Revista Colombiana de Física, Vol. 43, No. 3 de 2011.

Solución De La Ecuación De Difusión Usando El Método De Lattice-Boltzmann Y Diferencias Finitas

Solution Of The Diffusion Equation Using Lattice-Boltzmann And Finite Difference

F. Fonseca [*] [a], B. Romero [a]

[a] *Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.*

Recibido 23.08.11; Aceptado 29.09.11; Publicado en línea 04.10.11.

Resumen

En este trabajo se presenta la solución de la ecuación de difusión en dos dimensiones, usando el método de Lattice-Boltzmann (LB) y el método de diferencias finitas (DF). El propósito fundamental de este manuscrito es dar una introducción clara y detallada desde el punto de vista algebraico, sobre el tratamiento LB y su comparación con un método estándar de diferencias finitas.

Palabras Clave: Ecuación de difusión, lattice-Boltzmann, Diferencias finitas..

Abstract

This paper presents the solution of the diffusion equation in two dimensions, using the Lattice-Boltzmann method (LB) and finite difference discretization method (FD). The main purpose of this manuscript is to give a clear and detailed introduction on the analytical treatment of LB and its comparison with a standard method such as finite difference.

Keywords: Diffusion equation, lattice-Boltzmann, Finite difference.
PACS: .

©2011. Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Desarrollo Lattice-Boltzmann

La ecuación de Boltzmann describe la evolución temporal de la función de distribución de una partícula $f(\vec{x},t)$, la cual al ser discretizada se convierte en el método de lattice-Boltzmann $f_i(\vec{x},t)$, usando la referencia [1], es:

$$f_i(\vec{x}+\vec{e_i}\Delta t, t+\Delta t) = f_i(\vec{x},t) + \omega_i(f(\vec{x},t)) \qquad (1)$$

donde Ω_i es el operador de colisión local el cual describe las reglas de interacción local en la colisión de las partículas. Usando la aproximación B.G.K. [2] (Batnaghar Gross and Crook), el operador de colisión es:

$$\Omega_i = -(\frac{f_i(\vec{x},t) - f_i^{eq}(\vec{x},t)}{\tau}) \qquad (2)$$

Aquí $f_i^{eq}(\vec{x},t)$ es la función de distribución de equilibrio y la cantidad $1/\tau$ mide la razón de cambio en la aproximación del sistema al equilibrio estadístico. Definiendo a $\Delta t = 1$ obtenemos para la ecuación de lattice-Boltzmann:

$$f_i(\vec{x}+\vec{e_i}, t+1) = (1-\omega)f_i(\vec{x},t) + (f_i^{eq}(\vec{x},t)) \qquad (3)$$

La función de equilibrio se expande en serie perturbativa

$$f_i = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^1 + ... = \sum_{j=0}^{N} \epsilon^j f_i^j \qquad (4)$$

Teniendo en cuenta términos lineales en el parámetro de expansión ϵ y expandiendo en serie de Taylor a $f_i(\vec{x}+\vec{e_i}, t+1)$, logramos:

$$f_i(\vec{x}+\vec{e_i}, t+1) = f_i(\vec{x},t) + \partial_{x_\alpha} e_{i,\alpha} f_i(\vec{x},t) + \partial_t f_i(\vec{x},t) + ... \qquad (5)$$

[*] frfonsecaf@unal.edu.co

Igualando las ecuaciones (3) y (5)

$$(1-\omega)f_i(\vec{x},t)+(f_i^{eq}(\vec{x},t))=f_i(\vec{x},t) \quad (6)$$
$$+\partial_{x_\alpha}e_{i,\alpha}f_i(\vec{x},t)+\partial_t f_i(\vec{x},t)+...$$

Y usando la ecuación (4)

$$-\omega(f_i^0+\epsilon f_i^1)+(f_i^{eq}(\vec{x},t))= \quad (7)$$
$$+\partial_{x_\alpha}e_{i,\alpha}f_i(\vec{x},t)+\partial_t f_i(\vec{x},t)+...$$

Por lo tanto de la ecuación (7):

$$\epsilon f_i^1=(f_i^0-f_i^{eq}) \quad (8)$$
$$-\frac{1}{\omega}\partial_{x_\alpha}e_{i,\alpha}f_i(\vec{x},t)-\frac{1}{\omega}\partial_t f_i(\vec{x},t)$$

Asumiendo $f_i^0=f_i^{eq}$, obtenemos

$$\epsilon f_i^1=-\frac{1}{\omega}\partial_{x_\alpha}e_{i,\alpha}f_i(\vec{x},t)-\frac{1}{\omega}\partial_t f_i(\vec{x},t) \quad (9)$$

Podemos expandir las derivadas espaciales y temporales:

$$\partial_t=\epsilon\partial_t^{(1)}+\epsilon^2\partial_t^{(2)} \quad (10)$$

$$\partial_{x_\alpha}=\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}+\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(2)} \quad (11)$$

Usando la ecuación de difusión

$$\partial_t=D\delta_{\alpha,\beta}(\partial_{x_\alpha})(\partial_{x_\beta}) \quad (12)$$

$$\epsilon\partial_t^{(1)}+\epsilon^2\partial_t^{(2)}=D\delta_{\alpha,\beta}(\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}+\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(2)}) \quad (13)$$
$$\times(\epsilon\partial_{x_\beta}^{(1)}+\epsilon^2\partial_{x_\beta}^{(2)})$$

Igualando orden por orden, obtenemos:

$$\epsilon\partial_t^{(1)}=0 \quad (14)$$

$$D\delta_{\alpha,\beta}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}=\epsilon^2\partial_t^{(2)} \quad (15)$$

$$D\delta_{\alpha,\beta}\epsilon^3(\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(2)}+\partial_{x_\alpha}^{(2)}\partial_{x_\beta}^{(1)})=0 \quad (16)$$

$$D\delta_{\alpha,\beta}\epsilon^4(\partial_{x_\alpha}^{(2)}\partial_{x_\beta}^{(2)})=0 \quad (17)$$

Usaremos la ecuación (15) para capturar el fenómeno de difusión. De tal forma que podemos considerar las derivadas espaciales y temporales como:

$$\partial_t=\epsilon\partial_t^{(1)}+\epsilon^2\partial_t^{(2)}\rightarrow\epsilon^2\partial_t^{(2)} \quad (18)$$

$$\partial_{x_\alpha}=\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}+\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(2)}\rightarrow\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)} \quad (19)$$

Se puede entender las ecuaciones (18) y (19) como un escalamiento, el cual manifiesta el proceso de difusión sobre grandes escalas espaciales. De tal forma que la ecuación (9), se convierte en:

$$\epsilon f_i^1=-\frac{1}{\omega}\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i(\vec{x},t)-\frac{1}{\omega}\epsilon^2\partial_t^{(2)}f_i(\vec{x},t) \quad (20)$$

Se define:

$$\sum_{i=1}^{N}f_i(\vec{x},t)=\sum_{i=1}^{N}f_i^0(\vec{x},t)=\phi(\vec{x},t) \quad (21)$$

La ecuación de difusión es lineal, por lo tanto, se puede suponer:

$$f_i^0=\gamma_0+\gamma_1\phi \quad (22)$$

Insertando la ecuación (22) en (21), obtenemos:

$$f_i^0=\frac{\phi}{4} \quad (23)$$

Definiendo las relaciones tensoriales para las componentes de la velocidad en la red:

$$\sum_{i=1}^{N}\vec{e_i}=0 \quad (24)$$

$$\sum_{i=1}^{N}e_{i,\alpha}e_{i,\beta}=2\delta_{\alpha,\beta} \quad (25)$$

$$\sum_{i=1}^{N}\vec{e_i}f_i^0=\frac{\phi}{4}\sum_{i=1}^{N}\vec{e_i}=0 \quad (26)$$

Usando la relación de conservación de la distribución sobre la red:

$$\sum_{i=1}^{N}(f_i(\vec{x}+\vec{e_i},t+1)-f_i(\vec{x},t))=0 \quad (27)$$

Expandiendo en serie de Taylor $f_i(\vec{x}+\vec{e_i},t+1)$, tenemos:

$$\sum_{i=1}^{N}(f_i+\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i+\epsilon^2\partial_t^{(2)}f_i \quad (28)$$
$$+\frac{1}{2}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}e_{i,\alpha}e_{i,\beta}f_i-f_i(\vec{x},t))=0$$

$$\sum_{i=1}^{N}(\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i+\epsilon^2\partial_t^{(2)}f_i+\frac{1}{2}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}e_{i,\alpha}e_{i,\beta}f_i)=0 \quad (29)$$

Expandiendo la derivada

$$\sum_{i=1}^{N}\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i=\epsilon\partial_{x_\alpha}^{(1)}\sum_{i=1}^{N}e_{i,\alpha}f_i^{(0)} \quad (30)$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i^{(1)}=\sum_{i=1}^{N}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}e_{i,\alpha}f_i^{(1)}$$

Usando la ecuación (20) en (30)

$$\sum_{i=1}^{N} \epsilon \partial_{x_\alpha}^{(1)} e_{i,\alpha}(\epsilon f_i^{(1)}) = \tag{31}$$
$$\sum_{i=1}^{N} \epsilon \partial_{x_\alpha}^{(1)} e_{i,\alpha}(-\frac{1}{\omega}\epsilon \partial_{x_\beta}^{(1)} e_{i,\beta} f_i(\vec{x},t) - \frac{1}{\omega}\epsilon^2 \partial_t^{(2)} f_i(\vec{x},t))$$

Expandiendo f_i

$$-\frac{\epsilon^2}{\omega}\sum_{i=1}^{N} \partial_{x_\alpha}^{(1)} e_{i,\alpha}(\partial_{x_\beta}^{(1)} e_{i,\beta} f_i^{(0)} + \epsilon \partial_t^{(2)} f_i^{(0)}) \tag{32}$$
$$= -\frac{\epsilon^2}{\omega}\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)} \sum_{i=1}^{N} e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(0)}$$

Usando ecuación (25)

$$= -\frac{\epsilon^2}{2\omega}\delta_{\alpha,\beta}\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\phi \tag{33}$$

Regresando a la ecuación (29)

$$\frac{\epsilon^2}{2\omega}\delta_{\alpha,\beta}\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\phi = \sum_{i=1}^{N}(\epsilon^2\partial_t^{(2)} f_i + \frac{1}{2}\epsilon^2 \partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)} e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i) \tag{34}$$

$$\frac{\epsilon^2}{2\omega}\delta_{\alpha,\beta}\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\phi = \epsilon^2\partial_t^{(2)}\sum_{i=1}^{N} f_i^0 + \frac{1}{2}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\sum_{i=1}^{N} e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(0)} \tag{35}$$

Usando nuevamente la ecuación (25)

$$\frac{\epsilon^2}{2\omega}\delta_{\alpha,\beta}\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\phi = \epsilon^2\partial_t^{(2)}\phi + \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{4}\epsilon^2\partial_{x_\alpha}^{(1)}\partial_{x_\beta}^{(1)}\phi \tag{36}$$

$$\frac{\epsilon^2}{2\omega}\partial_x^{2(1)}\phi - \frac{1}{4}\epsilon^2\partial_x^{2(1)}\phi = \epsilon^2\partial_t^{(2)}\phi \tag{37}$$

$$\frac{1}{2\omega}\partial_x^2\phi - \frac{1}{4}\partial_x^2\phi = \partial_t\phi \tag{38}$$

$$\frac{1}{2}(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2})\partial_x^2\phi = \partial_t\phi \tag{39}$$
$$D\partial_x^2\phi = \partial_t\phi$$

Con

$$D = \frac{1}{2}(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2}) \tag{40}$$

2. Desarrollo Lattice-Boltzmann

Usando la ecuación (1) y expandiendo la función de distribución y las derivadas espaciales y temporales en potencias de ϵ, basados en la referencia [3], obtenemos:

$$\begin{aligned} f_i &= f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + ... \\ \partial_t &= \epsilon\partial_{1t} + \epsilon^2\partial_{2x} + ... \\ \partial_x &= \epsilon\partial_{1x} + ... \end{aligned} \tag{41}$$

Reemplazando las ecuaciones (41) in la ecuación (1) e igualando orden por orden en ϵ, obtenemos:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{u} = 0. \tag{42}$$

$$\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} + \nabla\cdot\Pi^{(0)} = 0, \tag{43}$$

Donde ϕ, $\vec{u}$ son las cantidades macroscópicas definidas como:

$$\phi = \sum_i f_i^{(0)}, \quad \vec{u} = \sum_i \vec{v}_i f_i^{(0)} \tag{44}$$

Y el tensor $\Pi^{(0)}$ es:

$$\Pi^{(0)} = \sum_i v_{i\alpha} v_{iu} f_i^{(0)} \tag{45}$$

Definimos las componentes diagonales como la derivada temporal de ϕ, donde D es una constante, entonces:

$$\Pi^{(0)} = D\begin{pmatrix} \frac{\partial(\phi)}{\partial t} & 0 \\ 0 & \frac{\partial(\phi)}{\partial t} \end{pmatrix} \tag{46}$$

Reemplazando la ecuación (46) en las ecuaciones (43), obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{u} + D\nabla(\frac{\partial\phi}{\partial t}) = 0 \tag{47}$$

Ahora intercambiando derivadas:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\vec{u} + D\nabla(\phi)) = 0 \tag{48}$$

Asumiendo

$$\vec{u} + D\nabla(\phi) = \vec{0} \tag{49}$$

Tomando la divergencia de la ecuación (49) y usando (42), obtenemos:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\phi + D\nabla^2(\phi) = 0 \tag{50}$$

Por lo tanto, la ecuación de difusión es:

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi = D\nabla^2(\phi) \tag{51}$$

2.1. La función de equilibrio

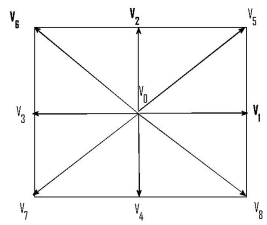

Fig. 1: Red de velocidades $d2q9$.

Usamos la rejilla de velocidades $d2q9$, ver figura (1) [1], en las cuales las velocidades v_i y los pesos w_i, sobre cada celda son:

$$w_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & if \quad i = 0 \\ \frac{1}{9} & if \quad i = 1,2,3,4 \\ \frac{1}{36} & if \quad i = 5,6,7,8 \end{cases} \tag{52}$$

Tanto las direcciones v_i como los pesos w_i, siguen las siguientes relaciones:

$$\sum_i w_i v_{i,\alpha} = 0 \tag{53}$$

$$\sum_i w_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} = \frac{1}{3}\delta_{\alpha,\beta} \tag{54}$$

$$\sum_i w_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} v_{i,\gamma} = 0 \tag{55}$$

Se asume la siguiente función de equilibrio

$$f_i^{(eq)} = \begin{cases} w_i[A\vec{v}_i \cdot \vec{u} + B] & if \quad i > 0 \\ w_0 C & otherwise \quad i = 0 \end{cases} \tag{56}$$

Se pueden encontrar las constantes A, B y C en la función $f_i^{(eq)}$, usando las definiciones de las cantidades macroscópicas ϕ, $\vec{u}$, el tensor $\Pi^{(0)}$, y la ecuaciones (46), (52), (53), (54) y (55). Entonces:

$$\phi = \frac{5}{9}B + \frac{4}{9}C \tag{57}$$

Y

$$C = \frac{9}{4}\phi - D\frac{15}{4}\frac{\partial(\phi)}{\partial t} \tag{58}$$

Por lo tanto la función de equilibrio es:,

$$f_i^{(eq)} = \begin{cases} 3w_i\left(\vec{v}_i \cdot \vec{u} + D\frac{\partial(\phi)}{\partial t}\right) & if \quad i > 0 \\ \frac{9}{4}w_0\phi - D\frac{15}{4}\frac{\partial(\phi)}{\partial t} & otherwise \quad i = 0 \end{cases} \tag{59}$$

3. Método de diferencias finitas

Se discretizan, tanto las coordenadas espaciales δx y δy, como la temporal δt, y la función $\phi(\vec{r}, t)$, usando el esquema FTCS, ([4]). Entonces, las derivadas espaciales y temporal quedan definidas como:

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+1,j}^m - \phi_{i,j}^m}{\delta x} \tag{60}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\phi_{i,j+1}^m - \phi_{i,j}^m}{\delta y} \tag{61}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\phi_{i,j+1}^m - \phi_{i,j}^m}{\delta t} \tag{62}$$

Y las segundas derivadas espaciales

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_{i+1,j}^m - 2\phi_{i,j}^m + \phi_{i-1,j}^m}{\delta x^2} \tag{63}$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = \frac{\phi_{i,j+1}^m - 2\phi_{i,j}^m + \phi_{i,j-1}^m}{\delta y^2} \tag{64}$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{\phi_{i,j+1}^m - 2\phi_{i,j}^m + \phi_{i,j-1}^m}{\delta t^2} \tag{65}$$

Reemplazando en la ecuación (39), y asumiendo $\delta x = \delta y$, tenemos:

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{k+1} &= \phi_{i,j}^k + r(\phi_{i,j+1}^k + \phi_{i,j-1}^k \\ &-4\phi_{i,j}^k + \phi_{i+1,j}^k + \phi_{i-1,j}^k) \end{aligned} \tag{66}$$

Los superíndices etiquetan la discretización temporal, y los subíndices la discretización espacial. Aquí r es dado por.

$$r = \frac{D\delta t}{\delta x^2} \tag{67}$$

El error se puede considerar como una expansión en ondas planas debido al caracter lineal de la ecuación:

$$E_{i,j}(x, y, t) = e^{at}e^{lk_i x}e^{lk_j y} \tag{68}$$

Donde l es el número imaginario (usualmente conocido como i, pero en nuestra notación lo usamos para etiquetar la discretización). Reemplazando en la ecuación (66)

$$\begin{aligned} &e^{a(t+\delta t)}e^{lk_i x}e^{lk_j y} = e^{a(t)}e^{lk_i x}e^{lk_j y} \\ &+\frac{D\delta t}{\delta x^2}(e^{a(t)}e^{lk_i(x)}e^{lk_j(y+\delta y)} + e^{a(t)}e^{lk_i(x)}e^{lk_j(y-\delta y)} \\ &-4e^{a(t)}e^{lk_i x}e^{lk_j y}e^{a(t)}e^{lk_i(x+\delta y)}e^{lk_j(y)} + \\ &e^{a(t)}e^{lk_i(x-\delta y)}e^{lk_j(y)}) \end{aligned} \tag{69}$$

Definiendo el factor de amplificación

$$A = \frac{e^{a(t+\delta t)}e^{lk_i x}e^{lk_j y}}{e^{a(t)}e^{lk_i x}e^{lk_j y}} \tag{70}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} e^{a(\delta t)} &= 1 + \frac{D\delta t}{\delta x^2}(e^{lk_j(\delta y)} + e^{lk_j(-\delta y)} \\ &-4 + e^{lk_i(\delta x)} + e^{lk_i(-\delta x)}) \end{aligned} \tag{71}$$

Usando un poco de álgebra

$$e^{a(\delta t)} = 1 - 4\frac{D\delta t}{\delta x^2}(\sin^2(\frac{k_i\delta x}{2}) + \sin^2(\frac{k_j\delta y}{2})) \quad (72)$$

La condición de estabilidad:

$$|1 - 4\frac{D\delta t}{\delta x^2}(\sin^2(\frac{k_i\delta x}{2}) + \sin^2(\frac{k_j\delta y}{2}))| \leq 1 \quad (73)$$

Por lo tanto

$$\frac{D\delta t}{\delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (74)$$

4. Resultados y Conclusiones

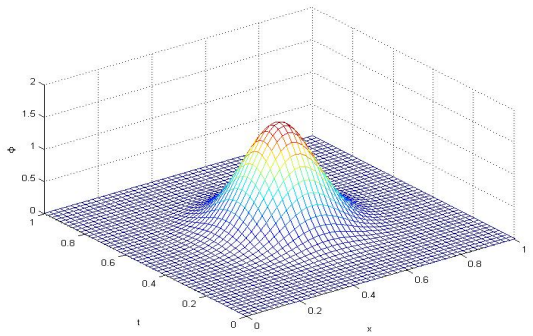

Fig. 2: Perfil de difusión método sección 1.

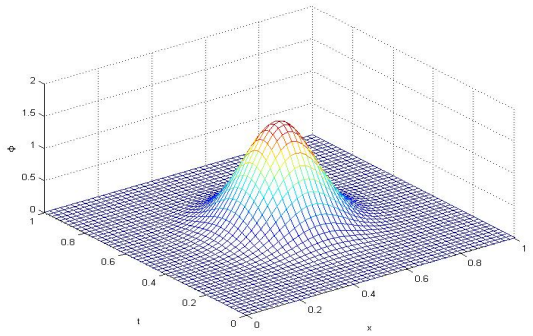

Fig. 3: Perfil de difusión método sección 2.

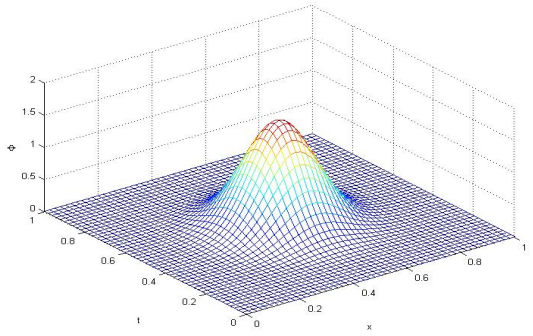

Fig. 4: Perfil de difusión método sección 3.

En los tres métodos empleados, secciones $1, 2$ y 3, se desarrollan las simulaciones sobre una red $(50x50)$, usando una Gaussiana como pulso inicial a propagar y con coeficiente de difusión $D = 5x10^{-5}$. Los resultados se aprecian en las figuras (2), (3) y (4). Fundamentalmente, los tres métodos presentan soluciones similares, las cuales, las gráficas no diferencian.

Se ha comparado la solución de la ecuación de difusión en dos dimensiones, usando dos procedimientos con la técnica de Lattice-Boltzmann y un tercero diferencias finitas. La comparación presenta un excelente acuerdo entre los tres resultados. De la misma forma, los tres desarrollos analíticos, son dados con el suficiente detalle algebraico, de tal manera, que el lector interesado en el tema puede trabajar autónomamente y formarse una idea cercana de los métodos. Por otra parte, los dos algoritmos de lattice-Boltzmann pueden ser extendidos fácilmente a tres dimensiones usando otras redes, e.g., $d3q19$, mostrando la potencia de los métodos, lo cual contrasta fuertemente con la dificultad de la aproximación analítica al problema.

5. Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por la Universidad Nacional de Colombia en la División de Investigación sede Bogotá con número de proyecto (DIB-8003355).

Referencias

[1] D. Wolf-Gladrow. Lattice-Gas cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction (Lectures in Mathematics), Springer-Verlag, (2000).

[2] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook, A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, Physical Review, 94 (1954), 511.

[3] F. Fonseca, Procesos de Difusión Anómala usando Lattice Boltzmann, Revista Colombiana de Física, Vol. 42, No. 2, (2010).

[4] J. C. Tannehill, D. A. Anderson y Richard H. Pletcher, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer (2nd ed.) Taylor & Francis. (1997) ISBN 156032046X.