin{cases} \frac{\partial J(\tilde{h})}{\partial \alpha} = 0 \\ \frac{\partial J(\tilde{h})}{\partial \beta} = 0 \\ \frac{\partial J(\tilde{h})}{\partial \gamma} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} -\frac{\delta^2}{\sqrt{\pi}}\alpha + \delta\beta + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}}\gamma + \frac{w\delta}{\sqrt{\pi}} = 0 \\ \delta\alpha + 2(\frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta)\beta + 2(1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}})\gamma + w = 0 \\ +\frac{2\delta}{\sqrt{\pi}}\alpha + 2(1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}})\beta + 4(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta)\gamma + \frac{2w}{\sqrt{\pi}} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow \begin{cases} \delta\alpha - \sqrt{\pi}\beta - 2\gamma = w \\ \frac{\delta}{2}\alpha + (\frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta)\beta + (1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}})\gamma = -\frac{w}{2} \\ +\frac{\delta}{\sqrt{\pi}}\alpha + (1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}})\beta + 2(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta)\gamma = -\frac{w}{\sqrt{\pi}} \end{cases} \\
&\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \delta & -\sqrt{\pi} & -2 \\ \frac{\delta}{2} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \\ \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} & 2(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ -\frac{w}{2} \\ -\frac{w}{\sqrt{\pi}} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Da cui possiamo calcolare i parametri che minimizzano il funzionale

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \delta & -\sqrt{\pi} & -2 \\ \frac{\delta}{2} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \\ \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} & 2(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} w \\ -\frac{w}{2} \\ -\frac{w}{\sqrt{\pi}} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\pi}{\delta\Delta} \begin{pmatrix} \frac{1}{\pi}(-4\delta^2 + 2\pi\delta^2 + 2\sqrt{\pi}\delta + 4 - \pi) & 2\sqrt{\pi}\delta - \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} & -\sqrt{\pi} + \frac{4}{\sqrt{\pi}} \\ -\delta^2 + \frac{2\delta^2}{\pi} & 2\delta^2 + \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} & -2\delta - \frac{2\delta^2}{\sqrt{\pi}} \\ \frac{\delta}{2} - \frac{2\delta}{\pi} & -2\delta - \frac{2\delta^2}{\sqrt{\pi}} & \delta^2 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} + \frac{\sqrt{\pi}\delta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ -\frac{w}{2} \\ -\frac{w}{\sqrt{\pi}} \end{pmatrix} \\
&= w \frac{\pi}{\delta\Delta} \begin{pmatrix} 2\delta^2 - 4\frac{\delta^2}{\pi} + 4\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} - \sqrt{\pi}\delta \\ \frac{4\delta^2}{\pi} - 2\delta^2 \\ +\delta - \frac{4\delta}{\pi} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{2w\delta}{\Delta}(\pi - 2) + \frac{w\sqrt{\pi}}{\Delta}(4 - \pi) \\ \frac{2w\delta}{\Delta}(2 - \pi) \\ \frac{w}{\Delta}(\pi - 4) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

essendo

$$\begin{vmatrix} \delta & -\sqrt{\pi} & -2 \\ \frac{\delta}{2} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \delta & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \\ \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} & 1 + \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} & 2(\frac{1}{\sqrt{\pi}} + \delta) \end{vmatrix} = \delta\pi 2(\pi - 2) \left[ \delta^2 + \frac{\pi^{3/2}}{2(\pi-2)}\delta + \frac{4-\pi}{\pi-2} \right] = \frac{\delta}{\pi}\Delta$$

avendo posto  $\Delta = 2(\pi - 2) \left[ \delta^2 + \frac{\pi^{3/2}}{2(\pi-2)}\delta + \frac{4-\pi}{\pi-2} \right] = 2(\pi - 2) [a + b\delta + \delta^2]$  con  $a = \frac{4-\pi}{\pi-2}$ ,  $b = \frac{\pi^{3/2}}{2(\pi-2)}$ .  
Ne segue che

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{w}{a+b\delta+\delta^2} \left( \delta + \frac{\sqrt{\pi}a}{2} \right) \\
\beta &= -\frac{w}{a+b\delta+\delta^2} \delta \\
\gamma &= -\frac{w}{a+b\delta+\delta^2} \frac{a}{2}
\end{aligned}$$

Possiamo ora valutare le grandezze fisiche di interesse in funzione di  $\delta$  ponendo  $h = \tilde{h}$  con i parametri appena trovati.

Il profilo della velocità macroscopica risulta lineare in  $x$ , infatti

$$\begin{aligned}
v_z(x) &= \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint c_z h e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
&= \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint c_z (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
&= \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi^{3/2}}{2} \alpha x \\
&= \frac{\alpha}{2} x
\end{aligned}$$

da cui ricaviamo il valore della velocità media del gas in prossimità della parete superiore in funzione di  $\delta$

$$v_z^w = \frac{\alpha}{2} \frac{d}{2} = \frac{dw}{8} \frac{2\delta + \sqrt{\pi}a}{a + b\delta + \delta^2} \left( \delta + \frac{\sqrt{\pi}a}{2} \right)$$

Calcoliamo ad esempio lo stress di taglio normalizzato per il valore che questo assume in regime molecole libere  $p_{xz}^{fm} = \frac{\rho w}{2\sqrt{\pi}}$

$$\begin{aligned}
 \pi_{xz} &= \frac{p_{xz}}{p_{xz}^{fm}} \\
 &= -\frac{2\sqrt{\pi}}{\rho w} \rho \pi^{-\frac{3}{2}} \iiint c_x c_z h e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
 &= -\frac{2}{\pi w} \iiint c_x c_z (\alpha x + \beta c_x + \gamma \operatorname{sgn} c_x) e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} dc_x dc_y dc_z \\
 &= -\frac{2}{\pi w} \left[ \frac{\pi^{-3/2}}{4} \beta + \frac{\pi}{2} \gamma \right] \\
 &= \frac{2}{\pi w} \frac{w}{a + b\delta + \delta^2} \left[ \frac{\pi^{-3/2}}{4} \delta + \frac{\pi}{2} \frac{a}{2} \right] \\
 &= \frac{a + \sqrt{\pi} \delta}{a + b\delta + \delta^2}
 \end{aligned}$$

### 3. SIMULAZIONE DIRETTA COL METODO MONTE CARLO

Per verificare i risultati ottenuti nella sezione precedente e quindi i limiti delle ipotesi che conducono alla formulazione e alla soluzione dell'equazione di Boltzmann abbiamo eseguito alcune simulazioni dirette con il metodo Monte Carlo.

Tali simulazioni simulano il comportamento di un gas modellandone le molecole tramite un numero rappresentativo di particelle le quali inizialmente costituiscono un campionamento delle molecole di un gas a riposo all'equilibrio termodinamico. Vengono poi simulati gli urti fra molecole e molecole e fra molecole e pareti in movimento. Dopo un regime di transitorio, necessario affinché le particelle siano rappresentative della configurazione d'equilibrio che il gas assume nel flusso alla Couette, vengono campionate le grandezze macroscopiche; a tal fine consideriamo il volume del gas suddiviso in celle, così facendo il valore assunto in un determinato punto da una grandezza macroscopica istantanea può essere ottenuto campionandone il valore nella relativa cella (media istantanea). I valori relativi a grandezze macroscopiche medie vengono poi ottenute mediando nel tempo grandezze macroscopiche istantanee.

#### 3.1. Distribuzioni iniziali all'equilibrio.

3.1.1. *Posizione.* Consideriamo le molecole di un gas all'equilibrio uniformemente distribuite spazialmente. Essendo il nostro problema monodimensionale, ci limitiamo a memorizzare la sola coordinata  $x$  della posizione.

3.1.2. *Velocità.* Consideriamo la funzione di distribuzione della componente  $i$ -esima della velocità caotica  $c' = c - \langle c \rangle$  di una molecola in un gas all'equilibrio

$$(7) \quad f_{c'_i} = \frac{\beta}{\pi^{1/2}} \exp(-\beta^2 c'^2_i)$$

a cui corrisponde la seguente funzione di ripartizione

$$F_{c'_i} = \frac{1}{2} [1 + \operatorname{erf}(\beta c'_i)]$$

la quale non può essere invertita. Pertanto non possiamo ricorrere al metodo della *trasformazione inversa* per generare le velocità del gas secondo tale distribuzione.

Possiamo ricorrere alla seguente metodo per campionare due componenti della velocità caotica  $c'_i, c'_j$  osservando che

$$\begin{aligned}
 f_{c'_i} dc'_i f_{c'_j} dc'_j &= \frac{\beta}{\pi^{1/2}} \exp(-\beta^2 c'^2_j) dc'_i dc'_j \\
 &= \frac{\beta^2}{\pi} \exp[-\beta^2 (c'^2_i + c'^2_j)] dc'_i dc'_j
 \end{aligned}$$

Posto  $r \cos \theta = c'_i$  e  $\sin \theta = c'_j$  possiamo scrivere

$$f_{c'_i} dc'_i f_{c'_j} dc'_j = \exp(-\beta^2 r^2) d(\beta^2 r^2) d\frac{\theta}{2\pi}$$

Possiamo osservare che  $\theta$  è uniformemente distribuita fra 0 e  $2\pi$  e che  $\beta^2 r^2$  è distribuita fra 0 e  $\infty$  secondo la distribuzione

$$f_{\beta^2 r^2} = \exp(-\beta^2 r^2)$$

a cui corrisponde la funzione di ripartizione

$$F_{\beta^2 r^2} = 1 - \exp(-\beta^2 r^2)$$

Per generare le componenti  $r$  e  $\theta$  è quindi sufficiente generare due numeri  $1 - R_{f,1}, R_{f,2}$  distribuiti uniformemente fra 0 e 1 e porre

$$1 - R_{f,1} = 1 - \exp(-\beta^2 r^2) \quad R_{f,2} = \frac{1}{2\pi} \theta$$

da cui ricaviamo

$$r = \frac{(-\ln R_f)^{1/2}}{\beta} \quad \theta = 2\pi R_{f,2}$$

Generati queste è immediato calcolare le componenti cartesiane  $c_i, c_j$

Per generare la rimanente componente ripetiamo lo stesso procedimento selezionando una delle due componenti generate.

**3.1.3. Energia interna.** Si può dimostrare che la funzione di distribuzione del rapporto fra l'energia interna di una singola molecola con due gradi di libertà interni  $\epsilon_i$  e  $kT$  vale

$$(8) \quad f_{\frac{\epsilon_i}{kT}} = \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)$$

che è del tutto analoga alla (7) pertanto si può generare un valore dell'energia interna distribuito secondo la (8) generando un numero  $1 - R_f$  distribuito uniformemente fra 0 e 1 e ponendo

$$\epsilon_i = -kT \ln R_f$$

#### Algoritmo generazione stato iniziale

```
siano note le grandezze macroscopiche del gas all'equilibrio
per ogni molecola JM=1,NM
- scegliere  $x$  uniformemente distribuito su  $[x_{\min}, x_{\max}]$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $x = x_{\min} + R_f(x_{\max} - x_{\min})$ 
- scegliere  $v_x, v_y, v_z$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $r = \frac{[-\ln(1-R_f)]^{1/2}}{\beta}$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $\theta = 2\pi R_f$ 
  * porre  $\xi_y = v_y + r \cos(\phi)$ 
  * porre  $\xi_z = v_z + r \sin(\phi)$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $r = \frac{[-\ln(1-R_f)]^{1/2}}{\beta}$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $\theta = 2\pi R_f$ 
  * porre  $\xi_y = v_y + r \cos(\phi)$ 
- scegliere  $\epsilon_i$ 
  * scegliere  $R_f$  uniformemente distribuito su  $[0,1]$ 
  * porre  $\epsilon_i = -kT \ln(1 - R_f)$ 
```

### 3.2. Collisioni.

**3.2.1. Campionamento.** La probabilità di una collisione fra due molecole in un gas omogeneo è proporzionale al prodotto della loro velocità relativa media  $v_r$  e della sezione d'urto collisionale  $\sigma_T$ . Tramite la seguente relazione possiamo stimare il numero atteso di collisioni,  $n_c^e$ , per unità di volume e di tempo in un gas non omogeneo

$$(9) \quad n_c^e = \frac{1}{2} n^2 \sigma_T \langle c_r \rangle$$

e quindi stimare il valore atteso del tempo trascorso fra due collisioni consecutive,  $\Delta t_c^e = 1/n_c^e$ .

Indichiamo ora con  $N_c(t)$  il numero totale di collisioni che si sono verificate nell'intervallo di tempo fra l'istante 0 e  $t$ . Ovviamente  $N_c(0) = 0$ ; inoltre, nell'ipotesi che le collisioni siano fra loro indipendenti e che il numero di molecole sia elevato, abbiamo che gli incrementi di  $N_c$



sono fra loro indipendenti e possiamo assumere che per ogni istante  $t \geq 0$  ed ogni intervallo di tempo  $\Delta t$  l'incremento del numero di collisioni nell'intervallo di tempo fra  $t$  e  $t + \Delta t$  abbia distribuzione di Poisson di parametro  $n_c^e \Delta t$ . Sotto queste ipotesi, cioè, il numero di collisioni,  $N_c(t)$ , costituisce un *processo di Poisson* di intensità  $n_c^e$ . Il valore atteso  $N_c^e(t)$  di collisioni fra l'istante 0 e l'istante  $t$  è quindi

$$N_c^e(t) = n_c^e t$$

ed inoltre il *tempo di attesa*,  $\Delta t_n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ), tra la  $(n-1)$ -esima e la  $n$ -esima collisione ha distribuzione esponenziale di parametro  $n_c^e$

$$f_{\Delta t_n} = n_c^e \exp(-n_c^e \Delta t_n) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

il cui valore atteso è  $\Delta t_n^e = 1/n_c^e$ .

Possiamo quindi generare il numero totale di collisioni in un intervallo di tempo  $\Delta t$  generando in successione i tempi di attesa  $\Delta t_k$  fino a che la loro somma  $S_n = \sum_{k=1}^n \Delta t_k$  è minore di  $\Delta t$ .

**3.2.2. Urti elastici: il modello delle sfere rigide.** Un urto fra due molecole è detto *elastico* se non vi è scambio fra energia traslazionale ed energia interna. Supponiamo di conoscere le velocità  $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$  di due molecole identiche, puntiformi e di massa  $m$  che urtano; vogliamo determinare le velocità  $\mathbf{c}_1^*, \mathbf{c}_2^*$  dopo l'urto. Introducendo le velocità relative prima e dopo l'urto

$$\mathbf{c}_r = \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2, \quad \mathbf{c}_r^* = \mathbf{c}_1^* - \mathbf{c}_2^*,$$

supponendo le particelle sottoposte ad un campo di forza centrale a simmetria sferica si può osservare che le velocità delle molecole prima dell'urto sono antiparallele rispetto al centro di massa

$$\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_m + \frac{1}{2}\mathbf{c}_r, \quad \mathbf{c}_2 = \mathbf{c}_m - \frac{1}{2}\mathbf{c}_r,$$

così come le velocità dopo l'urto

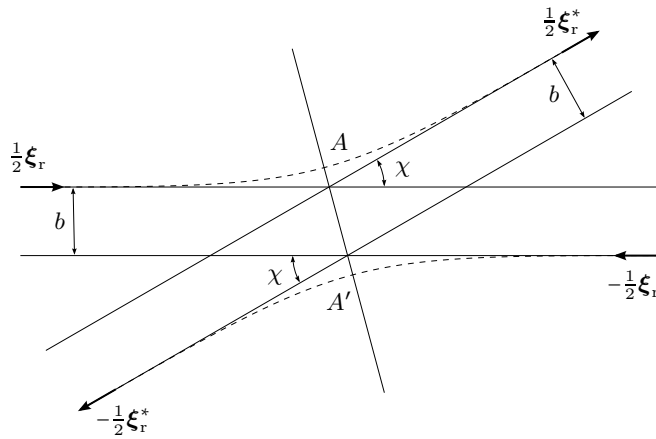
$$\mathbf{c}_1^* = \mathbf{c}_m + \frac{1}{2}\mathbf{c}_r^*, \quad \mathbf{c}_2^* = \mathbf{c}_m - \frac{1}{2}\mathbf{c}_r^*,$$

avendo indicato con  $\mathbf{c}_m$  la velocità del centro di massa che si conserva nell'urto.

Il moto delle molecole è inoltre piano e la conservazione del momento angolare impone che la velocità relativa si conservi nell'urto

$$c_r = c_r^*$$

così come la *distanza di massimo avvicinamento*  $b$ , ovvero la distanza fra le molecole nella direzione ortogonale alle velocità nel piano del moto. Si può inoltre dimostrare che il moto



delle due particelle è equivalente al moto di una molecola di massa pari alla quantità  $m_r = \frac{m}{2}$  detta *massa relativa*.

Per determinare completamente il moto in un urto elastico fra le due particelle è necessario definire un ulteriore parametro d'impatto oltre alla distanza di massimo avvicinamento  $b$ .

Definiamo l'angolo azimutale  $\epsilon$  come l'angolo compreso fra un piano di riferimento (ad es.  $y = 0$ ) ed il piano del moto.

Se consideriamo le molecole come sfere rigide di diametro  $d$  si ha che due molecole che urtano interagiscono quando la loro distanza  $r$  diventa pari al diametro e quindi in questo caso  $b = d \cos \frac{\chi}{2}$ . Ne consegue che ogni direzione è equiprobabile per la velocità relativa dopo l'urto  $\xi_r^*$  e che la sezione d'urto totale vale

$$\sigma_T = \frac{d^2}{4}.$$

Per generare la direzione della velocità relativa dopo l'urto abbiamo utilizzato il *trig method*. Tale metodo sfrutta il fatto non intuitivo che ciascuna delle coordinate cartesiane di un punto uniformemente distribuito sulla sfera unitaria è uniformemente distribuita sull'intervallo  $[-1, 1]$ . È quindi sufficiente scegliere una coordinata (ad esempio  $z$ ) e generare un valore uniformemente distribuito sull'asse corrispondente. Questo comporta che il punto giaccia su una circonferenza parallela al piano  $x - y$ ; per generare le rimanenti coordinate è quindi sufficiente generare un angolo  $\phi$  uniformemente distribuito fra  $[0, 2\pi]$ .

#### Algoritmo trig method

- scegliere  $z$  uniformemente distribuito su  $[-1, 1]$
- scegliere  $\phi$  uniformemente distribuito su  $[0, 2\pi]$
- pongo  $r = \sqrt{1 - z^2}$
- pongo  $x = r \cos(\phi)$
- pongo  $y = r \sin(\phi)$

**3.2.3. Urti anelastici: il modello di Larsen-Borgnakke per un gas semplice.** In un urto elastico l'energia totale viene ripartita fra energia traslazionale ed interna secondo una opportuna distribuzione dell'energia interna. Supponiamo che una frazione  $\Lambda$  delle collisioni sia completamente anelastica mentre la rimanente parte degli urti è considerata elastica. Se consideriamo sfere rigide con  $\zeta = 2$  gradi di libertà interni, la distribuzione dell'energia traslazionale  $E_t$  soddisfa

$$f_{E_t} \propto E_t \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right)$$

mentre quella dell'energia interna soddisfa

$$f_{E_i} \propto E_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

Come temperatura  $T$  viene scelta la *temperatura effettiva* per la collisione (ovvero quella che corrisponde a  $E_c$ ) cosicché il termine esponenziale possa essere considerato costante. Si può dimostrare che la distribuzione per il rapporto  $\frac{E_t}{E_c}$  per sfere rigide con 2 gradi di libertà interni è

$$f_{E_t/E_c} = 6 \frac{E_t}{E_c} \left(\frac{E_t}{E_c}\right)$$

a cui corrisponde la seguente funzione di ripartizione

$$F_{E_t/E_c} = 3x^2 - 2x^3$$

Vogliamo ricorrere al metodo della *trasformazione inversa* per generare il rapporto  $\frac{E_t}{E_c}$ ; generiamo un numero casuale  $R_f$  fra 0 ed 1 secondo una distribuzione uniforme, vogliamo quindi risolvere in  $x$  la seguente equazione di terzo grado

$$R_f = 3x^2 - 2x^3$$

Definendo  $y = x - \frac{1}{2}$  ci riconduciamo all'equazione

$$y^3 + py + q = 0,$$

dove  $p = -\frac{3}{4}$  e  $q = \frac{1}{2}R_f - \frac{1}{4}$ , che ammette la seguente soluzione generale

$$y = \left(-\frac{q}{2} + \Delta^{1/2}\right)^{1/3} + \left(-\frac{q}{2} - \Delta^{1/2}\right)^{1/3}$$

essendo  $\Delta = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27} = \frac{1}{16}R_f(R_f - 1) < 0$ .

Osserviamo che

$$-\frac{q}{2} + i\sqrt{-\Delta} = \frac{1}{8}(1 - 2R_f) + i\frac{1}{4}\sqrt{R_f(1 - R_f)} = \frac{1}{8}(\cos \theta + i \sin \theta)$$

con  $\theta = \arccos(1 - 2R_f) \in [0, \pi]$ . Possiamo quindi scrivere le tre soluzioni dell'equazione in  $y$

$$y_1 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta}{3} = \cos \frac{\theta}{3}$$

$$y_2 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta+2\pi}{3} = \cos \frac{\theta+2\pi}{3}$$

$$y_3 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\theta+4\pi}{3} = \cos \frac{\theta+4\pi}{3}$$

il cui grafico al variare di  $\theta \in [0, \pi]$  è riportato in Figura 2

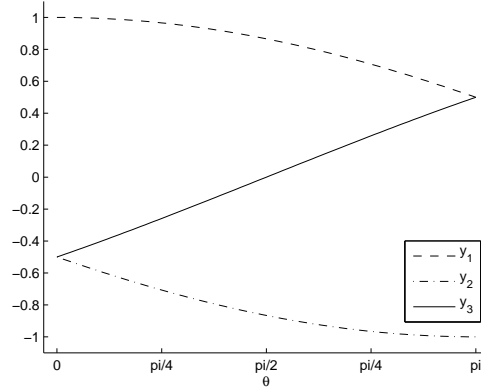


FIGURA 2

Poichè vogliamo che  $x$  sia una frazione in  $[0, 1]$  deve essere  $y \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$  e pertanto  $y_3$  è l'unica soluzione ammissibile a cui corrisponde la seguente soluzione

$$\begin{aligned} x &= \cos \frac{\arccos(1-2R_f)+4\pi}{3} + \frac{1}{2} \\ &= \cos \frac{\arcsin(2R_f-1)+\pi/2+4\pi}{3} + \frac{1}{2} \\ &= \cos \left( \frac{\arcsin(2R_f-1)}{3} + \frac{3}{2}\pi \right) + \frac{1}{2} \\ &= \cos \left( \frac{\arcsin(2R_f-1)}{3} - \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Una volta generata l'energia traslazionale dopo l'urto  $T_t^*$ , l'energia interna dopo l'urto è data da

$$E_i^* = E_c - E_t^*$$

Questa quantità va ripartita fra le due molecole osservando che l'energia interna dopo l'urto della singola molecole è, nel caso di molecole con 2 gradi di libertà interni, uniformemente distribuita fra 0 e  $E_i^*$ .

**3.3. Campionamento delle quantità macroscopiche.** Siano  $t_c^i$  il primo istante dopo il transitorio in cui effettuare il campionamento,  $t_c^f$  l'istante finale della simulazione e  $\Delta t_c$  l'intervallo temporale fra due campionamenti; sia per semplicità  $t_c^i = k^i \Delta t_c$  e  $t_c^f = k^f \Delta t_c$ .

Supponiamo inoltre che il volume del gas sia suddiviso in  $N_e$  elementi  $V_i$  e che le molecole siano rappresentate da  $N_p$  particelle.

Indichiamo con  $Q_j$  ( $j = 1, \dots, N_p$ ) il valore di una grandezza microscopica  $Q$  relativo alla  $j$ -esima particella e con  $\langle Q \rangle^i$  il suo valore medio campionato sia nella cella che nel tempo

$$\langle Q \rangle^i = \frac{1}{k^f - k^i} \sum_{k=k^i}^{k^f} \left( \frac{1}{n_i(k\Delta t_c)} \sum_{\mathbf{x}_j \in V_i} Q_j(k\Delta t_c) \right)$$

essendo  $n_i$  il numero di particelle nella  $i$ -esima cella.

A partire dalla velocità molecolare media possiamo stimare la velocità macroscopica del gas

$$\mathbf{v} = \langle \mathbf{c} \rangle$$

e quindi la velocità caotica delle molecole

$$\mathbf{c}' = \mathbf{c} - \mathbf{v}$$

Il tensore degli sforzi ( $p_{ij}$ ) può essere quindi calcolato tramite

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \rho \langle c'_i c'_j \rangle \\ &= \rho \langle (c_i - v_i)(c_j - v_j) \rangle \\ &= \rho (\langle c_i c_j \rangle - v_j \langle c_i \rangle - v_i \langle c_j \rangle + v_i v_j) \\ &= \rho (\langle c_i c_j \rangle - v_i v_j) \end{aligned}$$

da cui in particolare

$$p_{ii} = \rho (\langle c_i^2 \rangle - v_i^2)$$

e quindi la pressione scalare

$$p = \frac{1}{3} \sum_i p_{ii} = \frac{\rho}{3} (\langle c^2 \rangle - v^2)$$

Dalla relazione

$$\frac{3}{2} R T_{\text{tr}} = \frac{1}{2} e_{\text{tr}}$$

possiamo calcolare la temperatura cinetica traslazione  $T_{\text{tr}}$

$$T_{\text{tr}} = \frac{1}{3R} (\langle c^2 \rangle - v^2)$$

Per molecole poliatomiche è possibile definire anche una temperatura rotazionale tramite la relazione

$$\frac{1}{2} \zeta R T_{\text{rot}} = e_{\text{rot}}$$

essendo  $\zeta$  il numero di gradi di libertà interni, da cui

$$T_{\text{rot}} = \frac{2}{\zeta R} \frac{\langle \epsilon_i \rangle}{m}$$

La temperatura complessiva vale quindi

$$T = \frac{3T_{\text{tr}} + \zeta T_{\text{rot}}}{3 + \zeta}$$

Infine possiamo ricavare il vettore flusso di calore ( $q_i$ )

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{\rho}{2} \langle c'_i c'^2 \rangle \\ &= \frac{\rho}{2} (\langle c_i c'^2 \rangle - v_i \langle c'^2 \rangle) \\ &= \frac{\rho}{2} [\langle c_i (c^2 - 2\mathbf{c} \cdot \mathbf{v} + v^2) \rangle - v_i (\langle c^2 \rangle - v^2)] \\ &= \frac{\rho}{2} [\langle c_i c^2 \rangle - 2\langle c_i \mathbf{c} \rangle \cdot \mathbf{v} + \langle c_i \rangle v^2 - v_i \langle c^2 \rangle + v_i v^2] \\ &= \frac{\rho}{2} \left[ \langle c_i c^2 \rangle - 2\langle c_i^2 \rangle v_i - 2 \sum_{j \neq i} \langle c_i c_j \rangle v_j + 2v_i v^2 - v_i \langle c^2 \rangle \right] \\ &= \frac{\rho}{2} \langle c_i c^2 \rangle - \rho \langle c_i^2 \rangle v_i - \rho \sum_{j \neq i} \langle c_i c_j \rangle v_j + \rho v_i v^2 - \frac{\rho}{2} v_i \langle c^2 \rangle \end{aligned}$$

#### 4. CONFRONTO

Grazie alla teoria presentata nella sezione 2, abbiamo ottenuto che, in prima approssimazione, il problema del flusso alla Couette presenta un profilo della velocità in direzione  $z$  è lineare e una componente  $xz$  del tensore degli sforzi costante. Tali risultato è validato dai risultati numerici ottenuti tramite simulazione diretta con il metodo Monte Carlo fintanto che siano rispettate le ipotesi alla base dei risultati teorici, ovvero che si sia in regime di transizione, cioè che il libero cammino medio sia confrontabile con una lunghezza caratteristica del gas ( $0.1 < \text{Kn} < 10$ ), e che la velocità relativa delle pareti sia sufficientemente piccola.

In Figura 3 sono riportati i risultati ottenuti con  $w = 2$  e  $\delta = 1/\text{Kn} = 1$ .

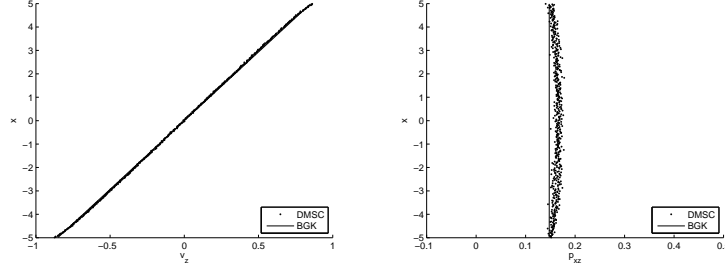


FIGURA 3. Profilo della velocità (a sinistra) e andamento della pressione (a destra) posto  $\delta = 1$  e  $w = 2$

All'aumentare della velocità relativa delle pareti si accentuano le differenze dal modello lineare: in prossimità delle pareti si osserva l'insorgere dello strato di Knudsen in corrispondenza del quale si osserva un incremento della velocità media del gas. Anche l'andamento della componente  $xz$  dello sforzo assume una forma più pronunciatamente parabolico come si può osservare nelle Figure 4 e 5.

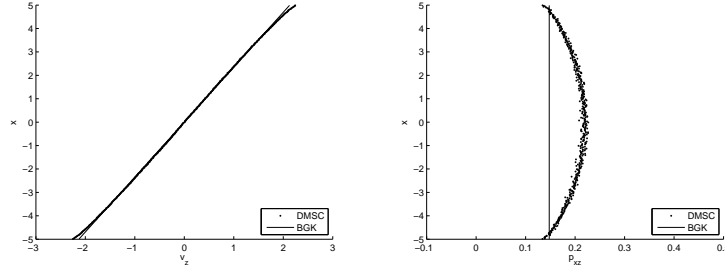


FIGURA 4. Profilo della velocità (a sinistra) e andamento della pressione (a destra) posto  $\delta = 1$  e  $w = 5$

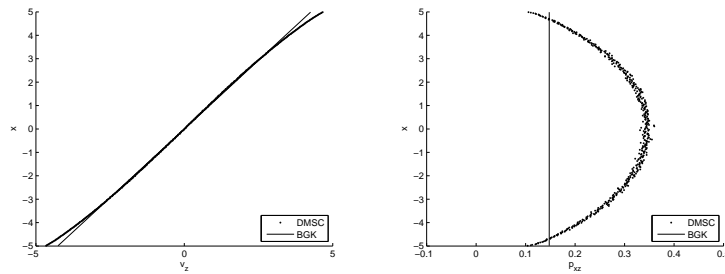


FIGURA 5. Profilo della velocità (a sinistra) e andamento della pressione (a destra) posto  $\delta = 1$  e  $w = 10$

Successivamente abbiamo confrontato gli andamenti al variare di  $\delta$  delle grandezze adimensionali  $v_z/w$  e  $\pi_{xz}$ , "teoricamente indipendenti" dalla velocità relativa delle pareti, così da poterli raffrontare con i dati riportati da [3] e presentati in Tabella 1

$\delta$	Willis	BGK
20	0.0807	0.0805
10	0.1471	0.1476
7	0.1964	0.1969
5	0.2526	0.2534
4	0.2946	0.2958
3	0.3539	0.2556
2	0.4440	0.4462
1	0.6008	0.6024

TABELLA 1. Confronto fra i risultati ottenuti con il metodo variazionale e tramite simulazione numerica.

I risultati da noi ottenuti tramite simulazione diretta sono riportati in Tabella 2 per la velocità in direzione  $z$  ed prossimità della parete superiore ed in Tabella 3 per il rapporto  $\pi_{xz}$ .

In Figura 6 è possibile osservare il discreto accordo fra risultati ottenuti tramite simulazione diretta e con il metodo variazionale.

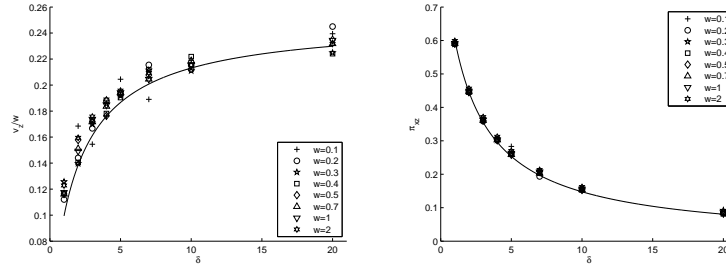


FIGURA 6. Confronto fra simulazione diretta e metodo variazionale per il computo dei rapporti  $v_z/w$  (a sinistra) e  $\pi_{xz}$  a destra.

	$\delta$							
	20	10	7	5	4	3	2	1
$w$	0.1	0.0479	0.0438	0.0378	0.0409	0.0352	0.0309	0.0231
	0.2	0.0980	0.0848	0.0862	0.0771	0.0752	0.0667	0.0448
	0.3	0.1349	0.1266	0.1269	0.1150	0.1114	0.1019	0.0754
	0.4	0.1793	0.1775	0.1694	0.1523	0.1425	0.1384	0.0934
	0.5	0.2348	0.2149	0.2077	0.1937	0.1764	0.1720	0.1163
	0.7	0.3245	0.3062	0.2864	0.2717	0.2571	0.2404	0.1626
	1	0.4689	0.4302	0.4090	0.3883	0.3693	0.3475	0.2349
	2	0.9267	0.8618	0.8377	0.7830	0.7556	0.7032	0.4913

TABELLA 2. Valori numerici della velocità media  $v_z$  in prossimità della parete superiore al variare di  $\delta$  e  $w$

		$\delta$							
		20	10	7	5	4	3	2	1
$w$	0.1	0.0780	0.1560	0.2115	0.2832	0.307	0.3603	0.4558	0.5948
	0.2	0.0842	0.1559	0.1935	0.2646	0.3039	0.3588	0.4461	0.5909
	0.3	0.0921	0.1551	0.2062	0.2607	0.3016	0.3631	0.4478	0.5892
	0.4	0.0814	0.1530	0.2034	0.2611	0.3048	0.3631	0.4454	0.5894
	0.5	0.0853	0.1533	0.2081	0.2583	0.3016	0.3609	0.4455	0.5909
	0.7	0.0859	0.1536	0.2032	0.2591	0.3026	0.3608	0.4466	0.5914
	1	0.0851	0.1558	0.2073	0.2627	0.3033	0.3627	0.4485	0.5914
	2	0.0889	0.1618	0.2129	0.2698	0.3122	0.3708	0.4561	0.5987

TABELLA 3. Valori numerici del rapporto  $\pi_{xz}$  in prossimità della parete superiore al variare di  $\delta$  e  $w$

## 5. CODICE

```

*****
*
*      SUBROUTINE COLLISIONI(JE)
*
*****

**** VARIABILI ****

**** INPUT
*      indice dell elemento della griglia all interno del quale
*      simulare le collisioni
*      INTEGER JE

**** PARAMETRI
*      numero massimo di particelle
*      (deve coincidere col valore in couette.f ed inizio.f)
*      INTEGER,PARAMETER::NPMAX=200000
*      numero massimo di nodi
*      (deve coincidere col valore in couette.f)
*      INTEGER,PARAMETER::NNMAX=1000

**** COSTANTI MATEMATICHE
*      pi greco e suoi multipli
*      REAL*8,PARAMETER::PI=3.1415926535897932D+0
*      REAL*8,PARAMETER::PI2=6.2831853071795864D+0

**** GRANDEZZE MICROSCOPICHE
*      posizione delle particelle
*      REAL*8 X(NPMAX)
*      componenti della velocita delle particelle
*      REAL*8 VX(NPMAX),VY(NPMAX),VZ(NPMAX)
*      energia interna delle particelle
*      REAL*8 EI(NPMAX)
*      numero totale di particelle
*      INTEGER NPAR
*      COMMON /MICRO/ X,VX,VY,VZ,EI,NPAR

**** DOMINIO SPAZIALE
*      estremi del dominio
*      REAL*8 XMIN,XMAX
*      passi spaziali
*      REAL*8 DX
*      numero totale di nodi
*      INTEGER NNOD
*      COMMON /SPAZIO/ XMIN,XMAX,DX,NNOD

**** DOMINIO TEMPORALE
*      passo temporale
*      REAL*8 DT
*      istante finale
*      REAL*8 TMAX
*      istante d inizio campionamento grandezze macroscopiche
*      REAL*8 TIM
*      passo campionamento
*      REAL*8 DTM

```

```

COMMON /TEMPO/ TMAX,DT,TIM,DTM

***** PARAMETRI COLLISIONALI
* sezione d urto
REAL*8 XSECT
* frazione di urti anaelastici
REAL*8 LAMBDA
COMMON /COLLIS/ XSECT,LAMBDA

***** INDICI PARTICELLE/ELEMENTI
* indici delle particelle ordinate per elemento di appartenenza
INTEGER IP(NPMAX)
* indici delle prime particelle di ciascun elemento
INTEGER IPIN(NNMAX)
* numero di particelle per elemento della griglia
INTEGER NPE(NNMAX)
COMMON /IND/ IP,IPIN,NPE

***** VARIABILI LOCALI
* componenti velocita massima
REAL*8 VXMAX,VYMAX,VZMAX
* componenti velocita minima
REAL*8 VXMIN,VYMIN,VZMIN
* velocita relativa delle particelle che collidono e suo quadrato
REAL*8 VR,VR2
* componenti velocita relativa dopo urto
REAL*8 VRX,VRZ
* modulo velocita relativa massima
REAL*8 VRMAX
* energia totale particelle che collidono
REAL*8 ETOT
* energia cinetica ed interna particelle dopo l urto
REAL*8 ECIN,EINT
* numero atteso di collisioni
REAL*8 AVN COLL
* numero di collisioni
INTEGER NCOLL
* contatore per le collisioni
INTEGER JCOLL
* tempo trascorso fra l istante precedente e l ultima collisione
REAL*8 DTCOLL
* indici delle particelle che collidono
INTEGER JP1,JP2
* indice della particella ordinata per elemento
INTEGER JP
* indici prima e ultima particella dell elemento
INTEGER JPEMIN, JPEMAX
* indice della particella nell elemento
INTEGER JPE
* parametri trig method
REAL*8 B,C,PHI,SITETA
* numero casuale con distribuzione uniforme
REAL*8 R

***** FINE VARIABILI *****

***** calcolo il numero atteso di collisioni (reali+fittizie)

JPEMIN=IPIN(JE)+1
JPEMAX=IPIN(JE)+NPE(JE)

* calcolo componenti velocita massima e minima delle particelle
VXMAX=-1.E+38
VXMIN=1.E+38
VYMAX=-1.E+38
VYMIN=1.E+38
VZMAX=-1.E+38
VZMIN=1.E+38
DO JPE=JPEMIN,JPEMAX
  JP=IP(JPE)
  VXMIN=DMIN1(VXMIN,VX(JP))
  VXMAX=DMAX1(VXMAX,VX(JP))
  VYMIN=DMIN1(VYMIN,VY(JP))
  VYMAX=DMAX1(VYMAX,VY(JP))
  VZMIN=DMIN1(VZMIN,VZ(JP))
  VZMAX=DMAX1(VZMAX,VZ(JP))
END DO

```



```

*      calcolo velocita relativa massima
VRMAX=DSQRT((VXMAX-VXMIN)**2+(VYMAX-VYMIN)**2+(VZMAX-VZMIN)**2)

*      processo di poisson per determinare il numero di collisioni
AVNCOLL=NPE(JE)*NPE(JE)*XSECT*VRMAX/(2.D+0*DX)
NCOLL=0
DTCOLL=0.D+0
10  R=1.D+0-RAND()
    DTCOLL=DTCOLL-DLOG(R)/AVNCOLL
    IF(DTCOLL.LT.DT) THEN
        NCOLL=NCOLL+1
        GO TO 10
    END IF

***** calcolo le collisioni fra le particelle

DO JCOLL=1,NCOLL
*      seleziono due particelle a caso dell elemento
    JP1=JPEMIN+INT(NPE(JE)*RAND())
    JP1=IP(JP1)
    JP2=JPEMIN+INT(NPE(JE)*RAND())
    JP2=IP(JP2)
*      calcolo velocita relativa
    VR2=(VX(JP2)-VX(JP1))**2+(VY(JP2)-VY(JP1))**2+
    &      (VZ(JP2)-VZ(JP1))**2
    VR=DSQRT(VR2)

    R=RAND()
    IF(R.LT.VR/VRMAX) THEN
*      collisione reale
        R=RAND()
        IF(R.LT.LAMBDA) THEN

*****      collisione anelastiche - modello di Larsen/Borgnakke

            ETOT=VR2/4.D0+EI(JP1)+EI(JP2)
*      genero energia cinetica dopo l urto
            R=1.D0-RAND()
            ECIN=ETOT*(DCOS(DASIN(2.0D+0*R-1.0D+0)/3.0D+0-PI/2.0D+0)+
            &      0.5D+0)
*      spartisco energia interna fra le due particelle
            EINT=ETOT-ECIN
            EI(JP1)=EINT*RAND()
            EI(JP2)=EINT-EI(JP1)
            VR=2.0D+0*DSQRT(ECIN)
            B=1.D0-2.D0*RAND()
            SITETA=DSQRT(1.D0-B*B)
            PHI=PI2*RAND()
            VRZ=VR*B
            VRX=VR*SITETA*DCOS(PHI)
            VRY=VR*SITETA*DSIN(PHI)
            C=VX(JP1)+VX(JP2)
            VX(JP1)=(C-VRX)*0.5D0
            VX(JP2)=(C+VRX)*0.5D0
            C=VY(JP1)+VY(JP2)
            VY(JP1)=(C-VRY)*0.5D0
            VY(JP2)=(C+VRY)*0.5D0
            C=VZ(JP1)+VZ(JP2)
            VZ(JP1)=(C-VRZ)*0.5D0
            VZ(JP2)=(C+VRZ)*0.5D0

            ELSE

*****      collisioni elastiche

            B=1.D0-2.D0*RAND()
            SITETA=DSQRT(1.D0-B*B)
            PHI=PI2*RAND()
            VRZ=VR*B
            VRX=VR*SITETA*DCOS(PHI)
            VRY=VR*SITETA*DSIN(PHI)
            C=VX(JP1)+VX(JP2)
            VX(JP1)=(C-VRX)*0.5D0
            VX(JP2)=(C+VRX)*0.5D0
            C=VY(JP1)+VY(JP2)
            VY(JP1)=(C-VRY)*0.5D0
            VY(JP2)=(C+VRY)*0.5D0
            C=VZ(JP1)+VZ(JP2)
            VZ(JP1)=(C-VRZ)*0.5D0
            VZ(JP2)=(C+VRZ)*0.5D0

```

```

      VZ(JP1)=(C-VRZ)*0.5D0
      VZ(JP2)=(C+VRZ)*0.5D0

      END IF
    END IF
  END DO

  RETURN

END

**** FINE SUBROUTINE COLLIS ****

*****
*
*   Programma per la simulazione diretta del flusso di calore tra
*   due piani paralleli in moto relativo
*
*   PROGRAM COUETTE
*
*   Ultima modifica ore 17 del 3 Settembre 2012
*
*   comprende i file:
*   - collisioni.f
*   - inizio.f
*   - maxwell.f
*   - velpar.f
*
*****

**** VARIABILI ****

**** PARAMETRI
*   numero massimo di particelle
*   (deve coincidere col valore in inizio.f e collisioni.f)
  INTEGER,PARAMETER::NPMAX=200000
*   numero massimo di nodi
*   (deve coincidere col valore in collisioni.f)
  INTEGER,PARAMETER::NNMAX=1000

**** GRANDEZZE MICROSCOPICHE
*   posizione delle particelle
  REAL*8 X(NPMAX)
*   componenti della velocita delle particelle
  REAL*8 VX(NPMAX),VY(NPMAX),VZ(NPMAX)
*   energia interna delle particelle
  REAL*8 EI(NPMAX)
*   numero totale di particelle
  INTEGER NPAR
  COMMON /MICRO/ X,VX,VY,VZ,EI,NPAR

**** STATO DELLA PARETE
*   velocita relativa pareti
  REAL*8 UW
*   temperatura
  REAL*8 TMPW
  COMMON /PARETE/ UW,TMPW

**** DOMINIO SPAZIALE
*   estremi del dominio
  REAL*8 XMIN,XMAX
*   passo spaziali
  REAL*8 DX
*   numero totale di nodi
  INTEGER NNOD
  COMMON /SPAZIO/ XMIN,XMAX,DX,NNOD

**** DOMINIO TEMPORALE
*   istante finale
  REAL*8 TMAX
*   passo temporale
  REAL*8 DT
*   istante d inizio campionamento grandezze macroscopiche
  REAL*8 TIM
*   passo campionamento
  REAL*8 DTM

```

```

COMMON /TEMPO/ TMAX,DT,TIM,DTM

***** CARATTERISTICHE DEL GAS
*   rapporto calori specifici
REAL*8 GAMMA
*   numero di gradi di liberta  interni
INTEGER ZETA
COMMON /GAS/ GAMMA,ZETA

***** PARAMETRI SIMULAZIONE
*   numero iniziale di particelle per elemento
INTEGER NPEO
COMMON /SIM/ NPEO

***** INDICI PARTICELLE/ELEMENTI
*   indici delle particelle ordinate per elemento di appartenenza
INTEGER IP(NPMAX)
*   indici delle prime particelle di ciascun elemento
INTEGER IPIN(NNMAX)
*   numero di particelle per elemento della griglia
INTEGER NPE(NNMAX)
COMMON /IND/ IP,IPIN,NPE

***** VARIABILI LOCALI
*   numero totale di particelle campionate per elemento
REAL*8 NPME(NNMAX)
*   componenti della velocita  molecolare media e loro prodotti
REAL*8 VXMED(NNMAX),VYMED(NNMAX),VZMED(NNMAX)
REAL*8 VX2MED(NNMAX),VY2MED(NNMAX),VZ2MED(NNMAX)
REAL*8 VXVYMED(NNMAX),VXVZMED(NNMAX),VYVZMED(NNMAX)
*   modulo quadro medio medio della velocita  molecolare e sue
*   combinazioni
REAL*8 V2MED(NNMAX),VXV2MED(NNMAX),VYV2MED(NNMAX),VZV2MED(NNMAX)
*   densita  dei particelle
REAL*8 N(NNMAX)
*   temperatura complessiva , traslazionale e rotazionale
REAL*8 TMP(NNMAX),TMPTR(NNMAX),TMPROT(NNMAX)
*   energia interna media
REAL*8 EIMED(NNMAX)
*   tensore degli sforzi e pressione scalare
REAL*8 PXX(NNMAX),PYY(NNMAX),PZZ(NNMAX),PXY(NNMAX),PXZ(NNMAX)
REAL*8 PYZ(NNMAX),P(NNMAX)
*   flusso di molecole
REAL*8 FX(NNMAX),FY(NNMAX),FZ(NNMAX)
*   flusso di calore
REAL*8 QX(NNMAX),QY(NNMAX),QZ(NNMAX)
*   indice particelle
INTEGER JP
*   indice nodi
INTEGER JN
*   indice elementi
INTEGER JE
*   istante temporale corrente
REAL*8 T
*   prossimo istante temporale di campionamento grandezze
*   macroscopiche
REAL*8 TM
*   posizione raggiunta dalla particella dopo DT
REAL*8 XNEW
*   tempo trascorso fra l istante precedente e l urto con una parete
REAL*8 DTCOLL
*   numero campionamenti
INTEGER NM
*   indice particella ordinata per elemento
INTEGER JPNEW
*   quadrato delle componenti della velocita  media di una particella
REAL*8 VXMED2,VYMED2,VZMED2
*   modulo quadro della velocita  delle particelle
REAL*8 V2
*   modulo quadro della velocita  media del gas
REAL*8 VMED2
*   coordinata x del punto medio di un elemento
REAL*8 XE
*   carriage return
CHARACTER,PARAMETER::CR=ACHAR(13)
*   numero medio particelle
INTEGER NPMED
*   progresso della simulazione in percentuale

```

```

      REAL PROGR
*      indici degli elementi della griglia a cui appartengono le
*      particelle
      INTEGER IE(NPMAX)

***** FINE VARIABILI *****

***** INIZIO inizializza
*      - le grandezze microscopiche X,VX,VY,VZ,EI,NPAR
*      - lo stato della parete UW,TMPW
*      - il dominio spaziale XMIN,XMAX,DX,NNOD
*      - il dominio temporale TMAX,DT,TIM,DTM
*      - le caratteristiche del gas GAMMA,ZETA
*      - i parametri collisionali XSECT,LAMBDA
*      - i parametri della simulazione NPEO

      WRITE(*,100,ADVANCE='no') 'Inizializzazione ...'
      CALL INIZIO
      WRITE(*,*) 'ok'

***** PASSO INIZIALE

      PROGR=0.E+1
      WRITE(*,200,ADVANCE='no') CR,PROGR

      T=0.D+0
      TM=TIM
      NM=0
      NPMED=0

      DO JE=1,NNOD
        VXMED(JE)=0.D+0
        VYMED(JE)=0.D+0
        VZMED(JE)=0.D+0
        VX2MED(JE)=0.D+0
        VY2MED(JE)=0.D+0
        VZ2MED(JE)=0.D+0
        VXVYMED(JE)=0.D+0
        VXVZMED(JE)=0.D+0
        VYVZMED(JE)=0.D+0
        V2MED(JE)=0.D+0
        VXV2MED(JE)=0.D+0
        VYV2MED(JE)=0.D+0
        VZV2MED(JE)=0.D+0
      END DO

***** CICLO TEMPORALE

      DO WHILE (T.LT.TMAX)

        T=T+DT

*****      movimento particelle

        DO JP=1,NPAR
*          aggiorno posizione
          XNEW=X(JP)+VX(JP)*DT
          IF(XNEW.LE.XMIN) THEN
*            particella urta parete inferiore
            DTCOLL=(XMIN-X(JP))/VX(JP)
            CALL VELPAR(-UW/2.D+0,TMPW,VX(JP),VY(JP),VZ(JP),EI(JP))
            XNEW=XMIN+VX(JP)*(DT-DTCOLL)
          END IF
          IF(XNEW.GT.XMAX) THEN
*            particella urta parete superiore
            DTCOLL=(XMAX-X(JP))/VX(JP)
            CALL VELPAR(UW/2.D+0,TMPW,VX(JP),VY(JP),VZ(JP),EI(JP))
            VX(JP)=-VX(JP)
            XNEW=XMAX+VX(JP)*(DT-DTCOLL)
          END IF
          X(JP)=XNEW
        END DO

*****      elimino le particelle finite fuori del dominio

*      ciclo all indietro sulle particelle
      JP=NPAR
      DO WHILE (JP.GE.1)

```

```

      IF(X(JP).LT.XMIN.OR.X(JP).GE.XMAX) THEN
*         particella fuori dal dominio
*         le sostituisco l ultima in posizione NPAR e aggiorno il
*         valore di NPAR
          X(JP)=X(NPAR)
          VX(JP)=VX(NPAR)
          VY(JP)=VY(NPAR)
          VZ(JP)=VZ(NPAR)
          EI(JP)=EI(NPAR)
          NPAR=NPAR-1
      END IF
*         aggiorno indice particella
          JP=JP-1
      END DO

*****   riordino le particelle

*         azzerò il numero di particelle per elemento
      DO JN=1,NNOD
          NPE(JN)=0
      END DO

*         aggiornò gli indici degli elementi della griglia a cui
*         appartengono le particelle ed il numero di particelle per
*         elemento
      DO JP=1,NPAR
          IE(JP)=1+INT((X(JP)-XMIN)/DX)
          NPE(IE(JP))=NPE(IE(JP))+1
      END DO

*         aggiornò il vettore degli indici relativi alla prima particella
*         di ciascun elemento e contestualmente pongo a zero il numero di
*         particelle per elemento
      IPIN(1)=0
      DO JN=2,NNOD
          IPIN(JN)=IPIN(JN-1)+NPE(JN-1)
          NPE(JN-1)=0
      END DO
      NPE(NNOD)=0

*         calcolo i nuovi indici di ciascuna particella in modo che siano
*         ordinati per elemento di appartenenza e aggiornò il numero di
*         particelle per elemento
      DO JP=1,NPAR
          JE=IE(JP)
          NPE(JE)=NPE(JE)+1
          JPNEW=IPIN(JE)+NPE(JE)
          IP(JPNEW)=JP
      END DO

*****   calcolo le collisioni

      DO JE=1,NNOD
          IF(NPE(JE).GT.1) THEN
              CALL COLLISIONI(JE,T)
          END IF
      END DO

*****   campiono le quantita macroscopiche

      IF(T.GE.TM) THEN
*         aggiornò numero di particelle medio
          NPMED=NPMED+NPAR
*         aggiornò numero di campionamenti
          NM=NM+1
          DO JP=1,NPAR
*
              JE=IE(JP)
              NPME(JE)=NPME(JE)+1

              VXMED(JE)=VXMED(JE)+VX(JP)
              VYMED(JE)=VYMED(JE)+VY(JP)
              VZMED(JE)=VZMED(JE)+VZ(JP)

              VX2MED(JE)=VXMED(JE)+VX(JP)**2
              VY2MED(JE)=VYMED(JE)+VY(JP)**2
              VZ2MED(JE)=VZMED(JE)+VZ(JP)**2
          
```

```

      VXVYMED(JE)=VXVYMED(JE)+VX(JP)*VY(JP)
      VXVZMED(JE)=VXVZMED(JE)+VX(JP)*VZ(JP)
      VYVZMED(JE)=VYVZMED(JE)+VY(JP)*VZ(JP)

      V2=VX(JP)**2+VY(JP)**2+VZ(JP)**2
      V2MED(JE)=V2MED(JE)+V2
      VXV2MED(JE)=VXV2MED(JE)+VX(JP)*V2
      VYV2MED(JE)=VYV2MED(JE)+VY(JP)*V2
      VZV2MED(JE)=VZV2MED(JE)+VZ(JP)*V2

*
      EIMED(JE)=EIMED(JE)+EI(JP)
      END DO
*
      aggiorno prossimo istante per campionamento
      TM=TM+DTM
      END IF

      IF (INT(T/TMAX*1000).GT.PROGR*10) THEN
        PROGR=PROGR+1.0E-1
        WRITE(*,200,ADVANCE='no') CR,PROGR
      END IF

      END DO

      WRITE(*,200) CR,100E+0
      WRITE(*,300,ADVANCE='no') 'Finalizzazione... ',

      WRITE(2,400)
      & '#####NUMERO DI CAMPIONAMENTI..... ',Nm
      WRITE(2,500)
      & '#####NUMERO DI PARTICELLE..... ',
      & DFLOAT(NPMED)/NM
      WRITE(2,600)
      & '#####',

      DO JE=1, NNOD
        IF (NPME(JE).NE.0.D+0) THEN
*
*          scalo per il numero di campionamenti effettuati su ciascun
*          elemeneto i valori campionari cumulati delle combinazioni
*          delle velocita
          VXMED(JE)=VXMED(JE)/NPME(JE)
          VYMED(JE)=VYMED(JE)/NPME(JE)
          VZMED(JE)=VZMED(JE)/NPME(JE)

          VX2MED(JE)=VX2MED(JE)/NPME(JE)
          VY2MED(JE)=VY2MED(JE)/NPME(JE)
          VZ2MED(JE)=VZ2MED(JE)/NPME(JE)

          VXVYMED(JE)=VXVYMED(JE)/NPME(JE)
          VXVZMED(JE)=VXVZMED(JE)/NPME(JE)
          VYVZMED(JE)=VYVZMED(JE)/NPME(JE)

          V2MED(JE)=V2MED(JE)/NPME(JE)
          VXV2MED(JE)=VXV2MED(JE)/NPME(JE)
          VYV2MED(JE)=VYV2MED(JE)/NPME(JE)
          VZV2MED(JE)=VZV2MED(JE)/NPME(JE)

          EIMED(JE)=EIMED(JE)/NPME(JE)
          END IF
          VXMED2=VXMED(JE)**2
          VYMED2=VYMED(JE)**2
          VZMED2=VZMED(JE)**2
          VMED2=VXMED2+VYMED2+VZMED2
*
          densita di molecole
          N(JE)=NPME(JE)/(NM*NP0)
*
          flusso di molecole
          FX(JE)=N(JE)*VXMED(JE)
          FY(JE)=N(JE)*VYMED(JE)
          FZ(JE)=N(JE)*VZMED(JE)
*
          tensore degli sforzi
          PXX(JE)=N(JE)*(VX2MED(JE)-VXMED2)
          PYY(JE)=N(JE)*(VY2MED(JE)-VYMED2)
          PZZ(JE)=N(JE)*(VZ2MED(JE)-VZMED2)
          PXY(JE)=N(JE)*(VXVYMED(JE)-VXMED(JE)*VYMED(JE))
          PXZ(JE)=N(JE)*(VXVZMED(JE)-VXMED(JE)*VZMED(JE))
          PYZ(JE)=N(JE)*(VYVZMED(JE)-VYMED(JE)*VZMED(JE))
*
          pressione scalare
          P(JE)=(PXX(JE)+PYY(JE)+PZZ(JE))/3.D+0
*
          temperatura traslazionale, rotazionale e totale

```

```

      TMPTR(JE)=(V2MED(JE)-VMED2)/3.D+0
      TMPROT(JE)=2.D+0*EIMED(JE)/ZETA
      TMP(JE)=(3.D+0*TMPTR(JE)+ZETA*TMPROT(JE))/(3.D+0+ZETA)
*      flusso di calore
      QX(JE)=N(JE)*(VXV2MED(JE)/2.D+0-VXMED(JE)*VX2MED(JE)-
&          VYMED(JE)*VXVYMED(JE)-VZMED(JE)*VXVZMED(JE)+
&          VXMED(JE)*VMED2-VXMED(JE)*V2MED(JE)/2.D+0)
      QY(JE)=N(JE)*(VYV2MED(JE)/2.D+0-VXMED(JE)*VXVYMED(JE)
&          -VYMED(JE)*VY2MED(JE)-VZMED(JE)*VYVZMED(JE)
&          +VZMED(JE)*VMED2-VZMED(JE)*V2MED(JE)/2.D+0)
      QZ(JE)=N(JE)*(VZV2MED(JE)/2.D+0-VXMED(JE)*VXVZMED(JE)
&          -VYMED(JE)*VYVZMED(JE)-VZMED(JE)*VZ2MED(JE)
&          +VZMED(JE)*VMED2-VZMED(JE)*V2MED(JE)/2.D+0)
      END DO

*      stampo le variabili macroscopiche in funzione della posizione

      WRITE(2,700)
&      '*****GRANDEZZE MACROSCOPICHE*****',
&      '*****',
      WRITE(2,700)
&      ' ',
&      ' ',
      WRITE(2,800) '*****X*****', '*****N*****', '**VXMED**',
&      '**VYMED**', '**VZMED**'
      DO JN=1, NNOD
          XE=XMIN+DX*(JN-.5D+0)
          WRITE(2,900) XE, N(JN), VXMED(JN), VYMED(JN), VZMED(JN)
      END DO
      WRITE(2,700)
&      ' ',
&      ' ',
      WRITE(2,800) '*****X*****', '**FLUX X**', '**FLUX Y**',
&      '**FLUX Z**', '**PXX**'
      DO JN=1, NNOD
          XE=XMIN+DX*(JN+.5D+0)
          WRITE(2,900) XE, FX(JN), FY(JN), FZ(JN), PXX(JN)
      END DO
      WRITE(2,700)
&      ' ',
&      ' ',
      WRITE(2,800) '*****X*****', '**PY**', '**PZ**',
&      '**PXY**', '**PXZ**'
      DO JN=1, NNOD
          XE=XMIN+DX*(JN+.5D+0)
          WRITE(2,900) XE, PYY(JN), PZZ(JN), PXY(JN), PXZ(JN)
      END DO
      WRITE(2,700)
&      ' ',
&      ' ',
      WRITE(2,800) '*****X*****', '**PYZ**', '**P**',
&      '**TMP TR**', '**TMP ROT**'
      DO JN=1, NNOD
          XE=XMIN+DX*(JN+.5D+0)
          WRITE(2,900) XE, PYZ(JN), P(JN), TMPTR(JN), TMPROT(JN)
      END DO
      WRITE(2,700)
&      ' ',
&      ' ',
      WRITE(2,800) '*****X*****', '**TMP**', '**QX**',
&      '**QY**', '**QZ**'
      DO JN=1, NNOD
          XE=XMIN+DX*(JN+.5D+0)
          WRITE(2,900) XE, TMP(JN), QX(JN), QY(JN), QZ(JN)
      END DO

      WRITE(*,*) 'ok'

      STOP

100  FORMAT(A20)
200  FORMAT(A1,"Simulazione...",F5.1,"%")
300  FORMAT(A18)
400  FORMAT(A58,I14)
500  FORMAT(A58,E14.4)
600  FORMAT(A58)
700  FORMAT(A60,A12)
800  FORMAT(5(A12,3X))

```

```
900  FORMAT(5(E12.4,3X))
```

```
END
```

```
***** FINE PROGRAM COUETTE *****
```

```
*****
*
*      SUBROUTINE INIZIO
*
*      Questo sotto-programma legge i dati in ingresso e prepara le
*      grandezze necessarie all'elaborazione
*
*****

***** PARAMETRI
*      numero massimo di particelle
*      INTEGER,PARAMETER::NPMAX=200000

***** COSTANTI MATEMATICHE
*      pi greco
*      REAL*8,PARAMETER::PI=3.1415926535897932D+0

***** GRANDEZZE MICROSCOPICHE
*      posizione delle particelle
*      REAL*8 X(NPMAX)
*      componenti della velocita delle particelle
*      REAL*8 VX(NPMAX),VY(NPMAX),VZ(NPMAX)
*      energia interna delle particelle
*      REAL*8 EI(NPMAX)
*      numero totale di particelle
*      INTEGER NPAR
*      COMMON /MICRO/ X,VX,VY,VZ,EI,NPAR

***** STATO DELLA PARETE
*      velocita relativa
*      REAL*8 UW
*      temperatura
*      REAL*8 TMPW
*      COMMON /PARETE/ UW,TMPW

***** DOMINIO SPAZIALE
*      estremi del dominio
*      REAL*8 XMIN,XMAX
*      passo spaziale
*      REAL*8 DX
*      numero totale di nodi
*      INTEGER NNOD
*      COMMON /SPAZIO/ XMIN,XMAX,DX,NNOD

***** DOMINIO TEMPORALE
*      istante finale
*      REAL*8 TMAX
*      passo temporale
*      REAL*8 DT
*      istante d'inizio campionamento grandezze macroscopiche
*      REAL*8 TIM
*      passo campionamento
*      REAL*8 DTM
*      COMMON /TEMPO/ TMAX,DT,TIM,DTM

***** CARATTERISTICHE DEL GAS
*      rapporto calori specifici
*      REAL*8 GAMMA
*      numero di gradi di liberta interni
*      INTEGER ZETA
*      COMMON /GAS/ GAMMA,ZETA

***** PARAMETRI COLLISIONALI
*      sezione d'urto
*      REAL*8 XSECT
*      frazione di urti anelastici
*      REAL*8 LAMBDA
*      COMMON /COLLIS/ XSECT,LAMBDA

***** PARAMETRI SIMULAZIONE
```



```

*      numero iniziale di particelle per elemento
      INTEGER NPEO
      COMMON /SIM/ NPEO

***** VARIABILI LOCALI
*      stringa per la descrizione degli input
      CHARACTER COMMEN(58)
*      numero di Knudsen
      REAL*8 KN
*      numero di nodi lungo x
      INTEGER NX
*      seme casuale
      INTEGER SEME
*      quadrato del diametro delle particelle
      REAL*8 DIAM2
*      indice generico
      INTEGER J
*      indice particelle
      INTEGER JP

***** LETTURA DATI DI INGRESSO

*      apertura file di input
      OPEN(UNIT=1, FILE='couette.inp', ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='OLD')

*      apertura file di output
      OPEN(UNIT=2, FILE='couette.out', ACCESS='SEQUENTIAL',
&        STATUS='UNKNOWN')

*      lettura file input e copiatura su output
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)

      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), KN
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), KN
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), UW
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), UW
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), TMPW
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), TMPW
      READ(1,200)(COMMEN(J), J=1,58), NPEO
      WRITE(2,200)(COMMEN(J), J=1,58), NPEO
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), LAMBDA
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), LAMBDA

      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)

      READ(1,200)(COMMEN(J), J=1,58), NX
      WRITE(2,200)(COMMEN(J), J=1,58), NX

      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)

      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), DT
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), DT
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), TMAX
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), TMAX
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), TIM
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), TIM
      READ(1,300)(COMMEN(J), J=1,58), DTM
      WRITE(2,300)(COMMEN(J), J=1,58), DTM
      READ(1,200)(COMMEN(J), J=1,58), SEME
      WRITE(2,200)(COMMEN(J), J=1,58), SEME

      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      READ(1,100)(COMMEN(J), J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J), J=1,58)

```

```

      READ(1,100)(COMMEN(J),J=1,58)
      WRITE(2,100)(COMMEN(J),J=1,58)

*      definisco gli estremi del dominio
*      hp: libero cammino medio = 1
      XMIN=-0.5D+0/KN
      XMAX=+0.5D+0/KN

*      definisco la griglia
      NNOD=NX
      DX=(XMAX-XMIN)/NX

*      calcolo sezione d 3urto
      DIAM2=1.D+0/(DSQRT(2.D+0)*PI*NPEO/DX)
      XSECT=PI*DIAM2

*      rapporto calori specifici
      IF(LAMBDA.EQ.0.D+0) THEN
        GAMMA=5.D+0/3.D+0
        ZETA=2
      ELSE
        GAMMA=7.D+0/5.D+0
        ZETA=0
      END IF

*      numero di particelle
      NPAR=NPEO*NNOD
      WRITE(2,400)
& '#####NUMERO DI PARTICELLE INIZIALE.....',NPAR

*      controllo che il numero di particelle non superi NPMAX
      IF(NPAR.GT.NPMAX) GOTO 1000

*      genero paritcelle con distribuzione della posizione uniforme lungo
*      x e distribuzione della velocita maxwelliana
      CALL SRAND(SEME)
      DO JP=1,NPAR
        X(JP)=XMIN+(XMAX-XMIN)*RAND()
        CALL MAXWELL(TMPW,VX(JP),VY(JP),VZ(JP),EI(JP))
      END DO

      RETURN

****  FORMATI  ****

100  FORMAT(58(A1))
200  FORMAT(58(A1),I14)
300  FORMAT(58(A1),E14.4)
400  FORMAT(A58,I14)

****  ERRORE NPAR > NPMAX  ****

1000 WRITE(2,1100)
& '#####',
  WRITE(2,1100)
& '#####ERROR#####',
  WRITE(2,1100)
& '#####',
  WRITE(2,1200)
& '#####NUMERO DI PARTICELLE>',NPMAX,'#####',
  WRITE(2,1100)
& '#####STOP#####',
& '#####STOP#####',
  WRITE(*,1300) 'error: NPAR>',NPMAX
  WRITE(*,*) 'Aborted'

  STOP

****  FINE ERRORE  ****

1100 FORMAT(A58)
1200 FORMAT(A29,I9.9,A20)
1300 FORMAT(A14,I9.9)

  END

****  FINE SUBROUTINE INIZIO  ****

```

```

*****
*
*      SUBROUTINE  MAXWELL (TMP,VX,VY,VZ,EI)
*
*      Subroutine per la generazione di velocita  ed energie secondo
*      una distribuzione di Maxwell tramite l argoritmo di Box-Mueller
*
*****

****  VARIABILI *****

****  INPUT
*      temperatura
REAL*8  TMP

****  OUTPUT
*      componenti della velocita
REAL*8  VX,VY,VZ
*      energia interna
REAL*8  EI

****  VARIABILI LOCALI
*      due volte pi greco
REAL*8,PARAMETER::PI2=6.2831853071795864
*      radice quadrata della temperatura
REAL*8  SIGMA
*      numero casuale da distribuzione uniforme
REAL*8  R
*      coordinate polari
REAL*8  RHO,THETA

****  FINE VARIABILI *****

      SIGMA=DSQRT (TMP)

*      genero modulo velocita  nel piano yz
R=1.DO-RAND ()
RHO=DSQRT (-2.DO*DLOG (R))
*      genero coordinata angolare
R=RAND ()
THETA=PI2*R
*      calcolo coordinate yz della velocita
VY=RHO*DCOS (THETA)*SIGMA
VZ=RHO*DSIN (THETA)*SIGMA

*      genero modulo per x
R=1.DO-RAND ()
RHO=DSQRT (-2.DO*DLOG (R))
*      genero angolo per x
R=RAND ()
THETA=PI2*R
VX=RHO*DCOS (THETA)*SIGMA

*      genero valore energia interna
R=1.DO-RAND ()
EI=-DLOG (R)*TMP

      RETURN

      END

****  FINE SUBROUTINE  MAXWELL *****

*****
*
*      SUBROUTINE  VELPAR (UW,TMPW,VX,VY,VZ,EI)
*
*
*
*****

****  VARIABILI *****

****  INPUT
*      velocita  parete lungo z

```

```

      REAL*8 UW
*      temperatura parete
      REAL*8 TMPW

***** OUTPUT
*      componenti della velocita  dopo 1 urto
      REAL*8 VX,VY,VZ
*      energia interna
      REAL*8 EI

***** VARIABILI LOCALI
*      due volte pi greco
      REAL*8,PARAMETER::PI2=6.2831853071795864D+0
*      radice quadrata della temperatura
      REAL*8 SIGMA
*      numero casuale da distribuzione uniforme
      REAL*8 R
*      coordinate polari
      REAL*8 RHO,THETA

***** FINE VARIABILI *****

      SIGMA=DSQRT(TMPW)

*      genero modulo velocita  nel piano yz
      R=1.DO-RAND()
      RHO=DSQRT(-2.DO*DLOG(R))
*      genero coordinata angolare
      R=RAND()
      THETA=PI2*R
*      calcolo coordinate yz della velocita
      VY=RHO*DCOS(THETA)*SIGMA
      VZ=RHO*DSIN(THETA)*SIGMA+UW

*      genero velocita  lungo x
10    R=1.DO-RAND()
      IF(R.EQ.1.0D0) GOTO 10
      VX=DSQRT(-2.DO*TMPW*DLOG(R))

*      genero valore energia interna
      R=1.DO-RAND()
      EI=-DLOG(R)*TMPW

      RETURN

      END

***** FINE SUBROUTINE VELPAR *****

```

## RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

1. G.A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford Engineering Science Series, Clarendon Press, 1994.
2. C. Cercignani, *Theory and application of the boltzmann equation*, Elsevier, 1975.
3. ———, *Rarefied gas dynamics: From basic concepts to actual calculations*, Cambridge University Press, 2000.