

POLITECNICO DI TORINO
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN INGEGNERIA MECCANICA

PROVA FINALE
ANNO ACCADEMICO 2021/2022

APPLICAZIONE DELLO SCHEMA DI
GODUNOV PER LA SOLUZIONE DI
PROBLEMI DI FLUIDODINAMICA



CANDIDATO:
Carmelo Baronetto

RELATORE:
Prof. Alessandro Ferrari
CORRELATORE:
Ing. Oscar Vento

Indice

1	Introduzione	3
2	Legge di conservazione	4
3	Equazioni di Eulero	5
3.1	Proprietà di omogeneità e quasi-linearità	7
3.2	Sistemi iperbolici e caratteristiche	8
3.2.1	Linee caratteristiche delle equazioni di Eulero	9
3.2.2	Soluzione delle equazioni di Eulero	10
4	Equazioni di stato	13
4.1	Gas ideale	13
4.2	Equazione di stato tipo <i>stiffened gas</i>	15
4.2.1	Velocità del suono	20
4.2.2	Trasformazione isoentropica	22
4.3	Equazione di Tait	23
4.4	Velocità del suono	26
4.5	Trasformazione isoentropica	26
5	Metodo delle caratteristiche	27
6	Schemi Conservativi	32
7	Problema di Riemann	36
7.1	Gas ideale	37
7.2	Acqua	39
7.2.1	Equazione di stato tipo stiffened gas	40
7.2.2	Equazione di Tait	41
8	Schema di Godunov	41
8.1	Schema di Godunov del secondo ordine	45
9	Flusso attraverso ugello de Laval	46
9.1	Condizioni al bordo	48
9.1.1	Soluzione con metodo delle caratteristiche	48
9.1.2	Soluzione con Godunov	49
9.2	Risultati	51
9.3	Soluzione con schema del secondo ordine	55
9.4	Risultati	60

10 Problema di Sod	64
10.1 Soluzione analitica	64
10.2 Soluzione numerica	66
10.2.1 Tracciamento dell'interfaccia	66
10.3 Risultati	74
11 Esplosione sottomarina di una bolla di gas	80
11.1 Risultati	81
11.2 Risultati con schema del secondo ordine	88
12 Conclusioni	95
A Verifica della proprietà di omogeneità	96
B Calcolo autovalori di [A]	97
C Derivazione equazione di stato tipo Mie-Gruneisen	99
C.1 Energia di un oscillatore quantistico	101
C.2 Basse temperature	102
C.3 Alte temperature	107
C.4 Modello di Debay	108
C.5 Modello di Einstein	111
D Parametri dell'equazione di stato <i>stiffened gas</i>	112
D.1 Calcolo dei parametri dai dati sperimentali	114
E Equazioni per la soluzione del problema di Riemann	117
E.1 Rapporto delle densità $\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)$	117
E.2 Metodo 1 per la soluzione del problema di Riemann	118
E.3 Metodo 2 per la soluzione del problema di Riemann	121
E.3.1 Equazione di stato stiffened gas	121
E.3.2 Equazione di Tait	122
F Formulazione primitiva delle equazioni di Eulero	123
G Metodo di Newton-Raphson	123

1 Introduzione

La fluidodinamica computazionale è una branca della meccanica dei fluidi che utilizza l'analisi numerica e algoritmi per la soluzione di problemi di fluidodinamica. I calcoli vengono eseguiti mediante l'impiego di un computer [1]. In molti di questi problemi i fluidi vengono descritti dalle equazioni di Navier-Stokes. Si tratta di un insieme di tre equazioni che descrivono la conservazione di massa, quantità di moto ed energia e per le quali non esiste ad oggi una soluzione analitica. La fluidodinamica computazionale si pone come obiettivo la creazione di metodi che permettano di ottenere ottime soluzioni numeriche di queste equazioni. Poiché non si conosce la soluzione esatta, è fondamentale verificare la validità dei metodi numerici impiegati. Questo può essere fatto attraverso lo studio di equazioni più semplici per le quali si conosce la soluzione esatta, da confrontare con quella numerica. Questa tesi si concentra proprio sullo studio delle equazioni di Eulero, casi particolari delle più complesse equazioni di Navier-Stokes. Il metodo numerico a cui si fa riferimento è quello di Godunov, proposto nel 1959 dal Professor S. K. Godunov e basato sulla soluzione del problema di Riemann. La prima parte della tesi è dedicata all'introduzione delle equazioni di Eulero e allo studio delle loro proprietà, in particolare l'individuazione delle *linee caratteristiche*. Insieme con queste vengono presentate le equazioni di stato utilizzate per descrivere aria e acqua. La seconda parte riguarda gli schemi numerici che vengono distinti tra conservativi e non conservativi, sottolineando l'efficacia dei primi nel caso di soluzioni con forti discontinuità. Tra gli schemi conservativi viene ricavato lo schema di Godunov; l'introduzione del *limitatore di pendenza* permette di ottenere uno schema di Godunov del secondo ordine. Per ciascuna delle equazioni di stato utilizzate viene ricavata la relativa soluzione al problema di Riemann. L'ultima parte della tesi è dedicata all'applicazione dello schema di Godunov a tre problemi di prova. Il primo riguarda il flusso di aria attraverso un ugello de Laval in presenza di urto retto nel tratto divergente del condotto. Per gli altri problemi che coinvolgono due fluidi diversi (aria-acqua) vengono presentati due metodi che ne consentono il tracciamento dell'interfaccia. Il problema di Sod con aria e acqua permette di verificare l'efficacia di questi metodi. Infine si studia il caso dell'esplosione sottomarina di una bolla di gas.

2 Legge di conservazione

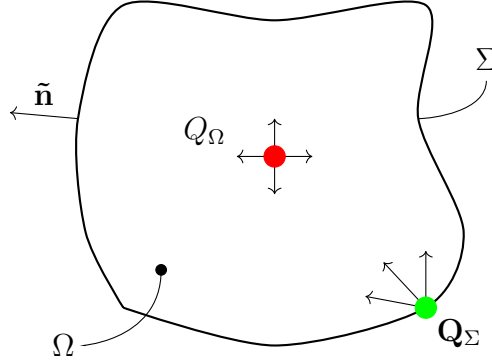


Figura 1. Dominio di integrazione

Per una generica grandezza scalare conservata y_Ω è possibile scrivere la relativa legge di conservazione:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_\Omega y_\Omega d\Omega + \oint_\Sigma \mathbf{F} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Sigma = \int_\Omega Q_\Omega d\Omega + \oint_\Sigma \mathbf{Q}_\Sigma \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Sigma \quad (2.1)$$

$\int_\Omega y_\Omega d\Omega$ è chiamato *termine di accumulo* mentre F è il *flusso fisico* di y_Ω . A secondo membro compaiono il termine sorgente di volume (Q_Ω) e di superficie (\mathbf{Q}_Σ). La (2.1) è la formulazione integrale della legge di conservazione e ammette come soluzioni anche funzioni non derivabili, dette *soluzioni deboli*. Applicando alla legge integrale il teorema di Gauss per cui:

$$\oint_\Sigma \mathbf{g} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Sigma = \int_\Omega \nabla \cdot \mathbf{g} d\Omega \quad (2.2)$$

si ricava la relativa formulazione differenziale:

$$\frac{\partial y_\Omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{Q}_\Sigma) = Q_\Omega \quad (2.3)$$

Le equazioni differenziali che presentano la struttura della (2.3) sono chiamate equazioni differenziali *conservative*. Il termine $\mathbf{F} - \mathbf{Q}_\Sigma$ è chiamato *flusso generalizzato*. Il flusso fisico comprende un termine diffusivo e uno convettivo:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_C \quad (2.4)$$

IL termine diffusivo è in generale esprimibile dalla legge di Fick:

$$\mathbf{F}_D = -\rho \cdot \chi \cdot \nabla \left(\frac{y_\Omega}{\rho} \right) \quad (2.5)$$

dove χ è il coefficiente di diffusione. Il termine convettivo è funzione della velocità locale \mathbf{v} :

$$\mathbf{F}_C = \mathbf{v} \cdot y_\Omega \quad (2.6)$$

Definita la relativa grandezza specifica $y = \frac{y_\Omega}{\rho}$, la (2.3) diventa quindi:

$$\frac{\partial(\rho \cdot y)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v} \cdot y) = \nabla \cdot (\rho \cdot \chi \cdot \nabla y) + Q_\Omega + \nabla \cdot \mathbf{Q}_\Sigma \quad (2.7)$$

Definizione 1. *Affinché un problema alle derivate parziali sia ben posto, la sua soluzione deve esistere ed essere unica, e deve dipendere continuamente rispetto ai valori iniziali e alle condizioni al bordo.*

Nota 2.1

La (2.7) rimane ancora una formulazione conservativa. Se ad esempio si applicasse la proprietà della divergenza al termine del flusso convettivo, per cui:

$$\nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v} \cdot y) = \nabla(\rho \cdot y) \bullet \mathbf{v} + (\rho \cdot y) \cdot \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.8)$$

si otterrebbe l'equazione:

$$\frac{\partial(\rho \cdot y)}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot y) \bullet \mathbf{v} + (\rho \cdot y) \cdot \nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot (\rho \cdot \chi \cdot \nabla y) + Q_\Omega + \nabla \cdot \mathbf{Q}_\Sigma \quad (2.9)$$

Questa equazione non possiede la struttura caratteristica della (2.3) e non è quindi una forma conservativa. In generale una legge di conservazione non è sempre espressa in una forma conservativa. Questa può essere sempre ottenuta per una grandezza conservata attraverso opportune manipolazioni dell'equazione iniziale ad esempio ricavando la legge direttamente dalla formulazione integrale.

3 Equazioni di Eulero

La (3.1), (3.2), (3.3) rappresentano rispettivamente le equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Queste tre leggi vengono chiamate equazioni di Eulero.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \cdot \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \cdot [\mathbf{I}]) = \mathbf{0} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial(\rho \cdot E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot H \cdot \mathbf{v}) = 0 \quad (3.3)$$

dove $E = e + \frac{1}{2} \cdot |v|^2$ ed $H = E + p \cdot v$ rappresentano l'energia e l'entalpia totali. Nel caso di flusso monodimensionale su geometria piana, le relazioni precedenti diventano:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial x} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho \cdot u^2)}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial(\rho \cdot E)}{\partial t} + \frac{\partial(u \cdot (p + \rho \cdot E))}{\partial x} = 0 \quad (3.6)$$

dove u indica la velocità locale. In forma matriciale il sistema può essere riscritto come:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{0} \quad (3.7)$$

dove i vettori sono definiti come:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \cdot u \\ \rho \cdot E \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho \cdot u \\ p + \rho \cdot u^2 \\ u \cdot (p + \rho \cdot E) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Storia Le equazioni di Eulero furono presentate dal matematico svizzero Leonhard Euler nel suo articolo del 1757 intitolato "*Principes généraux du mouvement des fluides*". Si trattava delle prime equazioni differenziali alle derivate parziali dopo l'equazione monodimensionale delle onde proposta dal matematico francese Jean-Baptiste le Rond d'Alembert nel 1747 in "*Recherches sur la courbe que forme une corde tenduë mise en vibration*". In realtà Eulero ricavò soltanto le equazioni di conservazione della massa e della quantità di moto. Si trattava di un sistema sottodeterminato ad eccezione del caso di flusso incompressibile. Solo nella seconda metà dell'Ottocento verrà introdotta l'equazione di bilancio dell'energia che permette di risolvere il sistema [2].

Equazioni di Navier-Stokes Le equazioni di Eulero coincidono con le più generali equazioni di Navier-Stokes, per un fluido non viscoso, in assenza di scambi termini conduttivi. In particolare l'assenza del termine viscoso fa sì che le soluzioni delle equazioni di Eulero non presentino smorzamenti e comprendano funzioni molto irregolari, le cui derivate possono non esistere. Nonostante la loro apparente semplicità, le equazioni di Eulero costituiscono un'ottima prova per verificare la bontà di uno schema numerico, che potrà

poi essere applicato alle più complesse equazioni di Navier-Stokes (3.9), su cui darà risultati ancora migliori.

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{0} \\ \frac{\partial(\rho \cdot \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \cdot [\mathbf{I}] + [\boldsymbol{\tau}]) = \rho \cdot \mathbf{f}_e \\ \frac{\partial(\rho \cdot E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot H \cdot \mathbf{v} - K \cdot \nabla T + [\boldsymbol{\tau}] \bullet \mathbf{v}) = \rho \cdot \mathbf{f}_e^* \bullet \mathbf{v} + \dot{q}_H \end{cases} \quad (3.9)$$

L'energia totale tiene conto anche dell'energia potenziale gravitazione $E = e + \frac{1}{2} \cdot |v|^2 + g \cdot z$. $\mathbf{f}_e = \left[\frac{m}{s^2} \right]$ rappresenta il contributo delle forze di volume (\mathbf{f}_e^* non include l'accelerazione di gravità inserita nell'energia totale); $\dot{q}_H = \sigma \cdot T^4$ è la potenza per irraggiamento dove σ indica la costante Stefan-Boltzmann. Infine K è la conducibilità termica e $[\boldsymbol{\tau}]$ è il tensore deviatorico degli sforzi.

3.1 Proprietà di omogeneità e quasi-linearità

Siano $[\mathbf{M}_k] \in \mathbb{R}^{n,n}$ ed $\mathbf{W}, \mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n,1}$, con m il numero di variabili indipendenti. Si consideri il generico sistema alle derivate parziali:

$$\sum_{k=1}^m [\mathbf{M}_k] \bullet \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} = \mathbf{S} \quad (3.1.1)$$

Il sistema è detto *lineare* se $[\mathbf{M}_k]$, ed \mathbf{S} sono funzioni solo di x_k ; è detto *quasi-lineare* se dipendono in generale da x_k e \mathbf{W} . Le equazioni di Eulero sono un sistema *quasi-lineare*. La dimostrazione consiste nel riscrivere la (3.7) nella stessa forma della (3.1.1). Per fare questo si ricorre alla proprietà di omogeneità per cui il flusso può essere espresso come:

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U}) \bullet \mathbf{U} \quad (3.1.2)$$

dove $[\mathbf{A}]$ corrisponde alla matrice jacobiana di \mathbf{F} . \mathbf{F}_x può essere espresso come:

$$\mathbf{F}_x = [\mathbf{J}_F] \bullet \mathbf{U}_x \quad (3.1.3)$$

Poiché $\mathbf{A} = [\mathbf{J}_F]$ si ottiene:

$$\mathbf{F}_x = [\mathbf{A}] \bullet \mathbf{U}_x \quad (3.1.4)$$

Sostituendo questa uguaglianza nella (3.7) e sfruttando la proprietà della matrice di identità si ottiene[†]:

$$[\mathbf{I}] \bullet \mathbf{U}_t + [\mathbf{A}] \bullet \mathbf{U}_x = \mathbf{0} \quad (3.1.5)$$

[†]Qui la proprietà di omogeneità non è molto importante e sarebbe bastato trovare una qualsiasi matrice per cui $\mathbf{F}_x = [\mathbf{M}_2] \bullet \mathbf{U}_x$. In generale la proprietà $[A] \equiv [\mathbf{J}_F]$ è molto utile ed è ad esempio fondamentale nel metodo del *flux vector splitting* [3].

Poiché la matrice identità è costante ed $[\mathbf{A}]$ è funzione solo di \mathbf{U} (vedi (A.5)) si conclude che il sistema (3.1.5) è *quasi-lineare*.

3.2 Sistemi iperbolici e caratteristiche

Si consideri l'omogenea associata alla (3.1.1):

$$\sum_{k=1}^m [\mathbf{M}_k] \bullet \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} = \mathbf{0} \quad (3.2.1)$$

Si cerchi come soluzione un'onda. In uno spazio m -dimensionale l'equazione dell'onda è data da:

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_0 \cdot e^{j \cdot \tilde{\mathbf{n}} \bullet \mathbf{x}} \quad (3.2.2)$$

dove $\tilde{\mathbf{n}} = \sum_{k=1}^m n_k \cdot \tilde{\boldsymbol{\mu}}_k$ è la direzione di propagazione dell'onda e $\mathbf{x} = \sum_{k=1}^m x_k \cdot \tilde{\boldsymbol{\mu}}_k$ è il vettore posizione. Sostituendo la (3.2.2) nella (3.2.1), dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\left(\sum_{k=1}^m [\mathbf{M}_k] \cdot n_k \right) \bullet \mathbf{W}_0 = \mathbf{0} \quad (3.2.3)$$

Affinché $\mathbf{W}_0 \neq \mathbf{0}$ si deve avere che:

$$\det \left(\sum_{k=1}^m [\mathbf{M}_k] \cdot n_k \right) = 0 \quad (3.2.4)$$

Se dalla soluzione della (3.2.4) si trovano n direzioni caratteristiche per cui $\tilde{\mathbf{n}}_i \in \mathbb{R}^n \forall i = 1 \dots n$ il sistema (3.1.1) è detto *iperbolico*. Se $\tilde{\mathbf{n}}_i \neq \tilde{\mathbf{n}}_j \forall i \neq j$ il sistema è detto *strettamente iperbolico*. Per i sistemi iperbolici sono molto importanti le *caratteristiche*.

Definizione 2. Le *caratteristiche* sono linee o superficie sulle quali si mantengono costanti alcune proprietà.

Nel caso delle onde, questa superficie equivale al fronte d'onda dove l'informazione che si propaga rimane costante e pari a \mathbf{W}_0 . Il fronte d'onda è perpendicolare alla direzione di propagazione dell'onda per cui:

$$\tilde{\mathbf{n}} \bullet \mathbf{x} = 0 \quad (3.2.5)$$

Se si sostituisce la (3.2.5) nella (3.2.2) si ottiene proprio:

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_0 \quad (3.2.6)$$

La superficie caratteristica è descritta dalla seguente equazione:

$$\sum_{k=1}^m n_k \cdot x_k = 0 \quad (3.2.7)$$

3.2.1 Linee caratteristiche delle equazioni di Eulero

Considerando la (3.1.5), nel caso delle equazioni di Eulero la (3.2.3) e (3.2.7) diventano:

$$([\mathbf{I}] \cdot n_t + [\mathbf{A}] \cdot n_x) \bullet \mathbf{U}_0 = \mathbf{0} \quad (3.2.8)$$

$$n_t \cdot t + n_x \cdot x = 0 \quad (3.2.9)$$

Dalla seconda si può definire λ come:

$$\frac{x}{t} = -\frac{n_t}{n_x} = \lambda \quad (3.2.10)$$

La (3.2.8) può essere riscritta come:

$$[\mathbf{A}] \bullet \mathbf{U}_0 = -\frac{n_t}{n_x} \cdot \mathbf{U}_0 = \lambda \cdot \mathbf{U}_0 \quad (3.2.11)$$

Il calcolo delle direzioni caratteristiche si è ridotto al problema agli autovalori per la matrice $[\mathbf{A}]$. Per sistemi strettamente iperbolici alle n distinte direzioni di propagazione dell'onda corrisponderanno altrettanti distinti autovalori e la matrice $[\mathbf{A}]$ risulterà diagonalizzabile.[‡] Di seguito sono riportati gli autovalori, i relativi autovettori di $[\mathbf{A}]$, la matrice degli autovalori $[\mathbf{\Lambda}]$ e quella degli autovettori $[\mathbf{\Psi}]$:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - a & \lambda_2 &= u & \lambda_3 &= u + a \\ \Psi_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u - a \\ H - u \cdot a \end{pmatrix} & \Psi_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ \frac{1}{2} \cdot u^2 \end{pmatrix} & \Psi_3 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u + a \\ H + u \cdot a \end{pmatrix} \\ [\mathbf{\Lambda}] &= \begin{bmatrix} u - a & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & u + a \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

[‡]Si noti come semplicemente considerando un'ulteriore variabile indipendente y si avrebbe avuto un'equazione del tipo $([\mathbf{I}] \cdot n_t + [\mathbf{M}_1] \cdot n_x + [\mathbf{M}_2] \cdot n_y) \bullet \mathbf{U}_0 = \mathbf{0}$ e sarebbe stato più difficile ottenere una relazione equivalente alla (3.2.11). Per questo la proprietà iperbolica non è stata definita a partire dalla diagonalizzabilità di $[\mathbf{A}]$.

$$[\Psi] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u-a & u & u+a \\ H-u \cdot a & \frac{1}{2} \cdot u^2 & H+u \cdot a \end{bmatrix} \quad (3.2.13)$$

È interessante calcolare le direzioni di propagazione delle onde corrispondenti agli autovalori trovati. Dall'equazione (3.2.10) e dalla condizione di normalizzazione:

$$n_t^2 + n_x^2 = 1 \quad (3.2.14)$$

si ottiene:

$$\begin{aligned} n_x &= \pm \frac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}} \\ n_t &= \mp \frac{\lambda}{\sqrt{1+\lambda^2}} \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Il verso di propagazione dipenderà dalle condizioni iniziali del problema. Si ottengono quindi le tre direzioni:

$$\mathbf{n}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{u-a}{\sqrt{1+(u-a)^2}} \\ \frac{1}{\sqrt{1+(u-a)^2}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{n}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{u}{\sqrt{1+u^2}} \\ \frac{1}{\sqrt{1+u^2}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{n}_3 = \begin{pmatrix} -\frac{u+a}{\sqrt{1+(u+a)^2}} \\ \frac{1}{\sqrt{1+(u+a)^2}} \end{pmatrix}$$

3.2.2 Soluzione delle equazioni di Eulero

La diagonalizzabilità della matrice $[\mathbf{A}]$ fornisce un metodo per la soluzione del sistema. Si considerino le equazioni di Eulero nella forma (3.1.5). Moltiplicando a sinistra per l'inversa di $[\Psi]$ si ottiene:

$$[\Psi]^{-1} \bullet \mathbf{U}_t + [\Psi]^{-1}[\mathbf{A}] \bullet \mathbf{U}_x = \mathbf{0} \quad (3.2.16)$$

Che può essere riscritta come:

$$[\Psi]^{-1} \bullet \mathbf{U}_t + ([\Psi]^{-1}[\mathbf{A}][\Psi]) [\Psi]^{-1} \bullet \mathbf{U}_x = \mathbf{0} \quad (3.2.17)$$

Definite la nuova variabile \mathbf{V} :

$$\mathbf{V} = [\Psi]^{-1} \bullet \mathbf{U} \quad (3.2.18)$$

e ricordando che:

$$[\Lambda] = [\Psi]^{-1}[\mathbf{A}][\Psi] \quad (3.2.19)$$

si ottiene il sistema diagonale:

$$\mathbf{V}_t + [\Lambda] \bullet \mathbf{V}_x = \mathbf{0} \quad (3.2.20)$$

La (3.2.20) può essere scritta per la k -esima componente come:

$${}_k V_t + \lambda_k \cdot {}_k V_x = 0 \quad (3.2.21)$$

Questa è ancora un'equazione alle derivate parziali, ma può essere trasformata in un sistema di due equazioni differenziali alle derivate ordinarie. Si scriva la 1-forma differenziale per la k -esima componente ${}_k V = {}_k V(t, x(t))$

$$d {}_k V = \frac{\partial {}_k V}{\partial t} \cdot dt + \frac{\partial {}_k V}{\partial x} \cdot dx = {}_k V_t \cdot dt + {}_k V_x \cdot dx \quad (3.2.22)$$

La derivata totale rispetto lungo la curva $l(t)$ è data da:

$$\frac{d}{dt} {}_k V(l(t)) = \frac{\partial {}_k V(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial {}_k V(t, x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} = {}_k V_t + {}_k V_x \cdot \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)_l \quad (3.2.23)$$

Se si sceglie come curva $l(t)$ la *linea caratteristica* k -esima (3.2.10):

$$l(t) = (t, x(t)) = (t, \lambda_k \cdot t) \quad (3.2.24)$$

si ottiene che:

$$\left(\frac{dx(t)}{dt} \right)_l = \lambda_k \quad (3.2.25)$$

Per questa particolare scelta di $l(t)$ la (3.2.23) diventa:

$$\frac{d}{dt} {}_k V(l(t)) = {}_k V_t + \lambda_k \cdot {}_k V_x \quad (3.2.26)$$

Il secondo membro di questa equazione è nullo per la (3.2.21). Si può quindi scrivere il seguente sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$\begin{cases} \frac{d {}_k V(t)}{dt} = 0 \\ \frac{dx}{dt} = \lambda_k \end{cases} \quad (3.2.27)$$

Definizione 3. Le *caratteristiche* sono famiglie di linee o superfici su cui è possibile trasformare un'equazione differenziale alle derivate parziali in un sistema di equazioni differenziali ordinarie.

La (3.2.27) dice che a partire da condizioni iniziali prefissate, l'informazione ${}_k V(t, x)$ si propaga lungo le *linee caratteristiche*. Se sono note le condizioni iniziali $\mathbf{U}_0(x)$ (quindi $\mathbf{V}_0(x)$ dalla (3.2.18)) è possibile conoscere la soluzione in un punto qualsiasi (t, x) :

$${}_k V(t, x) = {}_k V(t = 0, x - \lambda_k \cdot t) = {}_k V_0(x - \lambda_k \cdot t) \quad (3.2.28)$$

Dalla (3.2.18) si può ricavare:

$$\mathbf{U}(t, x) = [\Psi] \bullet \mathbf{V} = \sum_{k=1}^3 V(x, t) \cdot \Psi_k \quad (3.2.29)$$

Sostituendo in questa equazione la (3.2.28), si ottiene la soluzione in $\mathbf{U}(t, x)$:

$$\mathbf{U}(t, x) = \sum_{k=1}^3 V_0(x - \lambda_k \cdot t) \cdot \Psi_k \quad (3.2.30)$$

La figura 2 rappresenta graficamente la soluzione ottenuta con questo metodo, nel caso in cui $[\mathbf{A}]$ sia una matrice a coefficienti costanti e con le condizioni iniziali:

$$\mathbf{U}_0(x) = \begin{cases} \alpha_1 \cdot \Psi_1 + \alpha_2 \cdot \Psi_2 + \alpha_3 \cdot \Psi_3 & \text{se } x < 0 \\ \beta_1 \cdot \Psi_1 + \beta_2 \cdot \Psi_2 + \beta_3 \cdot \Psi_3 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3.2.31)$$

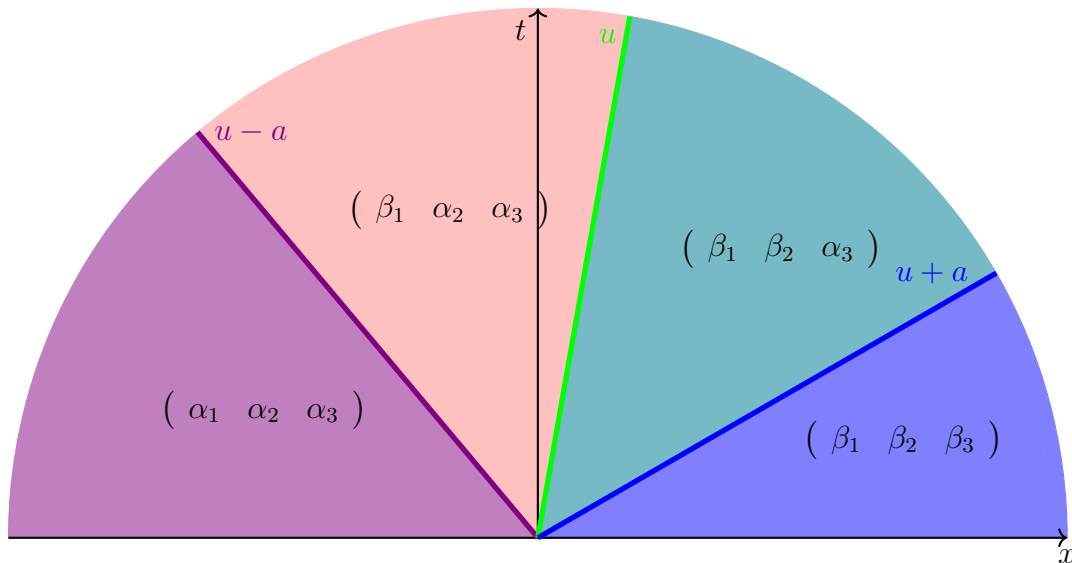


Figura 2.

Nota 3.2.1

Se il dominio spaziale è limitato i sistemi iperbolici si trasformano in problemi ai valori iniziale e alle condizioni al bordo. Queste ultime devono essere fornite per le famiglie di linee caratteristiche entranti nel

dominio. L'informazione al tempo $t = 0$ non è nota perché si trova in punti fuori dal dominio (figura 3). È necessario fornire le condizioni al bordo, che da qui si propagano lungo le caratteristiche.

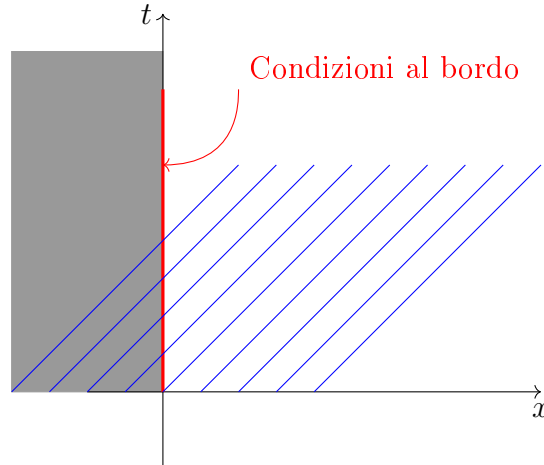


Figura 3. Famiglia di linee caratteristiche (blu) entranti nel dominio

4 Equazioni di stato

Un'equazione di stato è una relazione che lega le variabili di stato del sistema. In forma generale si può scrivere [4]:

$$f(p, \rho, T) = 0 \quad (4.1)$$

La conoscenza di f risulta fondamentale nello studio dei problemi di termodinamica, infatti permette di conoscere una delle tre grandezze note le altre due. In generale l'equazione di stato dipende dal sistema considerato e spesso non è possibile trovare un'espressione valida in tutto il campo di pressione, densità e temperatura. Per questo motivo in letteratura sono proposte delle relazioni empiriche che cercano di descrivere al meglio un particolare sistema in un intervallo limitato di pressione, densità e temperatura. In genere si tratta di leggi relativamente semplici che ne permettono una facile applicazione.

4.1 Gas ideale

Per gas ideale si intende un gas che gode delle seguenti proprietà [5]:

- molecole tutte identiche fra loro;
- molecole puntiformi;
- assenza di forze di interazione a distanza tra le molecole (molecole non interagenti);
- urti perfettamente elastici con le pareti;
- molecole si muovono di moto casuale in tutte le direzioni;

Nonostante nessun gas reale goda di queste proprietà, a basse pressioni e alte temperature il comportamento dei gas reali si avvicina a quello del gas ideale. Il motivo è dovuto al fatto che a basse pressioni le molecole di gas sono molto isolate e si incontrano poco frequentemente, di conseguenza diminuisce il contributo delle forze intermolecolari; ad alte temperature le molecole del gas si muovono molto velocemente e anche questo diminuisce il peso delle interazioni intermolecolari. Per questi motivi il modello di gas ideale viene spesso impiegato per descrivere il comportamento dell'aria. Tale ipotesi viene fatta anche nel corso di questa trattazione. Per un gas ideale il calore specifico è costante e dipende solo dalla struttura atomica del gas. L'aria, essendo costituita principalmente da azoto e ossigeno, è considerata un gas biatomico per cui si ha:

$$c_p = \frac{7}{2} \cdot R \quad (4.1.1)$$

$$c_v = \frac{5}{2} \cdot R \quad (4.1.2)$$

dove R è la costante caratteristica per l'aria.

Grandezza	Valore	Unità di misura
R	287	$\left(\frac{J}{kg \cdot K}\right)$
γ	1.4	-
c_p	1004.5	$\left(\frac{J}{kg \cdot K}\right)$
c_v	717.5	$\left(\frac{J}{kg \cdot K}\right)$

Tabella 1: Costanti per l'aria

Grandezza	Valore	Unità di misura
p_∞	$4.175 \cdot 10^8$	(Pa)
N	5.6	-

Tabella 2: Coefficienti della *stiffened gas* per l'acqua

4.2 Equazione di stato tipo *stiffened gas*

Un'equazione di stato del tipo *stiffened gas* può essere scritta come:

$$p = (N - 1) \cdot \rho \cdot e - N \cdot p_\infty \quad (4.2.1)$$

Questa equazione è stata proposta da Harlow & Amsden [6] e permette di descrivere il comportamento di liquidi ad alte pressioni [7] [8]. La pressione risente di due contributi: uno legato all'agitazione molecolare presente in gas, liquidi e solidi ($(N - 1) \cdot \rho \cdot e$); l'altro causato dalle interazioni intermolecolari che determinano la coesione tra le particelle allo stato liquido e solido ($N \cdot p_\infty$) [9].

Storia La (4.2.1) è una forma linearizzata della più generale equazione di Mie-Grüneisen. Agli inizi del '900 questi studiosi proposero una teoria secondo cui nei solidi la pressione è una funzione lineare dell'energia interna. Pur nascendo per descrivere il comportamento dei solidi, questa equazione nella forma (4.2.1) è molto usata anche nei liquidi compressi in presenza di urti poiché risulta molto semplice da usare.

Equazione di stato di Mie-Grüneisen Un'equazione di stato di tipo *Mie-Grüneisen* è una legge con la seguente struttura:

$$p \cdot V = G(V) + 2 \cdot \Gamma(V) \cdot \overline{E}_K \quad (4.2.2)$$

Dove Γ è il coefficiente di Grüneisen e \overline{E}_K è l'energia cinetica media del cristallo. Di seguito ne viene riportata la derivazione proposta nella splendida trattazione di Zharkov & Kalini [10]. Dal teorema del viriale di Clausius si ha che:

$$3 \cdot p \cdot V = 2 \cdot \overline{E}_K + \overline{\sum r \cdot f(r)} \quad (4.2.3)$$

dove r indica la distanza tra due coppie di atomi del reticolo e f la forza che agisce tra loro. Per descrivere le interazioni interatomiche, Mie assunse questa espressione per il potenziale:

$$\phi = \frac{a}{r^n} - \frac{b}{r^m} \quad n > m \quad (4.2.4)$$

A grandi distanze prevalgono le forze attrattive legate al termine $\frac{b}{r^m}$; a piccole distanze quelle repulsive dovute ad $\frac{a}{r^n}$. Nonostante si tratti di un modello estremamente semplificato, permette di spiegare la coesione tra gli atomi del cristallo senza che questi collasino tra loro. Dalla scelta della (4.2.4), deriva che l'energia potenziale all'equilibrio di una mole di atomi sia del tipo:

$$\Phi_0 = \Phi_0^{(1)} + \Phi_0^{(2)} = \frac{A}{V^{\frac{n}{3}}} + \frac{B}{V^{\frac{m}{3}}} \quad (4.2.5)$$

dove le costanti A e B dipendono dalla natura del potenziale. Vincenzo Zappallà [11] sintetizza efficacemente il significato del teorema del viriale: «per ottenere l'equilibrio del sistema, l'energia cinetica media delle particelle deve essere uguale alla metà della loro energia potenziale». In termini matematici:

$$2 \cdot \bar{E}_K + \bar{U} = 0 \quad (4.2.6)$$

Poiché gli atomi oscillando intorno a posizioni di equilibrio, il sistema si trova al minimo dell'energia potenziale. Ne deriva che, se si espande l'energia media in serie di potenze, e si trascurano i termini di ordine superiore al terzo si ottiene:

$$\bar{\Phi} = \Phi_0 + \frac{1}{2} \cdot \partial^2 \bar{\Phi} \quad (4.2.7)$$

Il termine \bar{U} della (4.2.6) è proprio la differenza di energia potenziale rispetto alla posizione di equilibrio:

$$\bar{U} = 2 \cdot (\bar{\Phi} - \Phi_0) \quad (4.2.8)$$

Sostituendo questa relazione nella (4.2.6) si ottiene:

$$\bar{\Phi} = \Phi_0 + \bar{E}_K \quad (4.2.9)$$

che può essere riscritto come:

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}^{(1)} + \bar{\Phi}^{(2)} = \Phi_0^{(1)} + \Phi_0^{(2)} \bar{E}_K \quad (4.2.10)$$

Supponiamo che questa energia sia distribuita tra forze attrattive e repulsive secondo una certa funzione η :

$$\bar{\Phi}^{(1)} = \Phi_0^{(1)} + \eta \cdot \bar{E}_K \quad (4.2.11)$$

$$\bar{\Phi}^{(2)} = \Phi_0^{(2)} + (1 - \eta) \cdot \bar{E}_K \quad (4.2.12)$$

A questo punto è possibile calcolare il termine $\sum r \cdot f(r)$ ricordando che la forza è legata al potenziale dalla relazione:

$$f(r) = -\frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (4.2.13)$$

Si ottiene quindi:

$$\overline{\sum r \cdot f(r)} = \overline{\sum r \cdot \left(n \cdot \frac{a}{r^{n+1}} - m \cdot \frac{b}{r^{m+1}} \right)} = n \cdot \overline{\sum \frac{a}{r^n}} - m \cdot \overline{\sum \frac{b}{r^m}} \quad (4.2.14)$$

Sostituendo l'energia potenziale si ricava:

$$\overline{\sum r \cdot f(r)} = n \cdot \overline{\sum \frac{a}{r^n}} - m \cdot \overline{\sum \frac{b}{r^m}} = n \cdot \overline{\Phi}^{(1)} + m \cdot \overline{\Phi}^{(2)} \quad (4.2.15)$$

Le sommatorie rappresentano l'energia potenziale media del sistema per le forze attrattive e repulsive. Utilizzando la (4.2.11) e (4.2.12) si ottiene:

$$\overline{\sum r \cdot f(r)} = n \cdot \Phi_0^{(1)} + m \cdot \Phi_0^{(2)} + [n \cdot \eta + m \cdot (1 - \eta)] \cdot \overline{E}_K \quad (4.2.16)$$

Sostituendo questa espressione nella (4.2.3) si ricava:

$$3 \cdot p \cdot V = 2 \cdot \overline{E}_K + n \cdot \Phi_0^{(1)} + m \cdot \Phi_0^{(2)} + [n \cdot \eta + m \cdot (1 - \eta)] \cdot \overline{E}_K \quad (4.2.17)$$

Dalle espressioni di $\Phi_0^{(1)}$ e $\Phi_0^{(2)}$ è possibile introdurre la funzione $G(V)$:

$$G(V) = \frac{n}{3} \cdot \Phi_0^{(1)} + \frac{m}{3} \cdot \Phi_0^{(2)} = \frac{n}{3} \cdot \frac{A}{V^{\frac{n}{3}}} + \frac{m}{3} \cdot \frac{B}{V^{\frac{m}{3}}} = -V \cdot \frac{\partial \Phi_0}{\partial V} \quad (4.2.18)$$

Il coefficiente di Gruneisen è definito come:

$$\Gamma(V) = \frac{1}{3} \cdot \left[1 + \frac{n}{2} \cdot \eta + \frac{m}{2} \cdot (1 - \eta) \right] \quad (4.2.19)$$

Utilizzando queste due definizioni nella (4.2.17), dopo opportuni passaggi algebrici si giunge all'equazione (4.2.2):

$$p \cdot V = G(V) + 2 \cdot \Gamma(V) \cdot \overline{E}_K \quad (4.2.20)$$

Nell'appendice C vengono ricavate le espressioni della pressione per un oscillatore armonico secondo varie ipotesi e modelli.

Derivazione dell'equazione tipo *stiffened gas* Il procedimento di linearizzazione qui riportato è tratto da [12]. A livello macroscopico il coefficiente di Grüneisen è definito come:

$$\Gamma = \frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial e} \right)_\rho \quad (4.2.21)$$

Questa relazione può essere ottenuta considerando il modello di Gruneisen, secondo cui durante un processo isocoro a basse temperature, tutto il calore trasmesso al cristallo è trasformato in energia vibrazionale degli atomi [10]:

$$2 \cdot \bar{E}_K = \int_0^T c_v \cdot dT \quad (4.2.22)$$

dove c_v è il calore specifico a volume costante. Dalla relazione fondamentale della termodinamica:

$$T \cdot ds = de + p \cdot dv \quad (4.2.23)$$

Per un processo isocoro $dv = 0$ per cui:

$$de = T \cdot ds \quad (4.2.24)$$

Il calore specifico è definito come:

$$c_v = \frac{\delta q}{dT} = \frac{T \cdot ds}{dT} \quad (4.2.25)$$

Sostituendo l'energia interna al numeratore si ottiene:

$$c_v = \frac{de}{dT} \quad (4.2.26)$$

Sostituendo questa espressione nella (4.2.22), l'integrale diventa:

$$2 \cdot \bar{E}_K = \int_0^e \frac{de}{dT} \cdot dT = \int_0^e de = e \quad (4.2.27)$$

Derivando la (4.2.2) rispetto all'energia interna lungo un'isocora, in termini di grandezze specifiche si ottiene la relazione (4.2.21):

$$\frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_\rho = \Gamma(V) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial e} (2 \cdot \bar{E}_K) \right)_\rho = \Gamma(V) \cdot \frac{de}{de} = \Gamma(V) \quad (4.2.28)$$

A questo punto si definisca il coefficiente γ come:

$$\gamma = \frac{\rho}{p} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (4.2.29)$$

In generale, per una grandezza $n(v, e)$, dalla regola della catena si può scrivere:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \rho} \right)_s = \left(\frac{\partial n}{\partial \rho} \right)_e + \left(\frac{\partial n}{\partial e} \right)_\rho \cdot \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s \quad (4.2.30)$$

Richiamando la relazione fondamentale della termodinamica:

$$T \cdot ds = de + p \cdot dv \quad (4.2.31)$$

Lungo una isoentropica $ds = 0$, per cui:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_s = -p \quad (4.2.32)$$

che in funzione della densità diventa:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s = \frac{p}{\rho^2} \quad (4.2.33)$$

Sostituendo la relazione appena ottenuta nella (4.2.30) si ricava l'espressione:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \rho}\right)_s = \left(\frac{\partial n}{\partial \rho}\right)_e + \frac{p}{\rho^2} \cdot \left(\frac{\partial n}{\partial e}\right)_\rho \quad (4.2.34)$$

Si applichi la (4.2.34) alla pressione:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e + \frac{p}{\rho^2} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \quad (4.2.35)$$

Sostituendo la (4.2.29), (4.2.21) nell'equazione appena ottenuta si ottiene:

$$\frac{p}{\rho} \cdot \gamma = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e + \frac{p}{\rho} \cdot \Gamma \quad (4.2.36)$$

da cui:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e = \frac{p}{\rho} \cdot (\gamma - \Gamma) \quad (4.2.37)$$

Riassumendo si ottengono le due relazioni:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho = \Gamma \cdot \rho \\ \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e = \frac{p}{\rho} \cdot (\gamma - \Gamma) = p \cdot v \cdot (\gamma - \Gamma) \end{cases} \quad (4.2.38)$$

Si consideri ora l'espansione di Taylor al primo ordine per la pressione:

$$p(\rho, e) = p_0 + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e \cdot (\rho - \rho_0) + \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \cdot (e - e_0) \quad (4.2.39)$$

Sostituendo le relazioni (4.2.38) nella (4.2.39) si ottiene:

$$p(\rho, e) = p_0 + p_0 \cdot v_0 \cdot (\gamma_0 - \Gamma_0) \cdot (\rho - \rho_0) + \Gamma_0 \cdot \rho_0 \cdot (e - e_0) \quad (4.2.40)$$

La densità può essere espressa come:

$$\rho(p, e) = \rho_0 + o(\Delta p, \Delta e) \quad (4.2.41)$$

Sostituendo questa approssimazione nella (4.2.40) e trascurando i termini del secondo ordine si ottiene:

$$p(\rho, e) = p_0 + p_0 \cdot v_0 \cdot (\gamma_0 - \Gamma_0) \cdot (\rho - \rho_0) + \Gamma_0 \cdot \rho \cdot (e - e_0) \quad (4.2.42)$$

La (4.2.40) può essere riscritta come:

$$p(\rho, e) = [p_0 \cdot (1 + \Gamma_0) - a_0^2 \cdot \rho_0] + \rho \cdot \Gamma_0 \cdot \left[e - \left(e_0 + p_0 \cdot v_0 - \frac{a_0^2}{\Gamma_0} \right) \right] \quad (4.2.43)$$

dove la velocità del suono è $a_0^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \gamma_0 \cdot p_0 \cdot v_0$. Definite:

$$p_\infty = \frac{\rho_0 \cdot a_0^2}{\Gamma_0 + 1} - p_0 \quad (4.2.44)$$

$$e_\infty = e_0 + p_0 \cdot v_0 - \frac{a_0^2}{\Gamma_0} \quad (4.2.45)$$

e sostituite queste due definizioni nella (4.2.43) si giunge a:

$$p = -(\Gamma_0 + 1) \cdot p_\infty + \rho \cdot \Gamma_0 \cdot (e - e_\infty) \quad (4.2.46)$$

In genere nella (4.2.46) il termine e_∞ non è rilevante, dal momento che l'energia è definita a meno di una costante. Posto $\Gamma_0 = N - 1$ si ottiene l'espressione (4.2.1):

$$p = (N - 1) \cdot \rho \cdot e - N \cdot p_\infty \quad (4.2.47)$$

4.2.1 Velocità del suono

Si vuole di seguito trovare l'espressione della velocità del suono nel caso dell'equazione di stato *stiffened gas* [8]. In generale la velocità del suono è definita come:

$$a^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (4.2.48)$$

Si consideri la (4.2.31); se espressa in termini di densità si ottiene:

$$ds = \frac{1}{T} \cdot de - \frac{p}{T \cdot \rho^2} \cdot d\rho \quad (4.2.49)$$

L'equazione ottenuta permette di ricavare le seguenti identità:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_\rho = \frac{1}{T} \quad (4.2.50)$$

$$\left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_e = -\frac{p}{T \cdot \rho^2} \quad (4.2.51)$$

Si consideri la 1-forma differenziale dell'entropia:

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_\rho \cdot de + \left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_e \cdot d\rho \quad (4.2.52)$$

Poiché si è lungo una curva ad entropia costante la (4.2.52) diventa:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_\rho \cdot de + \left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_e \cdot d\rho = 0 \quad (4.2.53)$$

da cui si ottiene la relazione:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s = -\frac{\left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_e}{\left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_\rho} \quad (4.2.54)$$

Si differenzi ora la pressione:

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \cdot de + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e \cdot d\rho \quad (4.2.55)$$

Dividendo per $d\rho$ si ottiene:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \cdot \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e \quad (4.2.56)$$

Sostituendo la (4.2.54) nell'equazione appena ottenuta si ottiene infine:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = -\left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \cdot \frac{\left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_e}{\left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_\rho} + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e \quad (4.2.57)$$

Le derivate parziali della pressione rispetto all'energia interna e alla densità si ricavano direttamente dalla (4.2.1) e valgono:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho = (N - 1) \cdot \rho \quad (4.2.58)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e = \frac{p + N \cdot p_\infty}{\rho} \quad (4.2.59)$$

Sostituendo la (4.2.51), (4.2.50), (4.2.58) e (4.2.59) nella (4.2.57) si ottiene:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = -(N-1) \cdot \rho \cdot \left(-\frac{p}{T \cdot \rho^2} \cdot T\right) + \frac{p + N \cdot p_\infty}{\rho} = N \cdot \frac{p + p_\infty}{\rho} \quad (4.2.60)$$

La velocità del suono è quindi pari a:

$$a = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} = \sqrt{N \cdot \frac{p + p_\infty}{\rho}} \quad (4.2.61)$$

Nota 4.2.1

Per un gas ideale $N \rightarrow \gamma$; $p_\infty \rightarrow 0$ e si ottiene la ben nota relazione:

$$a = \sqrt{\gamma \cdot \frac{p}{\rho}} \quad (4.2.62)$$

4.2.2 Trasformazione isoentropica

È importante conoscere la legge che descrive una evoluzione isoentropica nel caso dell'equazione di stato *stiffened gas* [8]. Si consideri l'equazione (4.2.49); poiché l'entropia è costante si ha:

$$\frac{1}{T} \cdot de - \frac{p}{T \cdot \rho^2} \cdot d\rho = 0 \quad (4.2.63)$$

Differenziando la (4.2.1) si ottiene:

$$de = \frac{1}{(N-1) \cdot d\rho} \cdot dp - \frac{p + N \cdot p_\infty}{(N-1) \cdot \rho^2} \cdot d\rho \quad (4.2.64)$$

Sostituendo l'espressione appena ottenuta nella (4.2.63) si ottiene un'equazione nelle sole variabili (p, ρ) . Dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\frac{dp}{p + p_\infty} = N \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.2.65)$$

A questo punto, poiché p_∞ è costante si può effettuare il cambio di variabile $dp = d(p + p_\infty)$ da cui si ottiene:

$$\frac{d(p + p_\infty)}{p + p_\infty} = N \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.2.66)$$

La (4.2.66) è un'equazione differenziale a variabili separabili, che può essere integrata tra gli stati $0 \rightarrow 1$:

$$\int_{p_0}^{p_1} \frac{d(p + p_\infty)}{p + p_\infty} = N \cdot \int_{\rho_0}^{\rho_1} \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.2.67)$$

da cui:

$$\ln(p_1 + p_\infty) - \ln(p_0 + p_\infty) = N \cdot \ln(\rho_1) - N \cdot \ln(\rho_0) \quad (4.2.68)$$

che può essere scritta come:

$$\ln\left(\frac{p_1 + p_\infty}{\rho_1^N}\right) = \ln\left(\frac{p_0 + p_\infty}{\rho_0^N}\right) \quad (4.2.69)$$

e infine:

$$\frac{p + p_\infty}{\rho^N} = \text{costante} \quad (4.2.70)$$

Nota 4.2.2

Anche in questo per un gas ideale $N \rightarrow \gamma$; $p_\infty \rightarrow 0$ e si ottiene la relazione:

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{costante} \quad (4.2.71)$$

4.3 Equazione di Tait

L'equazione di Tait utilizzata per descrivere l'acqua è la seguente [13]:

$$p = B \cdot \left[\left(\frac{\rho}{\rho_w} \right)^N - 1 \right] \quad (4.3.1)$$

Grandezza	Valore	Unità di misura
B	331130100	(Pa)
N	7	-
ρ_w	1007	$\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

Tabella 3: Coefficienti equazione di Tait per l'acqua

Storia Un'interessante revisione delle equazioni di stato utilizzate per descrivere l'acqua liquida, e di come queste si sono evolute nel tempo è presentata da A. T. J. Hayward in [14] e J. H. Dymond & R. Malhotra in [15]. L'equazione venne pubblicata dal matematico e fisico Peter Guthrie Tait nel 1888 nella forma originaria:

$$\frac{v_0 - v}{(p - p_0) \cdot v_0} = \frac{A}{\Pi + p} \quad (4.3.2)$$

dove A e Π sono due costanti da determinare. Tait si era dedicato allo studio della compressibilità dell'acqua durante la *spedizione Challenger*. Si trattò della prima ricerca marina globale, organizzata dalla *Royal Society* in collaborazione con l'università di Edimburgo dove Tait era professore di *filosofia della natura*. Tra il 1873-1876 la spedizione percorse 125936 (km) a bordo della *H.M.S Challenger*, una piccola nave da guerra donata dalla *Royal Navy* e allestita per la ricerca scientifica [16] [17]. La (4.3.2) scritta in questo modo non sembra avere un chiaro significato fisico e risulta più utile considerarne il reciproco:

$$-v_0 \cdot \frac{p - p_0}{v - v_0} = \frac{\Pi}{A} + \frac{1}{A} \cdot (p - p_0) \quad (4.3.3)$$

Il primo membro rappresenta il modulo di compressibilità *secante* (\overline{K}):

$$\overline{K} = -v_0 \cdot \frac{p - p_0}{v - v_0} \quad (4.3.4)$$

Quello che Tait aveva trovato nel corso della spedizione era la relazione lineare tra \overline{K} e la pressione:

$$\overline{K} = \overline{K}_0 + m \cdot (p - p_0) \quad (4.3.5)$$

dove $\overline{K}_0 = \frac{\Pi}{A}$ $m = \frac{1}{A}$. Il modulo di compressibilità è definito come:

$$K = -v \cdot \frac{\partial p}{\partial v} \quad (4.3.6)$$

Questo è il “vero” modulo di compressibilità e per distinguerlo da \overline{K} viene chiamato anche modulo di compressibilità *tangente*. La terminologia è legata alla forma della curva di compressione (figura 4). Per pressioni delle decine di bar la curva di compressione può essere approssimata da una retta (zona A). L'andamento diventa quadratico per pressioni di centinaia di bar (zona B) e cubico per pressioni dell'ordine delle migliaia di bar (zona C). Questa forma fa sì che i moduli di compressione *secante* e *tangente* rappresentino i coefficienti angolari delle rette rispettivamente secanti e tangenti della curva di compressione.

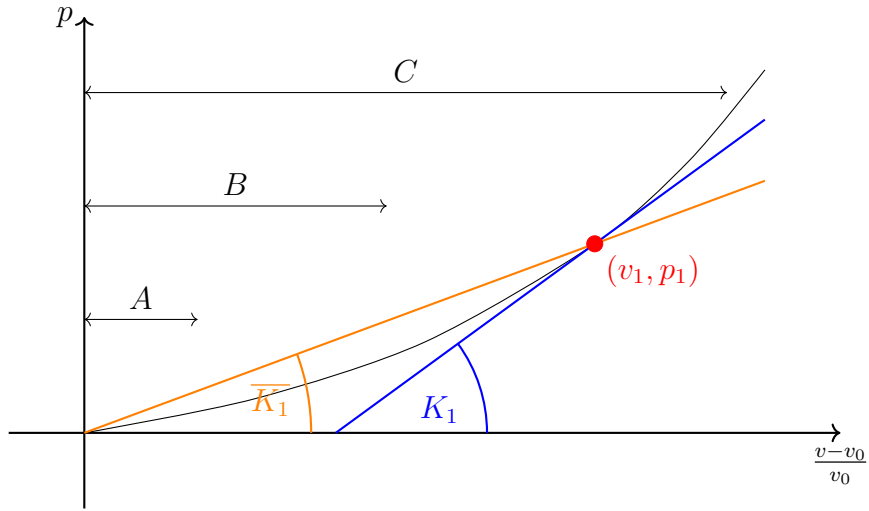


Figura 4. Curva di compressione: $A \approx 10 \text{ (bar)}$; $B \approx 100 \text{ (bar)}$, $C \approx 1000 \text{ (bar)}$ [6]

Equazione di Tait modificata Nel corso del tempo sono comparse in letteratura numerose leggi sotto il nome di equazione di Tait. La prima di queste risale probabilmente al 1907 nel libro pubblicato da Tammann:

$$-\frac{\partial v}{\partial p} = \frac{A}{B + (p - p_0)} \quad (4.3.7)$$

L'autore forse nel citare erroneamente Tait sostituì il modulo di compressibilità *tangente* con la forma differenziale $-\frac{dv}{dp}$. La (4.3.7) può essere riscritta come:

$$-v_0 \cdot \frac{\partial p}{\partial v} = v_0 \cdot \frac{B + (p - p_0)}{A} \quad (4.3.8)$$

Il primo membro rappresenta un ibrido tra il modulo di compressibilità *tangente* e *secante*. Di seguito viene indicato con K' :

$$K' = -v_0 \cdot \frac{\partial p}{\partial v} \quad (4.3.9)$$

Dall'integrazione della (4.3.8) si ottiene:

$$v = v_0 - A \cdot \ln \left[\frac{B + (p - p_0)}{B} \right] \quad (4.3.10)$$

È importante sottolineare come i tre moduli di compressibilità coincidano se calcolati a pressione e volume di riferimento:

$$K_0 \equiv \bar{K}_0 \equiv K'_0 \quad (4.3.11)$$

Questo è il motivo per cui tutte queste equazioni danno risultati simili nei campi di pressione e densità in cui vengono applicate che non si discostano troppo da quelli di riferimento. Nonostante questo, sarebbe da preferire l'espressione (4.3.3) perché il modulo di compressibilità *secante* risulta estremamente più semplice da misurare sperimentalmente. L'equazione di Tammann è quella più sconsigliata: non fornisce risultati migliori (al più equivalenti se non peggiori), non dà luogo a forme particolarmente semplici e i suoi coefficienti non hanno particolari significati fisici. In letteratura esistono poi molte altre equazioni che risultano equivalenti alla (4.3.3) per pressioni fino ai 1000 (bar). La (4.3.1) utilizzata nel corso di questa trattazione presenta la stessa struttura dell'equazione proposta da MacDonald:

$$p = \frac{K_0}{n} \cdot \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right] \quad (4.3.12)$$

4.4 Velocità del suono

L'espressione della velocità del suono (4.2.48) nel caso dell'equazione di Tait è ricavata in [13]. Si consideri la pressione come funzione della densità e dell'entropia:

$$p(\rho, s) = B \cdot \left[\left(\frac{\rho}{\rho_w} \right)^N - 1 \right] \quad (4.4.1)$$

Poiché la pressione in realtà dipende solo dalla densità si ha che derivata parziale e totale coincidono:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \frac{dp}{d\rho} = N \cdot \frac{p + B}{\rho} \quad (4.4.2)$$

da cui:

$$a = \sqrt{N \cdot \frac{p + B}{\rho}} \quad (4.4.3)$$

4.5 Trasformazione isoentropica

Per ricavare la legge che descrive una evoluzione a entropia costante nel caso dell'equazione di Tait si consideri la forma differenziale della pressione:

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \cdot ds + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \cdot d\rho \quad (4.5.1)$$

Lungo una trasformazione isoentropica $ds = 0$ per cui:

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \cdot d\rho \quad (4.5.2)$$

Sostituendo la (4.4.2) nell'equazione appena ottenuta si ha:

$$dp = N \cdot \frac{p + B}{\rho} \cdot d\rho \quad (4.5.3)$$

Poiché B è costante la (4.5.3) può essere riscritta considerando che $dp = d(p + B)$:

$$\frac{d(p + B)}{p + B} = N \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (4.5.4)$$

Si è ottenuta un'equazione differenziale a variabili separabili equivalente alla (4.2.66) che integrata permette di scrivere:

$$\frac{p + B}{\rho^N} = \text{costante} \quad (4.5.5)$$

5 Metodo delle caratteristiche

Definizione 4. *Un flusso è detto barotropico se una delle leggi della termodinamica che lo descrive può essere assunta a priori.*

Si consideri un flusso barotropico per il quale la generica variabile termodinamica θ si mantiene costante:

$$\frac{d\theta}{dt} = 0 \quad (5.1)$$

che può essere riscritta come:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (5.2)$$

Si supponga che per tale flusso valgano le seguenti relazioni:

$$\left(\frac{p + \bar{p}}{\rho^n} \right)_\theta = \text{costante} \quad (5.3)$$

$$a_\theta = \sqrt{n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho}} \quad (5.4)$$

Sostituendo la (5.2) al posto dell'equazione dell'energia, si ottiene il sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad (5.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho \cdot u^2)}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad (5.6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad (5.7)$$

La (5.5) può essere riscritta come:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \cdot u + \rho \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = \rho_t + \rho_x \cdot u + \rho \cdot u_x = 0 \quad (5.8)$$

da cui si ottiene:

$$\rho_t = -\rho_x \cdot u - \rho \cdot u_x \quad (5.9)$$

Lo stesso viene fatto per la (5.6), che diventa:

$$\rho_t \cdot u + \rho \cdot u + p_x + \rho_x \cdot u^2 + \rho \cdot 2 \cdot u_x \cdot u = 0 \quad (5.10)$$

Sostituendo la (5.9) nell'equazione appena ottenuta si ottiene:

$$\rho \cdot u_t + \rho \cdot u \cdot u_x + p_x = 0 \quad (5.11)$$

Dividendo per ρ la (5.8) e la (5.11), si ottiene il sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\rho_t}{\rho} + \frac{\rho_x}{\rho} \cdot u + u_x = 0 \\ u_t + u \cdot u_x + \frac{p_x}{\rho} = 0 \\ \theta_t + u \cdot \theta_x = 0 \end{array} \right. \quad (5.12)$$

Si vuole adesso riscrivere la (5.12) nelle variabili (a_θ, θ, u) . Dalla politropica (5.3) si ottiene:

$$d\left(\frac{p + \bar{p}}{\rho^n}\right) = 0 \quad (5.13)$$

Svolgendo il differenziale si ha:

$$\frac{d(p + \bar{p})}{\rho^n} = \frac{p + \bar{p}}{\rho^n} \cdot n \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (5.14)$$

che diventa:

$$d(p + \bar{p}) = n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho} \cdot d\rho \quad (5.15)$$

Sostituendo in questa equazione l'espressione di a_θ e considerando che \bar{p} è costante per cui $d(p + \bar{p}) = dp$, si ottiene:

$$dp = a_\theta^2 \cdot d\rho \quad (5.16)$$

Differenziando l'espressione della velocità del suono si ottiene:

$$da_\theta = d\left(n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.17)$$

da cui segue:

$$da_\theta = \frac{1}{2} \cdot \left(n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot d\left(n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho}\right) = \frac{n}{2 \cdot a_\theta} \cdot \left[\frac{d(p + \bar{p})}{\rho} - \frac{p + \bar{p}}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{\rho}\right] \quad (5.18)$$

Da questa equazione segue che:

$$\frac{da_\theta}{a_\theta} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\rho}{p + \bar{p}} \cdot \left[n \cdot \frac{d(p + \bar{p})}{\rho} - n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{\rho}\right] = \frac{1}{2} \frac{dp}{p + \bar{p}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (5.19)$$

Si ottengono quindi le due equazioni:

$$\begin{cases} dp = a_\theta^2 \cdot d\rho \\ \frac{da_\theta}{a_\theta} = \frac{1}{2} \frac{dp}{p + \bar{p}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{d\rho}{\rho} \end{cases} \quad (5.20)$$

Sostituendo la prima equazione nella seconda si ottiene:

$$\frac{da_\theta}{a_\theta} = \frac{1}{2} \frac{1}{p + \bar{p}} \cdot n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho} \cdot d\rho - \frac{1}{2} \cdot \frac{d\rho}{\rho} \quad (5.21)$$

da cui si ricava:

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{2}{n - 1} \cdot \frac{da_\theta}{a_\theta} \quad (5.22)$$

Sostituendo questa equazione nella prima del sistema (5.20) si ricava:

$$dp = n \cdot \frac{p + \bar{p}}{\rho} \cdot \rho \cdot \frac{2}{n - 1} \cdot \frac{da_\theta}{a_\theta} \quad (5.23)$$

che diventa:

$$\frac{dp}{\rho} = \frac{2}{n - 1} \cdot a_\theta \cdot da_\theta \quad (5.24)$$

Dalla (5.22) e (5.24) si ricavano:

$$\begin{cases} \frac{\rho_t}{\rho} = \frac{2}{n-1} \cdot \frac{a_{\theta t}}{a_{\theta}} \\ \frac{\rho_x}{\rho} = \frac{2}{n-1} \cdot \frac{a_{\theta x}}{a_{\theta}} \\ \frac{p_x}{\rho} = \frac{2}{n-1} \cdot a_{\theta} \cdot a_{\theta x} \end{cases} \quad (5.25)$$

Sostituendo queste relazioni nel sistema (5.12) si ottiene:

$$\begin{cases} a_{\theta t} + u \cdot a_{\theta x} + \frac{n-1}{2} \cdot a_{\theta} \cdot u_x = 0 \\ u_t + u \cdot u_x + \frac{2}{n-1} \cdot a_{\theta} \cdot a_{\theta x} = 0 \\ \theta_t + u \cdot \theta_x = 0 \end{cases} \quad (5.26)$$

Si vuole trasformare la (5.26) in un sistema di equazioni alle derivate ordinarie. Per la terza equazione della (5.26), questa è ottenuta dalla (5.1) ed equivale a:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = 0 \\ \frac{dx}{dt} = u \end{cases} \quad (5.27)$$

Per le altre due si procede a moltiplicare ciascuna equazione per un coefficiente μ_k e a sommarle tra loro:

$$\mu_1 \cdot \left[a_{\theta t} + u \cdot a_{\theta x} + \frac{n-1}{2} \cdot u_x \right] + \mu_2 \cdot \left[u_t + u \cdot u_x + \frac{2}{n-1} \cdot a_{\theta} \cdot a_{\theta x} \right] = 0 \quad (5.28)$$

Questa equazione può essere riscritta come:

$$\mu_1 \cdot \left[a_{\theta t} + a_{\theta x} \cdot \frac{\mu_1 \cdot u + \mu_2 \cdot \frac{2}{n-1} \cdot a}{\mu_1} \right] + \mu_2 \cdot \left[u_t + u_x \cdot \frac{\mu_2 \cdot u + \mu_1 \cdot \frac{n-1}{2} \cdot a}{\mu_2} \right] = 0 \quad (5.29)$$

Si supponga che:

$$\frac{\mu_1 \cdot u + \mu_2 \cdot \frac{2}{n-1} \cdot a}{\mu_1} = \frac{\mu_2 \cdot u + \mu_1 \cdot \frac{n-1}{2} \cdot a}{\mu_2} =: \lambda \quad (5.30)$$

Sotto questa ipotesi la (5.29) può essere riscritta come:

$$\mu_1 \cdot (a_{\theta t} + \lambda \cdot a_{\theta x}) + \mu_2 \cdot (u_t + \lambda \cdot u_x) = 0 \quad (5.31)$$

che equivale a al sistema alle derivate ordinarie:

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} = 0 \\ \frac{dx}{dt} = \lambda \end{cases} \quad (5.32)$$

dove R è chiamata *variabile di Riemann* ed è definita come:

$$R = \mu_1 \cdot a_\theta + \mu_2 \cdot u \quad (5.33)$$

La (5.30) equivale al sistema lineare:

$$\begin{cases} \mu_1 \cdot (\lambda - u) + \mu_2 \cdot \left(-\frac{2}{n-1} \cdot a_\theta\right) = 0 \\ \mu_1 \cdot \left(-\frac{n-1}{2} \cdot a_\theta\right) + \mu_2 \cdot (\lambda - u) = 0 \end{cases} \quad (5.34)$$

Affinché non si abbia la soluzione banale $\mu_1 = \mu_2 = 0$ il determinante della matrice associata deve essere nullo:

$$\begin{vmatrix} \lambda - u & -\frac{2}{n-1} \cdot a_\theta \\ -\frac{n-1}{2} \cdot a_\theta & \lambda - u \end{vmatrix} = 0 \quad (5.35)$$

Da cui si ottiene:

$$(\lambda - u)^2 - a_\theta^2 = 0 \quad (5.36)$$

$$\lambda^2 - 2 \cdot u \cdot \lambda + (u^2 - a_\theta^2) = 0 \quad (5.37)$$

La soluzione di questa equazione è data da:

$$\frac{\Delta}{4} = u^2 - u^2 + a_\theta^2 = a_\theta^2 \quad (5.38)$$

da cui si ottengono

$$\lambda_1 = u - a_\theta \quad (5.39)$$

$$\lambda_3 = u + a_\theta \quad (5.40)$$

È possibile dalla (5.34) ricavare uno dei due coefficiente in funzione dell'altro:

$$\mu_1 = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta \cdot \frac{\mu_2}{\lambda - u} \quad (5.41)$$

Inserendo questa relazione nella (5.33), e scegliendo come valore di $\mu_2 = -1$ la (5.33) diventa

$$R = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta^2 \cdot \frac{\mu_2}{u - \lambda} - u \quad (5.42)$$

Sostituendo nell'equazione precedente i valori di λ trovati si ottengono le rispettive *variabili di Riemann*

$$R_1 = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta - u \quad (5.43)$$

$$R_3 = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta + u \quad (5.44)$$

La seconda variabile coincide con $R_2 = \theta$ a cui corrisponde $\lambda_2 = u$.

Riassumendo la (5.12) equivale al sistema alle derivate totali:

$$\frac{dR_1}{dt} = 0 \quad \text{lungo} \quad \frac{dx}{dt} = u - a_\theta \quad \text{con} \quad R_1 = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta - u$$

$$\frac{dR_2}{dt} = 0 \quad \text{lungo} \quad \frac{dx}{dt} = u \quad \text{con} \quad R_2 = \theta$$

$$\frac{dR_3}{dt} = 0 \quad \text{lungo} \quad \frac{dx}{dt} = u + a_\theta \quad \text{con} \quad R_3 = \frac{2}{n-1} \cdot a_\theta + u$$

Il procedimento seguito per la derivazione degli *invarianti di Riemann* è valido per un flusso descritto dalle equazioni (5.4) e (5.1). In particolare gli *invarianti* ottenuti possono essere usati lungo una trasformazione isoentropica nel caso dell'equazione di stato *stiffened gas* e di quella di Tait, oltre che per l'equazione di stato del gas ideale.

6 Schemi Conservativi

Definizione 5. Uno schema è detto conservativo se può essere scritto in questa forma:

$$u_{i,n+1} = u_{i,n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left(\Phi_{i+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}(u_{i-p,n}, u_{i-p+1,n}, \dots, u_{i+q,n}) + \right. \\ \left. - \Phi_{i-\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}(u_{i-p-1,n}, u_{i-p,n}, \dots, u_{i+q-1,n}) \right) \quad (6.1)$$

dove Φ è detto *flusso numerico*.

Definizione 6. Consideriamo la generica legge di conservazione unidimensionale:

$$u_t + f_x = q \text{ con } f_x = a(u) \cdot u_x \quad (6.2)$$

Un metodo conservativo è consistente con l'originale legge di conservazione, se il flusso numerico si riduce al fisico per un flusso costante, ovvero se:

$$\Phi(u, u, \dots, u) = f(u) \quad (6.3)$$

Proprietà telescopica Si discretizzi la (6.2) in $x_{i+k} \in [x_{i-\frac{3}{2}}; x_{i+\frac{3}{2}}]$ con $k = (-1, 0, 1)$ con uno schema centrale:

$$\begin{cases} \frac{u_{i+1,n+1} - u_{i+1,n}}{\Delta t} + \frac{f_{i+\frac{3}{2},n} - f_{i+\frac{1}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \\ \frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{\Delta t} + \frac{f_{i+\frac{1}{2},n} - f_{i-\frac{1}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \\ \frac{u_{i-1,n+1} - u_{i-1,n}}{\Delta t} + \frac{f_{i-\frac{1}{2},n} - f_{i-\frac{3}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \end{cases} \quad (6.4)$$

Lo schema è conservativo e il flusso numerico è uguale a:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} = f_{i+\frac{1}{2},n} \quad (6.5)$$

Sommando le tre equazioni si ottiene:

$$\frac{\bar{u}_{n+1} - \bar{u}_n}{\Delta t} + \frac{f_{i+\frac{3}{2},n} - f_{i-\frac{3}{2},n}}{3 \cdot \Delta x} = \bar{q}_n \quad (6.6)$$

dove i caratteri sovrastriati rappresentano le medie su $[x_{i-\frac{3}{2}}; x_{i+\frac{3}{2}}]$ calcolate per una generica grandezza g come:

$$\bar{g}_n = \frac{g_{i+1,n} + g_{i,n} + g_{i-1,n}}{3} \quad (6.7)$$

Il risultato fondamentale è che la (6.6) coincide con lo schema applicato all'intero dominio $[x_{i-\frac{3}{2}}; x_{i+\frac{3}{2}}]$. Se si seguono gli stessi passaggi partendo dalla forma non conservativa si ottiene:

$$\begin{cases} \frac{u_{i+1,n+1} - u_{i+1,n}}{\Delta t} + a_{i+1,n} \cdot \frac{u_{i+\frac{3}{2},n} - u_{i+\frac{1}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \\ \frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{\Delta t} + a_{i,n} \cdot \frac{u_{i+\frac{1}{2},n} - u_{i-\frac{1}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \\ \frac{u_{i-1,n+1} - u_{i-1,n}}{\Delta t} + a_{i-1,n} \cdot \frac{u_{i-\frac{1}{2},n} - u_{i-\frac{3}{2},n}}{\Delta x} = q_{i,n} \end{cases} \quad (6.8)$$

Sommando le tre equazioni si ottiene:

$$\frac{\bar{u}_{n+1} - \bar{u}_n}{\Delta t} + a_{i,n} \cdot \frac{u_{i+\frac{3}{2},n} - u_{i-\frac{3}{2},n}}{3 \cdot \Delta x} = \bar{q}_n + r \quad (6.9)$$

con r uguale a:

$$r = -(a_{i+1,n} - a_{i,n}) \cdot \frac{u_{i+\frac{3}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}}}{3 \cdot \Delta x} + (a_{i,n} - a_{i-1,n}) \cdot \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{3}{2}}}{3 \cdot \Delta x} \approx \Delta x^2 \cdot (a_x \cdot u_x)_x \quad (6.10)$$

La (6.9) equivale all'applicazione dello schema sull'intero dominio solo se il termine r è trascurabile. La figura 5 mostra la soluzione della (6.2) per:

$$f(u) = \frac{u^2}{2} \rightarrow a(u) = u \quad (6.11)$$

$$u_0(x) = \begin{cases} 2 & \text{se } \frac{x}{L} < 0.005 \\ 1 & \text{se } \frac{x}{L} \geq 0.005 \end{cases} \quad (6.12)$$

Lo schema utilizzato è quello *up-wind*; l'ampiezza della griglia è pari a $\frac{\Delta x}{L} = 0.005$ mentre l'intervallo temporale $\Delta t = 0.00125$ (s). Si nota come lo schema conservativo, nonostante "ammorbidisca" la discontinuità, riesca comunque a seguire la soluzione esatta; se si affina la griglia la soluzione numerica si avvicinerà sempre di più a quella analitica. Lo schema non conservativo in generale non riesce a seguire la soluzione esatta; questo comportamento rimane anche se si diminuisce il Δx .

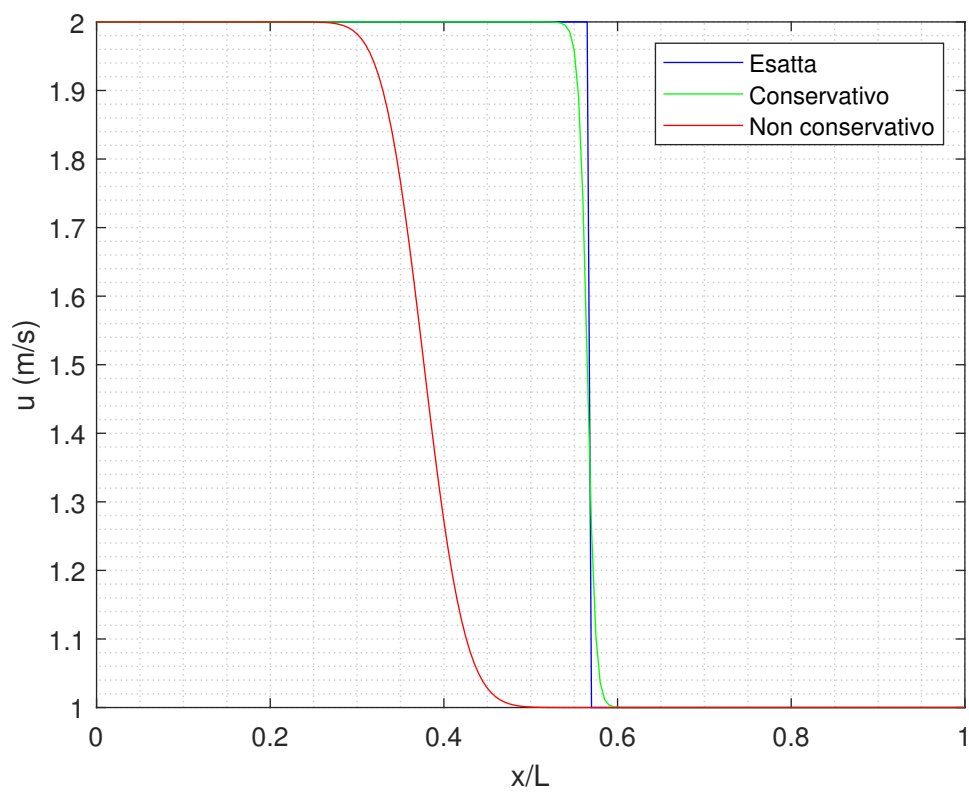


Figura 5. Confronto tra schema *up-wind* conservativo e non conservativo

7 Problema di Riemann

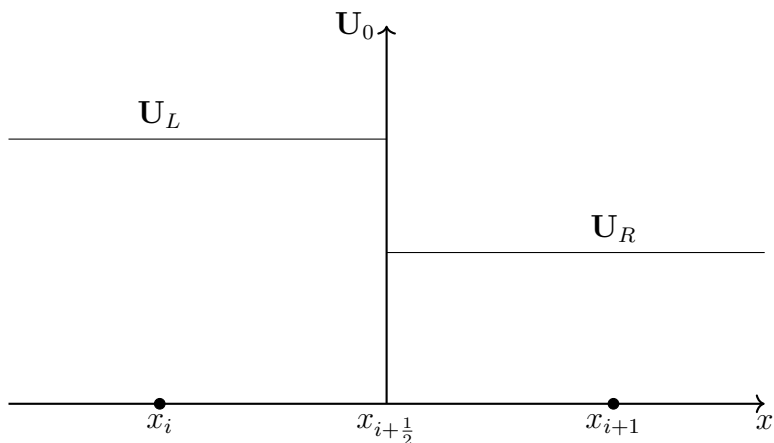


Figura 6. Valori iniziali per il problema di Riemann

Si considerino le equazioni di Eulero in forma omogenea (3.7):

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{0} \quad (7.1)$$

con le seguenti condizioni iniziali:

$$\mathbf{U}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{se } x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}_R & \text{se } x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (7.2)$$

Un problema di questo tipo (figura 6), con le condizioni iniziali a gradino, è chiamato *problema di Riemann*. In corrispondenza della discontinuità, a partire dal tempo $t = 0$, si originano tre perturbazioni ciascuna delle quali viaggia lungo una *linea caratteristica*. Ne deriva una soluzione simile a quella ottenuta nella sezione 3.2 e riportata in figura 7: le *caratteristiche* delimitano quattro zone del dominio in cui la soluzione è costante. Lungo la prima e terza famiglia di *caratteristiche* si può avere uno *shock* oppure un *rarefaction fan*; la seconda famiglia è sempre associata a una *contact discontinuity*. Nel caso del *rarefaction fan* le grandezze variano con continuità tra lo stato destro e sinistro del *fan* ed è possibile utilizzare la relazione isoentropica. Lo *shock* e la *contact discontinuity* introducono delle discontinuità e l'entropia varia a monte e valle di questi. La seconda famiglia di *caratteristiche*, e di conseguenza la *contact discontinuity*, deriva dall'equazione dell'energia. A monte e valle di questa, pressione (p^*) e velocità (u^*) si mantengono invariate, mentre può cambiare la temperatura [‡]. L'obiettivo di questa sezione

[‡]Si immagini due flussi che viaggiano adiacenti l'uno all'altro, alla stessa velocità ma a temperature diverse.

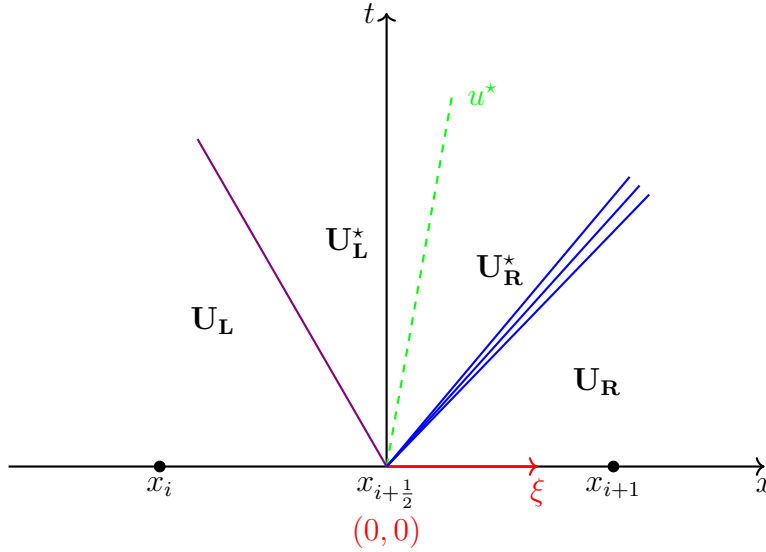


Figura 7. Esempio di problema di Riemann: Shock (viola), contact discontinuity (verde), rarefaction fan (blu)

è ottenere la soluzione del problema di Riemann, ovvero ricavare gli stati incogniti (\mathbf{U}_L^* , \mathbf{U}_R^*) a partire dalle condizioni iniziali (\mathbf{U}_L , \mathbf{U}_R). La soluzione del problema è iterativa ed esistono vari metodi che conducono alla stessa soluzione. In questa tesi vengono seguite due strategie diverse per il gas ideale e per l'acqua. Le equazioni utilizzate di seguito sono ricavate e approfondite nella sezione E, di cui se ne consiglia la previa lettura.

7.1 Gas ideale

Questo metodo risolutivo è proposto da E. F. Toro in “Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics” [18]. La velocità (u^*) a destra e sinistra della *contact discontinuity* è legata indipendentemente agli stati \mathbf{U}_R^* e \mathbf{U}_L^* attraverso le funzioni $f_R(p, \mathbf{U}_R)$ e $f_L(p, \mathbf{U}_L)$. Dalla relazione (E.2.1) si può quindi scrivere:

$$u^* = u_R + f_R(p^*, \mathbf{U}_R) \quad (7.1.1)$$

$$u^* = u_L - f_L(p^*, \mathbf{U}_L) \quad (7.1.2)$$

Dalla (7.1.1), (7.1.2) si ottiene la seguente identità:

$$f_R(p^*, \mathbf{U}_R) + f_L(p^*, \mathbf{U}_L) + u_R - u_L = 0 \quad (7.1.3)$$

Si definisce la funzione $f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)$ come:

$$f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L) = f_R(p, \mathbf{U}_R) + f_L(p, \mathbf{U}_L) + u_R - u_L \quad (7.1.4)$$

Dalla (7.1.3), (7.1.4) risulta che p^* è uno zero di $f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)$. $f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)$ è una funzione monotona crescente, in quanto somma di funzioni monotone crescenti $f_R(p, \mathbf{U}_R)$, $f_L(p, \mathbf{U}_L)$, ed ammette un unico zero. Le espressioni di $f_R(p, \mathbf{U}_R)$ e $f_L(p, \mathbf{U}_L)$ variano a seconda che si verifichi uno *shock* o un *rarefaction fan*. Per determinare p^* si calcola dapprima $f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)$ per i valori p_L e p_R . Poiché si tratta di una funzione monotona crescente si possono avere due casi:

$f(p_L, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L) > 0$ In questo caso si avrà che $p^* < p_L$. Lungo la prima famiglia di *caratteristiche* si propaga un *rarefaction fan* e si sceglie la relativa espressione di $f_L(p, \mathbf{U}_L)$.

$f(p_L, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L) < 0$ In questo caso si avrà che $p^* > p_L$. Lungo la prima famiglia di *caratteristiche* si propaga uno *shock* e si sceglie l'espressione di $f_L(p, \mathbf{U}_L)$ relativa allo *shock*.

Lo stesso vale per $f_R(p, \mathbf{U}_R)$. A questo punto si conosce l'espressione di $f(p, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)$ e si può trovare il suo zero attraverso il metodo delle tangenti:

$$p_{k+1}^* = p_k^* - \frac{f(p_k^*, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)}{f'(p_k^*, \mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)} \quad (7.1.5)$$

Nota p^* si ricava u^* indifferentemente dalla (7.1.1) o (7.1.2). Si possono ora ricavare tutte le altre grandezze a secondo che si abbia uno *shock* o *rarefaction fan*:

shock Il rapporto delle densità tra valle e monte dello *shock* è dato dalla relazione (E.1.16). La densità viene ricavata da questa, riferendosi allo stato di sinistra o destra rispettivamente per uno *shock* della prima o terza famiglia. Note (p^*, u^*, ρ_k^*) si possono determinare tutte le altre grandezze termodinamiche. Nel caso dello *shock*, la velocità s con cui si propaga può essere ricavata dalla *condizioni di salto* di Rankine e Hugoniot (E.1.1) come:

$$s_k = \frac{\rho_k \cdot u_k - \rho_k^* \cdot u^*}{\rho_k - \rho_k^*} \quad (7.1.6)$$

con $k = L/R$ rispettivamente nel caso di uno *shock* della prima o terza famiglia.

rarefaction fan Come si è detto in precedenza, attraverso un *rarefaction fan* è valida la relazione isoentropica (E.2.13). Si può quindi scrivere:

$$\rho_k^* = \rho_k \cdot \left(\frac{p^*}{p_k} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (7.1.7)$$

Come prima, note (p^*, u^*, ρ_k^*) si possono determinare tutte le altre grandezze termodinamiche. In questo caso è necessario determinare anche le proprietà all'interno del *fan*. Per fare questo si utilizzano gli *invarianti di Riemann* (E.2.10) tra lo stato destro o sinistro e un punto generico del *fan*. Per segni $+/-$ ($-/+$), ci si riferisce a quello superiore nel caso in cui si abbia un *rarefaction fan* della prima famiglia; a quello inferiore per uno della terza.

$$u_k \pm \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_k = u \pm \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a \quad (7.1.8)$$

All'interno del *fan* si può scrivere:

$$u \mp a = \frac{d\xi}{dt} = \frac{\xi}{t} \quad (7.1.9)$$

da cui:

$$u = \frac{\xi}{t} \pm a \quad (7.1.10)$$

dove ξ indica il sistema di riferimento relativo (figura 7). Sostituendo la (7.1.10) nella (7.1.8) si ottiene:

$$a = \frac{2}{\gamma + 1} \cdot a_k \pm \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \quad (7.1.11)$$

e da questa il rapporto tra le velocità del suono:

$$\frac{a}{a_k} = \frac{2}{\gamma + 1} \pm \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \quad (7.1.12)$$

Considerando la (E.2.13) e la (E.2.14) è semplice ricavare:

$$\frac{p}{p_k} = \left[\frac{2}{\gamma + 1} \pm \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2 \cdot \gamma}{\gamma - 1}} \quad (7.1.13)$$

$$\frac{\rho}{\rho_k} = \left[\frac{2}{\gamma + 1} \pm \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2}{\gamma - 1}} \quad (7.1.14)$$

7.2 Acqua

La soluzione per l'acqua impiega un metodo iterativo diverso rispetto a quello visto per il gas ideale. Il metodo per ricavare p^* e u^* è proposto in [8]. Si consideri la definizione di m data dalla (E.3.1). Se applicati agli stati destro e sinistro si ha:

$$m_L = -\frac{p^* - p_L}{u^* - u_L} \quad (7.2.1)$$

$$m_R = + \frac{p^* - p_R}{u^* - u_R} \quad (7.2.2)$$

da cui si ottiene:

$$m_L \cdot u^* - m_L \cdot u_L = -p^* + p_L \quad (7.2.3)$$

$$m_R \cdot u^* - m_R \cdot u_R = p^* - p_R \quad (7.2.4)$$

Si hanno due equazioni nelle incognite (p^*, u^*) . La soluzione della (7.2.3), (7.2.4) risulta:

$$p^* = \frac{u_L - u_R}{\frac{1}{m_R} + \frac{1}{m_L}} + \frac{m_R \cdot p_L + m_L \cdot p_R}{m_L + m_R} \quad (7.2.5)$$

$$u^* = \frac{p_L - p_R + m_L \cdot u_L + m_R \cdot u_R}{m_L + m_R} \quad (7.2.6)$$

Partendo da un valore di $p^* = \frac{p_L + p_R}{2}$ si ricavano dalla (7.2.1), (7.2.2) m_L ed m_R che inseriti nella (7.2.5) fornisce il nuovo valore per l'iterazione successiva [8].

7.2.1 Equazione di stato tipo stiffened gas

Nel caso della *stiffened gas* il procedimento è molto simile a quello visto per il gas ideale.

shock Il rapporto delle densità tra valle e monte dello *shock* è dato dalla relazione (E.1.15). La densità viene ricavata da questa, riferendosi allo stato di sinistra o destra rispettivamente per uno *shock* della prima o terza famiglia. Note (p^*, u^*, ρ_k^*) si possono determinare tutte le altre grandezze termodinamiche. La velocità di propagazione è data anche in questo caso dalla (7.1.6).

rarefaction fan Le relazioni nel caso *rarefaction fan* si ricavano come per il gas ideale considerando l'espressione dell'isoentropica e della velocità del suono per l'acqua. Si ricavano le seguenti relazioni:

$$\rho_k^* = \rho_k \cdot \left(\frac{p^* + p_\infty}{p_k + p_\infty} \right)^{\frac{1}{N}} \quad (7.2.7)$$

All'interno del *fan* si ottengono le seguenti relazioni:

$$\frac{p + p_\infty}{p_k + p_\infty} = \left[\frac{2}{N + 1} \pm \frac{N - 1}{N + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2 \cdot N}{N - 1}} \quad (7.2.8)$$

$$\frac{\rho}{\rho_k} = \left[\frac{2}{N + 1} \pm \frac{N - 1}{N + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2}{N - 1}} \quad (7.2.9)$$

7.2.2 Equazione di Tait

L'equazione di Tait essendo un'equazione di stato può essere applicata sia attraverso uno *shock* che un *rarefaction fan*.

shock Utilizzando l'equazione di Tait si ottiene l'espressione della densità in funzione della pressione p^* :

$$\rho_k^* = \rho_w \cdot \left(\frac{p^*}{B} + 1 \right)^{\frac{1}{N}} \quad (7.2.10)$$

Note (p^*, u^*, ρ_k^*) si possono determinare tutte le altre grandezze termodinamiche. La velocità di propagazione è data anche in questo caso dalla (7.1.6).

rarefaction fan Anche in questo caso si applica l'equazione di Tait:

$$\rho_k^* = \rho_w \cdot \left(\frac{p^*}{B} + 1 \right)^{\frac{1}{N}} \quad (7.2.11)$$

Note (p^*, u^*, ρ_k^*) si possono determinare tutte le altre grandezze termodinamiche. All'interno del *fan* si segue quanto visto nei casi precedente sfruttando gli *invarianti di Riemann*:

$$\frac{p + B}{p_k + B} = \left[\frac{2}{N + 1} \pm \frac{N - 1}{N + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2 \cdot N}{N - 1}} \quad (7.2.12)$$

$$\frac{\rho}{\rho_k} = \left[\frac{2}{N + 1} \pm \frac{N - 1}{N + 1} \cdot \frac{1}{a_k} \cdot \left(u_k - \frac{\xi}{t} \right) \right]^{\frac{2}{N - 1}} \quad (7.2.13)$$

8 Schema di Godunov

Si consideri il generico problema alle derivate parziali:

$$\begin{cases} \mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{S} & x \in [0, L] \quad t \in (0, T] \\ \mathbf{U}(x, t = 0) = \mathbf{U}_0 \end{cases} \quad (8.1)$$

Si suddivida il dominio spaziale in N celle di ampiezza Δx con centro in:

$$x_j = j \cdot \Delta x \quad j = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (8.2)$$

(In questo caso le celle 0 ed N avranno ampiezza $\frac{\Delta x}{2}$). Si integri la (8.1) all'interno della j -esima cella al passo temporale n :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} (\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x) \cdot dx dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S} \cdot dx dt \quad (8.3)$$

da cui si ottiene:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}_t \cdot dx dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{F}_x \cdot dx dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S} \cdot dx dt \quad (8.4)$$

Si considerino ora i singoli termini della (8.4):

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}_t \cdot dx dt &= \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{U}_t \cdot dt dx = \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} [\mathbf{U}(x, t_{n+1}) - \mathbf{U}(x, t_n)] \cdot dx = \\ &= \int_{x_{j+\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t_{n+1}) \cdot dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t_n) \cdot dx \end{aligned} \quad (8.5)$$

Definita la media di cella come:

$$\mathbf{U}_{j,n} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t_n) \cdot dx \quad (8.6)$$

Sostituendo la (8.6) nella (8.5) si ottiene:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}_t \cdot dx dt = \Delta x \cdot (\mathbf{U}_{j,n+1} - \mathbf{U}_{j,n}) \quad (8.7)$$

Si ripete lo stesso per il termine del flusso:

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{F}_x \cdot dx dt &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} [\mathbf{F}(x_{j+\frac{1}{2}}, t) - \mathbf{F}(x_{j-\frac{1}{2}}, t)] \cdot dt = \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(x_{j+\frac{1}{2}}, t) \cdot dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(x_{j-\frac{1}{2}}, t) \cdot dt \end{aligned} \quad (8.8)$$

Definito il flusso numerico Φ :

$$\Phi_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(x_{j+\frac{1}{2}}, t) \cdot dt \quad (8.9)$$

La (8.8) si può riscrivere come:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{F}_x \cdot dx dt = \Delta t \cdot (\Phi_{j+\frac{1}{2}} - \Phi_{j-\frac{1}{2}}) \quad (8.10)$$

Infine per il termine sorgente si considera il valore approssimato:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S} \cdot dx dt \approx \mathbf{S}_{j,n} \cdot \Delta x \Delta t \quad (8.11)$$

dove il termine $S_{j,n}$ è la media di cella:

$$\mathbf{S}_{j,n} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S}(x, t_n) \cdot dx \quad (8.12)$$

Sostituendo la (8.7), (8.10), (8.11) nella (8.4), dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\mathbf{U}_{j,n+1} = \mathbf{U}_{j,n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (\Phi_{j+\frac{1}{2}} - \Phi_{j-\frac{1}{2}}) + \Delta t \cdot \mathbf{S}_{j,n} \quad (8.13)$$

In generale la (8.13) fornisce un'espressione che permette di calcolare la soluzione al passo temporale successivo. Il punto più importante è come vengono determinati i flussi numerici. Nello schema di Godunov si considera la soluzione costante all'interno di ogni cella (figura 8); per la j -esima cella si ha:

$$\mathbf{U}(x, t_n) = \mathbf{U}(x_j, t_n) \text{ con } x \in (x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}) \quad (8.14)$$

Sotto questa ipotesi la (8.6) e (8.12) diventano:

$$\mathbf{U}_{j,n} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t_n) \cdot dx = \mathbf{U}(x_j, t_n) \quad (8.15)$$

$$\mathbf{S}_{j,n} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S}(x, t_n) \cdot dx = \mathbf{S}(x_j, t_n) \quad (8.16)$$

Al bordo $j + \frac{1}{2}$ si ha una discontinuità tra la cella destra e sinistra che determina un problema di Riemann:

$$\mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{U}_{j,n} & \text{se } x < x_{j+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}_{j+1,n} & \text{se } x > x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (8.17)$$

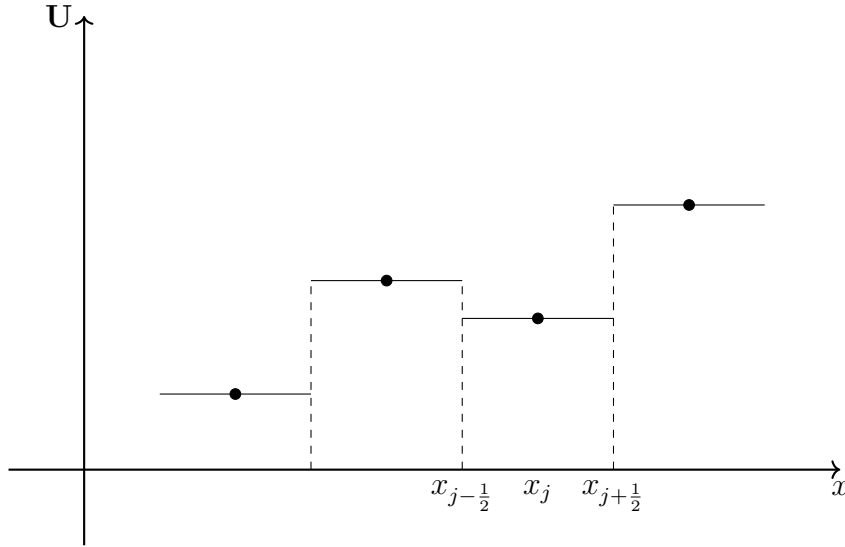


Figura 8. Ricostruzione del dominio con origine di problemi di Riemann a bordo cella

La soluzione del problema di Riemann (figura 7) permette di conoscere la soluzione al bordo celle $\mathbf{U}(0, \eta)$:

$$\mathbf{U}(0, \eta) = \mathbf{U}^{RP}(0) = \text{costante } \eta \in (0, \Delta t) \quad (8.18)$$

dove l'apice RP indica la soluzione ottenuta dal problema di Riemann. Il flusso numerico è calcolabile dalla (8.9) come:

$$\Phi_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(x_{j+\frac{1}{2}}, t) \cdot dt = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}^{RP}(0)) \cdot dt = \mathbf{F}(\mathbf{U}^{RP}(0)) \quad (8.19)$$

è importante sottolineare come tutte le relazioni utilizzate siano esatte. La sola approssimazione fatta dal metodo proposto da Godunov è l'ipotesi sulla ricostruzione del dominio che considera omogenee le proprietà all'interno di ogni cella.

Condizione di stabilità La condizione di stabilità prevede la non interazione tra un problema di Riemann e l'altro. A ogni bordo celle deve essere soddisfatta la condizione:

$$w \cdot \Delta t < \frac{\Delta x}{2} \quad (8.20)$$

$$w = \max(|u_L - a_L|, |s_L|, |s_R|, |u_R + a_R|) \quad (8.21)$$

Nella (8.21) s rappresenta la velocità con cui viaggia lo *shock*. Nel caso di *rarefaction fan* si assume nulla la velocità dello *shock* e viceversa. Praticamente la (8.20) è sostituita da una relazione più semplice da verificare:

$$[\max(|u|) + \max(a)] \cdot \Delta t < \frac{\Delta x}{2} \quad (8.22)$$

8.1 Schema di Godunov del secondo ordine

Lo schema di Godunov descritto nella sezione 8 è del primo ordine in quanto la soluzione è costante all'interno di ogni cella. È possibile aumentare l'accuratezza dello schema al secondo ordine approssimando la soluzione con una funzione lineare a tratti (figura 9).

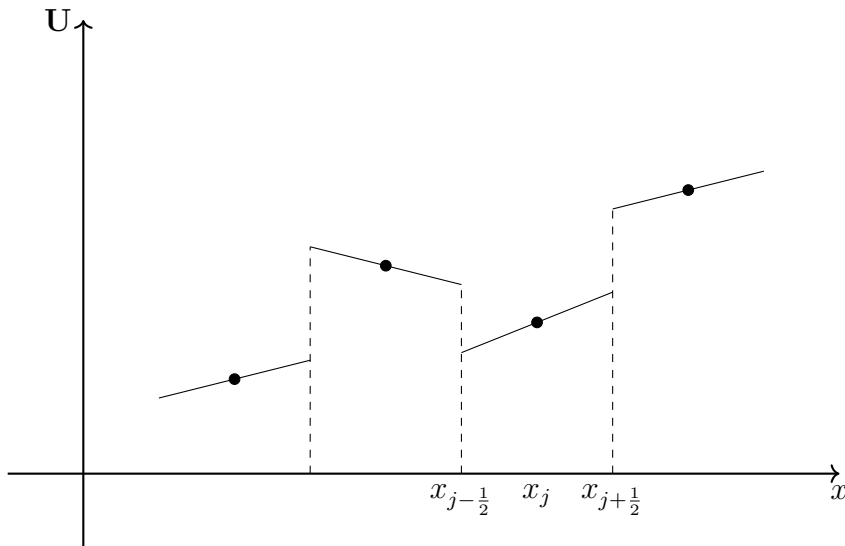


Figura 9. Ricostruzione del dominio con lineare a tratti

Si consideri la (8.1), per la k -esima componente si ha:

$${}_k U_t + {}_k F_x = {}_k S \quad (8.1.1)$$

All'interno della j -esima cella si ha:

$${}_k U(x, t_n) = {}_k U_{j,n} + \frac{\Delta_i}{\Delta x} \cdot (x - x_j) \text{ se } x \in (x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}) \quad (8.1.2)$$

Definite al passo temporale n :

$${}_k U_j^R := {}_k U_{j+\frac{1}{2},n} \quad (8.1.3)$$

$${}_k U_j^L := {}_k U_{j-\frac{1}{2},n} \quad (8.1.4)$$

Dalla (8.1.2) è immediato:

$${}_k U_j^R = {}_k U_{j,n} + \Delta_i \quad (8.1.5)$$

$${}_k U_j^L = {}_k U_{j,n} - \Delta_i \quad (8.1.6)$$

Il valore di Δ_i è fornito da appropriate funzioni dette *limitatori di pendenza*. In letteratura ne sono presenti molti, ciascuno definito in modo diverso. Qui si fa riferimento a quello proposto da Von Leer [19]:

$$\frac{\Delta_i}{\Delta x} = \minmod \left(\frac{{}_k U_{i+1,n} - {}_k U_{i-1,n}}{2 \cdot \Delta x}, 2 \cdot \frac{{}_k U_{i,n} - {}_k U_{i-1,n}}{\Delta x}, 2 \cdot \frac{{}_k U_{i+1,n} - {}_k U_{i,n}}{\Delta x} \right) \quad (8.1.7)$$

Dove la funzione *minmod* è definita come:

$$\minmod(a, b, c) := \begin{cases} \min(|a|, |b|, |c|) & \text{se } \text{sign}(a) = \text{sign}(b) = \text{sign}(c) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (8.1.8)$$

Il metodo prevede 3 passi:

- **Ricostruzione del dominio:** nota la soluzione al tempo n , dalla (8.1.7), (8.1.5), (8.1.6) si ricavano $({}_k U_j^L, {}_k U_j^R)$
- **Evoluzione temporale:** si valutano $({}_k U_j^L, {}_k U_j^R)$ al tempo $t_{n+\frac{1}{2}}$ secondo le seguenti relazioni:

$${}_k \hat{U}_j^L = {}_k U_j^L - \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot [{}_k F({}_k U_j^R) - {}_k F({}_k U_j^L)] \quad (8.1.9)$$

$${}_k \hat{U}_j^R = {}_k U_j^R - \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot [{}_k F({}_k U_j^R) - {}_k F({}_k U_j^L)] \quad (8.1.10)$$

- **Soluzione problema di Riemann:** si applica lo schema (8.13) dove i flussi numerici sono calcolati dalla soluzione del problema di Riemann:

$$\hat{\mathbf{U}}_{(x,0)} = \begin{cases} \hat{\mathbf{U}}_{j,n}^R & \text{se } x < x_{j+\frac{1}{2}} \\ \hat{\mathbf{U}}_{j+1,n}^L & \text{se } x > x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (8.1.11)$$

9 Flusso attraverso ugello de Laval

Il primo caso applicativo riguarda il flusso di aria attraverso un ugello de Laval. In particolare si vuole simulare la condizione di funzionamento nel fuori progetto, con presenza di un urto nel tratto divergente dell'ugello. Le ipotesi per questo problema sono:

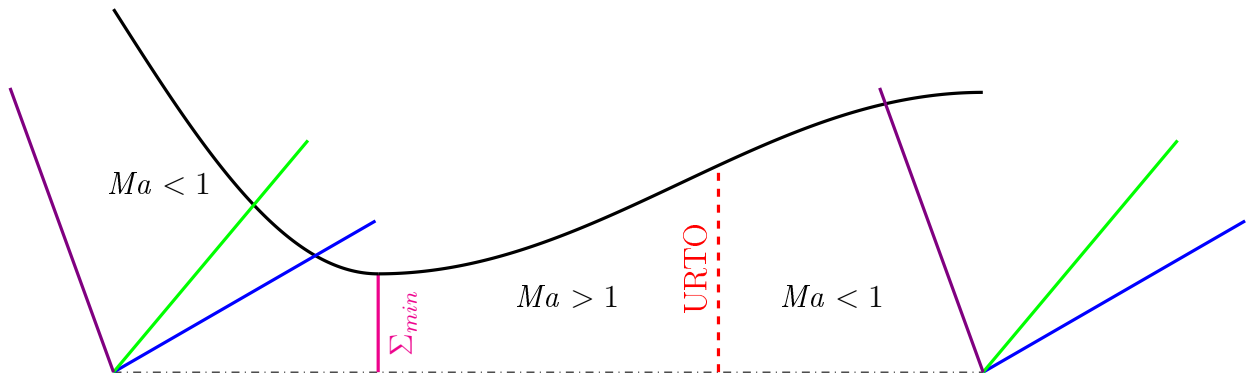


Figura 10. Ugello de Laval in presenza di urto retto [3]

- flusso unidimensionale;
- gas ideale;
- no attrito;
- $Ma_{IN} < 1$;

Nel caso di flusso attraverso un condotto a sezione variabile le equazioni di Eulero assumo questa espressione:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{S} \quad (9.1)$$

con:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \cdot \Sigma \\ \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \rho \cdot E \cdot \Sigma \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \Sigma \cdot (p + \rho \cdot u^2) \\ \Sigma \cdot u \cdot (p + \rho \cdot E) \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ p \cdot \left(\frac{\partial \Sigma}{\partial x}\right) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Per le celle interne del dominio, la soluzione della (9.1) prevede i seguenti passi:

1. calcolo di \mathbf{U}_L^* e \mathbf{U}_R^* dalla soluzione del problema di Riemann;
2. calcolo dei flussi numerici ai margini di cella dalla (8.19);
3. applicazione dello schema di Godunov (8.13)

9.1 Condizioni al bordo

Il flusso nelle condizioni di funzionamento dell'ugello è subsonico sia all'ingresso che all'uscita: al bordo sinistro si hanno due *linee caratteristiche* entranti nel dominio; al bordo destro solo una (figura 10). Ne consegue che a monte dell'ugello vengono imposte pressione e temperatura totali (p_1^0, T_1^0) , mentre a valle la sola pressione (p_v) (vedi nota 3.2.1). Per le celle agli estremi del dominio non è possibile applicare direttamente lo schema di Godunov perché la soluzione del problema di Riemann richiederebbe un valore di pressione fuori dall'ugello. Per queste celle è necessario trovare delle strategie che dipendono dalle stesse condizioni al bordo. Di seguito vengono proposte due soluzioni basate sul *metodo delle caratteristiche* e sullo *schema di Godunov*.

9.1.1 Soluzione con metodo delle caratteristiche

In questa soluzione si utilizza la formulazione primitiva delle equazioni di Eulero (vedi F).

Bordo Sinistro Per il primo nodo, che si trova esattamente all'ingresso dell'ugello, è possibile imporre la pressione e temperatura totale, insieme con l'espressione del primo invariante:

$$p_1^0 = p_{1,n+1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot Ma_{1,n+1}^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (9.1.1)$$

$$T_1^0 = T_{1,n+1} + \frac{u_{1,n+1}^2}{2 \cdot c_p} \quad (9.1.2)$$

$$R_{11,n+1} = -\frac{\rho_{1,n+1}}{2 \cdot a_{1,n+1}} \cdot u_{1,n+1} + \frac{1}{2 \cdot a_{1,n+1}^2} \cdot p_{1,n+1} \quad (9.1.3)$$

Sostituendo le espressioni di $Ma_{1,n+1} = \sqrt{\gamma \cdot \frac{p_{1,n+1}}{\rho_{1,n+1}}}$ e $T_{1,n+1} = \frac{p_{1,n+1}}{R \cdot \rho_{1,n+1}}$, si ottengono tre equazioni nelle quattro incognite $(p_{1,n+1}, \rho_{1,n+1}, u_{1,n+1}, R_{11,n+1})$. La proprietà delle linee caratteristiche permette di scrivere:

$$\frac{dR_1}{dt} = G_1 \text{ se } \frac{dx}{dt} = (u - a) = \lambda_1 \Rightarrow \frac{\partial R_1}{\partial t} + \lambda_1 \cdot \frac{\partial R_1}{\partial x} = G_1 \quad (9.1.4)$$

L'invariante R_1 si propaga da destra a sinistra lungo le *caratteristiche* della prima famiglia. Il termine $R_{11,n+1}$ può essere ricavato discretizzando la (9.1.4) con uno schema *down-wind*:

$$\frac{R_{11,n+1} - R_{11,n}}{\Delta t} + \lambda_{11,n} \cdot \frac{R_{12,n} - R_{11,n}}{\Delta x} = G_{11,n} \quad (9.1.5)$$

Le equazioni (9.1.1),(9.1.2),(9.1.3) si risolvono iterativamente (vedi appendice G).

Bordo Destro Similmente per l'ultimo nodo oltre al valore di pressione imposta, si aggiungono le equazioni degli invarianti R_2 ed R_3 :

$$p_{N,n+1} = p_v \quad (9.1.6)$$

$$R_{2N,n+1} = \rho_{N,n+1} - \frac{\rho_{N,n+1}}{\gamma} \quad (9.1.7)$$

$$R_{3N,n+1} = \frac{\rho_{N,n+1}}{2 \cdot a_{N,n+1}} \cdot u_{N,n+1}^2 + \frac{1}{2 \cdot a_{N,n+1}^2} \cdot p_{N,n+1} \quad (9.1.8)$$

In questo caso gli invarianti si propagano da sinistra a destra lungo le *caratteristiche* della seconda e terza famiglia. I termini $R_{2N,n+1}$ ed $R_{3N,n+1}$ possono essere calcolati discretizzando la (9.1.7) e (9.1.8) con un metodo *up-wind*:

$$\frac{R_{2N,n+1} - R_{2N,n}}{\Delta t} + \lambda_{2N,n} \cdot \frac{R_{2N,n} - R_{2N-1,n}}{\Delta x} = G_{2N,n} \text{ con } \lambda_2 = u \quad (9.1.9)$$

$$\frac{R_{3N,n+1} - R_{3N,n}}{\Delta t} + \lambda_{3N,n} \cdot \frac{R_{3N,n} - R_{3N-1,n}}{\Delta x} = G_{3N,n} \text{ con } \lambda_3 = u + a \quad (9.1.10)$$

La (9.1.7) e (9.1.8), permettono di calcolare ($\rho_{N,n+1}$ e $u_{N,n+1}$) nota la pressione e l'espressione di $a = \sqrt{\gamma \cdot \frac{p}{\rho}}$.

9.1.2 Soluzione con Godunov

Questo metodo permette di risolvere il problema di Riemann ai bordi e di applicare lo schema di Godunov su tutto il dominio. Le celle vengono traslate in modo che i margini della prima e ultima coincidano rispettivamente con il bordo sinistro e destro dell'ugello.

Bordo Sinistro La figura 11 mostra uno schema del problema: dal momento che il flusso è subsonico le grandezze totali sono legate a quelle della regione alla sinistra della *contact discontinuity* (\mathbf{U}_L^*).

La pressione e temperatura totale sono date dalle relazioni:

$$p_1^0 = p^* \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot Ma_L^{*2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (9.1.11)$$

$$T_1^0 = T_L^* + \frac{u^{*2}}{2 \cdot c_p} \quad (9.1.12)$$

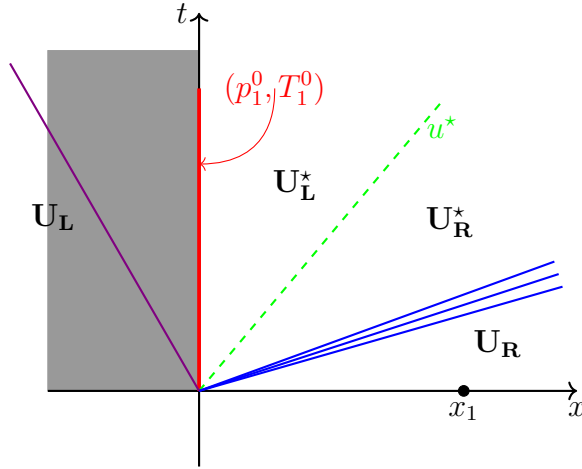


Figura 11.

Sostituendo l'espressione di $Ma_L^* = \frac{u^*}{a_L^*} = \frac{u^*}{\sqrt{\gamma RT_L^*}}$ nella (9.1.11) si ottiene un sistema di due equazioni nelle tre incognite (p^*, T_L^*, u^*) . La terza equazione è data:

$$u^* = u_R + f_R(p^*, \mathbf{U}_R) \quad (9.1.13)$$

Per risolvere il sistema si fa l'ipotesi iniziale di *shock/rarefaction fan* e si sceglie l'opportuna espressione di $f_R(p^*, \mathbf{U}_R)$. A partire da un valore di primo tentativo p_k^* , si calcola u_k^* dalla (9.1.13) quindi T_{Lk}^* dalla (9.1.12). La (9.1.11) permette di ottenere il valore p_{k+1}^* per l'iterazione successiva. Arrivati a convergenza se l'assunzione iniziale di *shock/rarefaction fan* non risulta verificata si ripete il calcolo nell'ipotesi opposta.

Bordo Destro A valle dell'ugello come si può vedere in figura 12, si ha che:

$$p^* = p_v \quad (9.1.14)$$

Nota p^* è possibile risolvere direttamente il problema di Riemann.

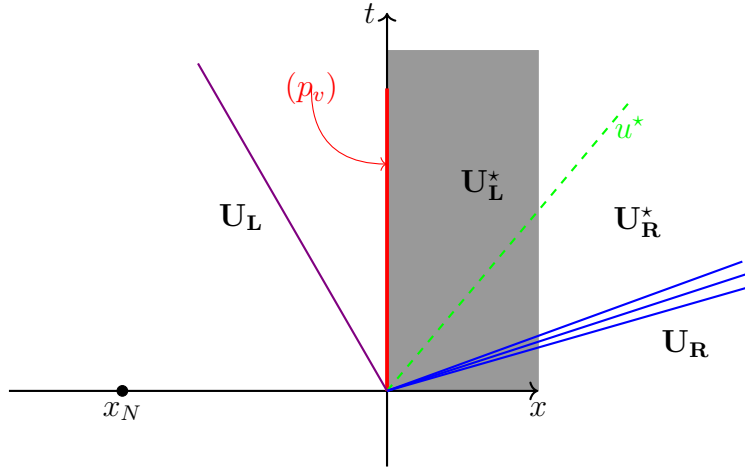


Figura 12.

9.2 Risultati

L'ugello utilizzato nella simulazione ha la seguente sezione:

$$\Sigma = 2.5 \cdot (x + 0.1) + \frac{0.3}{x + 0.1} \quad (9.2.1)$$

Le tabelle 4 e 5 riportano le caratteristiche dell'ugello e le condizioni al bordo della simulazione. L'ampiezza delle celle è pari a $\frac{\Delta x}{L} = 0.0005$.

Rapporto discriminante: $\left(\frac{p}{p_1}\right)_d = 0.915$
Rapporto di adattamento: $\left(\frac{p}{p_1}\right)_{ad} = 0.12$
Sezione ristretta: $x_{min} \approx 0.246 \quad \Sigma_{min} = \sqrt{3}$

Tabella 4: Specifiche ugello

Pressione totale: $p_1^0 = 10^5 (Pa)$
Temperatura totale: $T_1^0 = 543 (K)$
Rapporto pressioni: $\left(\frac{p}{p_1}\right) = 0.7$

Tabella 5: Condizioni al bordo per simulazione ugello

Di seguito sono riportati gli andamenti di pressione, velocità e portata lungo l'ugello. Entrambi i metodi utilizzati per risolvere il flusso ai bordi

del dominio forniscono degli ottimi risultati e approssimano molto bene la soluzione analitica. La grandezza più sensibile risulta la portata, che viene leggermente sovrastimata dal metodo che implementa Godunov. In questo caso i nodi delle celle non si trovano esattamente sui bordi del dominio, ma leggermente dentro e questo può in parte spiegare il leggero scostamento dal valore esatto. Inoltre, in assenza di discontinuità, il metodo delle caratteristiche risulta estremamente efficace e non sorprende che fornisca risultati così vicini alla soluzione analitica.

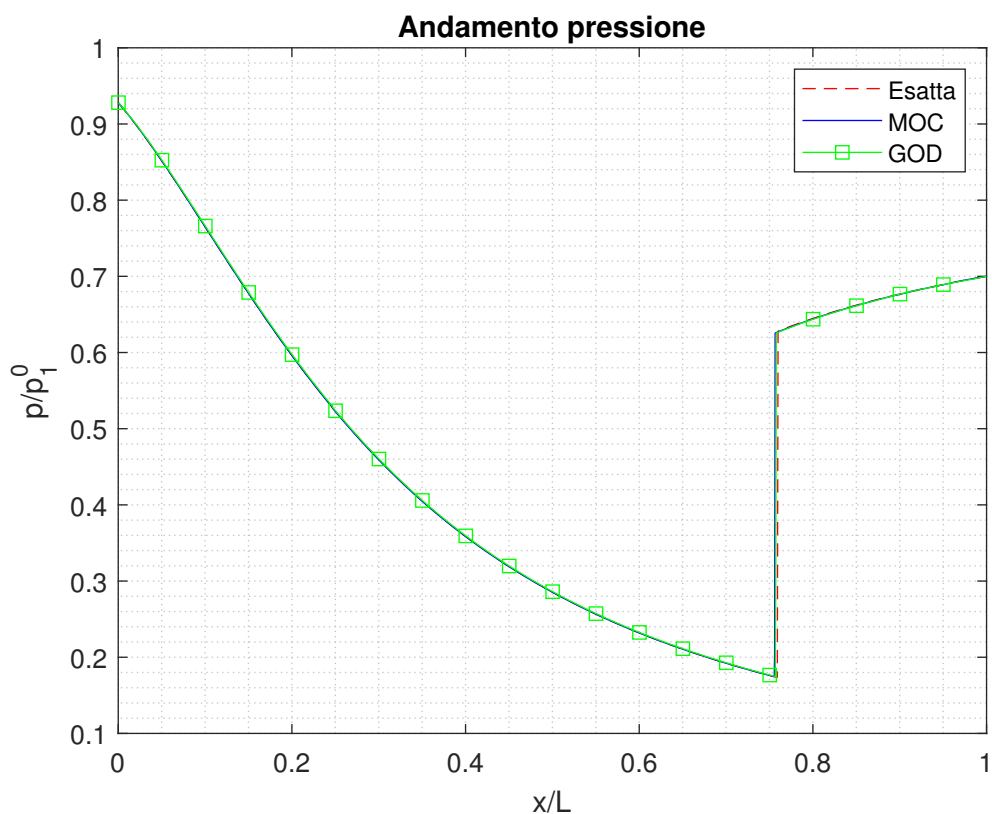


Figura 13. Andamento della pressione lungo l'ugello

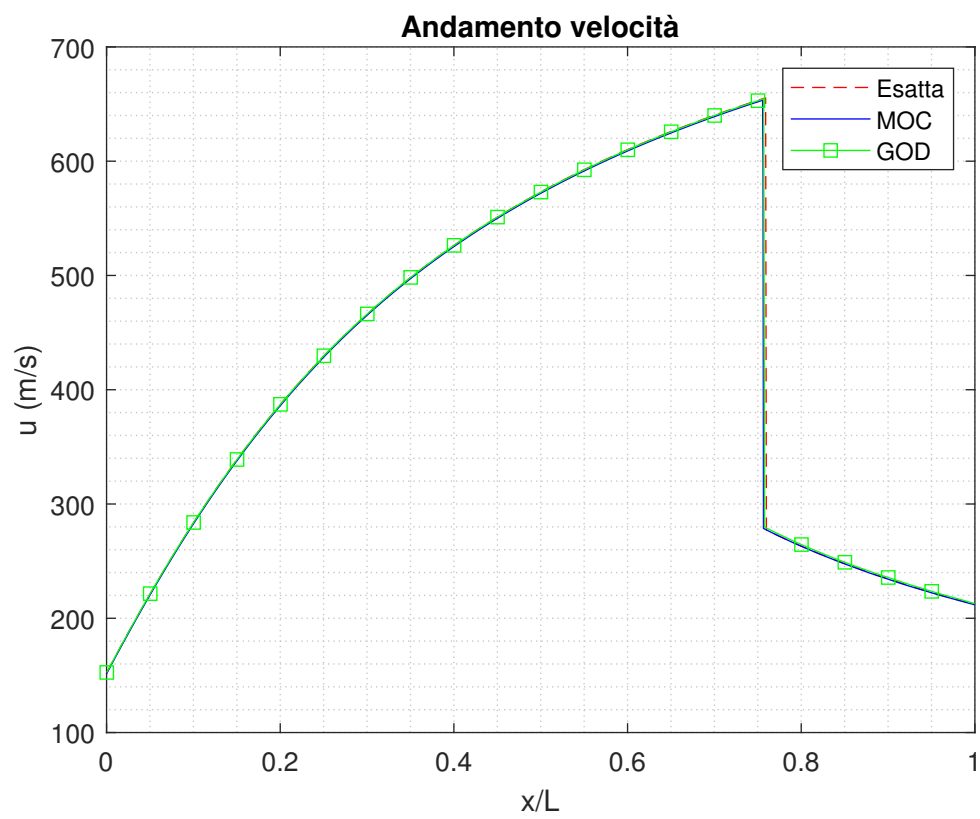


Figura 14. Andamento della velocità lungo l'ugello

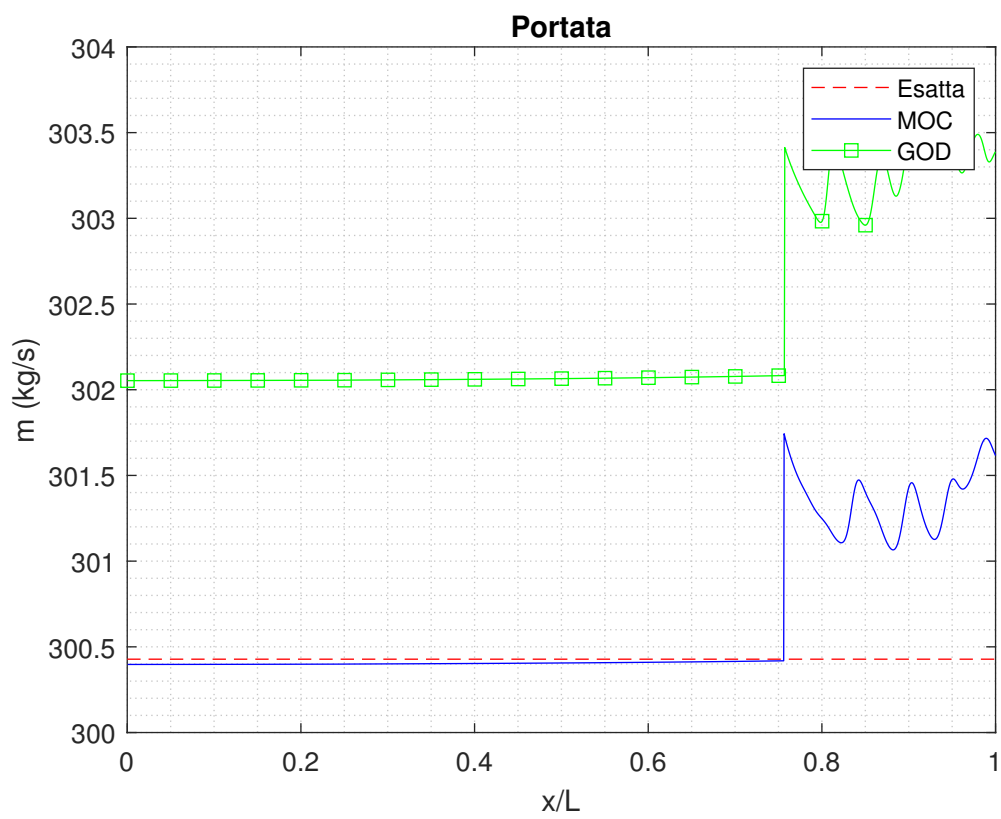


Figura 15. Portata che attraversa l'ugello allo stazionario

9.3 Soluzione con schema del secondo ordine

La soluzione con uno schema di Godunov del secondo ordine è spiegata nella sezione 8.1. La differenza consiste nella ricostruzione del dominio e nell'evoluzione temporale delle variabili al bordo cella. Mentre quest'ultima prevede l'applicazione di una semplice formula, la ricostruzione del dominio può essere più complicata. Il calcolo di ${}_k\Delta_i$ al nodo i -esimo viene fatto attraverso il *limitatore di pendenza* di Von Leer e necessita della conoscenza di ${}_kU_{i-1,n}$, ${}_kU_{i,n}$ e ${}_kU_{i+1,n}$. È evidente che per la prima e ultima cella il *limitatore di pendenza* di Von Leer non possa essere usato così come è definito. Una soluzione potrebbe essere quella di ridefinirlo direttamente come:

$$\begin{cases} \frac{{}_k\Delta_1}{\Delta x} = 2 \cdot \frac{{}_kU_{2,n} - {}_kU_{1,n}}{\Delta x} \\ \frac{{}_k\Delta_N}{\Delta x} = 2 \cdot \frac{{}_kU_{N,n} - {}_kU_{N-1,n}}{\Delta x} \end{cases} \quad (9.3.1)$$

Questa scelta non è da risultati soddisfacenti (figura 17). Il motivo è che questa definizione non tiene conto delle condizioni al bordo. La figura 16 mostra graficamente il problema: con la pendenza in blu, calcolata dalla formula sopra, in generale ${}_kU_L = {}_kU_{1,n} - {}_k\Delta_1 \neq {}_kU_{BC}$. Lo stesso vale per il bordo destro.

Una definizione migliore è invece:

$$\begin{cases} \frac{{}_k\Delta_1}{\Delta x} = 2 \cdot \frac{{}_kU_{1,n} - {}_kU_{BC}^L}{\Delta x} \\ \frac{{}_k\Delta_N}{\Delta x} = 2 \cdot \frac{{}_kU_{BC}^R - {}_kU_{N-1,n}}{\Delta x} \end{cases} \quad (9.3.2)$$

Dove ${}_kU_{BC}^L$ e ${}_kU_{BC}^R$ indicano la condizione al bordo, rispettivamente sinistro e destro, della k -esima componente. Occorre quindi trovare l'espressione di ${}_kU_{BC}^L$ e ${}_kU_{BC}^R$ che dipende dalle condizioni al bordo fissate.

Bordo sinistro Di seguito le grandezze con pedice L e R indicano rispettivamente le condizioni al bordo sinistro e destro mentre si trascura l'indicazione del passo temporale n . Nel caso dell'ugello le tre componenti del vettore \mathbf{U} sono:

$$\begin{cases} {}_1U_k = \rho_k \cdot \Sigma_k \\ {}_2U_k = \rho_k \cdot \Sigma_k \cdot u_k \\ {}_3U_k = \rho_k \cdot \Sigma_k \cdot E_k = \rho_k \cdot \Sigma_k \cdot \left(c_v \cdot T_k + \frac{1}{2} \cdot u_k^2 \right) \end{cases} \quad (9.3.3)$$

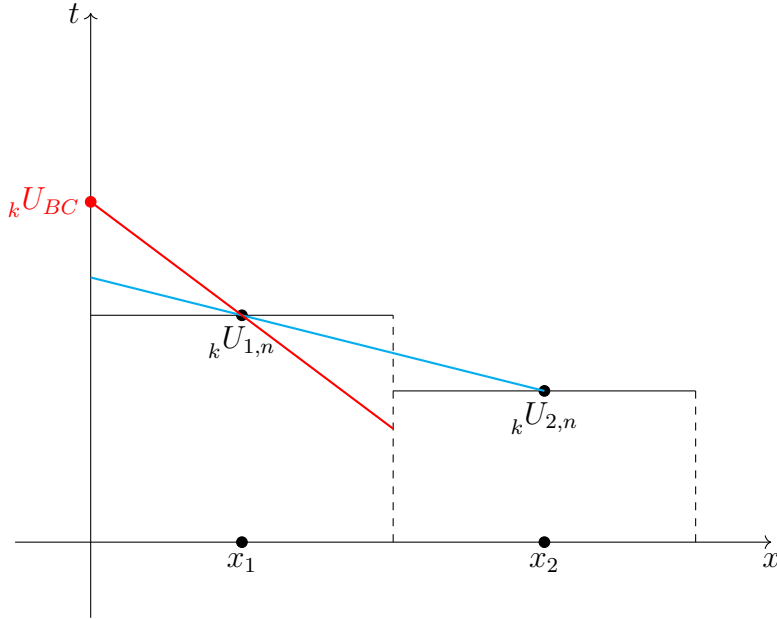


Figura 16. Pendenza in rosso rispetta le condizioni al bordo; pendenza in blu non tiene conto delle condizioni al bordo

con $k = L/R$. La pressione e temperatura totale al bordo sinistro divento:

$$\begin{cases} T_1^0 = T_L + \frac{u_L^2}{2 \cdot c_p} \\ p_1^0 = p_L \cdot \left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \left(\frac{u_L}{\sqrt{\gamma \cdot R \cdot T_L}} \right)^2 \right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \end{cases} \quad (9.3.4)$$

La (9.3.4) è un sistema sottodeterminato di due equazioni nelle incognite T_L , p_L e u_L . Una soluzione è quella di esprimere le grandezze totali in funzione di ${}_1U_L$, ${}_2U_L$, ${}_3U_L$, quindi calcolare la pendenza per la seconda componente come:

$${}_2\Delta_1 = 2 \cdot \frac{{}_2U_2 - {}_2U_1}{\Delta x} \quad (9.3.5)$$

da cui si ha che:

$${}_2U_L = {}_2U_1 - {}_2\Delta_1 \quad (9.3.6)$$

A questo punto ${}_2U_L$ è noto e si ottiene un sistema di due equazioni in due incognite:

$$\begin{cases} p_1^0 = p_1^0({}_1U_L, {}_3U_L) \\ T_1^0 = T_1^0({}_1U_L, {}_3U_L) \end{cases} \quad (9.3.7)$$

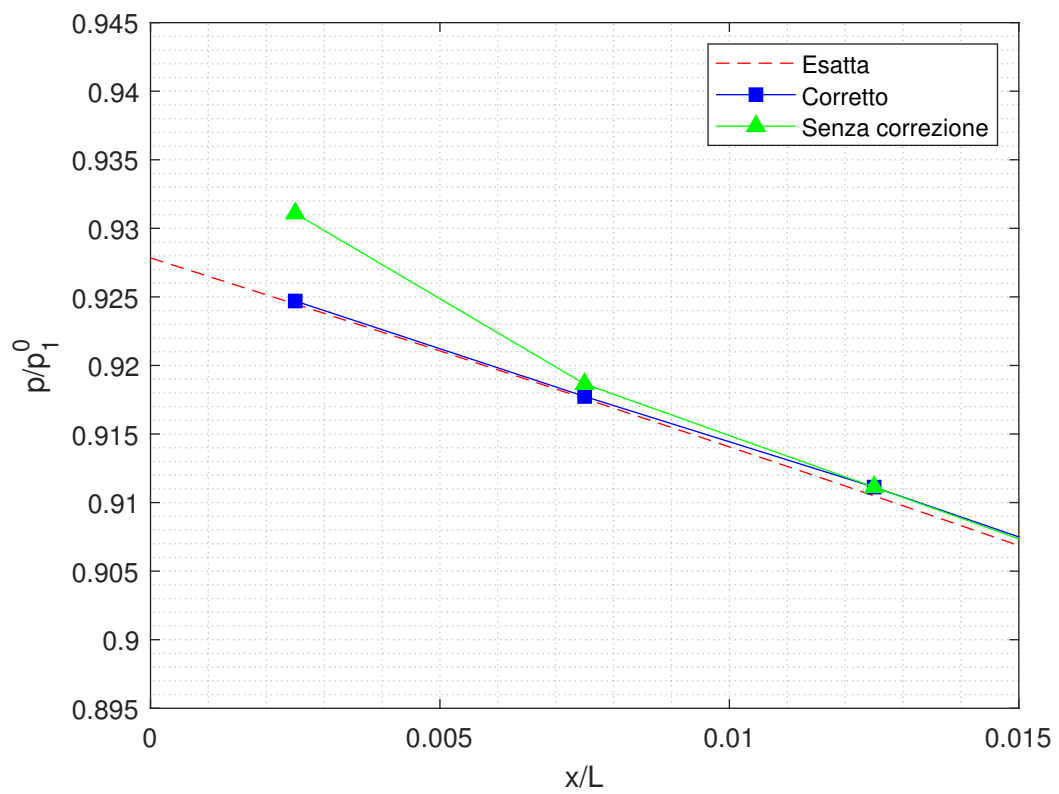


Figura 17. Confronto dell'andamento di pressione al bordo sinistro con e senza correzione

Dalla (9.3.3) si ha che:

$${}_1U_L = \rho_L \cdot \Sigma_L = \frac{p_L}{R \cdot T_L} \cdot \Sigma_L \quad (9.3.8)$$

da cui si ottiene:

$$T_L = \frac{p_L}{{}_1U_L} \cdot \Sigma_L \quad (9.3.9)$$

La velocità al bordo sinistro è uguale a:

$$u_L = \frac{{}_2U_L}{{}_1U_L} \quad (9.3.10)$$

Sostituendo l'espressione della temperatura e velocità nella grandezze totali si ottiene:

$$T_1^0 = \frac{p_L}{{}_1U_L} \cdot \Sigma_L + \left(\frac{{}_2U_L}{{}_1U_L} \right)^2 \cdot \frac{1}{2 \cdot c_p} \quad (9.3.11)$$

$$p_1^0 = p_L \cdot \left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \left(\frac{\frac{{}_2U_L}{{}_1U_L}}{\sqrt{\gamma \cdot \frac{p_L \cdot \Sigma_L}{{}_1U_L}}} \right)^2 \right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (9.3.12)$$

Dalla (9.3.11) e (9.3.12) se ${}_2U_L = 0$ segue che:

$$\begin{cases} p_L = p_1^0 \\ {}_1U_L = \frac{p_L}{R \cdot T_1^0} \cdot \Sigma_L \end{cases} \quad (9.3.13)$$

Noto ${}_1U_L$ si può ricavare dalla sua definizione:

$$\rho_L = \frac{{}_1U_L}{\Sigma_L} \quad (9.3.14)$$

Dall'equazione di stato si calcola la temperatura, quindi considerando che $u_L = \frac{{}_2U_L}{\rho_L \cdot \Sigma_L} = 0$ si ottiene:

$${}_3U_L = \rho_L \cdot \Sigma_L \cdot c_v \cdot T_L \quad (9.3.15)$$

Se invece ${}_2U_L \neq 0$ occorre procedere in questo modo. Dalla (9.3.12) si ricava:

$${}_1U_L = \frac{{}_2U_L^2}{\frac{2 \cdot \gamma}{\gamma - 1} \cdot p_L \cdot \Sigma_L \cdot \left[\left(\frac{p_1^0}{p_L} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right]} \quad (9.3.16)$$

Dalla (9.3.11) si può ottenere la seguente equazione di secondo grado:

$$T_1^0 \cdot {}_1U_L^2 - \frac{p_L \cdot \Sigma_L}{R} \cdot {}_1U_L - \frac{{}_2U_L^2}{2 \cdot c_p} = 0 \quad (9.3.17)$$

Risolvendo rispetto a ${}_1U_L$ si calcola il delta (da non confondere con la pendenza):

$$\Delta = \left(\frac{p_L \cdot \Sigma}{R} \right)^2 + \frac{2 \cdot T_1^0 \cdot {}_2U_L^2}{c_p} \quad (9.3.18)$$

e infine:

$${}_1U_L = \frac{\frac{p_L \cdot \Sigma_L}{R} + \sqrt{\left(\frac{p_L \cdot \Sigma_L}{R} \right)^2 + \frac{2 \cdot T_1^0 \cdot {}_2U_L^2}{c_p}}}{2 \cdot T_1^0} \quad (9.3.19)$$

Si ottiene quindi il sistema:

$$\begin{cases} {}_1U_L = \frac{{}_2U_L^2}{\frac{2 \cdot \gamma}{\gamma - 1} \cdot p_L \cdot \Sigma_L \cdot \left[\left(\frac{p_1^0}{p_L} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right]} = g_1(p_L) \\ {}_1U_L = \frac{\frac{p_L \cdot \Sigma_L}{R} + \sqrt{\left(\frac{p_L \cdot \Sigma_L}{R} \right)^2 + \frac{2 \cdot T_1^0 \cdot {}_2U_L^2}{c_p}}}{2 \cdot T_1^0} = g_2(p_L) \end{cases} \quad (9.3.20)$$

La soluzione di questo sistema $p = p_L$ può essere ricavata iterativamente con il metodo di bisezione per il calcolo dello zero della funzione $g(p) = g_1(p) - g_2(p)$. Trovata p_L si ricava ${}_1U_L$ da una delle due e da questo:

$$\rho_L = \frac{{}_1U_L}{\Sigma_L} \quad (9.3.21)$$

Da qui si procede come per il caso ${}_2U_L = 0$ considerando che in questo caso la velocità non è nulla e vale:

$$u_L = \frac{{}_2U_L}{\rho_L \cdot \Sigma_L} \quad (9.3.22)$$

Trovate tutte le grandezze al bordo sinistro si calcola ${}_3U_L$ dalla (9.3.3). La pendenza della prima e terza componente è data da:

$$\begin{cases} {}_1\Delta_1 = 2 \cdot \frac{{}_1U_1 - {}_1U_L}{\Delta x} \\ {}_3\Delta_1 = 2 \cdot \frac{{}_3U_1 - {}_3U_L}{\Delta x} \end{cases} \quad (9.3.23)$$

Bordo destro Al bordo destro è imposta la sola pressione di valle:

$$p_R = p_v \quad (9.3.24)$$

In questo caso si ha una sola equazione e tre incognite ${}_1U_R$, ${}_2U_R$ e ${}_3U_R$. La pendenza della prima e seconda componente vengono calcolate come:

$$\begin{cases} {}_1\Delta_N = 2 \cdot \frac{{}_1U_N - {}_1U_{N-1}}{\Delta x} \\ {}_2\Delta_N = 2 \cdot \frac{{}_2U_N - {}_2U_{N-1}}{\Delta x} \end{cases} \quad (9.3.25)$$

da cui segue:

$$\begin{cases} {}_1U_R = {}_1U_N + {}_1\Delta_N \\ {}_2U_R = {}_2U_N + {}_2\Delta_N \end{cases} \quad (9.3.26)$$

Dalla prima e seconda equazione della (9.3.26) si ricavano rispettivamente:

$$\begin{cases} \rho_R = \frac{{}_1U_R}{\Sigma_R} \\ u_R = \frac{{}_2U_R}{\rho_R \cdot \Sigma_R} \end{cases} \quad (9.3.27)$$

Il valore della densità e velocità al bordo destro, insieme al dato della pressione di valle permette di calcolare ${}_3U_R$:

$${}_3U_R = \rho_R \cdot \Sigma_R \cdot \left(c_v \cdot \frac{p_R}{R \cdot \rho_R} + \frac{1}{2} \cdot u_R^2 \right) \quad (9.3.28)$$

A questo punto la pendenza della terza componente può essere calcolata come:

$${}_3\Delta_N = 2 \cdot \frac{{}_3U_R - {}_3U_N}{\Delta x} \quad (9.3.29)$$

9.4 Risultati

La simulazione viene eseguita nelle stesse condizioni dello schema del primo ordine. L'unica differenza è l'ampiezza delle celle pari a $\frac{\Delta x}{L} = 0.005$. Nonostante la griglia sia dieci volte meno fitta rispetto al caso del primo ordine, i risultati sono assolutamente paragonabili. In particolare l'andamento di pressione fornisce un'ottima stima della posizione dell'urto. La possibilità di utilizzare un passo spaziale più grande si traduce in una simulazione molto più veloce: lo stazionario viene raggiunto nell'arco di una decina di minuti, contro le circa 5 ore e mezza necessarie allo schema del primo ordine. Anche in questo caso la portata tende a discostarsi dal valore esatto, ma risulta molto simile a quella ottenuta con lo schema del primo ordine che implementa Godunov ai bordi.

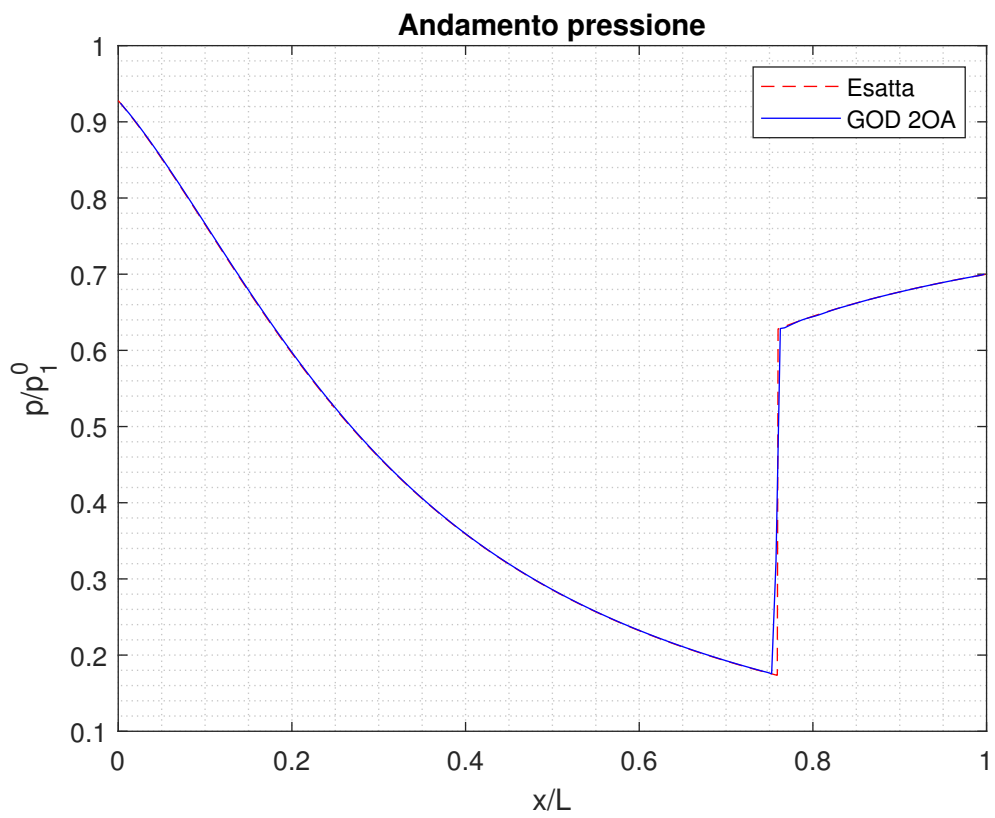


Figura 18. Andamento della pressione lungo l'ugello con schema del secondo ordine

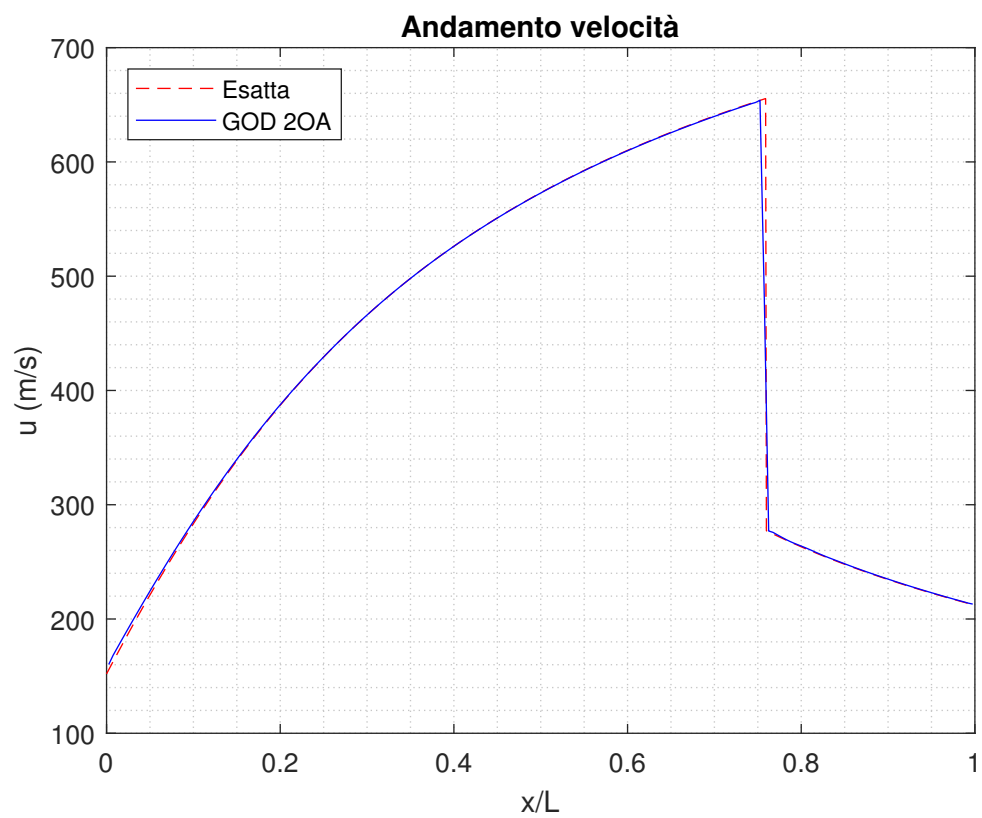


Figura 19. Andamento della velocità lungo l'ugello con schema del secondo ordine

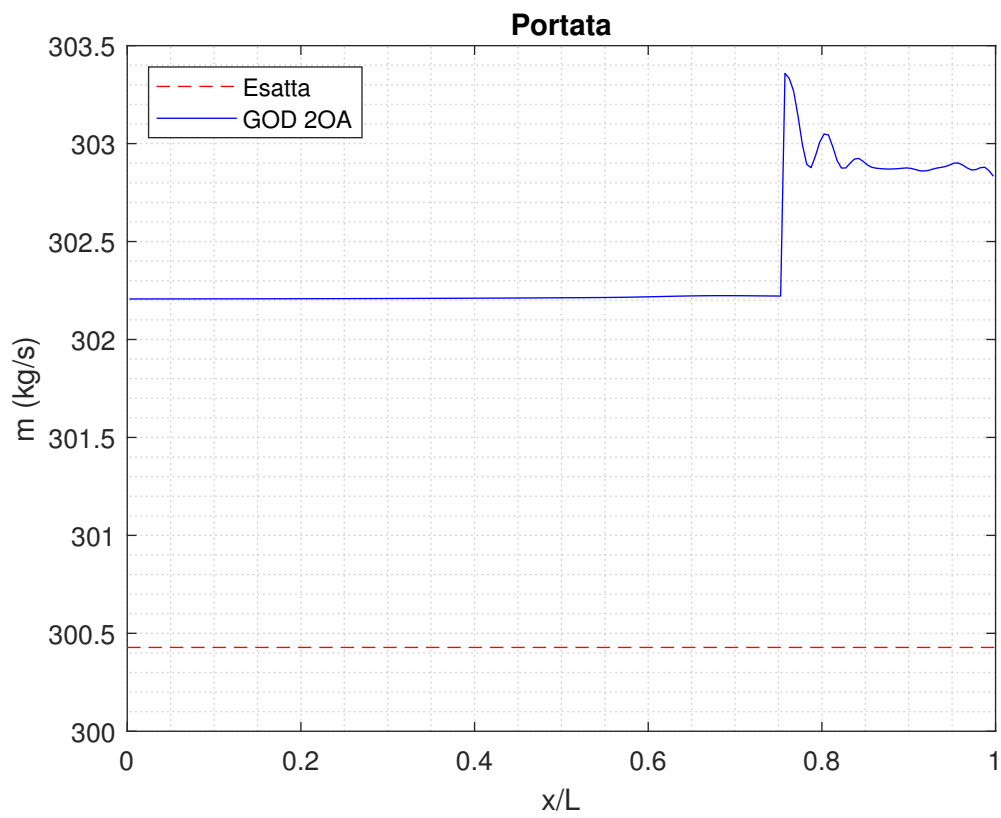


Figura 20. Portata che allo stazionario attraversa l'ugello con schema de secondo ordine

10 Problema di Sod

Descrizione Il problema di Sod consiste in due fluidi, generalmente gas, a pressioni diverse, separati da un setto rigido [20] [8]. Nel caso specifico si considera il gas ideale ad alta pressione circondato da acqua liquida a pressione più bassa. L'equazione di stato assunta per l'acqua è la *stiffened gas* descritta nella sezione 4.2. Quando il setto viene rimosso si generano uno *shock* e un *rarefaction fan* che si propagano rispettivamente nel liquido e gas [20]. L'interfaccia tra i fluidi si sposta alla velocità della *contact discontinuity*.

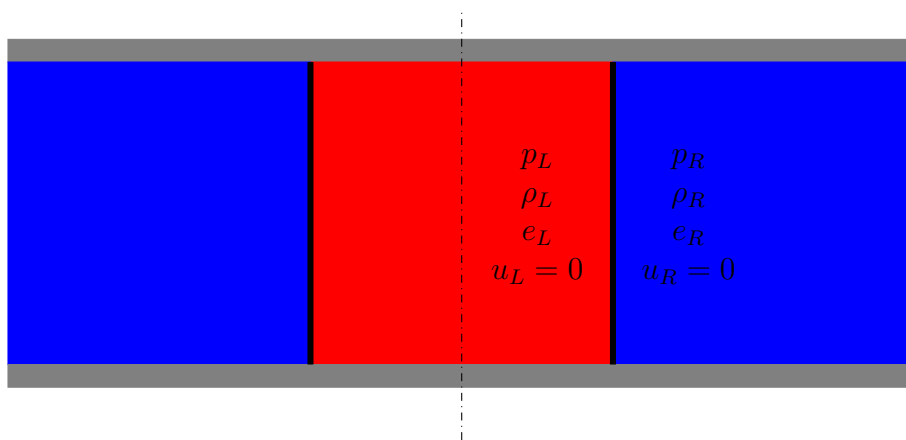


Figura 21. Problema di Sod: gas ideale (rosso) ad alta pressione circondato da acqua (blu)

10.1 Soluzione analitica

Se il *rarefaction fan* non raggiunge l'asse di simmetria del problema, quindi non si ha interazione tra le onde, la soluzione analitica del problema di Sod consiste nel risolvere il problema di Riemann all'interfaccia tra i due fluidi al tempo $t = 0$. Trovati i valori delle grandezze a destra e sinistra della *contact*

discontinuity e la velocità dello *shock* s_R , si ottiene la soluzione:

$$p(t, x) = \begin{cases} p_L & \text{se } x \leq x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \\ p_L \cdot \left[\frac{2}{\gamma + 1} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{a_L} \cdot \left(u_L - \frac{x}{t} \right) \right]^{\frac{2 \cdot \gamma}{\gamma - 1}} & \\ \text{se } x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \leq x \leq x_0 + (u_L^* - a_L^*) \cdot t & \\ p^* & \text{se } x_0 + (u^* - a_L^*) \cdot t \leq x \leq x_0 + u^* \cdot t \\ p^* & \text{se } x_0 + u^* \cdot t \leq x < x_0 + s_R \cdot t \\ p_R & \text{se } x > x_0 + s_R \cdot t \end{cases} \quad (10.1.1)$$

$$u(t, x) = \begin{cases} u_L & \text{se } x \leq x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \\ \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot u_L + \frac{2}{\gamma + 1} \cdot \left(a_L + \frac{x - x_0}{t} \right) & \\ \text{se } x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \leq x \leq x_0 + (u_L^* - a_L^*) \cdot t & \\ u^* & \text{se } x_0 + (u^* - a_L^*) \cdot t \leq x \leq x_0 + u^* \cdot t \\ u^* & \text{se } x_0 + u^* \cdot t \leq x < x_0 + s_R \cdot t \\ u_R & \text{se } x > x_0 + s_R \cdot t \end{cases} \quad (10.1.2)$$

$$\rho(t, x) = \begin{cases} \rho_L & \text{se } x \leq x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \\ \rho_L \cdot \left[\frac{2}{\gamma + 1} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{a_L} \cdot \left(u_L - \frac{x}{t} \right) \right]^{\frac{2}{\gamma - 1}} & \\ \text{se } x_0 + (u_L - a_L) \cdot t \leq x \leq x_0 + (u_L^* - a_L^*) \cdot t & \\ \rho_L^* & \text{se } x_0 + (u^* - a_L^*) \cdot t \leq x \leq x_0 + u^* \cdot t \\ \rho_R^* & \text{se } x_0 + u^* \cdot t \leq x < x_0 + s_R \cdot t \\ \rho_R & \text{se } x > x_0 + s_R \cdot t \end{cases} \quad (10.1.3)$$

dove x_0 indica la posizione iniziale dell'interfaccia. Per i fluidi considerati, le altre grandezze possono essere ricavate da queste mediante l'equazione di stato. La figura 22 mostra graficamente la soluzione del problema.

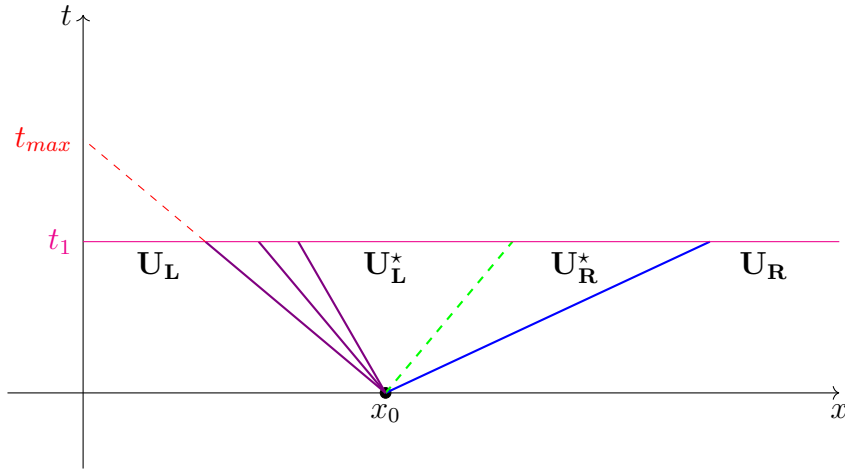


Figura 22. Rappresentazione grafica della soluzione del problema di Sod [20]

10.2 Soluzione numerica

Il flusso in assenza di variazioni di sezione del condotto, è descritto dal sistema di equazioni:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x = \mathbf{0} \quad (10.2.1)$$

con:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \cdot \Sigma \\ \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \rho \cdot E \cdot \Sigma \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \Sigma \cdot (p + \rho \cdot u^2) \\ \Sigma \cdot u \cdot (p + \rho \cdot E) \end{pmatrix}$$

La soluzione numerica può essere ricavata discretizzando questo sistema con lo schema di Godunov, come spiegato nel flusso attraverso l'ugello nella sezione 9. In questo caso lo schema deve essere applicato al gas ideale e all'acqua, utilizzando le rispettive equazioni di stato.

10.2.1 Tracciamento dell'interfaccia

La presenza di due fluidi diversi introduce il problema del tracciamento dell'interfaccia tra essi. Lo schema di Godunov non può essere applicato direttamente: in generale se al passo n l'interfaccia si trova sul bordo cella, al passo temporale successivo, questa si troverà all'interno di una delle celle del dominio. In questo caso le medie di cella non avrebbero alcun significato fisi-

co perché riferite a fluidi diversi [¶]. Di seguito vengono presentati due metodi che permettono di risolvere questo problema, basati sul teorema di Green e sul metodo di interpolazione. Le soluzioni ottenute vengono confrontate con quella analitica per verificarne l'efficacia.

Tracciamento con teorema di Green Questo metodo è proposto da Charlie H. Cooke & Tze-Jang Chen in [21]. L'interfaccia tra i due fluidi si sposta con velocità u^* , assunta costante nell'intervallo Δt . Si verifica che una delle due celle all'interfaccia si espande e l'altra si comprime: le celle non possono essere più grandi di $2 \cdot \Delta x$ e più piccole di Δx . Sotto queste ipotesi le due celle all'interfaccia coprono sempre uno spazio pari a $3 \cdot \Delta x$. La figura 23 mostra uno schema della situazione al tempo t_n nel caso di $u^* > 0$:

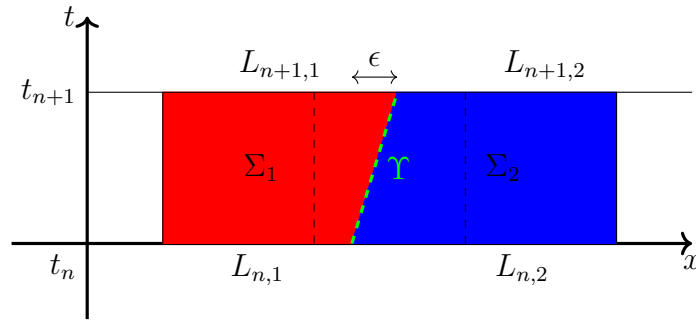


Figura 23. Avanzamento dell'interfaccia tra i fluidi [21]

Si integri la 10.2.1 sull'area Σ_1 e Σ_2 . Per la cella che si espande si ha:

$$\int_{\Sigma_1} (\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x) dxdt = \mathbf{0} \quad (10.2.2)$$

Il teorema di Green permette di trasformare un integrale di superficie in uno di linea:

$$\int_{\Sigma} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) - \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right) \right] dxdt = \int_{\partial \Sigma} (-f dx + g dt) \quad (10.2.3)$$

Se si applica il teorema alla (10.2.2) si ottiene:

$$\int_{\partial \Sigma_1} (-\mathbf{U}(t, x) dx - \mathbf{F}(t, x) dt) = \mathbf{0} \quad (10.2.4)$$

[¶]Si immagini al calcolo di una densità media per una cella occupata per metà da gas e liquido

che diventa:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{U}(t, x) dx = - \int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{F}(t, x) dt \quad (10.2.5)$$

L'integrale a primo membro può essere scritto come:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{U}(t, x) dx = \int_{L_{n,1}} \mathbf{U}(t, x) dx + \int_{\Upsilon} \mathbf{U}(t, x) dx + \int_{L_{n+1,1}} \mathbf{U}(t, x) dx \quad (10.2.6)$$

Il primo e ultimo integrale rappresentano le medie di cella di $\mathbf{U}(t, x)$ al passono n ed $n + 1$:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{U}(t, x) dx = \frac{1}{L_{n,1}} \cdot \mathbf{U}_{n,1} + \int_{\Upsilon} \mathbf{U}(t, x) dx - \frac{1}{L_{n+1,1}} \cdot \mathbf{U}_{n+1,1} \quad (10.2.7)$$

Il termine $\int_{\Upsilon} \mathbf{U}(t, x) dx$ rappresenta l'integrale lungo la *contact discontinuity* dal lato della cella Σ_1 . Dalla soluzione del problema di Riemann si ha che nell'intervallo Δt la soluzione a sinistra della *contact discontinuity* è costante e pari a \mathbf{U}_L^* . L'integrale può quindi essere calcolato come:

$$\int_{\Upsilon} \mathbf{U}(t, x) dx = \mathbf{U}_L^* \cdot \int_{\Upsilon} dx = \mathbf{U}_L^* \cdot \epsilon \quad (10.2.8)$$

Il primo membro della (10.2.5) è uguale a:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{U}(t, x) dx = L_{n,1} \cdot \mathbf{U}_{n,1} - L_{n+1,1} \cdot \mathbf{U}_{n+1,1} + \epsilon \cdot \mathbf{U}_L^* \quad (10.2.9)$$

Gli stessi passaggi vengono ripetuti per il termine del flusso:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{F}(t, x) dt = \int_{\Upsilon} \mathbf{F}(t, x) dt + \int_{t_{n+1}}^{t_n} \mathbf{F}(t, x) dt \quad (10.2.10)$$

A secondo membro, l'argomento del primo integrale è costante perché funzione di \mathbf{U}_L^* anch'esso costante:

$$\int_{\Upsilon} \mathbf{F}(t, x) dt = \mathbf{F}(\mathbf{U}_L^*) \cdot \int_{\Upsilon} dt = \mathbf{F}(\mathbf{U}_L^*) \cdot \Delta t \quad (10.2.11)$$

mentre il secondo integrale rappresenta il flusso numerico calcolato al bordo $i = 1 - \frac{1}{2}$:

$$\int_{\partial\Sigma_1} \mathbf{F}(t, x) dt = \mathbf{F}(\mathbf{U}_L^*) \cdot \Delta t - \Delta t \cdot \Phi_{n,1-\frac{1}{2}} \quad (10.2.12)$$

Sostituendo la (10.2.9) e (10.2.12) nella (10.2.5), dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\mathbf{U}_{n+1,1} = \frac{1}{L_{n+1,1}} \cdot \left[L_{n,1} \cdot \mathbf{U}_{n,1} + \epsilon \cdot \mathbf{U}_L^* - \Delta t \cdot \left(\mathbf{F}(\mathbf{U}_L^*) - \Phi_{n,1-\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (10.2.13)$$

dove la distanza ϵ è pari a:

$$\epsilon = u^* \cdot \Delta t \quad (10.2.14)$$

Ripetendo gli stessi passaggi per la cella che si contrae si ottiene:

$$\mathbf{U}_{n+1,2} = \frac{1}{L_{n+1,2}} \cdot \left[L_{n,2} \cdot \mathbf{U}_{n,2} - \epsilon \cdot \mathbf{U}_R^* - \Delta t \cdot \left(\Phi_{n,2+\frac{1}{2}} - \mathbf{F}(\mathbf{U}_R^*) \right) \right] \quad (10.2.15)$$

L'eventuale presenza di un termine sorgente $\mathbf{S}(t, x)$ nella (10.2.1) può essere discretizzato con il metodo dei trapezi e comporta il termine aggiuntivo a secondo membro:

$$\mathbf{S}_{n,i} = \Delta t \cdot \frac{L_{n,i} + L_{n+1,i}}{2} \cdot \mathbf{S}(t_n, x_i) \quad (10.2.16)$$

A questo punto è possibile applicare lo schema di Godunov all'interfaccia seguendo questi passi:

1. Risolvere il problema di Godunov tra gas e liquido;
2. Calcolare $\epsilon = u^* \cdot \Delta t$ utilizzando come passo temporale quello imposto dalla condizione di stabilità (8.20);
3. Se $L_{n+1,1} < \Delta x \vee L_{n+1,1} > 2 \cdot \Delta x$ oppure $L_{n+1,2} < \Delta x \vee L_{n+1,2} > 2 \cdot \Delta x$ imporre Δt in modo che la discontinuità al passo $n + 1$ si trovi al bordo cella;
4. Applicare le equazioni (10.2.13) (10.2.13)
5. Se si verifica la 3. aggiornare le celle;

Nota 10.2.1

La figura 24 mostra l'intervallo temporale in cui l'interfaccia tra i fluidi attraversa la celle. Per questo Δt , determinato dalla condizione di stabilità (8.20), si avrebbe che:

$$L_{n+1,1}^{CFL} = L_{n,1} + u^* \cdot \Delta t > 2 \cdot \Delta x \quad (10.2.17)$$

Come detto le celle devono avere sempre dimensione compresa $L_{n,i} \in [\Delta x, 2 \cdot \Delta x] \forall i, n$. La soluzione consiste nello scegliere un intervallo

temporale minore pari a:

$$\Delta t^G = \frac{2 \cdot \Delta x - L_{n,i}}{u^*} \quad (10.2.18)$$

Compiuta l'iterazione si avrà $L_{n+1,i} = 2 \cdot \Delta x$. questa cella viene divisa in due celle di ampiezza Δx in cui fluido ha stesse proprietà della cella grande iniziale: una di queste sarà interna al dominio di uno dei due fluidi; l'altra sarà la nuova cella all'interfaccia. In questo modo si è ottenuto che il fluido è avanzato di una cella in avanti. Al passo temporale $n + 1$ l'interfaccia partirà dal bordo cella, e si possono verificare due situazioni:

$u^* > 0$ In questo caso la cella i si espande e avrà dimensione iniziale Δx . La cella $i + 1$ si comprime e inizialmente avrà dimensione $2 \cdot \Delta x$ (figura 25). Le proprietà in questa cella saranno la medie di quelle nelle due celle originali:

$$\bar{\mathbf{U}}_{n,i+1} = \frac{1}{2 \cdot \Delta x} \cdot \int_{C_{i+1}+C_{i+2}} \mathbf{U}(t_n, x) dx = \frac{\mathbf{U}_{n,i+1} + \mathbf{U}_{n,i+2}}{2} \quad (10.2.19)$$

$u^* < 0$ In questo caso la cella i si comprime e avrà dimensione iniziale $2 \cdot dx$. Anche in questo verrà valutata la media:

$$\bar{\mathbf{U}}_{n,i} = \frac{1}{2 \cdot \Delta x} \cdot \int_{C_{i-1}+C_i} \mathbf{U}(t_n, x) dx = \frac{\mathbf{U}_{n,i-1} + \mathbf{U}_{n,i}}{2} \quad (10.2.20)$$

La cella $i + 1$ si espande e sarà inizialmente pari a Δx (figura 26).

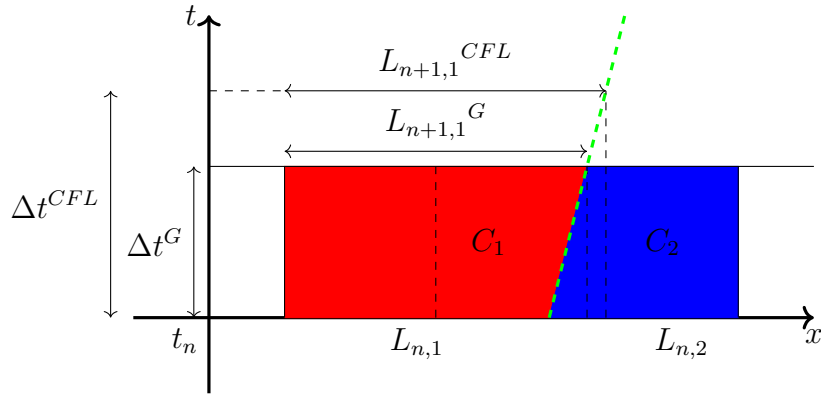


Figura 24. Scelta dell'intervallo temporale: l'apice si CFD si riferisce al valore massimo per garantire la stabilità dello schema; l'apice G all'intervallo richiesto dal tracciamento con Green [21]

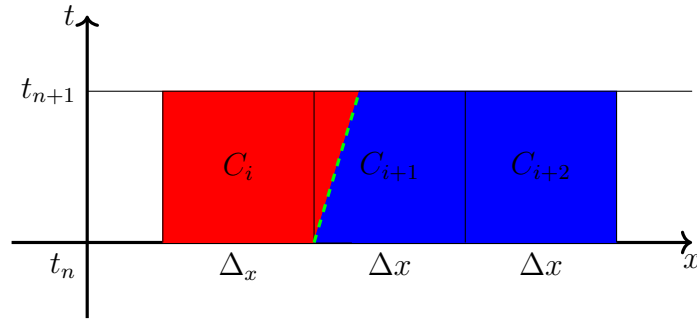


Figura 25. La cella C_i (rosso) si espande; le due celle adiacenti C_{i+1} e C_{i+2} si fondono in una grande $2 \cdot \Delta x$ (blu) [21]

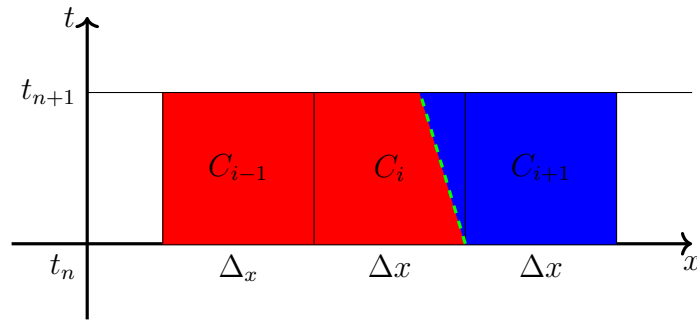


Figura 26. La cella $C_i + 1$ (blu) si espande; le due celle adiacenti C_i e C_{i-1} si fondono in una grande $2 \cdot \Delta x$ (rossa) [21]

Tracciamento per interpolazione Questo metodo è presentato da J.P. Cocchi & R. Saurel & J.C. Loraud in [8]. Dalla condizione di stabilità (8.20) si ha che nessuna delle tre perturbazioni, sia essa *shock*, *rarefaction fan* o *contact discontinuity*, può viaggiare per più di $\frac{\Delta x}{2}$. Questo determina due possibili situazioni, a seconda che l'interfaccia attraversi o meno il nodo di una cella. Assumendo u^* costante nell'intervallo Δt , la posizione dell'interfaccia al passo temporale $n + 1$ è data da:

$$v_{n+1} = v_n + u^* \cdot \Delta t \quad (10.2.21)$$

Siano inoltre v_L e v_R le posizioni estreme raggiunte dalle perturbazioni sinistra e destra:

$$v_{L_{n+1}} = v_n + \alpha_L \cdot \Delta t \quad (10.2.22)$$

$$v_{R_{n+1}} = v_n + \alpha_R \cdot \Delta t \quad (10.2.23)$$

dove α rappresenta la velocità della perturbazione. Si indichino con x_L e x_R i centri delle celle a sinistra e destra dell'interfaccia; mentre x_{L-1} e x_{R+1} i centri delle loro celle adiacenti. Supponendo il caso di $u^* > 0$ si possono verificare due situazioni:

$v_{n+1} > x_R$ Se l'interfaccia supera x_R (figura 27) allora si avrà che $\mathbf{U}_R = \mathbf{U}_L^*$. Inoltre, poiché la distanza massima percorribile dalle onde è $\frac{\Delta x}{2}$ il nodo sinistro non verrà perturbato. La soluzione a questo nodo viene interpolata tra x_{L-1} e l'interfaccia v_{n+1} :

$$\mathbf{U}_L = \mathbf{U}_{L-1} + \frac{\mathbf{U}_L^* - \mathbf{U}_{L-1}}{v_{n+1} - x_{L-1}} \cdot \Delta x \quad (10.2.24)$$

$v_{n+1} < x_R$ Nel caso in cui l'interfaccia non attraversi x_R (figura 28) bisogna considerare più possibilità. Se $v_L > x_L$ allora è necessario interpolare come al caso precedente, altrimenti si avrà direttamente $\mathbf{U}_L = \mathbf{U}_L^*$. Lo stesso vale per il nodo destro: se $v_R > x_R$ segue che $\mathbf{U}_R = \mathbf{U}_R^*$ altrimenti sarà necessario interpolare tra l'interfaccia v_{n+1} e x_{R+1} :

$$\mathbf{U}_R = \mathbf{U}_{R+1} - \frac{\mathbf{U}_{R+1} - \mathbf{U}_R^*}{x_{R+1} - v_{n+1}} \cdot \Delta x \quad (10.2.25)$$

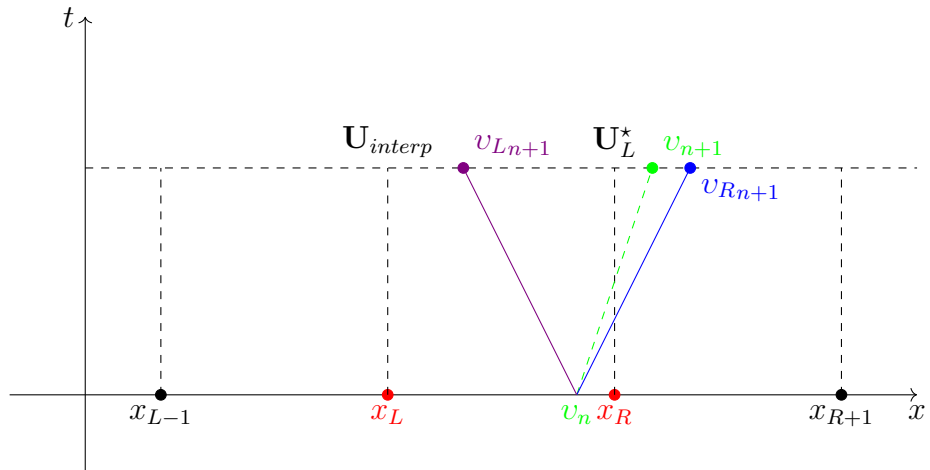


Figura 27. Caso in cui l'interfaccia attraversa il nodo [8]

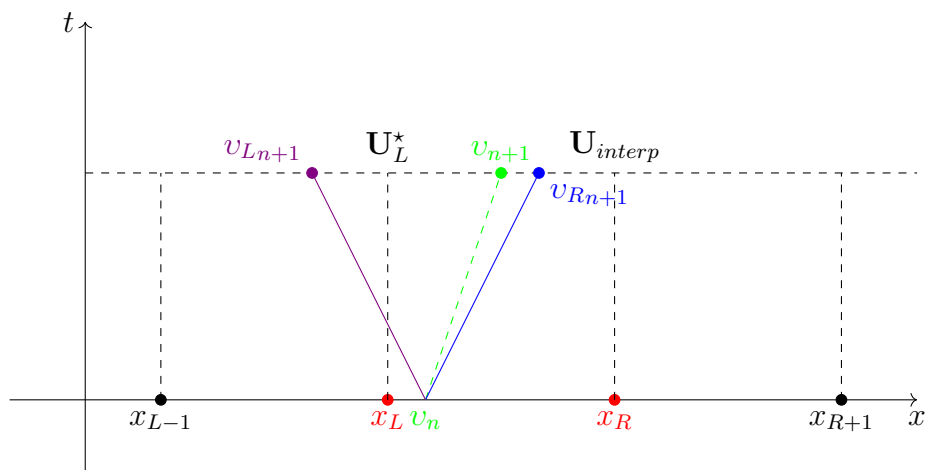


Figura 28. Caso in cui l'interfaccia non attraversa il nodo [8]

10.3 Risultati

Di seguito sono riportati i risultati delle simulazioni numeriche. L'ampiezza delle celle è pari a $\frac{dx}{L} = \frac{1}{3000}$ e la simulazione avanza fino al tempo $t_f = 1.5 \cdot 10^{-4}$ (s). Le condizioni iniziali della prova sono riportate in tabella 6:

Posizione del diaframma: $(\frac{x}{L})_0 = \frac{1}{3}$
Pressione del gas: $p_0^G = 9000$ (atm)
Temperatura del gas: $T_0^G = 2500$ (K)
Pressione dell'acqua: $p_0^A = 1$ (atm)
Densità dell'acqua: $\rho_0^A = 1007$ ($\frac{kg}{m^3}$)
Velocità iniziale: $u_0 = 0$ ($\frac{m}{s}$)

Tabella 6: Tabella dei valori iniziali per problema di Sod

Come si può vedere entrambi i metodi forniscono delle ottime soluzioni. L'andamento un po' più critico è quello della densità: a monte dell'interfaccia il metodo per interpolazione presenta meno oscillazioni (figura 32); a valle il metodo con Green rimane leggermente più basso (figura 33). Nonostante entrambi i metodi siano efficaci, il metodo di interpolazione sembra dare risultati leggermente migliori, probabilmente dovuti al fatto che utilizza una griglia con celle costanti mentre nel metodo di Green le celle all'interfaccia si accorciano e allungano.

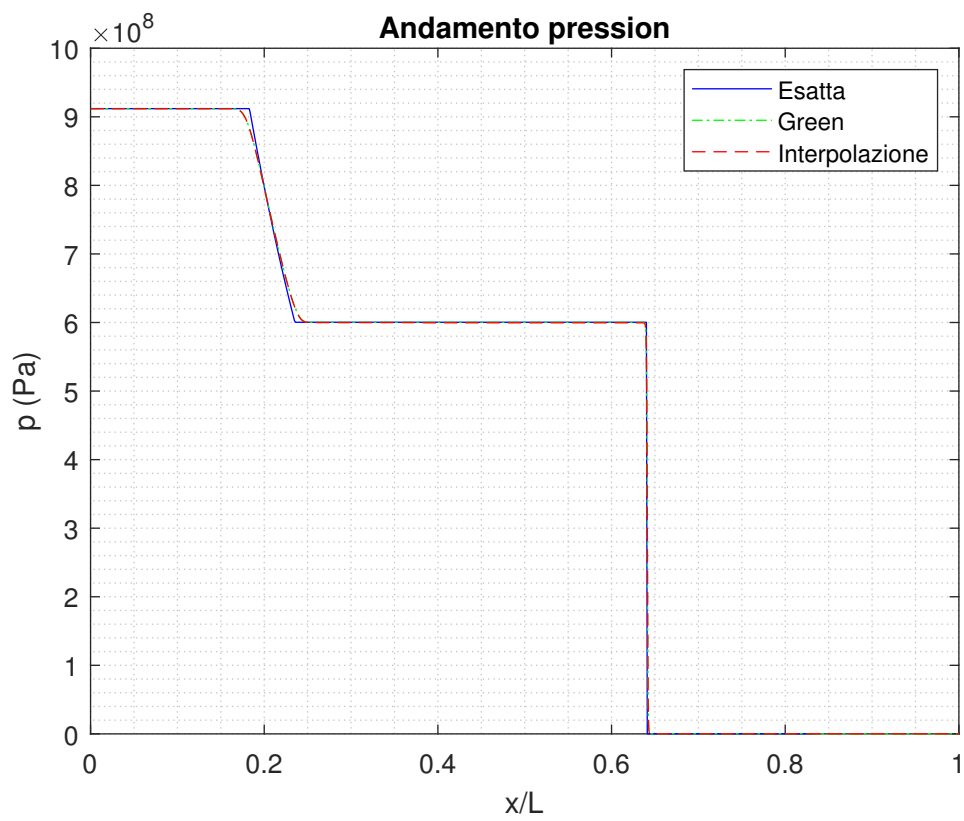


Figura 29. Andamento della pressione

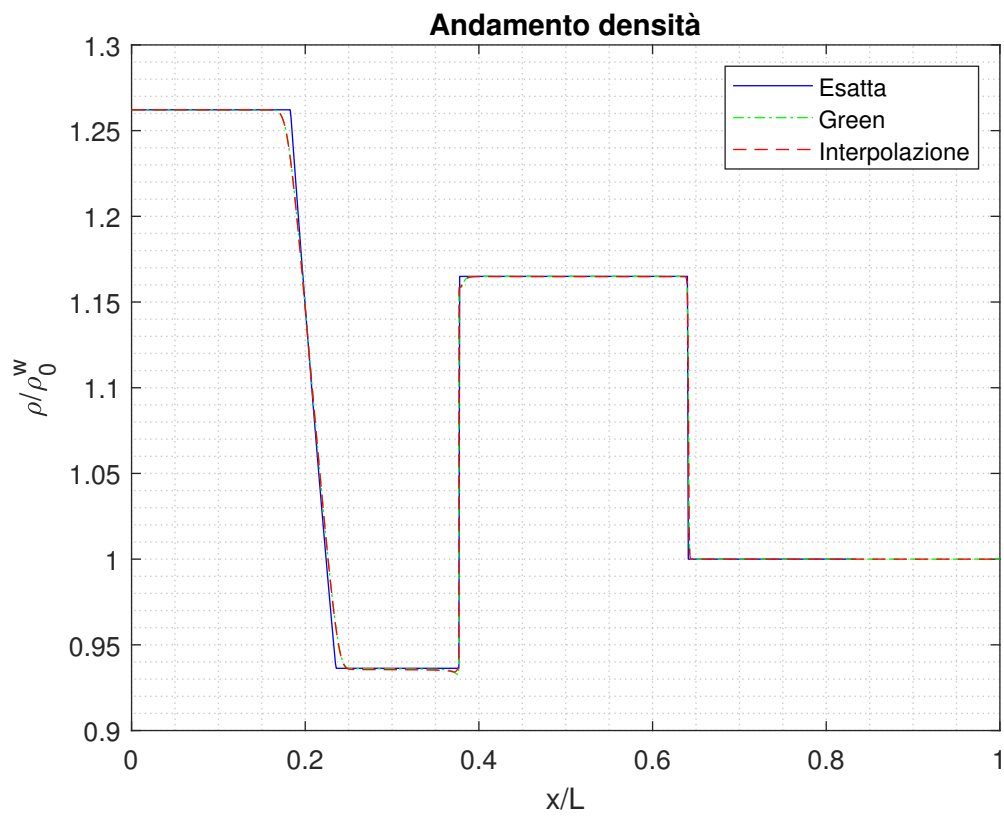


Figura 30. Andamento della densità

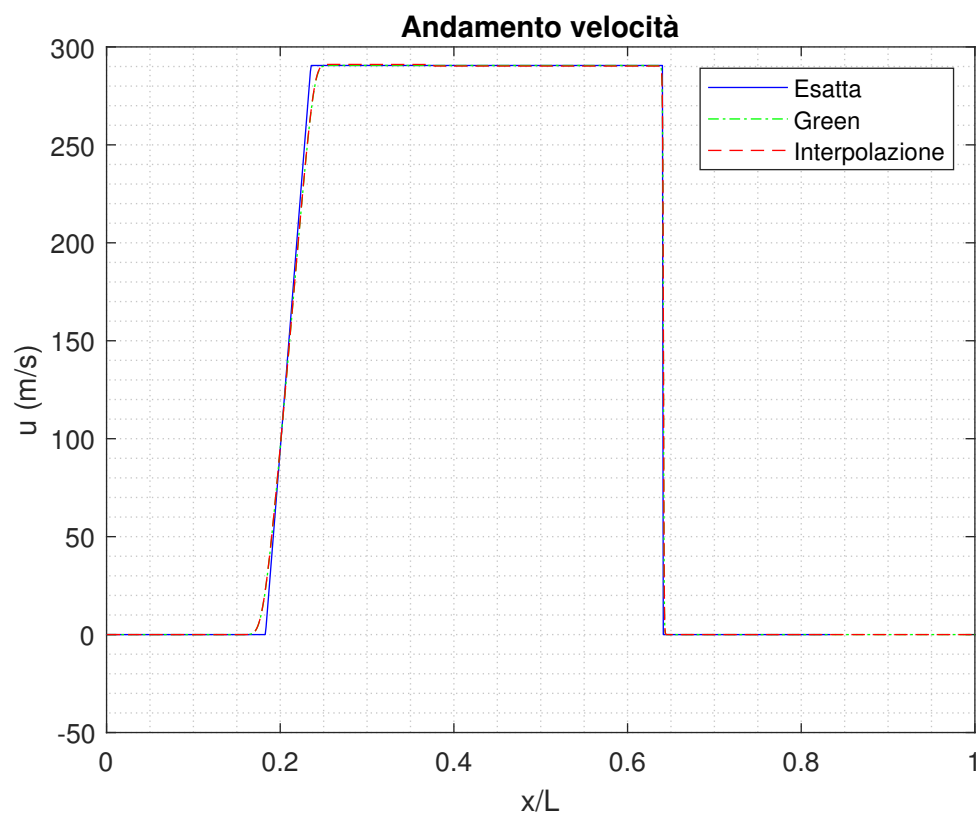


Figura 31. Andamento della velocità

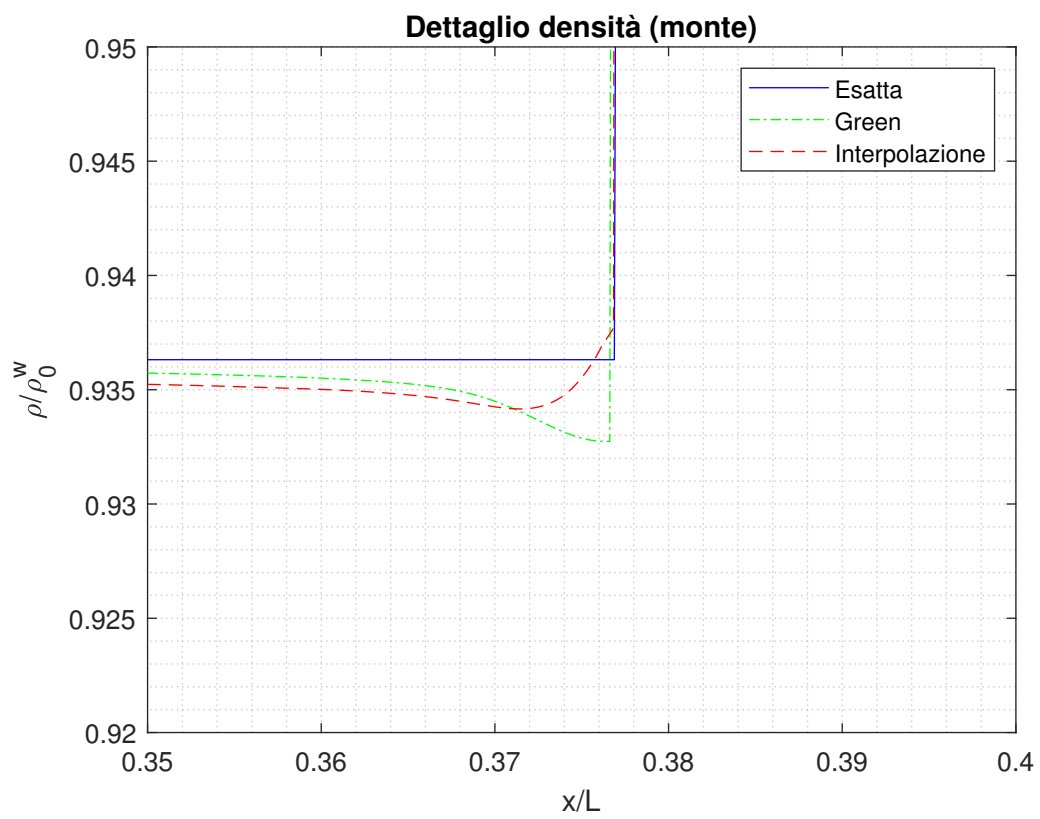


Figura 32. Dettaglio andamento densità a monte dell'interfaccia

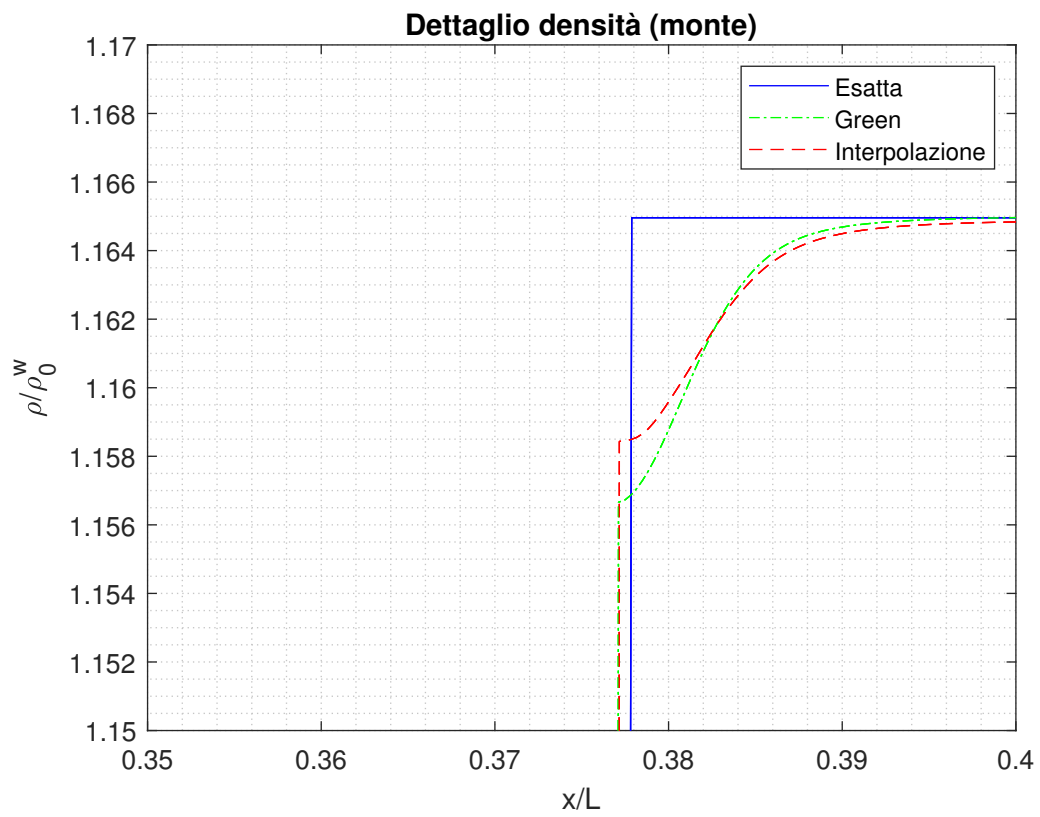


Figura 33. Dettaglio andamento densità a valle dell'interfaccia

11 Esplosione sottomarina di una bolla di gas

Questo problema è piuttosto diffuso in letteratura ed è stato trattato in [8] [22] [13] [21]. Il problema è affrontato in maniera abbastanza simile da molti autori. In particolare si fa riferimento al lavoro di Jolen Flores & Maurke Holt [13] dove si utilizza l'equazione di Tait e J.P. Cocchi & R. Saurel & J.C. Loraud [8] dove si impiega la *stiffened gas*. Si consideri una bolla di gas ad alta pressione e temperatura circondata da acqua a pressione più bassa (figura 34).

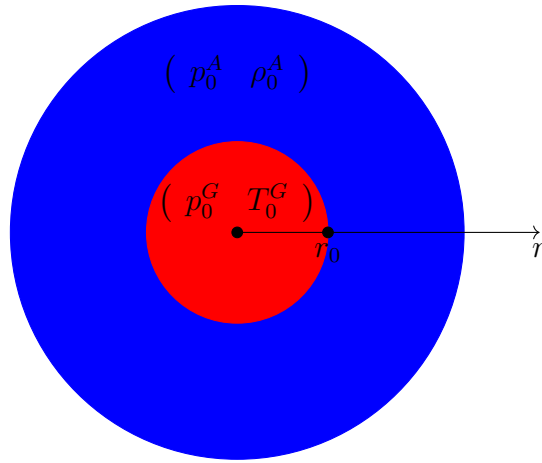


Figura 34. Schema di una bolla di gas (rossa) immersa in acqua (blu)

Si tratta di un problema unidimensionale lungo r per il quale vengono riportate di seguito le equazioni di Eulero in coordinate sferiche [21]:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_r = \mathbf{S} \quad (11.1)$$

dove:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \cdot \Sigma \\ \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \rho \cdot E \cdot \Sigma \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho \cdot u \cdot \Sigma \\ \Sigma \cdot (p + \rho \cdot u^2) \\ \Sigma \cdot u \cdot (p + \rho \cdot E) \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = -2 \cdot \begin{pmatrix} \frac{\rho \cdot u}{r} \\ \frac{\rho \cdot u^2}{r} \\ \frac{\rho \cdot E \cdot u}{r} \end{pmatrix}$$

Il problema in realtà è abbastanza semplice e si riconduce a una forma non omogenea delle equazioni differenziali fino ad ora incontrate. In particolare si ottiene un problema simile a quello di Sod, con il termine sorgente \mathbf{S} legato al cambio di coordinate. La soluzione numerica prevede di applicare lo schema di Godunov separatamente a gas e liquido come nel problema di Sod. La presenza del termine sorgente influenza il tracciamento dell'interfaccia. Mentre

il metodo basato sul teorema di Green può essere direttamente applicato al caso non omogeneo, integrando il termine $\mathbf{S}(t, x)$; nel metodo per interpolazione non compare mai il termine sorgente ed è valido solo per la forma omogenea delle equazioni di Eulero. Se si vuole utilizzare questa soluzione è possibile ricorrere a un metodo detto *operator splitting* [8]. La soluzione della (11.1) è data dalla soluzione dell'equazione differenziale ordinaria:

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{U}}(t_{n+1}, r), r) \quad (11.2)$$

dove $\tilde{\mathbf{U}}(t_{n+1}, x)$ è la soluzione dell'omogenea associata alla (11.1):

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_r = \mathbf{0} \quad (11.3)$$

A ogni passo temporale si trova la soluzione $\tilde{\mathbf{U}}_{n,i}$ della (11.3) interpolando all'interfaccia e utilizzando lo schema di Godunov altrove; quindi si risolve l'equazione (11.2) e si ricava $\mathbf{U}_{n+1,i}$ come:

$$\mathbf{U}_{n+1,i} = \tilde{\mathbf{U}}_{n,i} + \Delta t \cdot \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{U}}_{n+1,i}, r_i) \quad (11.4)$$

11.1 Risultati

Di seguito vengono proposti i risultati numerici delle simulazioni. I valori iniziali sono riportati in tabella 7. L'ampiezza delle celle è pari a $\frac{\Delta r}{L} = \frac{1}{3000}$ e la simulazione avanza fino a $t_f = 1.5 \cdot 10^{-4}$ (s). Le differenze più importanti sono legate all'equazione di stato utilizzata; entrambi i metodi per il tracciamento dell'interfaccia sembrano funzionare bene. I risultati ottenuti sono assolutamente paragonabili con quelli delle fonti a cui si è fatto riferimento [8] [13] [21].

Posizione del diaframma: $(\frac{r}{L})_0 = \frac{1}{3}$
Pressione del gas: $p_0^G = 9000$ (atm)
Temperatura del gas: $T_0^G = 2500$ (K)
Pressione dell'acqua: $p_0^A = 1$ (atm)
Densità dell'acqua: $\rho_0^A = 1007$ ($\frac{kg}{m^3}$)
Velocità iniziale: $u_0 = 0$ ($\frac{m}{s}$)

Tabella 7: Tabella dei valori iniziali per esplosione sottomarina

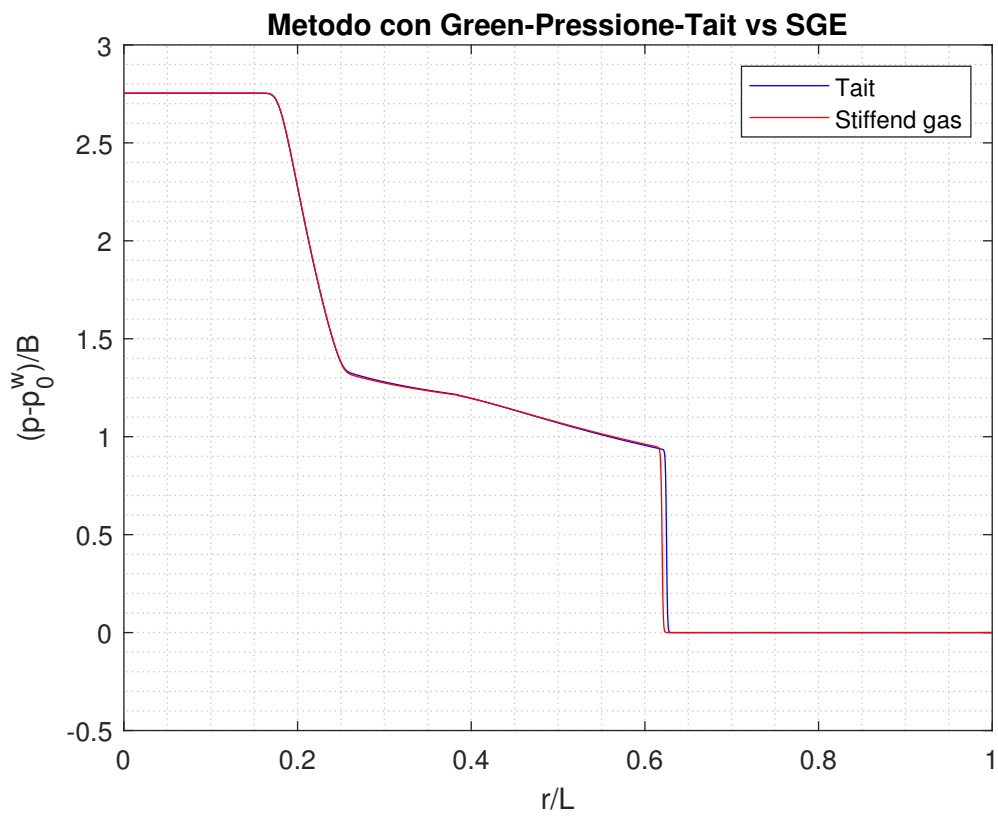


Figura 35. Andamento della pressione con il metodo con Green

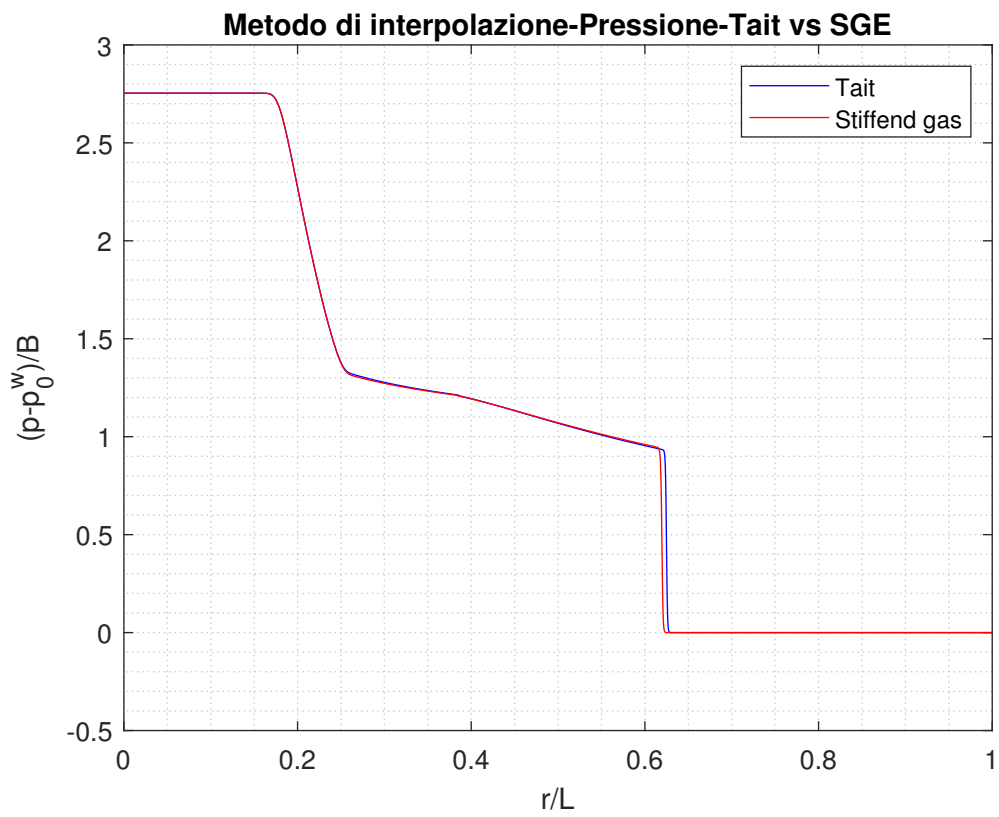


Figura 36. Andamento della pressione con il metodo di interpolazione

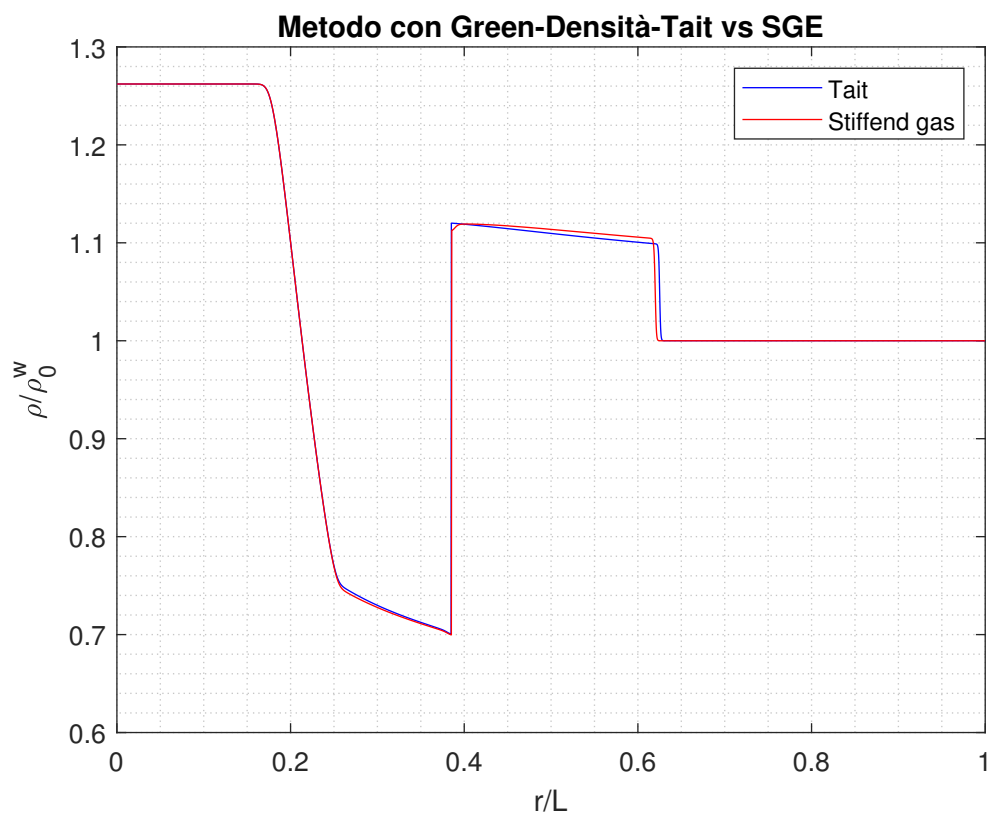


Figura 37. Andamento della densità con il metodo con Green

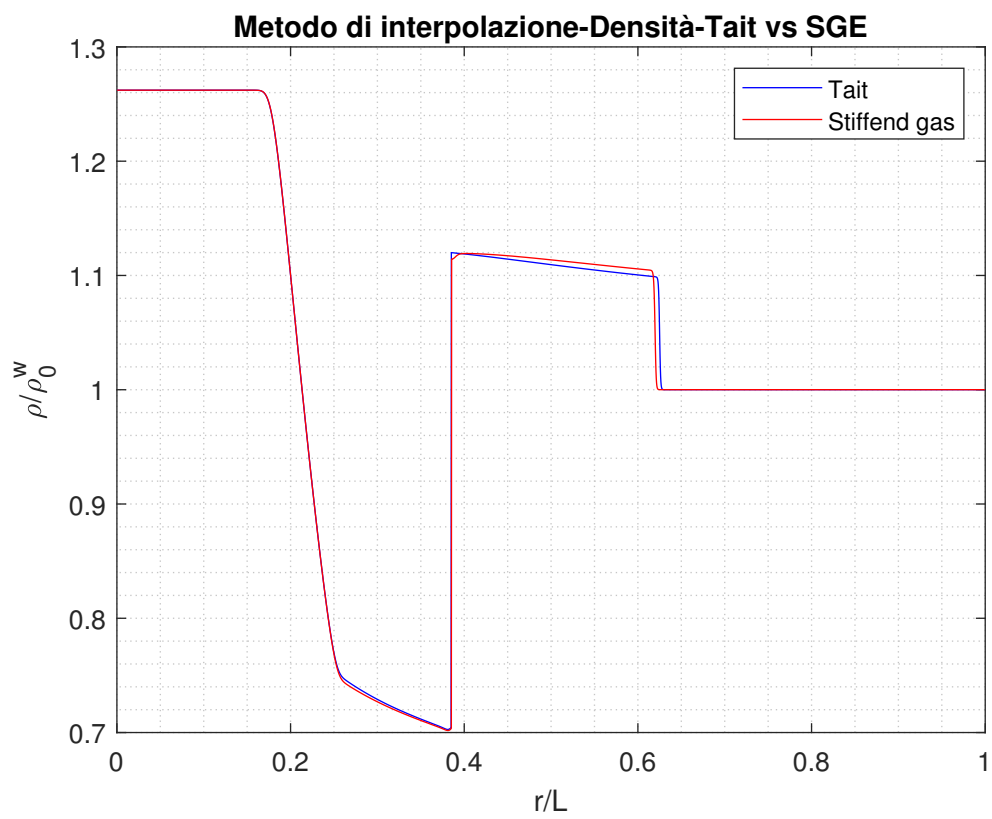


Figura 38. Andamento della densità con il metodo di interpolazione

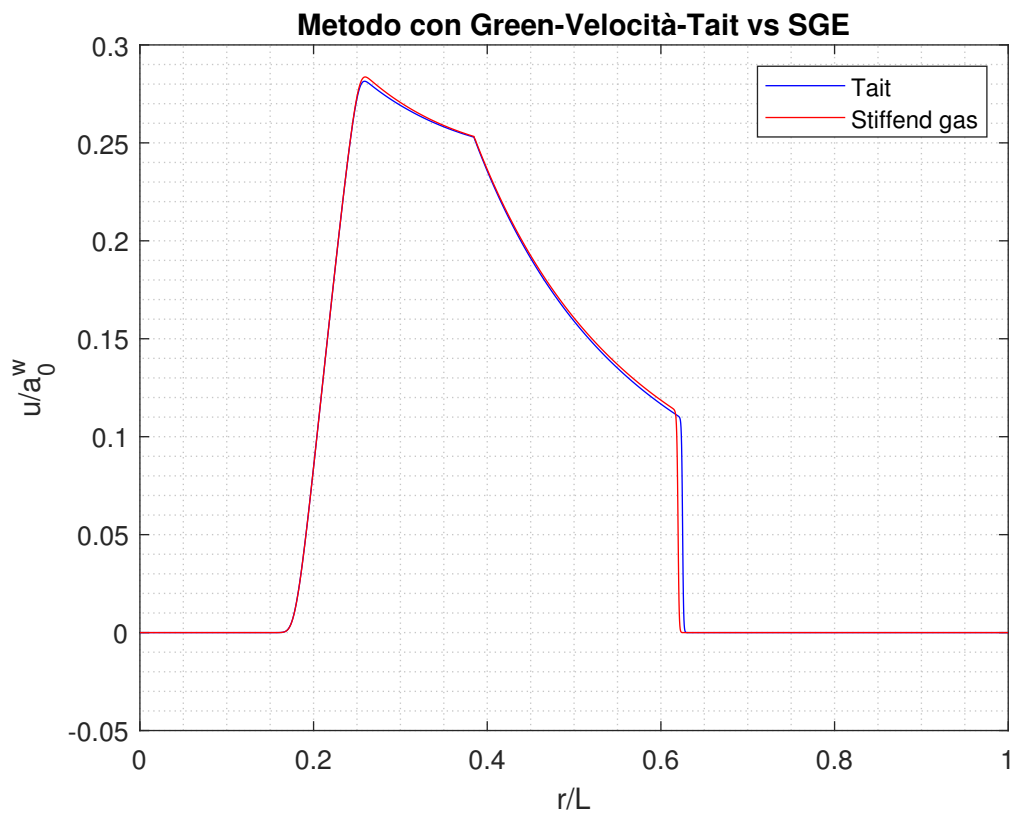


Figura 39. Andamento della velocità con il metodo con Green

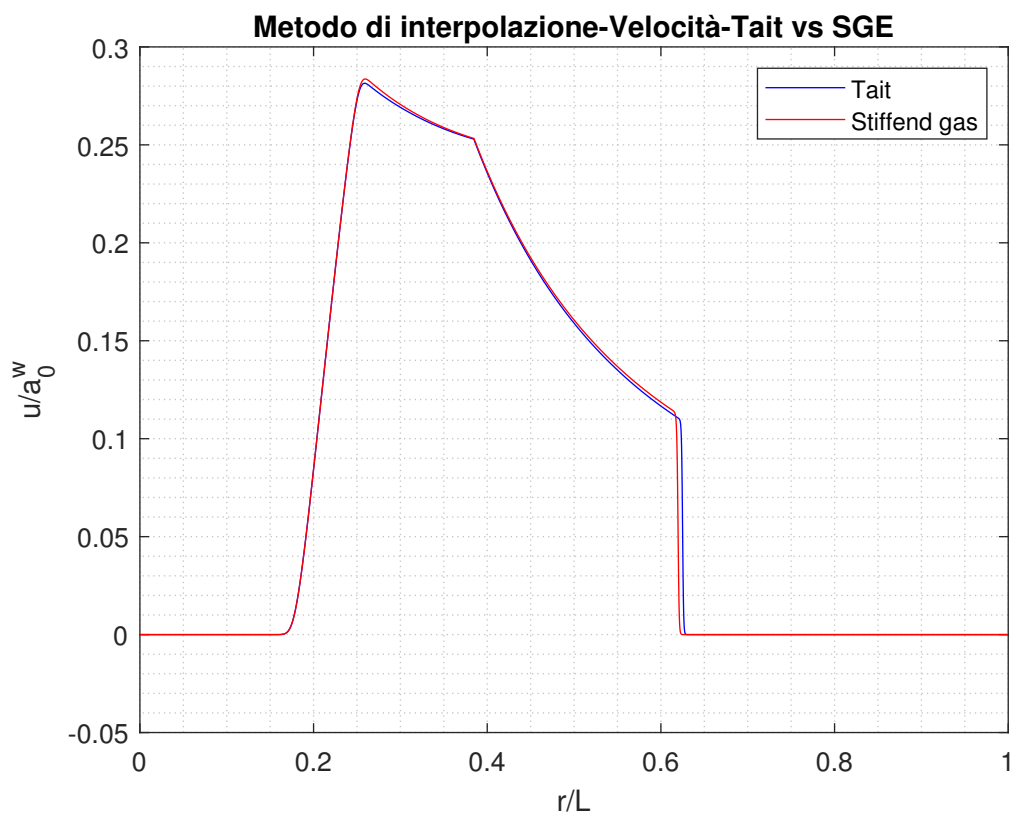


Figura 40. Andamento della velocità con il metodo di interpolazione

11.2 Risultati con schema del secondo ordine

I risultati sono stati ottenuti utilizzando lo schema di Godunov del secondo ordine che implementa il *limitatore di pendenza* di Von Leer. Per il tracciamento dell'interfaccia si è utilizzato il metodo di interpolazione che in questo caso da risultati effettivamente migliori rispetto a quello con Green. Questo è probabilmente legato al fatto che il *limitatore di pendenza* non funziona molto bene nel caso di celle ad ampiezza variabile. Le differenze maggiori rispetto allo schema del primo ordine sono visibili nel caso della *stiffened gas*, mentre con l'equazione di Tait si ottengono risultati molto simili. In particolare nel caso della *stiffened gas* si riesce a ottenere una curva di densità molto più netta a monte e valle dell'interfaccia tra i fluidi (figura 41).

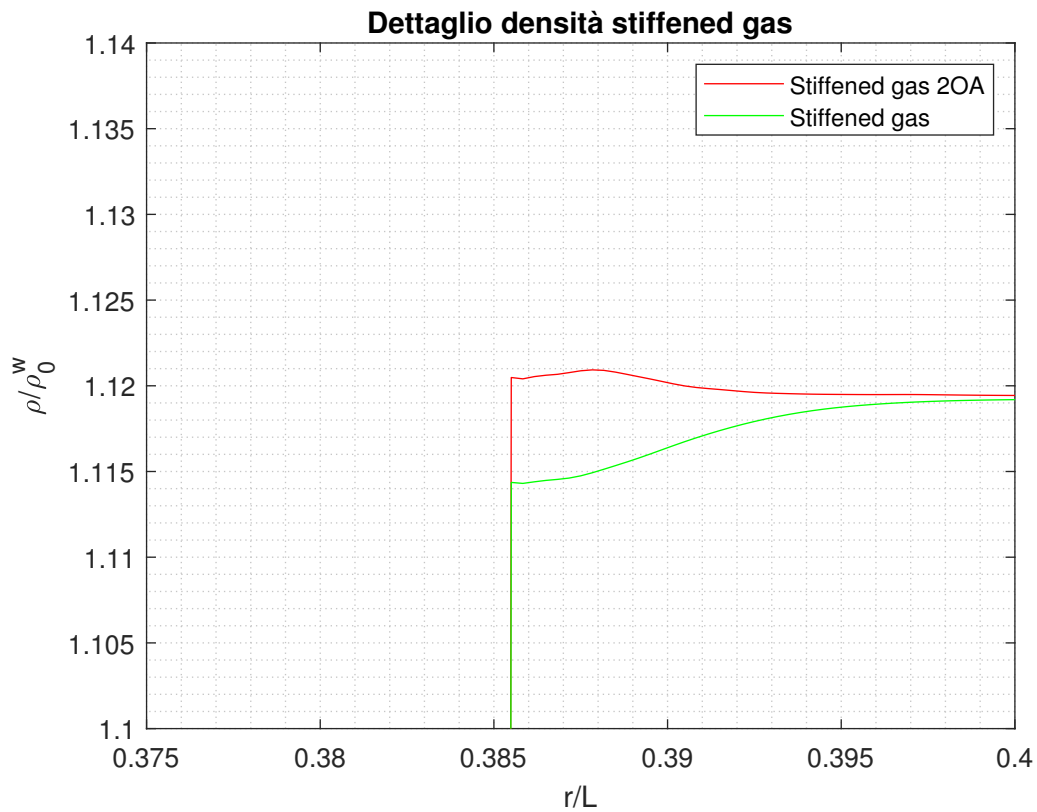


Figura 41. Dettaglio densità per la *stiffened ga* tra monte e valle l'interfaccia

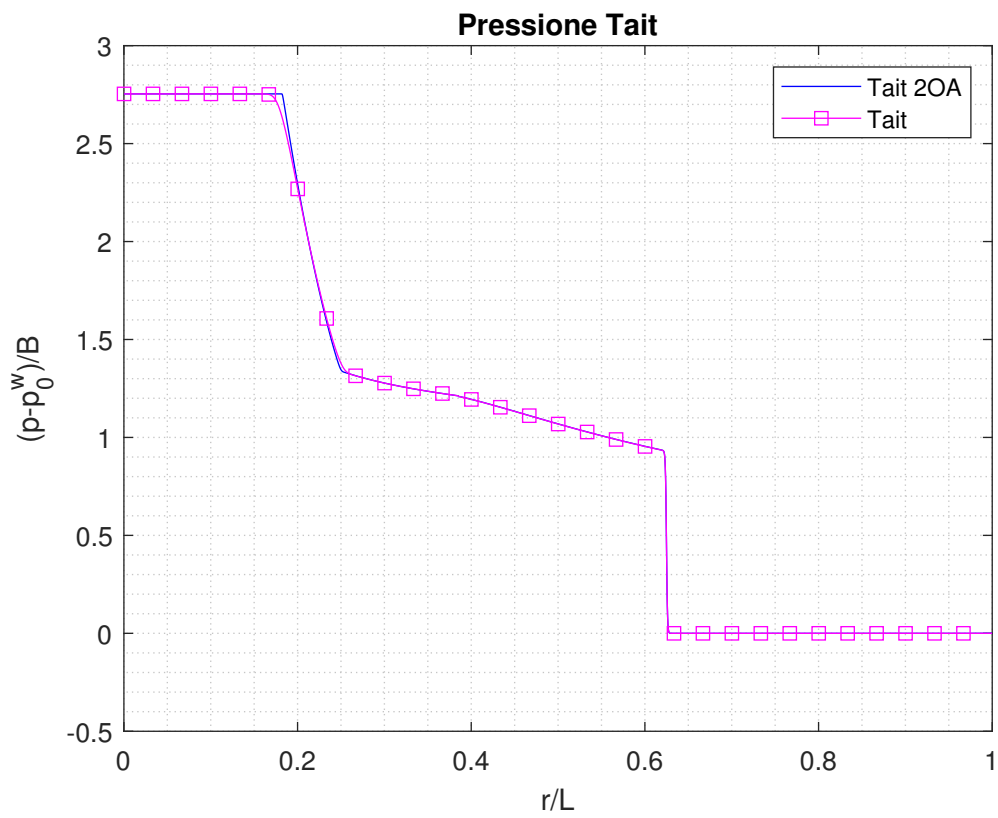


Figura 42. Confronto pressione tra schema del primo e secondo ordine per Tait

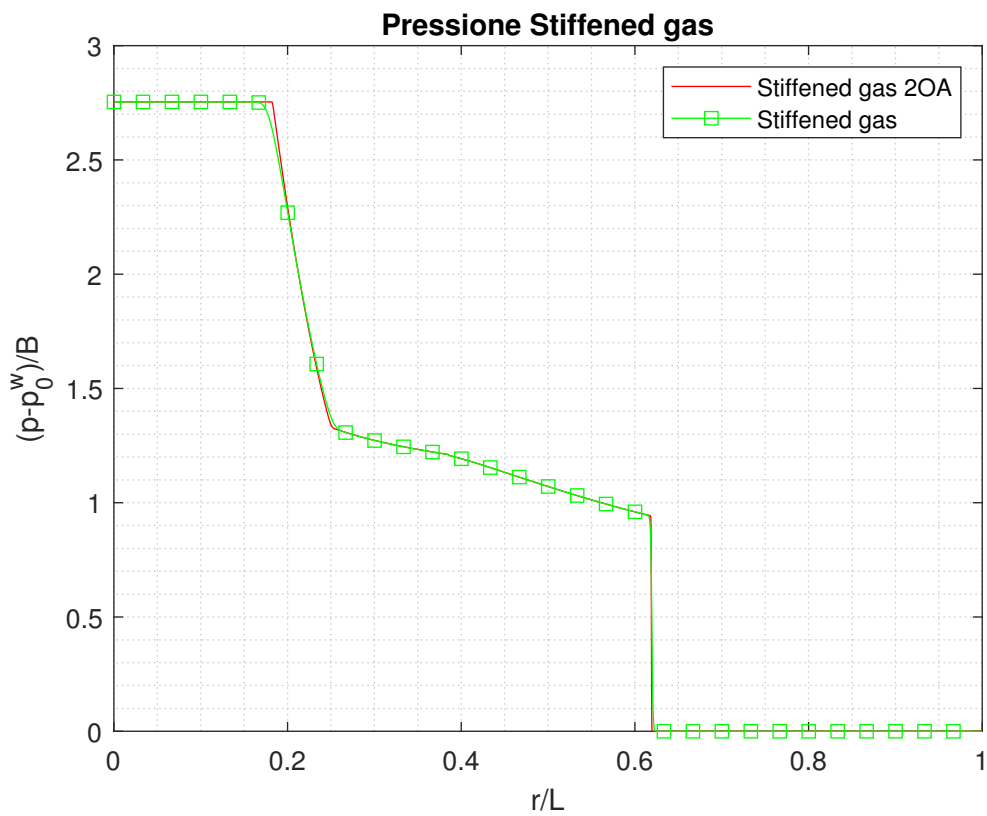


Figura 43. Confronto pressione tra schema del primo e secondo ordine per la *stiffened gas*

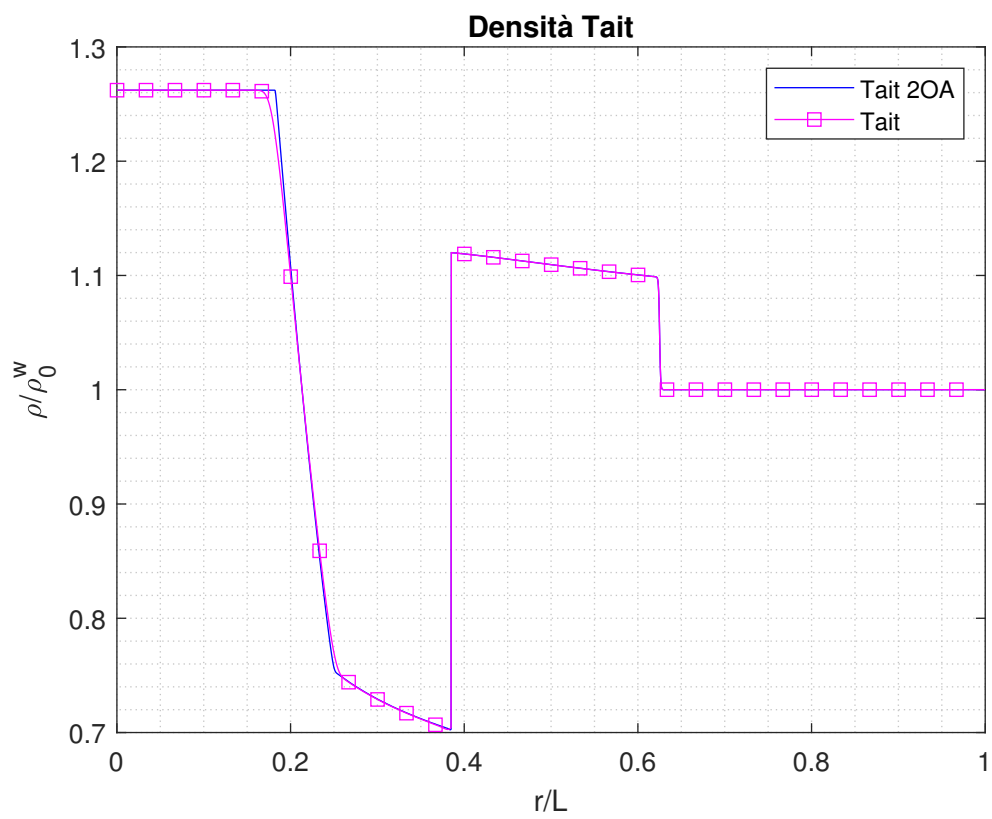


Figura 44. Confronto densità tra schema del primo e secondo ordine per Tait

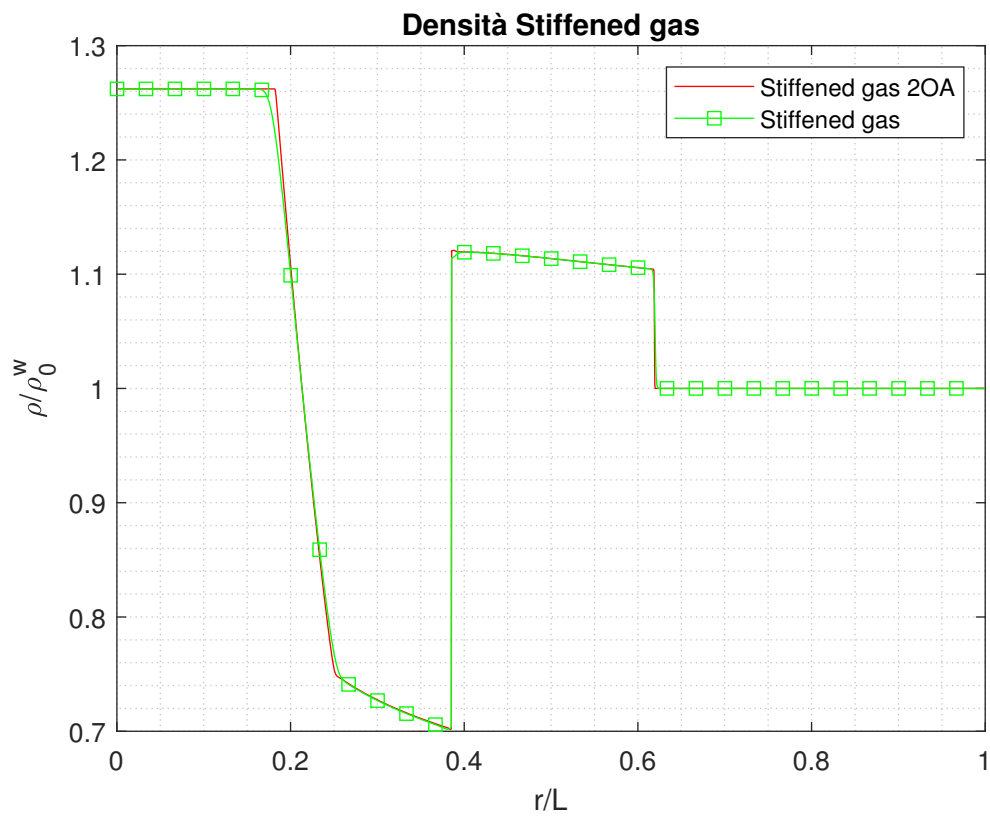


Figura 45. Confronto densità tra schema del primo e secondo ordine per la *stiffened gas*

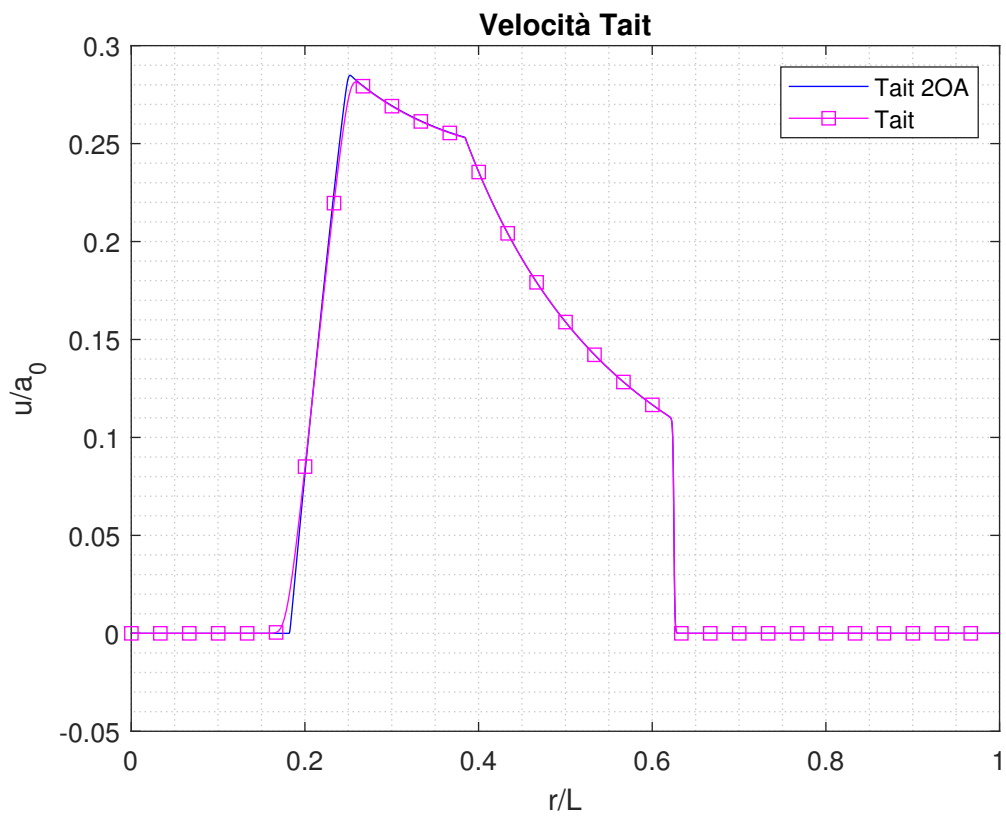


Figura 46. Confronto velocità tra schema del primo e secondo ordine per Tait

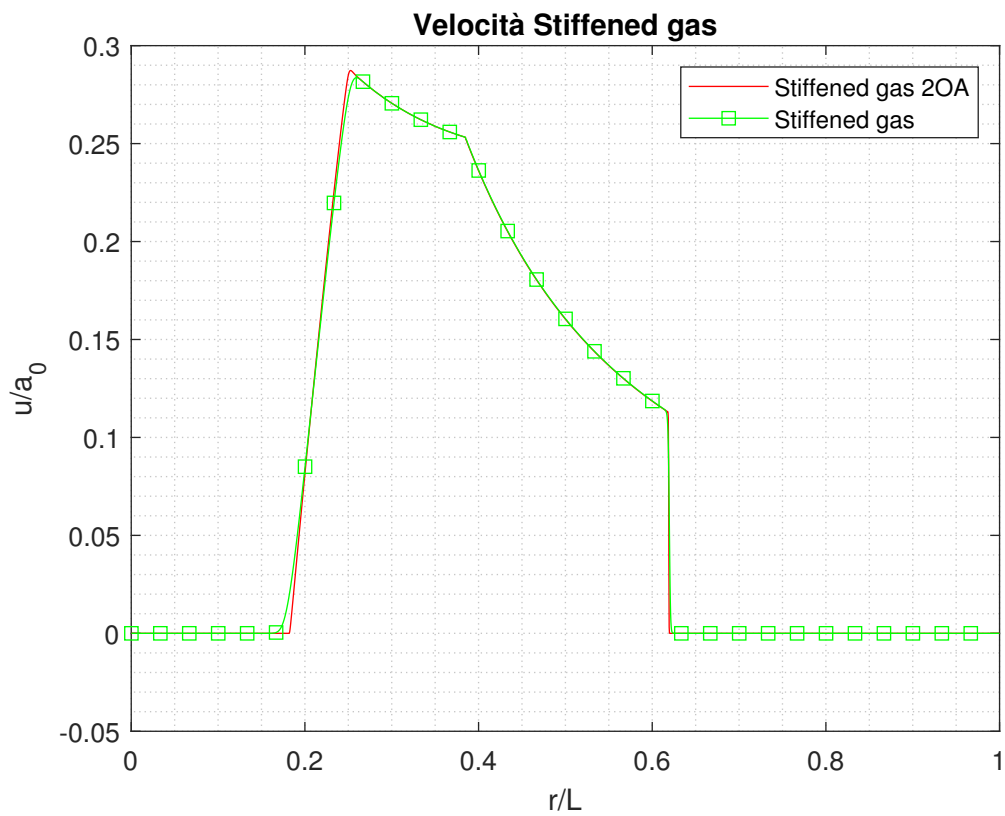


Figura 47. Confronto velocità tra schema del primo e secondo ordine per la *stiffened gas*

12 Conclusioni

Lo schema di Godunov si è dimostrato molto efficace per la soluzione delle equazioni di Eulero. In tutti gli esempi numerici proposti le soluzioni ottenute si sono dimostrate ragionevoli e coerenti con le relative soluzioni analitiche o con i risultati di altri lavori presenti in letteratura. Oltre al modello di gas ideale utilizzato per descrivere l'aria, l'introduzione dell'acqua è stata un'interessante complicazione che ha permesso da un lato di affrontare la soluzione del problema di Riemann con equazioni di stato, simili ma comunque diverse da quella del gas ideale; dall'altro ho reso necessario l'introduzione di metodi per il tracciamento dell'interfaccia tra i due fluidi. È proprio nella descrizione del liquido che probabilmente risiedono i limiti di questi risultati: se per l'aria il modello di gas ideale risulta un'approssimazione assolutamente accettabile; in generale non è detto che l'acqua possa essere descritta sempre da relazioni come l'equazione di Tait e la *stiffened gas*. Questo fa sì che il metodo seguito non possa essere facilmente replicato per intervalli di pressione e densità qualsiasi, ma risulta strettamente legato al modello utilizzato per descrivere il liquido. In generale, se si guarda al lavoro complessivo, questa tesi è stato un ottimo esercizio per introdursi nel mondo della fluidodinamica computazionale. Da un lato, lo studio preliminare delle equazioni di Eulero è indispensabile per comprendere il perché si scelgano determinati schemi numerici e procedimenti risolutivi; dall'altro, l'applicazione pratica a esempi numerici, ha permesso di acquisire un certa familiarità con la scrittura di codici basati sullo schema di Godunov.

Appendice A Verifica della proprietà di omogeneità

Si consideri un funzione scalare in più variabili $q(\mathbf{X}(t, x))$ con $\mathbf{X}(t, x) \in \mathbb{R}^n$. Per la regola della catena si ha che:

$$q_x = \frac{\partial q(t, x)}{\partial x} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial q}{\partial X_k} \cdot \frac{\partial X_k}{\partial x} \quad (\text{A.1})$$

Nel caso di una funzione vettoriale $\mathbf{Q}(\mathbf{X}(t, x)) \in \mathbb{R}^m$ applicando la (A.1) a ogni componente si ha:

$$\mathbf{Q}_x = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n \frac{\partial Q_1}{\partial X_k} \cdot \frac{\partial X_k}{\partial x} \\ \dots \\ \sum_{k=1}^n \frac{\partial Q_m}{\partial X_k} \cdot \frac{\partial X_k}{\partial x} \end{pmatrix} = [\mathbf{J}_\mathbf{Q}] \bullet \mathbf{Q}_x \quad (\text{A.2})$$

dove $[\mathbf{J}_\mathbf{Q}]$ è la matrice jacobiana definita come:

$$[\mathbf{J}_\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial X_1} & \frac{\partial Q_1}{\partial X_2} & \frac{\partial Q_1}{\partial X_3} \\ \frac{\partial Q_2}{\partial X_1} & \frac{\partial Q_2}{\partial X_2} & \frac{\partial Q_2}{\partial X_3} \\ \frac{\partial Q_3}{\partial X_1} & \frac{\partial Q_3}{\partial X_2} & \frac{\partial Q_3}{\partial X_3} \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Nel caso delle equazioni di Eulero è possibile ricavare $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ dalla (3.8):

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} U_2 \\ \frac{U_2^2}{U_1} + (\gamma - 1) \cdot \left(U_3 - \frac{1}{2} \cdot \frac{U_2^2}{U_1} \right) \\ \gamma \cdot \frac{U_2 \cdot U_3}{U_1} - \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \frac{U_2^3}{U_3} \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

La matrice jacobiana di \mathbf{F} è pari a:

$$[\mathbf{A}] \equiv [\mathbf{J}_\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma - 3}{2} \cdot \left(\frac{U_2}{U_1} \right)^2 & (3 - \gamma) \cdot \frac{U_2}{U_1} & \gamma - 1 \\ -\gamma \cdot \frac{U_2 \cdot U_3}{U_1^2} + (\gamma - 1) \cdot \left(\frac{U_2}{U_1} \right)^3 & \gamma \cdot \frac{U_3}{U_2} - \frac{3 \cdot (\gamma - 1)}{2} \cdot \left(\frac{U_2}{U_1} \right)^2 & \gamma \cdot \frac{U_2}{U_1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Per dimostrare la proprietà di omogeneità è sufficiente verificare che:

$$\mathbf{F} = [\mathbf{J}_\mathbf{F}] \bullet \mathbf{U} \quad (\text{A.6})$$

Prima componente

$$J_F^{1,1} \cdot U_1 + J_F^{1,2} \cdot U_2 + J_F^{1,3} \cdot U_3 = 0 + U_2 + 0 = U_2 \equiv F_1$$

Seconda componente

$$J_F^{2,1} \cdot U_1 + J_F^{2,2} \cdot U_2 + J_F^{2,3} \cdot U_3 = \frac{\gamma - 3}{2} \cdot \frac{U_2^2}{U_1} - (\gamma - 3) \cdot \frac{U_2^2}{U_1} + (\gamma - 1) \cdot U_3 = -\frac{\gamma - 3}{2} \cdot \frac{U_2^2}{U_1} + (\gamma - 1) \cdot U_3 = \frac{U_2^2}{U_1} + (\gamma - 1) \cdot \left(U_3 - \frac{1}{2} \cdot \frac{U_2^2}{U_1} \right) \equiv F_2$$

Terza componente

$$J_F^{3,1} \cdot U_1 + J_F^{3,2} \cdot U_2 + J_F^{3,3} \cdot U_3 = -\gamma \cdot \frac{U_2 \cdot U_3}{U_1} + (\gamma - 1) \cdot \frac{U_2^3}{U_1^2} + \gamma \cdot \frac{U_3 \cdot U_2}{U_1} - \frac{3}{2} \cdot (\gamma - 1) \cdot \frac{U_2^3}{U_1^2} + \gamma \cdot \frac{U_2 \cdot U_3}{U_1} = \gamma \cdot \frac{U_2 \cdot U_3}{U_1} - \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \frac{U_2^3}{U_1^2} \equiv F_3$$

Appendice B Calcolo autovalori di [A]

Il problema agli autovalori (3.2.11) è equivalente a:

$$([\mathbf{A}] - \lambda \cdot [\mathbf{I}]) \bullet \Psi = \mathbf{0} \quad (\text{B.1})$$

Affinché $\Psi \neq \mathbf{0}$ si deve avere che:

$$\det([\mathbf{A}] - \lambda \cdot [\mathbf{I}]) = 0 \quad (\text{B.2})$$

La relazione precedente può essere scritta in funzione della velocità locale u e di quella del suono a :

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ -\frac{3-\gamma}{2} \cdot u^2 & (3-\gamma) \cdot u - \lambda & \gamma - 1 \\ C \cdot u & -(C + \frac{\gamma-1}{2} \cdot u^2) & \gamma \cdot u - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{B.3})$$

dove $C = \frac{\gamma-2}{2} \cdot u^2 - \frac{a^2}{\gamma-1}$. Calcolando il determinante rispetto alla terza colonna si ha:

$$-(\gamma-1) \cdot \left[C \cdot (\lambda - u) + \frac{\gamma-1}{2} \cdot u^2 \cdot \lambda \right] + (\gamma \cdot u - \lambda) \cdot \left[\lambda^2 - (3-\gamma) \cdot u \cdot \lambda + \frac{3-\gamma}{2} \cdot u^2 \right] = 0 \quad (\text{B.4})$$

Attraverso opportuni passaggi algebrici dall'equazione precedente si ottiene:

$$(u-\lambda) \cdot C \cdot (\gamma-1) + \left[-\lambda^3 + 3 \cdot u^2 \cdot \lambda + \frac{1}{2} \cdot (\gamma^2 - 3 \cdot \gamma - 4) \cdot u^2 \cdot \lambda + \frac{3-\gamma}{2} \cdot \gamma \cdot u^3 \right] = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{array}{c|ccc|c}
u & -1 & 3 \cdot u & \frac{1}{2} \cdot (\gamma^2 - 3 \cdot \gamma - 4) \cdot u^2 & \frac{3-\gamma}{2} \cdot \gamma \cdot u^3 \\
& & -u & 2 \cdot u^2 & \frac{\gamma-3}{2} \cdot \gamma u^3 \\
\hline
& -1 & 2 \cdot u & \frac{1}{2} \cdot (\gamma^2 - 3 \cdot \gamma) \cdot u^2 & 0
\end{array}$$

Il termine tra parentesi quadre può essere scomposto con il metodo di Ruffini.

La (B.5) diventa:

$$(\lambda - u) \cdot [-\lambda^2 + 2 \cdot u^2 \cdot \lambda + \frac{\gamma^2 - 3 \cdot \gamma}{2} \cdot u^2 - C \cdot (\gamma - 1)] = 0 \quad (\text{B.6})$$

La prima soluzione è:

$$\lambda - u = 0 \rightarrow \lambda_2 = u \quad (\text{B.7})$$

Gli altri due autovalori sono soluzione di:

$$-\lambda^2 + 2 \cdot u^2 \cdot \lambda + \frac{\gamma^2 - 3 \cdot \gamma}{2} \cdot u^2 - C \cdot (\gamma - 1) = 0 \quad (\text{B.8})$$

Esplicitando il termine C , dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\lambda^2 - 2 \cdot u \cdot \lambda + (u^2 - a^2) = 0 \quad (\text{B.9})$$

Il determinante è pari a:

$$\frac{\Delta}{4} = u^2 - u^2 + a^2 = a^2 \quad (\text{B.10})$$

da cui si ottengo i due autovalori

$$\lambda_1 = u - a \quad (\text{B.11})$$

$$\lambda_3 = u + a \quad (\text{B.12})$$

A questo punto è possibile calcolare gli autovettori associati, risolvendo la (B.1).

Primo e terzo autovettore Di seguito (+/-) si riferiscono nell'ordine al primo e terzo autovalore.

$$\begin{bmatrix}
-\lambda & 1 & 0 \\
-\frac{3-\gamma}{2} \cdot u^2 & (3-\gamma) \cdot u - \lambda & \gamma - 1 \\
C \cdot u & -(C + \frac{\gamma-1}{2} \cdot u^2) & \gamma \cdot u - \lambda
\end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{B.13})$$

Poiché una delle tre equazioni è linearmente dipendente dalle altre due, si preferisce utilizzare le prime due equazioni che risultano più semplici:

$$\begin{cases} -\lambda \cdot \Psi_1 + \Psi_2 = 0 \\ -\frac{3-\gamma}{2} \cdot u^2 \cdot \Psi_1 + [(3-\gamma) \cdot u - \lambda] \cdot \Psi_2 + (\gamma-1) \cdot \Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

Esprimendo tutte le componenti in funzione di Ψ_1 si ottiene:

$$\begin{cases} \Psi_2 = \lambda \cdot \Psi_1 \\ \Psi_3 = -\frac{\Psi_1}{\gamma-1} \cdot \left[\frac{\gamma-3}{2} \cdot (u^2 - 2 \cdot u \cdot \lambda) - \lambda^2 \right] \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Imponendo $\Psi_1 = 1$ e sostituendo nella (B.15) i valori di λ trovati si ottengo i seguenti autovettori:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - a & \lambda_2 &= u & \lambda_3 &= u + a \\ \Psi_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u - a \\ H - u \cdot a \end{pmatrix} & \Psi_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ \frac{1}{2} \cdot u^2 \end{pmatrix} & \Psi_3 &= \begin{pmatrix} 1 \\ u + a \\ H + u \cdot a \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Appendice C Derivazione equazione di stato tipo Mie-Gruneisen

Il procedimento che permette di ricavare l'espressione dell'energia libera di Helmholtz è presentato in "Statistical Physics" di L. D. Landau & E. M. Lifshitz [23]. La derivazione delle equazioni di tipo *Mie-Gruneisen* per i casi di bassa e alta temperatura, e per i modelli di Debay e Einstein sono invece tratti da [10]. Si consideri la definizione di entropia di Gibbs:

$$S = -k_B \cdot \overline{\ln w_n} \quad (\text{C.1})$$

dove $k_B = 1.3806 \cdot 10^{-23} \left(\frac{J}{K} \right)$ è la costante di Boltzmann. w_n è la probabilità del sistema di trovarsi nel microstato ad energia E_n , ed è descritta dalla distribuzione di Gibbs:

$$w_n = A \cdot e^{-\frac{E_n}{k_B \cdot T}} \quad (\text{C.2})$$

Sostituendo questa relazione nella definizione dell'entropia si ottiene:

$$S = -k_B \cdot \overline{\ln \left(A \cdot e^{-\frac{E_n}{k_B \cdot T}} \right)} = -k_B \cdot \ln(A) + k_B \cdot \frac{\overline{E}}{k_B \cdot T} \cdot T = -k_B \cdot \ln(A) + \frac{\overline{E}}{T} \quad (\text{C.3})$$

\bar{E} è la media dell'energia di tutti i microstati e corrisponde alla definizione di energia del sistema E . Si ottiene quindi:

$$k_B \cdot \ln(A) = \frac{E}{T} - S = \frac{E - T \cdot S}{T} \quad (\text{C.4})$$

Introducendo l'energia libera di Helmholtz:

$$F = E - T \cdot S \quad (\text{C.5})$$

è possibile ricavare dall'equazione precedente l'espressione di A :

$$A = e^{\frac{F}{k_B \cdot T}} \quad (\text{C.6})$$

Sostituendo la relazione ottenuta nella (C.2), la distribuzione di Gibbs diventa:

$$w_n = e^{\frac{F - E_n}{k_B \cdot T}} \quad (\text{C.7})$$

Poiché la probabilità di trovare il sistema in uno qualsiasi degli n microstati, w_n deve soddisfare la condizione:

$$\sum_n w_n = 1 \quad (\text{C.8})$$

Sostituendo la (C.7) nella condizione precedente si ottiene:

$$\sum_n e^{\frac{F - E_n}{k_B \cdot T}} = 1 \quad (\text{C.9})$$

che può essere riscritta come:

$$e^{-\frac{F}{k_B \cdot T}} = \cdot \sum_n e^{\frac{-E_n}{k_B \cdot T}} \quad (\text{C.10})$$

Da questa equazione è possibile ottenere l'espressione dell'energia libera di Helmholtz:

$$F = -k_B \cdot T \cdot \ln \left(\sum_n e^{\frac{-E_n}{k_B \cdot T}} \right) \quad (\text{C.11})$$

C.1 Energia di un oscillatore quantistico

L'energia E_n per un oscillatore quantistico è data dalla relazione:

$$E_n = \varphi(V) + \hbar \cdot w(V) \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{C.1.1})$$

dove $\hbar = 6.6261 \cdot 10^{-34}$ ($J \cdot s$) è la costante di Planck, e $w = \frac{2 \cdot \pi}{f}$ è la pulsazione di oscillazione dell'oscillatore e dipende solo dal volume. Il termine $\varphi(V)$ è legato all'energia potenziale dovuta alle forze di attrazione e repulsione tra gli oscillatori del sistema. Per snellire la notazione si utilizzerà da qui in avanti $\varphi = \varphi(V)$ e $w = w(V)$. Per l'oscillatore j -esimo, la (C.11) diventa:

$$F_j = -k_B \cdot T \cdot \ln \left[\sum_n e^{-\frac{\varphi_j + \hbar \cdot w_j \cdot (n + \frac{1}{2})}{k_B \cdot T}} \right] \quad (\text{C.1.2})$$

Dopo opportuni passaggi algebrici l'equazione precedente può essere scritta come:

$$F_j = \varphi_j + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot w_j - k_B \cdot T \cdot \ln \left(\sum_n e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T} \cdot n} \right) \quad (\text{C.1.3})$$

Il termine $\sum_n e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T} \cdot n}$ è una *serie geometrica* ed equivale a :

$$\sum_n e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T} \cdot n} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}}} \quad (\text{C.1.4})$$

Sostituendo questo risultato nell'espressione dell'energia libera di Helmholtz, la (C.1.3) diventa:

$$F_j = \varphi_j + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot w_j + k_B \cdot T \cdot \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}} \right) \quad (\text{C.1.5})$$

L'energia complessiva del sistema è pari alla sommatoria delle energie dei singoli oscillatori. Se si considera un cristallo con N celle ciascuna delle quali contiene q atomi, si hanno $3Nq$ gradi di libertà vibrazioni[§]. Questo è equivalente a un sistema di altrettanti oscillatori:

$$F = \sum_j^{3Nq} F_j = E_P(V) + \frac{1}{2} \cdot \sum_j^{3Nq} \hbar \cdot w_j + k_B \cdot T \cdot \sum_j^{3Nq} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}} \right) \quad (\text{C.1.6})$$

[§]I gradi di libertà vibrazionali sono $3Nm - 6$, escludendo i tre moti di rotazione e i tre di traslazione del cristallo. Tuttavia poiché $3Nm \gg 6$ si approssimano a $3Nq$

$E_P(V) = \sum_j^{3Nq} \varphi_j$ rappresenta l'energia potenziale del sistema. Poiché non dipende da T può essere riferita a $T = 0 (K)$ e dalla (C.11) si ha che $F \equiv E$. La prima sommatoria è funzione del volume. Questo termine rappresenta l'energia di punto zero: nella fisica quantistica anche a $T = 0 (K)$ gli oscillatori non occupano posizioni fisse ma possiedono un certo moto vibrazionale, come descritto dal principio di indeterminazione di Heisenberg [24]. Questo termine viene indicato con $E_{ZV}(V) = \frac{1}{2} \cdot \sum_j^{3Nq} \hbar \cdot w_j$.

C.2 Basse temperature

Per basse temperature ($\hbar \cdot w \lesssim k_B \cdot T$) le oscillazioni corrispondono ad onde elastiche stazionarie. Per un'onda che si propaga lungo la direzione x l'oscillazione y è data da:

$$y_x = y_{max} \cdot \sin(k_x \cdot x) \cdot \cos(w \cdot t) \quad (C.2.1)$$

con $c = \frac{w}{k}$ che equivale alla velocità delle onde che si propagano nei due versi. Se si considera un cristallo cubico di dimensione L , si hanno due onde trasversali con diversa polarizzazione ma che si propagano con la stessa velocità c_t e un'onda longitudinale che si propaga con velocità c_l . Poiché il cristallo è fermo e le sue facce non vibrano, i nodi devono appartenere alle sue facce (figura 48), per cui:

$$k_x = \frac{\pi \cdot n}{L} \quad (C.2.2)$$

dove $n = 1, 2, 3, \dots$. Se L è molto grande allora k_x varia con continuità e la sommatoria nell'equazione (C.1.6) può essere sostituita dall'integrale:

$$F = E_P(V) + \frac{1}{2} \cdot \sum_j \hbar \cdot w_j + k_B \cdot T \cdot \int \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) \cdot Z(w) dw \quad (C.2.3)$$

Dove $Z(w)dw$ è il numero di onde con pulsazione compresa tra w e $w + dw$. Per le onde elastiche longitudinali la distribuzione $Z_l(w)$ è data da:

$$Z_l(w) = \frac{4 \cdot \pi \cdot V \cdot w^2}{(2 \cdot \pi \cdot c_t)^3} \quad (C.2.4)$$

Per le onde trasversali, che sono il doppio di quelle longitudinali si ottiene:

$$Z_t(w) = 2 \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot V \cdot w^2}{(2 \cdot \pi \cdot c_t)^3} \quad (C.2.5)$$

La distribuzione complessiva è pari alla somma delle due:

$$Z(w) = Z_l(w) + Z_t(w) = \frac{3 \cdot V}{2 \cdot \pi^2 \cdot \bar{c}^3} \cdot w^2 \quad (\text{C.2.6})$$

con:

$$\frac{3}{\bar{c}^3} = \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \quad (\text{C.2.7})$$

L'equazione (C.2.3) diventa:

$$F = E_P(V) + \frac{1}{2} \cdot \sum_j^{3Nq} \hbar \cdot w_j + k_B \cdot T \cdot \frac{3 \cdot V}{2 \cdot \pi^2 \cdot \bar{c}^3} \int \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) \cdot w^2 dw \quad (\text{C.2.8})$$

Calcolati gli integrali si ottiene:

$$F = E_P(V) + E_{ZV}(V) - \frac{\pi^2 \cdot (k_B \cdot T)^4}{30 \cdot \hbar^3} \cdot \left(\frac{V}{\bar{c}^3} \right) \quad (\text{C.2.9})$$

La pressione è data dalla relazione:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \quad (\text{C.2.10})$$

La pressione è quindi pari a:

$$p = p_P(V) + p_{ZV}(V) + \frac{\pi^2 \cdot (k_B \cdot T)^4}{30 \cdot \hbar^3} \cdot \frac{\partial \left(\frac{V}{\bar{c}^3} \right)}{\partial V} \quad (\text{C.2.11})$$

Definito il coefficiente di Gruneisen come:

$$\Gamma(V) = - \frac{\partial \ln \left(\frac{c}{V^{\frac{1}{3}}} \right)}{\partial \ln(V)} \quad (\text{C.2.12})$$

dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\frac{\partial \left(\frac{V}{\bar{c}^3} \right)}{\partial V} = \Gamma \cdot \frac{3}{\bar{c}^3} \quad (\text{C.2.13})$$

Per le basse temperature la pressione può essere espressa come:

$$p = p_P(V) + p_{ZV}(V) + \frac{\Gamma(V)}{10} \cdot \frac{(k_B \cdot T)^4}{(\bar{c} \cdot \hbar)^3} \quad (\text{C.2.14})$$

Nota C.2.1

Di seguito viene svolto il calcolo dell'integrale:

$$\int_0^{\infty} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) \cdot w^2 dw \quad (\text{C.2.15})$$

Il procedimento seguito fa riferimento a [10]. Effettuando il cambio di variabili $y = \frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}$ si ha:

$$\int_0^{\infty} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) \cdot w^2 dw = \left(\frac{k_B \cdot T}{\hbar} \right)^3 \cdot \int_0^{\infty} \ln (1 - e^{-y}) \cdot y^2 dy \quad (\text{C.2.16})$$

Ricorrendo all'integrazione per parti:

$$\int_0^{\infty} \ln (1 - e^{-y}) \cdot y^2 dy = \left[\frac{y^3}{3} \cdot \ln (1 - e^{-y}) \right]_0^{\infty} - \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \frac{y^3}{e^y - 1} dy \quad (\text{C.2.17})$$

Il primo termine è nullo infatti:

$$\lim_{y \rightarrow \infty} y^3 \cdot \ln(1 - e^{-y}) = \lim_{y \rightarrow \infty} y^3 \cdot (-e^{-y} + o(e^{-y})) = 0 \quad (\text{C.2.18})$$

$$\begin{aligned} \lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln(1 - e^{-y}) &= \lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln(y + o(y)) = \\ &= \lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln y + \lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln \left(1 + \frac{o(y)}{y} \right) = \lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln y \end{aligned} \quad (\text{C.2.19})$$

Applicando il teorema di de L'Hopital:

$$\lim_{y \rightarrow 0} y^3 \cdot \ln y = \lim_{y \rightarrow 0} -\frac{1}{y} \cdot \frac{y^4}{3} = 0 \quad (\text{C.2.20})$$

Pertanto si ottiene:

$$\int_0^{\infty} \ln (1 - e^{-y}) \cdot y^2 dy = -\frac{1}{3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{y^3}{e^y - 1} dy = -\frac{1}{3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{y^3 \cdot e^{-y}}{1 - e^{-y}} dy \quad (\text{C.2.21})$$

Dal risultato della *serie geometrica* si ha che:

$$\sum_{k=0}^{\infty} (e^{-y})^k = \frac{1}{1 - e^{-y}} \quad (\text{C.2.22})$$

da cui si ottiene:

$$\sum_{k=0}^{\infty} e^{-y \cdot (k+1)} = \frac{e^{-y}}{1 - e^{-y}} \quad (\text{C.2.23})$$

Sfruttando questo risultato, l'ultimo integrale della (C.2.21) si può scrivere come:

$$\int_0^{\infty} \frac{y^3 \cdot e^{-y}}{1 - e^{-y}} dy = \int_0^{\infty} y^3 \cdot \left(\sum_{k=0}^{\infty} e^{-y \cdot (k+1)} \right) = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} y^3 \cdot e^{-y \cdot (k+1)} dy \right) \quad (\text{C.2.24})$$

Effettuando il cambio di variabile $y = \frac{z}{k+1}$ si ottiene:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} y^3 \cdot e^{-y \cdot (k+1)} dy \right) &= \left(\sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{1}{(k+1)^4} \cdot z^3 \cdot e^{-z} dz \right) = \\ &= \int_0^{\infty} z^3 \cdot e^{-z} dz \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^4} \end{aligned} \quad (\text{C.2.25})$$

La sommatoria è la *serie armonica*:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^4} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90} \quad (\text{C.2.26})$$

L'integrale può essere risolto per parti:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} z^3 \cdot e^{-z} dz &= [-e^{-z} \cdot z^3]_0^{\infty} + 3 \cdot \int_0^{\infty} z^2 \cdot e^{-z} dz = [-3 \cdot e^{-z} \cdot z^3]_0^{\infty} + \\ &+ 6 \cdot \int_0^{\infty} z \cdot e^{-z} dz = \\ &= [-6 \cdot e^{-z} \cdot z^3]_0^{\infty} + 6 \cdot \int_0^{\infty} z^2 \cdot e^{-z} dz = [-6 \cdot e^{-z}]_0^{\infty} = 6 \end{aligned} \quad (\text{C.2.27})$$

L'integrale (C.2.24) è uguale a:

$$\int_0^{\infty} \frac{y^3 \cdot e^{-y}}{1 - e^{-y}} dy = \int_0^{\infty} z^3 \cdot e^{-z} dz \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^4} = \frac{\pi^4}{15} \quad (\text{C.2.28})$$

E infine si ottiene:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) \cdot w^2 dw &= - \left(\frac{k_B \cdot T}{\hbar} \right)^3 \cdot \frac{1}{3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{y^3 \cdot e^{-y}}{1 - e^{-y}} dy = \\ &= -\frac{1}{3} \cdot \left(\frac{k_B \cdot T}{\hbar} \right)^3 \cdot \frac{\pi^4}{15} \end{aligned} \quad (\text{C.2.29})$$

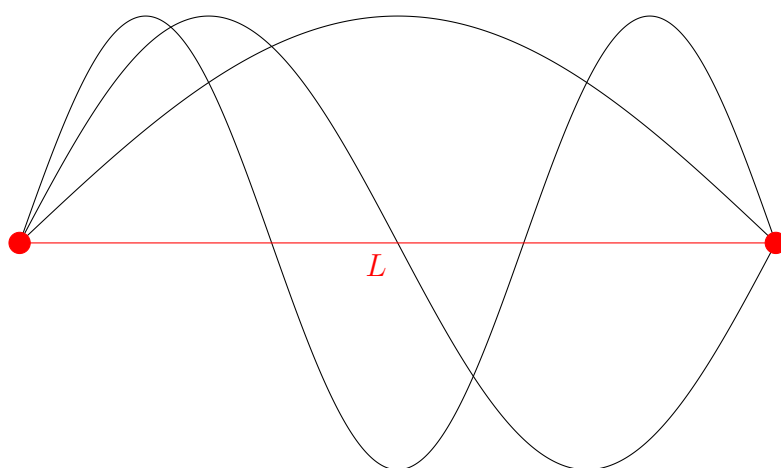
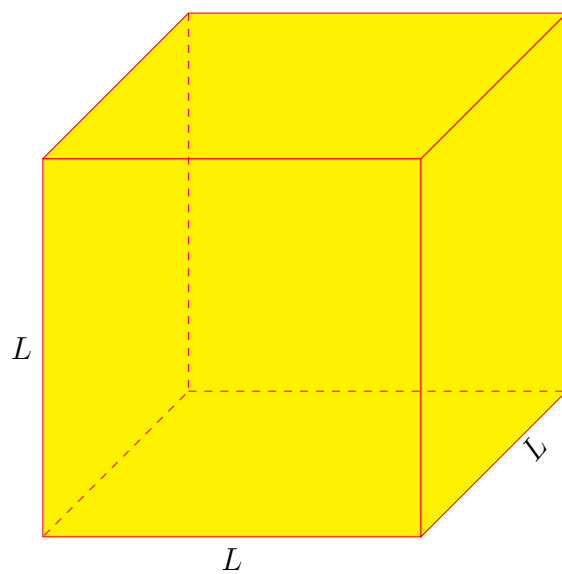


Figura 48. Onde elastiche stazionarie con i nodi sulle facce del cristallo

C.3 Alte temperature

Per alte temperature ($\hbar \cdot w \ll k_B \cdot T$) è possibile approssimare l'esponenziale attraverso l'espansione di Taylor:

$$\begin{aligned} \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}}\right) &= \ln(1 - e^{-x}) \approx \ln\left(1 - \left(1 - x + \frac{x^2}{2}\right)\right) = \ln\left(x - \frac{x^2}{2}\right) = \\ &= \ln\left(x \cdot \left(1 - \frac{x}{2}\right)\right) = \ln(x) + \ln\left(1 - \frac{x}{2}\right) \approx \ln(x) - \frac{x}{2} = \ln\left(\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}\right) - \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T} \end{aligned} \quad (\text{C.3.1})$$

Sostituendo questa approssimazione nella (C.1.6) si ottiene la forma

$$F = E_P(V) + \frac{1}{2} \cdot \sum_j^{3Nq} \hbar \cdot w_j + k_B \cdot T \cdot \sum_j^{3Nq} \ln\left(\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}\right) - \frac{1}{2} \cdot \sum_j^{3Nq} \hbar \cdot w_j \quad (\text{C.3.2})$$

che equivale a:

$$F = E_P + k_B \cdot T \cdot \sum_j^{3Nq} \ln\left(\frac{\hbar \cdot w_j}{k_B \cdot T}\right) \quad (\text{C.3.3})$$

Come si vede, alle alte temperature il contributo dell'energia di punto zero scompare. Questo è un risultato ragionevole perché mentre alle basse temperature l'agitazione termica delle particelle è anch'essa molto piccola e paragonabile all'energia di punto zero, alle alte temperatura il contributo termico diventa predominante. La (C.3.3) può essere riscritta svolgendo la sommatoria sui gradi vibrazionali del sistema:

$$F = E_P(V) + k_B \cdot T \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \ln(\hbar) + k_B \cdot T \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \sum_j^{3Nq} \ln(w_j) - k_B \cdot T \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \ln(k_B \cdot T) \quad (\text{C.3.4})$$

Definita la pulsazione media \bar{w} :

$$\ln(\bar{w}) = \sum_j^{3Nq} \ln(w_j) \quad (\text{C.3.5})$$

si ottiene:

$$F = E_P(V) + k_B \cdot T \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \ln(\hbar \cdot \bar{w}) - k_B \cdot T \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \ln(k_B \cdot T) \quad (\text{C.3.6})$$

Definito il coefficiente di Gruneisen come:

$$\Gamma(V) = -\frac{\partial \ln(\bar{w})}{\partial \ln(V)} \quad (\text{C.3.7})$$

e sfruttando la relazione (C.2.10) si ottiene:

$$p = p_P + \frac{\Gamma(V)}{V} \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot k_B \cdot T \quad (\text{C.3.8})$$

C.4 Modello di Debay

Debay ipotizza che la distribuzione $Z(w)$ sia proporzionale al quadrato di w , come avviene alle basse temperature. Inoltre stabilisce un valore massimo w_D , corrispondente alla frequenza massima posseduta dagli oscillatori, oltre la quale la distribuzione si annulla:

$$Z(w) = \begin{cases} 9 \cdot N \cdot q \cdot \frac{w^2}{w_D^3} & \text{se } 0 \leq w \leq w_D \\ 0 & \text{se } w \geq w_D \end{cases} \quad (\text{C.4.1})$$

Si può verificare che la distribuzione di Debay soddisfa la condizione per cui il numero di gradi di libertà vibrazionali del sistema è pari a $3Nq$:

$$\int_0^\infty Z(w)dw = \int_0^{w_D} 9 \cdot N \cdot q \cdot \frac{w^2}{w_D^3} dw = 9 \cdot N \cdot q \cdot \frac{1}{3} = 3 \cdot N \cdot q \quad (\text{C.4.2})$$

Utilizzando la distribuzione di Debay la (C.1.6) diventa:

$$F = E_P(V) + \frac{1}{2} \cdot \frac{9 \cdot N \cdot q}{w_D^3} \cdot \int_0^{w_D} \hbar \cdot w^3 dw + k_B \cdot T \cdot \frac{9 \cdot N \cdot q}{w_D^3} \int_0^{w_D} w^2 \cdot \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}} \right) dw \quad (\text{C.4.3})$$

Svolgendo gli integrali si ottiene:

$$F = E_P(V) + N \cdot q \cdot k_B \cdot T \cdot \left[\frac{9}{8} \cdot \frac{T_D}{T} + 3 \cdot \ln \left(1 - e^{-\frac{T_D}{T}} \right) - D \left(\frac{T_D}{T} \right) \right] \quad (\text{C.4.4})$$

dove $T_D = \frac{\hbar \cdot w_D}{k_B}$ è la temperatura di Debay, e D è una funzione definita come:

$$D \left(\frac{T_D}{T} \right) = 3 \cdot \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \cdot \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{y^3}{e^y - 1} dy \quad (\text{C.4.5})$$

Utilizzando la relazione (C.2.10), dall'equazione (C.4.4) si ottiene:

$$p = p_P(V) - N \cdot q \cdot k_B \cdot T \cdot \left[\frac{9}{8} \cdot \frac{1}{T} \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} + \frac{3}{T} \cdot \frac{1}{e^{\frac{T_D}{T}} - 1} \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} - \frac{\partial D \left(\frac{T_D}{T} \right)}{\partial V} \right] \quad (\text{C.4.6})$$

La derivata di $D\left(\frac{T_D}{T}\right)$ può essere espressa come:

$$\frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial V} = \frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial\left(\frac{T_D}{T}\right)} \cdot \frac{\partial\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial V} = \frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial\left(\frac{T_D}{T}\right)} \cdot \frac{1}{T} \frac{\partial T_D}{\partial V} \quad (\text{C.4.7})$$

Posto $z = \frac{T_D}{T}$ e considerando la (C.4.5), si può scrivere:

$$\frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial\left(\frac{T_D}{T}\right)} = \frac{\partial D(z)}{\partial z} = -9 \cdot z^{-4} \cdot \int_0^z \frac{y^3}{e^y - 1} dy + 3 \cdot z^{-3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\int_0^z \frac{y^3}{e^y - 1} dy \right] \quad (\text{C.4.8})$$

La derivata dell'integrale è data da:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\int_0^z \frac{y^3}{e^y - 1} dy \right] = \int_0^z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{y^3}{e^y - 1} \right) dy + \frac{z^3}{e^z - 1} \cdot \frac{\partial z}{\partial z} = \frac{z^3}{e^z - 1} = \left(\frac{T_D}{T} \right)^3 \cdot \frac{1}{e^{\frac{T_D}{T}} - 1} \quad (\text{C.4.9})$$

Si ottiene quindi:

$$\frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial\left(\frac{T_D}{T}\right)} = -9 \cdot \left(\frac{T}{T_D} \right)^4 \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{y^3}{e^y - 1} dy + 3 \cdot \frac{1}{e^{\frac{T_D}{T}} - 1} = -3 \cdot \frac{T}{T_D} \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right) + \frac{3}{e^{\frac{T_D}{T}} - 1} \quad (\text{C.4.10})$$

La derivata di $D\left(\frac{T_D}{T}\right)$ rispetto al volume è pari a:

$$\frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial V} = -\frac{3}{T} \cdot \frac{T}{T_D} \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right) \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} + \frac{3}{T} \cdot \frac{1}{e^{\frac{T_D}{T}} - 1} \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} \quad (\text{C.4.11})$$

Sostituendo questo risultato nella (C.4.6), dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$p = p_P(V) - N \cdot q \cdot k_B \cdot \left[\frac{9}{8} \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} + 3 \cdot \frac{T}{T_D} \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right) \cdot \frac{\partial T_D}{\partial V} \right] \quad (\text{C.4.12})$$

Definito il coefficiente di Gruneisen come:

$$\Gamma(V) = \frac{\partial \ln(T_D)}{\partial \ln(V)} \quad (\text{C.4.13})$$

si ottiene infine:

$$p = p_P(V) + \frac{\Gamma(V)}{V} \cdot N \cdot q \cdot k_B \cdot \left[\frac{9}{8} \cdot T_D + 3 \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right) \cdot T \right] \quad (\text{C.4.14})$$

Nota C.4.1

Di seguito viene ricavata la funzione $D\left(\frac{T_D}{T}\right)$ e calcolato l'integrale:

$$\int_0^{w_D} w^2 \cdot \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}}\right) dw \quad (\text{C.4.15})$$

Il procedimento seguito fa riferimento a [10]. L'integrale da calcolare è lo stesso della (C.2.15). Seguendo i passaggi svolti nella nota C.2.1 può essere riscritto come:

$$\int_0^{w_D} w^2 \cdot \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}}\right) dw = \left(\frac{k_B \cdot T}{\hbar}\right)^3 \cdot \int_0^{y_D} \ln(1 - e^{-y}) \cdot y^2 dy \quad (\text{C.4.16})$$

con $y_D = \frac{\hbar \cdot w_D}{k_B \cdot T} = \frac{T_D}{T}$. L'integrale a secondo membro può essere svolto per parti:

$$\int_0^{y_D} \ln(1 - e^{-y}) \cdot y^2 dy = \frac{y_D^3}{3} \cdot \ln(1 - e^{-y_D}) - \frac{1}{3} \cdot \int_0^{y_D} y^3 \cdot \frac{1}{e^y - 1} dy \quad (\text{C.4.17})$$

Sostituendo questo risultato nella (C.4.16) e utilizzando la definizione (C.4.5), si può già scrivere come:

$$\int_0^{w_D} w^2 \cdot \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cdot T}}\right) dw = \frac{1}{3} \cdot \ln\left(1 - e^{-\frac{T_D}{T}}\right) - \frac{1}{9} \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right) \quad (\text{C.4.18})$$

A sua volta il secondo integrale della (C.4.17) si può scrivere come:

$$\int_0^{y_D} y^3 \cdot \frac{e^y}{e^y - 1} dy = \int_0^{\infty} y^3 \cdot \frac{e^y}{e^y - 1} dy - \int_{y_D}^{\infty} y^3 \cdot \frac{e^y}{e^y - 1} dy \quad (\text{C.4.19})$$

Il risultato del primo integrale a secondo membro è noto dalla (C.2.28):

$$\int_0^{\infty} y^3 \cdot \frac{e^y}{e^y - 1} dy = \frac{\pi^4}{15} \quad (\text{C.4.20})$$

L'altro integrale può essere scritto come: (vedi nota C.2.1)

$$\int_{y_D}^{\infty} y^3 \cdot \frac{e^y}{e^y - 1} dy = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \int_{y_D}^{\infty} y^3 \cdot e^{-y \cdot (k+1)} dy \right) \quad (\text{C.4.21})$$

Integrando per parti l'integrale all'interno della sommatoria, dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$\int_{y_D}^{\infty} y^3 \cdot e^{-y \cdot (k+1)} dy = e^{-\frac{T_D}{T} \cdot (k+1)} \cdot \left[\frac{1}{k+1} \cdot \left(\frac{T_D}{T}\right)^3 + \frac{3}{(k+1)^2} \cdot \left(\frac{T_D}{T}\right)^2 + \frac{6}{(k+1)^3} \cdot \left(\frac{T_D}{T}\right) + \frac{6}{(k+1)^4} \right] \quad (\text{C.4.22})$$

La funzione $D\left(\frac{T_D}{T}\right)$ può quindi essere espressa come:

$$D\left(\frac{T_D}{T}\right) = \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \cdot \frac{\pi^4}{5} - 3 \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{T_D}{T} \cdot k}}{k} \cdot \left[1 + \frac{3}{k} \cdot \left(\frac{T}{T_D}\right) + \frac{6}{k^2} \cdot \left(\frac{T}{T_D}\right)^2 + \frac{6}{k^3} \cdot \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \right] \quad (\text{C.4.23})$$

C.5 Modello di Einstein

Einstein nel suo modello ipotizza che tutti gli oscillatori abbiano la stessa frequenza w_E . La distribuzione in questo caso diventa:

$$Z(w) = \begin{cases} 3 \cdot N \cdot q \cdot \delta(w - w_E) & \text{se } w = w_E \\ 0 & \text{se } w \neq w_D \end{cases} \quad (\text{C.5.1})$$

Anche in questo caso si ha che:

$$\int_0^{\infty} Z(w) dw = 3 \cdot N \cdot q \cdot \int_0^{\infty} \delta(w - w_E) dw = 3 \cdot N \cdot q \quad (\text{C.5.2})$$

Sostituendo questa distribuzione nella (C.1.6) si ottiene:

$$F = E_P(V) + \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot w + k_B \cdot T \cdot \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w}{k_B \cot T}} \right) \right] \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \delta(w - w_E) dw \quad (\text{C.5.3})$$

L'integrazione è immediata e l'energia libera di Helmholtz diventa:

$$F = E_P(V) + 3 \cdot N \cdot q \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot w_E + k_B \cdot T \cdot \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \cdot w_E}{k_B \cot T}} \right) \right] \quad (\text{C.5.4})$$

Definito il coefficiente di Gruneisen come:

$$\Gamma = - \frac{\partial \ln(w_E)}{\partial \ln(V)} \quad (\text{C.5.5})$$

Dalla relazione (C.2.10) dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene l'espressione della pressione:

$$p = p_E(V) + \frac{\Gamma(V)}{V} \cdot 3 \cdot N \cdot q \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot w_E + \frac{\hbar \cdot w_E}{e^{\frac{\hbar \cdot w_E}{k_B \cdot T}} - 1} \right) \quad (\text{C.5.6})$$

Appendice D Parametri dell'equazione di stato *stiffened gas*

Di seguito viene mostrato il procedimento che permette di ricavare i parametri della *stiffened gas*. Questo approccio è proposto in [8]. Si consideri lo schema di figura 49: uno stantuffo si muove a velocità costante u_p , il moto dello stantuffo genera un'onda di pressione che viaggia a velocità u_s e perturba il fluido inizialmente in quiete. Si applichino le condizioni di salto di

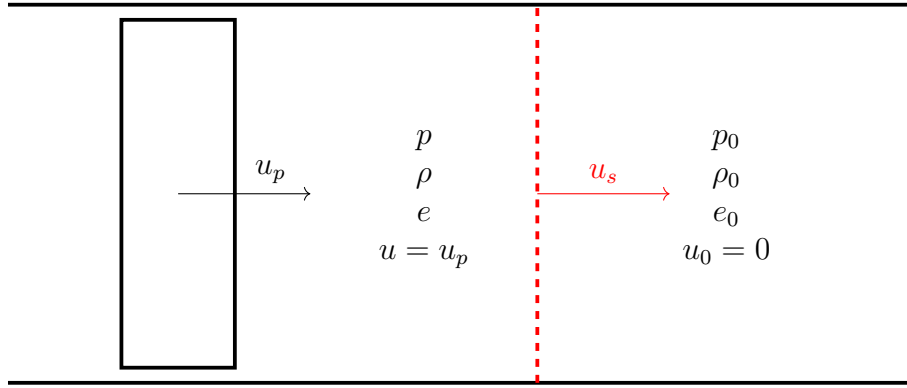


Figura 49. Le grandezze 0 indicano il fluido indisturbato non ancora raggiunto dal fronte d'onda.

Rankine-Hugoniot a monte e valle dell'onda di pressione:

$$\rho \cdot w = \rho_0 \cdot w_0 \quad (\text{D.1})$$

$$p + \rho \cdot w^2 = p_0 + \rho_0 \cdot w_0^2 \quad (\text{D.2})$$

con $w = u - u_s$. Dal momento che $u_0 = 0$ dalla prima equazione si ottiene:

$$\rho \cdot (u_p - u_s) = -\rho_0 \cdot u_s \quad (\text{D.3})$$

da cui:

$$\frac{u_p}{u_s} = \frac{\rho - \rho_0}{\rho} \quad (\text{D.4})$$

Sostituendo la (D.1) nella (D.2) questa diventa:

$$p + \rho_0 \cdot w_0 \cdot w = p_0 + \rho_0 \cdot w_0^2 \quad (\text{D.5})$$

da cui, ricordando che $u_0 = 0$:

$$p - p_0 = \rho_0 \cdot u_s \cdot u_p \quad (\text{D.6})$$

Si ottiene infine:

$$u_p \cdot u_s = \frac{p - p_0}{\rho_0} \quad (\text{D.7})$$

A partire dalle condizioni di salto di Rankine-Hugoniot si ottengono queste due relazioni:

$$\frac{u_p}{u_s} = 1 - \frac{\rho_0}{\rho} \quad (\text{D.8})$$

$$u_p \cdot u_s = \frac{p - p_0}{\rho_0} \quad (\text{D.9})$$

Il rapporto tra le densità a monte e valle dell'onda di pressione è dato dalla (E.1.15) che sostituita nella (D.8) permette di scrivere:

$$\frac{u_p}{u_s} = \frac{2 \cdot (p - p_0)}{(N + 1) \cdot (p + p_\infty) + (N - 1) \cdot (p_0 + p_\infty)} \quad (\text{D.10})$$

La differenza tra le pressioni a monte e valle del fronte d'onda è ricavabile dalla (D.9) come:

$$p - p_0 = \rho_0 \cdot u_p \cdot u_s \quad (\text{D.11})$$

che sostituita nella (D.10) permette di ottenere, dopo opportuni passaggi algebrici:

$$u_s^2 - \frac{N + 1}{2} \cdot u_p \cdot u_s - a_0^2 = 0 \quad (\text{D.12})$$

La (D.12) è un'equazione di secondo grado nelle sole incognite u_p e u_s . Risolvendo questa equazione rispetto u_s si ha:

$$\Delta = \left(\frac{N + 1}{2} \right)^2 \cdot u_p^2 + a_0^2 \quad (\text{D.13})$$

e infine:

$$u_s = \frac{N + 1}{4} \cdot u_p + \sqrt{a_0^2 + \left(\frac{N + 1}{4} \cdot u_p \right)^2} \quad (\text{D.14})$$

La soluzione con il segno $-$ non è accettabile perché darebbe valori di u_s negativi mentre per ipotesi $u_s > 0$. La (D.14) permette di stimare il parametro N : misurando sperimentalmente u_s per diverse velocità dello stantuffo

u_p è possibile costruire la *curva di Hugoniot* e quindi scegliere il valore di N che interpola meglio i dati sperimentali. Noto N è possibile calcolare p_∞ a partire dall'espressione della velocità del suono nel fluido indisturbato:

$$a_0^2 = N \cdot \frac{p_0 + p_\infty}{\rho_0} \quad (\text{D.15})$$

da cui si ricava infine:

$$p_\infty = \frac{a_0^2 \cdot \rho_0}{N} - p_0 \quad (\text{D.16})$$

D.1 Calcolo dei parametri dai dati sperimentali

Le numerose prove sperimentali mostrano una relazione lineare tra u_s e u_p :

$$U_s = A + B \cdot u_p \quad (\text{D.1.1})$$

Per l'intervallo di velocità u_p compreso tra circa $0 - 500 \left(\frac{m}{s}\right)$ si fa riferimento ai valori di $A = 1450 \left(\frac{m}{s}\right)$ $B = 1.99$ [25]. Il metodo dei minimi quadrati permette di stimare il miglior valore di N che corrisponde al minimo di S , definita come:

$$S = \sum_k [u_s(u_{pk}) - U_s(u_{pk})]^2 \quad (\text{D.1.2})$$

Una buona approssimazione si ottiene per $N = 5.6$ (figura 50). In figura 51 viene riportato l'andamento di u_s per il valore di N scelto. Infine dalla (D.16) si calcola il valore di p_∞ pari a:

$$p_\infty = 4.175 \cdot 10^8 \text{ (Pa)} \quad (\text{D.1.3})$$

Nota D.1.1

La (D.1.3) è calcolata con i valori a_0 , p_0 , ρ_0 utilizzati per il problema dell'esplosione sottomarina della bolla di gas (sezione 11); invece per N si fa riferimento alla velocità del suono nelle condizioni dell'esperimento da cui sono stati ricavati i coefficienti della (D.1.1). Questo equivale ad assumere che la *curva di Hugoniot* trasli lungo l'asse delle ordinate mantenendo la stessa pendenza al variare di a_0 . Tale ipotesi è ragionevole dal momento che la velocità del suono nel problema considerato si discosta meno del 5% da quella delle prove sperimentali.

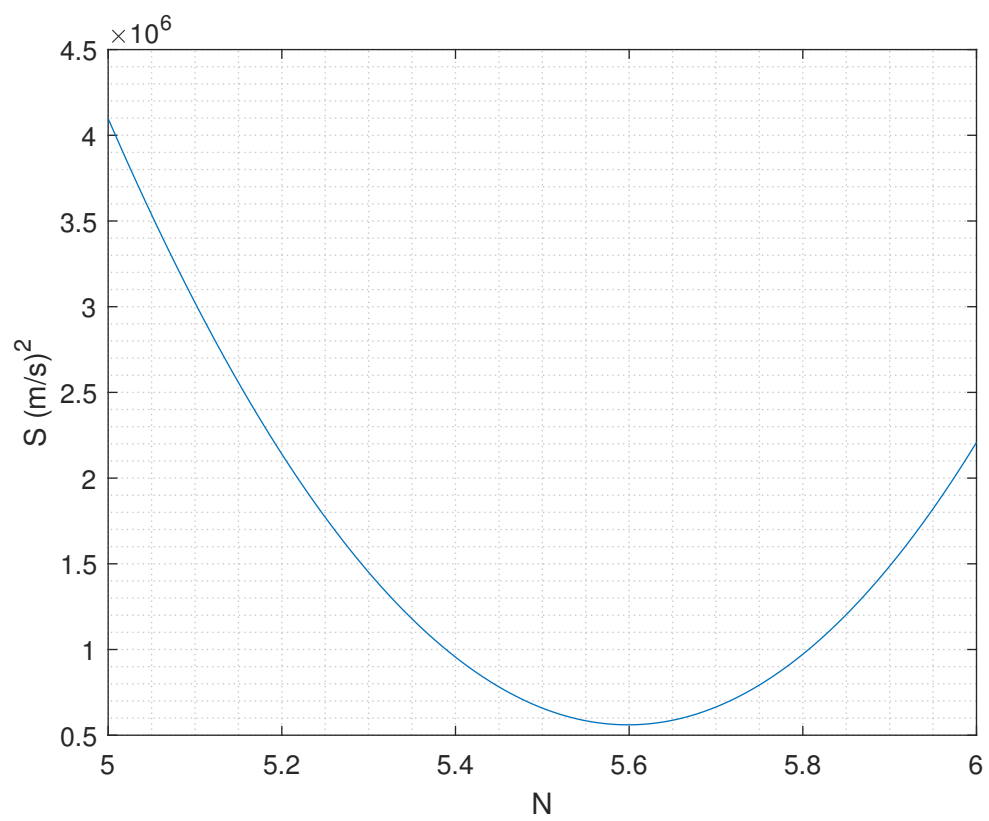


Figura 50. Andamento di S al variare di N

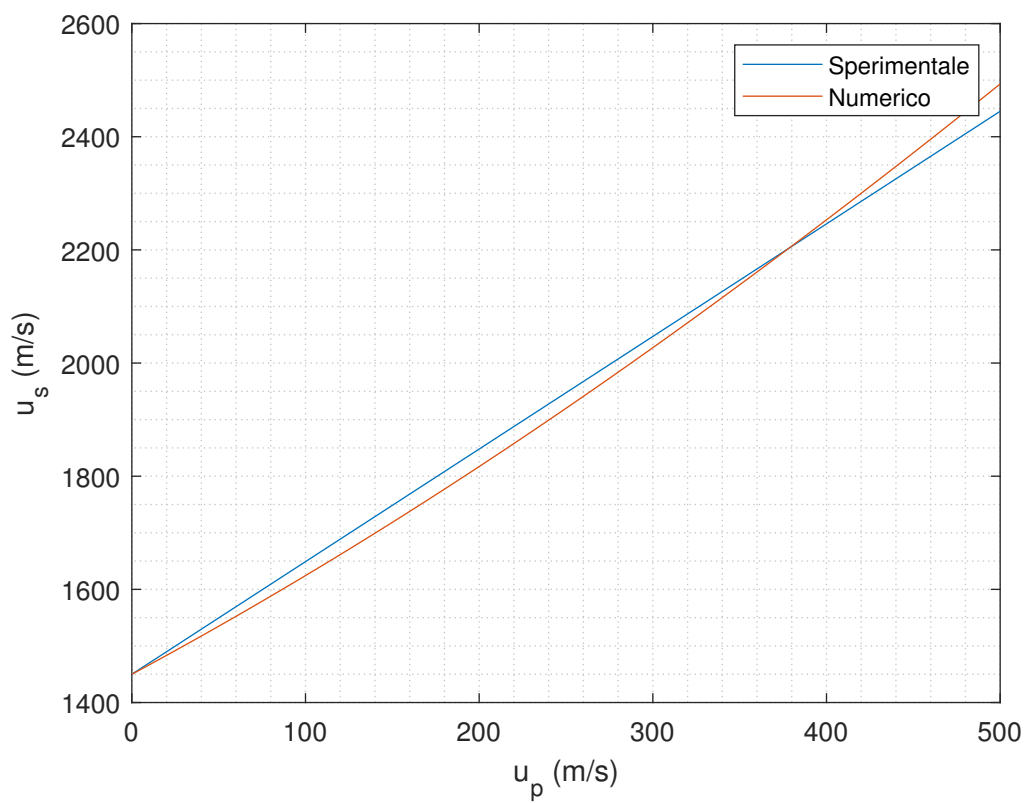


Figura 51. Confronto di u_s con i dati sperimentali

Appendice E Equazioni per la soluzione del problema di Riemann

Di seguito vengono ricavate le relazioni impiegate nella sezione 7. Le grandezze 0 fanno riferimento allo stato non perturbato; $+/-$ ($-/+$) rispettivamente alla prima e terza famiglia di linee caratteristiche.

E.1 Rapporto delle densità $\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)$

Il risultato finale e le equazioni di partenza utilizzate per risolvere il problema sono riportate in [8]. Si considerino le equazioni di continuità, bilancio di momento ed energia scritte rispetto a un sistema di riferimento relativo in moto con velocità dello *shock* s :

$$\rho_0 \cdot w_0 = \rho \cdot w = \pm Q_0 \quad (\text{E.1.1})$$

$$p_0 + \rho_0 \cdot w_0^2 = p + \rho \cdot w^2 \quad (\text{E.1.2})$$

$$h_0 + \frac{w_0^2}{2} = h + \frac{w^2}{2} \quad (\text{E.1.3})$$

dove $w = u - s$. Le equazioni (E.1.1) e (E.1.2) possono essere riscritte come:

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \frac{u - s}{u_0 - s} = \frac{u - s + u_0 - u_0}{u_0 - s} = 1 - \frac{u_0 - u}{u_0 - s} \quad (\text{E.1.4})$$

$$p - p_0 = \rho_0 \cdot w_0^2 - \rho_0 \cdot w_0 \cdot w = \rho_0 \cdot w_0 \cdot (u_0 - u) \quad (\text{E.1.5})$$

Ricavando w^2 dalla (E.1.2):

$$w^2 = \frac{p_0}{\rho} + \frac{\rho_0}{\rho} \cdot w_0^2 - \frac{p}{\rho} \quad (\text{E.1.6})$$

e sostituendola nella (E.1.3) insieme con l'espressione dell'entalpia $h = e + \frac{p}{\rho}$, dopo vari passaggi algebrici si ottiene:

$$e + \frac{1}{2} \cdot \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \cdot \frac{p_0}{\rho} = e_0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{p_0}{\rho_0} - \frac{1}{2} \cdot (u_0 - s) \cdot (u - u_0) \quad (\text{E.1.7})$$

Il termine $(u - u_0)$ può essere ricavato dalla (E.1.5)

$$u - u_0 = \frac{p - p_0}{s \cdot u_0 \cdot \rho_0} \quad (\text{E.1.8})$$

e sostituito nella (E.1.7):

$$e - e_0 = \frac{1}{2} \cdot (p_0 + p) \cdot \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) \quad (\text{E.1.9})$$

Moltiplicando a sinistra e destra per ρ_0 la (E.1.9) diventa:

$$\rho_0 \cdot (e - e_0) = \frac{1}{2} \cdot (p_0 + p) \cdot \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \quad (\text{E.1.10})$$

Quindi sostituendo la (E.1.4), l'equazione appena ottenuta diventa:

$$\rho_0 \cdot (e - e_0) = \frac{1}{2} \cdot (p_0 + p) \cdot \left(\frac{u - u_0}{s - u_0}\right) \quad (\text{E.1.11})$$

Da qui si ricava:

$$\frac{u - u_0}{s - u_0} = 2 \cdot \rho_0 \cdot \frac{e - e_0}{p + p_0} \quad (\text{E.1.12})$$

Questo sostituito nella (E.1.4) permette di ottenere una equazione nelle sole incognite (p, ρ, e) :

$$\frac{\rho_0}{\rho} = 1 - 2 \cdot \rho_0 \cdot \frac{e - e_0}{p + p_0} \quad (\text{E.1.13})$$

A questo punto è possibile introdurre l'equazione di stato:

$$e = \frac{1}{N - 1} \cdot \frac{p + N \cdot p_\infty}{\rho} \quad (\text{E.1.14})$$

Infine, sostituendo la (E.1.14) nella (E.1.13), dopo opportuni passaggi algebrici, si ottiene:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{(N + 1) \cdot (p + p_\infty) + (N - 1) \cdot (p_0 + p_\infty)}{(N - 1) \cdot (p + p_\infty) + (N + 1) \cdot (p_0 + p_\infty)} \quad (\text{E.1.15})$$

Nel caso di gas ideale, allora $N \rightarrow \gamma; p_\infty \rightarrow 0$ e si ricava l'espressione:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{\left(\frac{p}{p_0}\right) + \frac{\gamma-1}{\gamma+1}}{\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right) + 1} \quad (\text{E.1.16})$$

E.2 Metodo 1 per la soluzione del problema di Riemann

Il procedimento riportato di seguito è tratto da [18]. L'obiettivo è quello di determinare la funzione $f(p, \mathbf{U}_0)$ definita dalla relazione:

$$u^* = u_k \mp f_{k(p, \mathbf{U}_k)} \quad (\text{E.2.1})$$

con $k=L/R$ se si fa riferimento rispettivamente allo stato non perturbato \mathbf{U}_L o \mathbf{U}_R . In questo metodo si fa l'assunzione di gas ideale.

Shock Si considerino le equazioni (E.1.1), (E.1.2), (E.1.3). (In questo caso 0 fa riferimento genericamente allo stato non perturbato destro o sinistro). Dalla (E.1.2) si ricava:

$$Q_0^2 = \frac{p - p_0}{\left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\right)} = \rho_0 \cdot \frac{p - p_0}{\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)} \quad (\text{E.2.2})$$

Sostituendo la (E.1.16) nell'equazione appena ottenuta si ottiene:

$$Q_0^2 = \frac{\rho_0}{2} \cdot (\gamma + 1) \cdot \left(p + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot p_0\right) \quad (\text{E.2.3})$$

Definite le funzioni A_0, B_0 come:

$$A_0 = \frac{2}{\rho_0 \cdot (\gamma + 1)} \quad (\text{E.2.4})$$

$$B_0 = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot p_0 \quad (\text{E.2.5})$$

L'espressione di Q_0 diventa:

$$Q_0 = \left(\frac{p + B_0}{A_0}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{E.2.6})$$

Dalla (E.1.1) e (E.1.2) è possibile scrivere:

$$p_0 \pm Q_0 \cdot w_0 = p \pm Q_0 \cdot w \quad (\text{E.2.7})$$

e da qui si ricava l'espressione di u^* :

$$u = u_0 \mp \frac{p - p_0}{Q_0} = u_0 \mp (p - p_0) \cdot \left(\frac{A_0}{p + B_0}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{E.2.8})$$

Nel caso di *shock* $f_k(p, \mathbf{U}_k)$ assume la seguente espressione:

$$f_k(p, \mathbf{U}_k) = (p - p_k) \cdot \left(\frac{A_k}{p + B_k}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{E.2.9})$$

Rarefaction fan In assenza di discontinuità valgono le invarianti di Riemann:

$$u_0 \pm \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_0 = u \pm \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a \quad (\text{E.2.10})$$

Dall'equazione precedente si ricava:

$$u = u_0 \mp \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_0 \cdot \left(\frac{a}{a_0} - 1 \right) \quad (\text{E.2.11})$$

Considerando l'espressione della velocità del suono e della isoentropica:

$$a = \sqrt{\gamma \cdot \frac{p}{\rho}} \quad (\text{E.2.12})$$

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{costante} \quad (\text{E.2.13})$$

si ottiene:

$$\frac{a}{a_0} = \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\cdot\gamma}} \quad (\text{E.2.14})$$

Infine si sostituisce l'equazione precedente nella (E.2.11) e si ottiene:

$$u = u_0 \mp \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_0 \cdot \left[\left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\cdot\gamma}} - 1 \right] \quad (\text{E.2.15})$$

L'equazione di $f_k(p, \mathbf{U}_k)$ per il *rarefaction fan* è:

$$f_k(p, \mathbf{U}_k) = \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_k \cdot \left[\left(\frac{p}{p_k} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\cdot\gamma}} - 1 \right] \quad (\text{E.2.16})$$

Riassumendo si ottiene:

$$\begin{cases} u^* = u_k \mp f_k(p, \mathbf{U}_k) \\ f_k(p, \mathbf{U}_k) = \begin{cases} (p - p_k) \cdot \left(\frac{A_k}{p + B_k} \right)^{\frac{1}{2}} & \text{se } p > p_k \\ \frac{2}{\gamma - 1} \cdot a_k \cdot \left[\left(\frac{p}{p_k} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\cdot\gamma}} - 1 \right] & \text{se } p < p_k \end{cases} \end{cases} \quad (\text{E.2.17})$$

È utile conoscere l'andamento di f_k studiandone il segno della deriva prima:

$$f'_k(p, \mathbf{U}_k) = \begin{cases} \left(\frac{A_k}{p + B_k} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(1 - \frac{p - p_k}{2 \cdot (p + B_k)} \right) > 0 \quad \forall p > p_k \\ \frac{2 \cdot a_k}{\gamma \cdot p_k} \cdot \sqrt{\left(\frac{p}{p_k} \right) - 1} > 0 \quad \forall p < p_k \end{cases} \quad (\text{E.2.18})$$

Si ottiene quindi che la funzione $f_k(p, \mathbf{U}_k)$ è una funzione monotona crescente. Questo risultato è utile per la soluzione del problema di Riemann (sezione 7.1)

E.3 Metodo 2 per la soluzione del problema di Riemann

Definiamo la funzione m_0 come fatto in [8]:

$$m_0 = \mp \frac{p - p_0}{u - u_0} \quad (\text{E.3.1})$$

L'obiettivo è quello di esprimere m_0 in funzione di p . Tale espressione è diversa a seconda che si utilizzi la *stiffened gas* o l'*equazione di Taït*.

E.3.1 Equazione di stato stiffened gas

Le relazioni finali nel caso nella *stiffened gas* sono presentate in [8].

Shock Dalla (E.1.1),(E.1.2) è possibile scrivere:

$$p_0 + (\rho_0 \cdot w_0) \cdot w_0 = p + (\rho_0 \cdot w_0) \cdot w \quad (\text{E.3.2})$$

da cui si ottiene:

$$|\rho_0 \cdot w_0| = \mp \frac{p - p_0}{u - u_0} \quad (\text{E.3.3})$$

Come si può osservare la (E.3.3) coincide proprio con la definizione (E.3.1). L'equazione di continuità può essere riscritta come:

$$\rho_0 \cdot w_0 = \rho \cdot w = \mp m_0 \quad (\text{E.3.4})$$

Sostituendo la (E.3.4) nella (E.1.2) si ottiene:

$$p_0 + \frac{m_0^2}{\rho_0} = p + \frac{m_0^2}{\rho} \quad (\text{E.3.5})$$

da cui si trova:

$$m_0 = \sqrt{\frac{p - p_0}{\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}}} = \sqrt{\rho_0 \cdot \frac{p - p_0}{1 - \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)}} \quad (\text{E.3.6})$$

Infine sostituendo la (E.1.15) nell'equazione appena ottenuta, dopo alcuni passaggi algebrici si ottiene:

$$m_0 = \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + p_\infty)} \cdot \left(\frac{N + 1}{2 \cdot N} \cdot z + \frac{N - 1}{2 \cdot N} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{E.3.7})$$

con

$$z = \frac{p + p_\infty}{p_0 + p_\infty} \quad (\text{E.3.8})$$

Rarefaction fan Sfruttando la (E.2.10), (E.2.13) si ottiene:

$$u - u_0 = \mp \frac{2}{N-1} \cdot a_0 \cdot \left[\left(\frac{p + p_\infty}{p_0 + p_\infty} \right)^{\frac{N-1}{2 \cdot N}} - 1 \right] \quad (\text{E.3.9})$$

Sostituendo l'equazione appena ottenuta nella (E.3.1) si ottiene:

$$m_0 = \frac{N-1}{2 \cdot N} \cdot \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + p_\infty)} \cdot \frac{1-z}{1 - z^{\frac{N-1}{2 \cdot N}}} \quad (\text{E.3.10})$$

Dove z è definito dalla (E.3.8). Riassumendo per la *stiffened gas* si ottiene

$$m_k = \begin{cases} \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + p_\infty)} \cdot \left(\frac{N+1}{2 \cdot N} \cdot z + \frac{N-1}{2 \cdot N} \right)^{\frac{1}{2}} & \text{se } p > p_k \\ \frac{N-1}{2 \cdot N} \cdot \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + p_\infty)} \cdot \frac{1-z}{1 - z^{\frac{N-1}{2 \cdot N}}} & \text{se } p < p_k \end{cases} \quad (\text{E.3.11})$$

E.3.2 Equazione di Tait

Il procedimento utilizzato per l'equazione di Tait è tratto da [13].

shock L'equazione di Tait continua a valere anche attraverso uno *shock*, per cui:

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(\frac{p_0 + B}{p + B} \right)^{\frac{1}{N}} \quad (\text{E.3.12})$$

Questo è il rapporto delle densità a monte e valle di uno *shock* per l'equazione di Tait e rimpiazza la (E.1.15), valida per gas ideale e *stiffened gas*. Sostituendo la (E.3.12) nella (E.3.6), ancora valida, dopo opportuni passaggi algebrici si ottiene:

$$m_0 = \sqrt{\rho_0 \cdot (p_0 + B)} \cdot \left(\frac{z-1}{1 - z^{-\frac{1}{N}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{E.3.13})$$

con $z = \frac{p+B}{p_0+B}$.

rarefaction fan Nel caso di *rarefaction fan* i passaggi sono uguali a quelli della *stiffened gas* e si arriva alla stessa espressione:

$$m_0 = \frac{N-1}{2 \cdot N} \cdot \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + B)} \cdot \frac{1-z}{1 - z^{\frac{N-1}{2 \cdot N}}} \quad (\text{E.3.14})$$

Riassumendo, per l'equazione di Tait m_k assume la seguente espressione:

$$m_k = \begin{cases} \sqrt{\rho_0 \cdot (p_0 + B)} \cdot \left(\frac{z-1}{1-z^{-\frac{1}{N}}} \right)^{\frac{1}{2}} & \text{se } p > p_k \\ \frac{N-1}{2 \cdot N} \cdot \sqrt{N \cdot \rho_0 \cdot (p_0 + B)} \cdot \frac{1-z}{1-z^{\frac{N-1}{2 \cdot N}}} & \text{se } p < p_k \end{cases} \quad (\text{E.3.15})$$

Appendice F Formulazione primitiva delle equazioni di Eulero

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_t + \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho a^2 & u \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_x = \begin{pmatrix} -\frac{\partial \Sigma}{\partial x} \cdot \frac{\rho u}{\Sigma} \\ 0 \\ -\frac{\partial \Sigma}{\partial x} \cdot \frac{\rho u a^2}{\Sigma} \end{pmatrix} \quad (\text{F.1})$$

Nella formulazione primitiva le variabili di Riemann hanno la seguente espressione:

$$\begin{cases} \delta R_1 = -\frac{\rho}{2 \cdot a} \cdot \delta u + \frac{1}{2 \cdot a^2} \cdot \delta p \\ \delta R_2 = \delta \rho - \frac{1}{a^2} \cdot \delta p \\ \delta R_3 = \frac{\rho}{2 \cdot a} \cdot \delta u + \frac{1}{2 \cdot a^2} \cdot \delta p \end{cases} \quad (\text{F.2})$$

Appendice G Metodo di Newton-Raphson

Sia $\hat{\mathbf{X}}$ lo zero della funzione $\mathbf{B}(\mathbf{X})$ con $\mathbf{X} = (\rho \ p \ u)^T$:

$$\mathbf{B}(\rho, p, u) = \begin{pmatrix} p_{1,n+1}^0 - p \cdot \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \cdot \left(\frac{u}{a} \right)^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \\ T_{1,n+1}^0 - T - \frac{1}{2} \cdot \frac{u^2}{c_p} \\ -\frac{\rho}{2 \cdot a} \cdot u + \frac{1}{2 \cdot a^2} \cdot p - R_{11,n+1} \end{pmatrix} \quad (\text{G.1})$$

La soluzione del sistema di (9.1.1),(9.1.2),(9.1.4) coincide con $\hat{\mathbf{X}}$ e può essere determinata iterativamente come:

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{X}_k - \mathbf{v} \mid [\mathbf{J}_\mathbf{B}] \bullet \mathbf{v} = \mathbf{B}(\mathbf{X}_k) \quad (\text{G.2})$$

Dove $[\mathbf{J}_\mathbf{B}]$ è la matrice Jacobiana di \mathbf{B} (vedi (A.3))

Di seguito sono riportate le espressioni delle derivate:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_1}{\partial p} = - \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \rho \cdot \frac{u^2}{\gamma \cdot p} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\rho \cdot u^2}{p} \cdot \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \rho \cdot \frac{u^2}{\gamma \cdot p} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \\ \frac{\partial B_1}{\partial u} = -u \cdot \rho \cdot \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \rho \cdot \frac{u^2}{2 \cdot p} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \\ \frac{\partial B_1}{\partial \rho} = -\frac{1}{2} \cdot u^2 \cdot \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \rho \cdot \frac{u^2}{2 \cdot p} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_2}{\partial p} = -\frac{1}{R \cdot \rho} \\ \frac{\partial B_2}{\partial u} = -\frac{u}{c_p} \\ \frac{\partial B_2}{\partial \rho} = \frac{p}{R \cdot \rho^2} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_3}{\partial p} = \frac{1}{4 \cdot \sqrt{\gamma}} \cdot \frac{\rho^{1.5} \cdot u}{p^{1.5}} \\ \frac{\partial B_3}{\partial u} = -\frac{1}{2 \cdot \sqrt{\gamma}} \cdot \frac{\rho^{1.5}}{p^{0.5}} \\ \frac{\partial B_3}{\partial \rho} = \frac{1}{2 \cdot \gamma} - \frac{3}{4} \cdot \frac{u \cdot \rho^{0.5}}{\sqrt{\gamma \cdot p}} \end{array} \right.$$

Riferimenti bibliografici

- [1] Wikipedia contributors. Computational fluid dynamics — Wikipedia, the free encyclopedia, 2022. [Online; accessed 3-December-2022].
- [2] Wikipedia contributors. Euler equations (fluid dynamics) — Wikipedia, the free encyclopedia, 2022. [Online; accessed 5-December-2022].
- [3] Alberto Luzio. Numerical solution of a one-dimensional unsteady convergent-divergent nozzle with an high resolution godunov scheme. 2021/2022.
- [4] Wikipedia. Equazione di stato — wikipedia, l'enciclopedia libera, 2022. [Online; in data 28-novembre-2022].
- [5] Wikipedia. Gas ideale — wikipedia, l'enciclopedia libera, 2022. [Online; in data 28-novembre-2022].
- [6] Francis H Harlow and Anthony A Amsden. Fluid dynamics. a lasl monograph. Technical report, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1971.
- [7] Y Tatekura, M Watanabe, K Kobayashi, and T Sanada. Pressure generated at the instant of impact between a liquid droplet and solid surface. *Royal Society open science*, 5(12):181101, 2018.
- [8] JP Cocchi, R Saurel, and JC Loraud. Treatment of interface problems with godunov-type schemes. *Shock waves*, 5(6):347–357, 1996.
- [9] Olivier Le Métayer, Jacques Massoni, and Richard Saurel. Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques. *International journal of thermal sciences*, 43(3):265–276, 2004.
- [10] Vladimir Naumovich Zharkov and Vladimir Alekseevich Kalinin. *Equations of state for solids at high pressures and temperatures*. Springer, 1971.
- [11] Vincenzo Zappalà. Il teorema del viriale: il prezzemolo della fisca, 2018.
- [12] Ralph Menikoff and Bradley J Plohr. The riemann problem for fluid flow of real materials. *Reviews of modern physics*, 61(1):75, 1989.
- [13] Jolen Flores and Maurice Holt. Glimm's method applied to underwater explosions. *Journal of Computational Physics*, 44(2):377–387, 1981.

- [14] Alan Thomas Joseph Hayward. Compressibility equations for liquids: a comparative study. *British Journal of Applied Physics*, 18(7):965, 1967.
- [15] JH Dymond and R Malhotra. The tait equation: 100 years on. *International journal of thermophysics*, 9(6):941–951, 1988.
- [16] Wikipedia. Spedizione challenger — wikipedia, l’enciclopedia libera, 2022. [Online; in data 29-novembre-2022].
- [17] Wikipedia. Hms challenger (1858) — wikipedia, l’enciclopedia libera, 2020. [Online; in data 29-novembre-2022].
- [18] Eleuterio F Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [19] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics*, 32(1):101–136, 1979.
- [20] Christian Di Lizia. Ottimizzazione di schemi alla godunov per la simulazione di flussi quasi-unidimensionali non stazionari. 2003/2004.
- [21] Charlie H Cooke and Tze-Jang Chen. Continuous front tracking with subcell resolution. *Journal of scientific computing*, 6(3):269–282, 1991.
- [22] Kon-Ming Li and Maurice Holt. Numerical solutions to water waves generated by shallow underwater explosions. *The Physics of Fluids*, 24(5):816–824, 1981.
- [23] Lev Davidovich Landau and Evgenii Mikhailovich Lifshitz. *Statistical Physics: Volume 5*, volume 5. Elsevier, 2013.
- [24] Wikipedia contributors. Zero-point energy — Wikipedia, the free encyclopedia, 2022. [Online; accessed 29-November-2022].
- [25] Kunihito Nagayama, Yasuhito Mori, Katsuya Shimada, and Motonao Nakahara. Water shock hugoniot measurement up to less than 1 gpa. In *AIP Conference Proceedings*, volume 505, pages 65–68. American Institute of Physics, 2000.