
La Matematica nella Società e nella Cultura

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

GIACOMO DIMARCO

Modelli e metodi numerici per equazioni iperboliche e cinetiche multiscala

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. 2 (2009), n.2 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 235-238.

Unione Matematica Italiana

http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2009_1_2_2_235_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2009.

Modelli e metodi numerici per equazioni iperboliche e cinetiche multiscala

GIACOMO DIMARCO

1. – Introduzione

Molti fenomeni importanti nella scienza e nella tecnologia sono descritti da equazioni non lineari alle derivate parziali e/o integrali, in particolare da modelli iperboliche e cinetici. Entrambe queste classi di equazioni esprimono leggi fondamentali della fisica, e rivestono una grande importanza in molte moderne applicazioni che spaziano dai plasmi e dalla fisica quantistica alla geofisica, a fenomeni di turbolenza, a semiconduttori, a mezzi granulari o gas reagenti, ma anche il traffico veicolare, il flusso di pedoni, problemi socio-economici, formazione di opinioni, tessuti cellulari e competizione tra cellule tumorali e immuni possono essere descritti da questi modelli.

L'obiettivo principale di questa tesi di dottorato è stato quello di dare un contributo allo studio e alla comprensione di questi fenomeni attraverso lo sviluppo di modelli matematici e metodi numerici per problemi che sono descritti da equazioni cinetiche e/o fluidodinamiche.

2. – I modelli cinetici

In natura tutti quanti gli oggetti sono costituiti da atomi ed elettroni, e contemporaneamente sono caratterizzati dalla loro dimensione naturale notevolmente più grande (di diversi ordini di grandezza). Analogamente, i processi a livello atomico avvengono su scale temporali molto più veloci degli eventi della nostra vita. Un primo approccio per descrivere matematicamente questi fenomeni consiste nell'ignorare i dettagli delle interazioni microscopiche ottenendo modelli espliciti per la scala di interesse. Purtroppo questo non è sempre possibile, e talvolta siamo obbligati a introdurre e a risolvere numericamente equazioni diverse che governano i processi a diverse scale temporali e spaziali. Tuttavia, la simulazione numerica di sistemi fisici di grandi dimensioni attraverso modelli deterministici microscopici risulta essere fortemente proibitiva dal punto di vista computazionale, e non è pensabile che lo sviluppo della tecnologia possa risolvere radicalmente la situazione nel prossimo futuro.

In questo contesto, la teoria cinetica rappresenta un approccio mesoscopico, basato su equazioni integro-differenziali di tipo Boltzmann, che descrive l'evoluzione temporale di una funzione di distribuzione di particelle $f(x, v, t)$ nello spazio delle fasi, soggette a un'azione di trasporto libera e a delle mutue collisioni descritte da un

operatore $Q(f, f, \cdot)$ che agisce solo rispetto a v :

$$(1) \quad \frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f(x, v, t) = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f).$$

Questi modelli consentono di determinare l'evoluzione delle quantità macroscopiche (come i modelli fluidodinamici), mantenendo allo stesso tempo anche informazioni riguardo agli stati microscopici del problema. Inoltre è possibile ricavare in maniera formale a partire dall'equazione di Boltzmann sistemi di equazioni macroscopiche facendo ipotesi sulla struttura della funzione di distribuzione. In particolare, vicino al cosiddetto limite fluidodinamico $\varepsilon \rightarrow 0$ la funzione f può essere sostituita da una distribuzione di equilibrio, o Maxwelliana, e l'equazione di Boltzmann risulta equivalente alle equazioni di Eulero compressibili

$$(2) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0,$$

$$(3) \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u + pI) = 0,$$

$$(4) \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla_x \cdot ((E + p)u) = 0.$$

dove ρ rappresenta la densità, u rappresenta la velocità media ed E l'energia. Di conseguenza se da una parte è naturale aspettarci che questi modelli siano molto dettagliati nella descrizione del problema fisico rispetto ad equazioni di tipo macroscopico che coinvolgono solo valori medi della funzione di distribuzione, d'altra parte, notevoli sono le difficoltà che si incontrano quando si vuole simulare numericamente equazioni di tipo cinetico in particolare in regimi stiff quando ε è piccolo. Difficoltà analoghe si incontrano nel caso di problemi iperbolici contenenti termini di rilassamento di tipo stiff.

La risoluzione numerica dell'equazione di Boltzmann, nonostante i notevoli sforzi fatti in passato rappresenta ancora oggi una grande sfida. Questo è dovuto principalmente alla non linearità dell'equazione, al grande numero di incognite che caratterizza la funzione di distribuzione e alle difficoltà legate al calcolo dell'integrale collisionale $Q(f, f)$. Il calcolo di tale integrale è particolarmente delicato poichè le proprietà di conservazione dell'equazione (massa, momento ed energia) dipendono dalla sua approssimazione. Per questi motivi, i metodi utilizzati nelle simulazioni reali per l'approssimazione numerica dell'equazione di Boltzmann sono tutt'ora basati su degli approcci stocastici di tipo Monte Carlo. Questi metodi oltre a garantire la conservazione delle quantità fisiche principali e ad essere facilmente utilizzabili in caso di geometrie complesse, hanno prestazioni migliori in termini di velocità di calcolo di diversi ordini di grandezza rispetto ad approcci deterministici. Tuttavia, come osservato da numerosi autori e dimostrato attraverso molti risultati numerici, questi schemi diventano abbastanza inefficienti quando il cammino libero medio delle particelle diventa molto piccolo (vicino al cosiddetto limite fluidodinamico $\varepsilon \rightarrow 0$), mentre le soluzioni sono caratterizzate da grandi fluttuazioni statistiche la cui velocità di convergenza è molto lenta.

La tesi di dottorato descritta in questa breve nota si è posta l'obiettivo di tentare di superare alcune di queste problematiche.

3. – Risultati principali

Nel corso dei tre anni di tesi l'accento è stato posto su due differenti e complementari metodologie: accoppiamenti fluido-cinetici e metodi ibridi. È importante sottolineare la generalità della formulazione dei metodi sviluppati, infatti entrambi gli approcci sono facilmente adattabili a differenti situazioni e problemi come mostrato ripetutamente in letteratura e durante il lavoro di tesi.

Il metodo ibrido è stato realizzato in collaborazione con il Prof. Lorenzo Pareschi e riguarda la realizzazione di una nuova classe di schemi per la soluzione di problemi che coinvolgono differenti scale sia spaziali che temporali descritti da equazioni cinetiche o iperboliche. L'idea è stata quella di unire schemi Monte Carlo per la soluzione del problema microscopico con schemi deterministici per la soluzione del problema macroscopico. Il metodo si basa, nel caso dell'equazione di Boltzmann, sulla seguente decomposizione della funzione di distribuzione:

$$(5) \quad f(x, v, t) = \underbrace{\tilde{f}(x, v, t)}_{\text{nonequilibrium}} + \underbrace{w(x, v, t)M(x, v, t)}_{\text{equilibrium}}$$

dove M rappresenta la funzione di equilibrio o la Maxwelliana tale che $Q(M, M) = 0$, w è una funzione che caratterizza la frazione di equilibrio e $\tilde{f}(x, v, t)$ è la parte non in equilibrio. Ora, poichè la soluzione cinetica di un problema in equilibrio termodinamico corrisponde alla soluzione delle equazioni di Eulero compressibili, si è pensato di sviluppare un algoritmo che fosse in grado di risolvere la parte $\tilde{f}(x, v, t)$ con metodi Monte Carlo e la parte $w(x, v, t)M(x, v, t)$ attraverso schemi ai volumi finiti per il sistema di equazioni macroscopiche (2-3-4). I risultati ottenuti sono molto promettenti in termini di costo computazionale rispetto ai tradizionali metodi deterministici per equazioni cinetiche come i metodi alle discrete velocità o i metodi spettrali. Inoltre, il metodo sviluppato comporta una riduzione delle fluttuazioni rispetto ai metodi Monte Carlo tradizionali e, vicino al limite fluidodinamico, permette di calcolare risultati più velocemente (al costo del solo risolutore deterministico per le equazioni macroscopiche).

Un metodo alternativo che permette di affrontare i problemi descritti, consiste nella realizzazione di metodi dinamici di decomposizione del domino. Questo lavoro è stato fatto in collaborazione con l'unità di ricerca del Prof. Pierre Degond dell'Università di Toulouse e del Prof. Luc Mieussens dell'Università di Bordeaux in Francia. L'idea di base su cui il metodo si basa è quello di accoppiare modelli macroscopici fluidodinamici e modelli cinetici attraverso delle regioni intermedie in cui entrambi i modelli sono risolti. Le regioni intermedie sono realizzate introducendo una funzione di transizione $h(x, t)$ che varia tra zero e uno e che assume valori identicamente uguali a uno nelle regioni cinetiche e zero nelle regioni fluidodinamiche. L'introduzione di queste regioni intermedie evita la definizione spesso problematica delle condizioni di interfaccia fra un

modello e l'altro. In definitiva il modello descritto si ottiene definendo due funzioni di distribuzione $f_R = hf$ e $f_L = (1 - h)f$, le cui equazioni di evoluzione sono:

$$(6) \quad \partial_t f_R + hv\partial_x f_R + hv\partial_x f_L = \frac{h}{\tau}(M_f - f) + f\partial_t h,$$

$$(7) \quad \partial_t f_L + (1 - h)v\partial_x f_L + (1 - h)v\partial_x f_R = \frac{1 - h}{\tau}(M_f - f) - f\partial_t h,$$

Infine, sostituendo a f_L l'equilibrio Maxwelliano M_{f_L} , ovvero supponendo di essere in equilibrio termodinamico in alcune parti del dominio, si ottiene un sistema equivalente di equazioni macroscopiche di tipo Eulero modificato che descrive la soluzione al problema per $h(x, t) \neq 1$, mentre per $h(x, t) = 1$ il modello risulta invariato. Questi metodi sono molto efficienti in tutti i casi in cui una localizzata, non necessariamente costante nel tempo, risoluzione a livello microscopico di un fenomeno globalmente macroscopico è necessaria per fornire soluzioni corrette a un problema. Un esempio che descrive molto bene la situazione è un'onda d'urto che si muove all'interno di un gas rarefatto. Queste metodologie permettono un adattamento nel tempo dei differenti risolutori ed alzano in maniera drammatica l'efficienza degli schemi numerici. Infatti, la possibilità di avere piccole regioni in cui si risolve il problema a livello cinetico all'interno di un vasto dominio computazionale, localizzate intorno alle cosiddette zone di non equilibrio termodinamico che si muovono nel tempo, permette forti aumenti di prestazioni computazionali senza tuttavia perdere di accuratezza nelle soluzioni.

Un altro aspetto, trattato nella tesi, riguarda la simulazione numerica di plasmi. Questo lavoro è stato svolto in collaborazione con un'unità di ricerca del Prof. Russel Caffisch dell'IPAM di UCLA e con un'unità di ricerca del Lawrence Livermore National Laboratory California, diretto dal Prof. Bruce Cohen. Durante questo periodo ci siamo interessati dello sviluppo di metodi numerici ibridi, Monte Carlo-deterministici, per trattare il termine collisionale di Landau-Fokker-Planck per la simulazione numerica della dinamica di plasmi. Abbiamo lavorato alla riduzione del tempo globale delle simulazioni in schemi Particle-In-Cell insieme alla riduzione delle fluttuazioni. I risultati preliminari ottenuti ci incoraggiano a continuare su questa strada, considerando anche che la maggior parte dei codici cinetici utilizzati in fisica dei plasmi non considerano le collisioni, mentre è noto che considerare le collisioni è indispensabile in un certo numero di applicazioni come per esempio nella fusione magnetica nei Tokamaks e negli ITER.

BIBLIOGRAFIA

- [1] G. DIMARCO, *Modeling and Numerical Methods for Multiscale Hyperbolic and Kinetic Equations*, Annali on line dell'Università di Ferrara, **I** issue 2 (2007).

Dipartimento di Matematica, Università di Ferrara

e-mail: giacomo.dimarco@unife.it

Dottorato in Scienze dell'Ingegneria Curriculum Matematica

con sede presso l'Università di Ferrara - Ciclo XX

Direttore di ricerca: Prof. Lorenzo Pareschi, Università di Ferrara