

Le simulazioni cinetiche basate sul metodo Lattice Boltzmann (LB) consentono di studiare fenomeni fluidodinamici su scala mesoscopica. Questi metodi risultano particolarmente adatti allo studio di flussi complessi, come quelli costituiti da più componenti (fluide e non) o caratterizzati da separazioni di fase. In questi sistemi, gli effetti idrodinamici svolgono un ruolo rilevante, del quale il metodo LB riesce a caratterizzare efficacemente la fenomenologia, tenendo conto delle principali proprietà fisiche dei fluidi componenti ma consentendo anche di trascurare i dettagli del comportamento microscopico. Combinando metodi cinetici e altri modelli numerici tipicamente usati nello studio dei sistemi complessi, è possibile effettuare simulazioni accurate ed efficienti per descrivere la fisica di flussi multi-fase e multi-componente, integrando e indirizzando il lavoro sperimentale.

## Offerta

L'infrastruttura di calcolo del CASPUR offre risorse computazionali e di *storage* adatte a svolgere analisi parametriche, rispetto alle numerose variabili coinvolte nei fenomeni fisici indagati. Il CASPUR ha inoltre maturato una pluriennale esperienza sia nell'implementazione, ottimizzazione e parallelizzazione di algoritmi basati sul metodo LB sia nello sviluppo di codici che sfruttano le diverse architetture e tecnologie di calcolo, incluse le GP-GPU. Un'attenzione crescente è rivolta all'analisi e visualizzazione dei dati prodotti dalle simulazioni.

## Collaborazioni

Tra le principali collaborazioni è possibile citare:

- **Simulazioni Lattice Boltzmann di sistemi tridimensionali a cristalli liquidi** (Prof. G. Gonnella, Prof. E. Orlandini): si tratta di un codice che integra il metodo LB con un algoritmo alle differenze finite, sviluppato e ottimizzato sia su architettura vettoriale che *cache-based*, allo scopo di studiare la dinamica e le trasformazioni di fase di sistemi costituiti da celle tridimensionali contenenti cristalli liquidi. Il lavoro ha molteplici risvolti applicativi che vanno dagli LCD ai prodotti di *skin-care*.

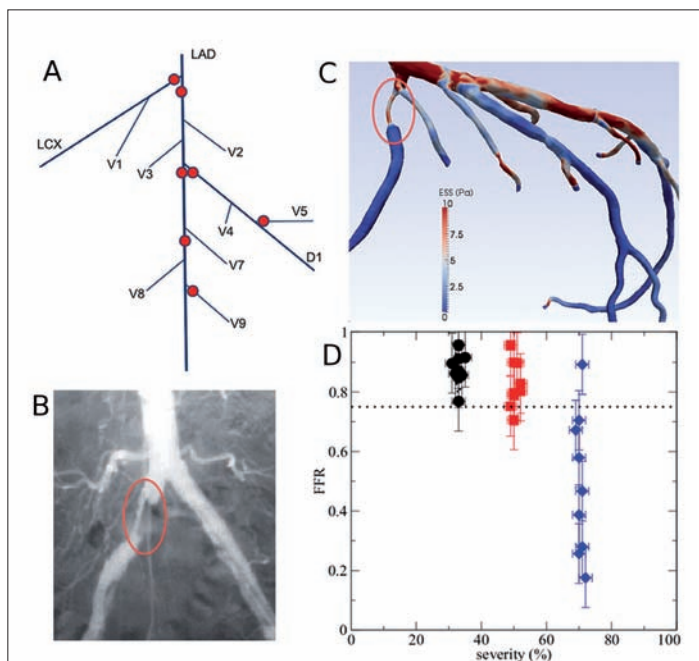


Fig. 1 Distorsioni del flusso derivanti da coronarie aterosclerotiche simulate con MUPHY. Sette placche stenotiche inserite in un sistema coronario sano dove la crescita di placche è più probabile (cerchi rossi nello schema rappresentante il sistema coronario sinistro in Figura A). Sono state simulate placche con differenti livelli di gravità. L'arteriografia clinica in Figura B evidenzia la presenza di una grave stenosi. La Figura C mostra i livelli di tensione tangenziale dell'endotelio. La Figura D mostra il Fractional Flow Reserve (FFR) in funzione della gravità delle stenosi e la linea tratteggiata la soglia sotto la quale si ritiene necessario l'intervento chirurgico.

- **Studio di sistemi fluidodinamici biologici complessi** (Dott. M. Bernaschi, Ing. S. Succi, Dott. G. Pontrelli): il progetto consiste nella realizzazione di un modello multiscala basato sul metodo LB e su un metodo a particelle (MPS) per simulazioni di emodinamica. Si intende simulare, ad esempio, il comportamento fluidodinamico del sangue, come flusso composto sia dalla parte fluida (plasma) che dalla parte corpuscolare (globuli rossi e bianchi).
- **Codice Lattice Boltzmann per lo studio di flussi complessi in condizioni di temperatura variabile** (Prof. G. Gonnella, Prof. V. Sofonea, Dott. A. Lamura): si tratta di un modello numerico mesoscopico, basato sul metodo LB, che viene applicato allo studio della struttura e della dinamica di flussi bifase o bicomponente, in condizioni di temperatura variabile.

## Risultati

Gli studi descritti sono tutt'ora in corso ed è prevista la pubblicazione dei primi risultati secondo tempistiche dettate dallo sviluppo dei singoli progetti. I codici sviluppati dal CASPUR in questo ambito sono sovente utilizzati per la caratterizzazione sperimentale delle prestazioni e per il *benchmarking* realistico di nuove tecnologie e architetture di calcolo, ora anche su GPU, perché l'esperienza accumulata negli anni ha consentito di verificare come esista un'elevata correlazione tra le prestazioni ottenute da questo tipo di codici e quelle raggiunte da altre applicazioni significative nell'ambito della fluidodinamica computazionale e della soluzione di equazioni differenziali alle derivate parziali.

## Bibliografia essenziale

- Gonnella, G., Lamura, A., Sofonea, V. (2007). Lattice Boltzmann simulations of thermal nonideal fluids. *Physical review E* **76**(3).
- Henrich, O., Marenduzzo, D., Stratford, K., Cates, M.E. (2010). Domain growth in cholesteric blue phases: Hybrid lattice Boltzmann simulations. *Computers and Mathematics with Applications*.
- Botti, M., Gonnella, G., Lamura, A., Massaioli, F., Sofonea, V. (2008). A parallel thermal Lattice Boltzmann model with flux limiters for microscale flow. *Int. J. of Modern Physics C* **19**, 1847-61.
- Amati, G. (2008). Lectures on Lattice Boltzmann Methods for complex fluid flows (cap.15 Performance Issues for Lattice Boltzmann Method). Science4 press (Ubertini, Orzag ed.).
- Amati, G. (2010). Using PGI Accelerator with LBM code. *DSFD Conference*, Rome.
- Scagliarini, A., Biferale, L., et al. (2010). Lattice Boltzmann methods for thermal flows: Continuum limit and applications to compressible Rayleigh-Taylor systems. *Phys. Fluids* **22**, 055101.
- Biferale, L., Scagliarini, A., Toschi, F. (2010). On the measurement of vortex filament lifetime statistics in turbulence. *Phys. Fluids* **22**, 065101.
- Bernaschi, M., Bisson, M., Endo, T., Fatica, M., Matsuoka, M., Melchionna, S., Succi, S. (2011). Petaflop biofluidics simulations on a two million-core system. *Proceedings of SuperComputing 2011*.
- Bernaschi, M., Bisson, M., Kaxiras, E., Melchionna, S., Succi, S. (2012). Multiscale Hemodynamics using GPU clusters. Accepted for publication in *Communications in Computational Physics*.
- Tiribocchi, A., Gonnella, G., Marenduzzo, D., Orlandini, E., Salvatore, F. (2011). Bistable Defect Structures In Blue Phase Devices. *Phys. Rev. Lett.* **107**.

MANUAL REPORT