

## **Raport stiintific**

*privind implementarea proiectului PN-II-ID-PCE-2011-3-0516 in perioada*

*ianuarie 2014 – decembrie 2014*

In aceasta perioada a fost continuata investigarea dinamicii si morfologiei tranzitiilor de faza in fluide, utilizand modele lattice Boltzmann implementate pe sisteme de calcul paralel. Au fost utilizate in principal sistemele GPU dotate cu placi grafice NVIDIA Tesla Fermi M2090, din dotarea Centrului de Cercetari Tehnice Fundamentale si Avansate al Academiei Romane – Filiala Timisoara, dar si sistemul de calcul IBM Blue Gene / P existent la Universitatea de Vest din Timisoara.

Au fost puse la punct doua versiuni ale unui model Lattice Boltzmann (LB), in care termenul de forta dintre particulele fluidului (termen care genereaza separarea fazelor) a fost exprimat cu ajutorul derivatelor polinoamelor Hermite. Pentru minimizarea erorilor de calcul, modelul LB folosit a fost un model Gauss-Hermite de ordinul 3. O caracteristica a acestui model este ca setul de viteze, obtinut prin aplicarea cuadraturii Gauss-Hermite, contine vectori care au componente exprimate prin numere irrationale. Din acest motiv, atat in versiunea bi-dimensionala (2D) a acestui model LB, cat si in versiunea tri-dimensionala (3D), a fost implementata schema numerica "corner transport upwind" pentru calculul operatorilor de derivare care intervin in ecuatia de evolutie, ceea ce constituie un element de noutate al modelului.

Noile scheme numerice astfel elaborate au permis obtinerea cu o acuratete deosebita a diagramei de faza lichid-vapori, cat si a valorii functionalelor Minkowski. Rezultatele obtinute au fost prezentate la doua conferinte, internationale, incluzand conferinta internationala "Discrete Simulation of Fluid Dynamics, organizata in anul acesta la Paris, si constituie totodata obiectul unei lucrari trimise spre publicare in revista **Comptes Rendus de Mecanique**. O alta lucrare elaborata in cursul acestui an, in care se discuta aspecte legate de morfologia dezvoltarii tesuturilor de celule considerate aici ca un fluid bifazic, precum si influenta vascozitatii asupra evolutiei acestor structuri, a fost trimisa spre publicare la revista **Biofabrication**.

Dat fiind specificul acestui proiect, care urmareste modelarea sistemelor fluide la scara micro-, in care implementarea conditiilor pe frontiera domeniului de curgere cu modelele LB actuale poate prezenta erori semnificative atunci cand valoarea numarului lui Knudsen nu mai este neglijabila, si in anul acesta s-a urmarit dezvoltarea de noi modele Lattice Boltzmann. Pornind de la experienta acumulata in cursul anului trecut, cand a fost elaborat un model bazat pe polinoamele Laguerre (publicat intr-o lucrare de tip **Rapid Communications**, aparuta in aprilie 2014 in **Physical Review E**), in anul acesta a fost dezvoltat un nou model LB, bazat pe polinoamele Hermite definite pe semiaxele sistemului cartezian de coordonate din spatiul vitezelor (impulsurilor). Spre deosebire de modelele Lattice Boltzmann bazate pe polinoamele Hermite obisnuite (care formeaza un set orthogonal in raport cu integrarea pe intreg domeniul axelor carteziene), aceste polinoame Hermite definite pe semiaxe, cunoscute sub denumirea de **half-range Hermite polynomials** au permis obtinerea valorilor corecte, atat pentru fluxul incident de particule la perete, cat si pentru cel emergent, la diferite valori ale numarului lui Knudsen (incluzand aici si regimul ballistic).

Rezultatele obtinute cu modelele LB bazate pe polinoame ortogonale definite pe semiaxe au fost prezentate la doua conferinte internationale si constituie obiectul a doua lucrari elaborate in anul 2014, dintre care una a fost deja acceptata spre publicare. Aceste rezultate vor constitui fundamentul pentru investigarea unor probleme specifice de microfluidica, in conformitate cu obiectivul prevazut pentru acest proiect in cursul anului 2015.

#### Lista lucrarilor elaborate in anul 2014

1. V.E. Ambrus, V. Sofonea, *Application of Lattice Boltzmann models based on Laguerre quadratures to force-driven flows of rarefied gases*, acceptata pentru publicare la revista *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*.
2. T. Biciusca, A. Horga, V. Sofonea, *Simulation of liquid-vapour phase separation on GPUs using Lattice Boltzmann models with off-lattice velocity sets*, in curs de evaluare la revista *Comptes Rendus de Mecanique*.
3. A. Cristea, A. Neagu, *Shape changes of bioprinted tissue constructs simulated by the Lattice Boltzmann method*, in curs de evaluare la revista *Biofabrication*.

#### Lista lucrarilor prezentate oral la conferinte internationale in anul 2014

1. V.E. Ambrus, V. Sofonea, *Application of Lattice Boltzmann models based on Laguerre quadratures in complex flows*, 5<sup>th</sup> International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale (HTFFM-V), April 22 – 25, 2014, Marseille, France.
2. V.E. Ambrus, V. Sofonea, *Lattice Boltzmann models based on half-space quadratures and the corner transport upwind method*, 23<sup>rd</sup> International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics, July 28 – August 1, 2014, Paris, France.
3. T. Biciusca, A. Horga, V. Sofonea, *Simulation of liquid-vapour phase separation on GPUs using Lattice Boltzmann models with off-lattice velocity sets*, 23<sup>rd</sup> International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics, July 28 – August 1, 2014, Paris, France.
4. T. Biciusca, A. Horga, V. Sofonea, *Lattice Boltzmann approach to multiphase fluids using massively parallel computing systems*, TIM-14 Physics Conference, November 21 – 24, Timisoara, Romania.

Director proiect,

Dr. fiz. Victor Sofonea

