

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PISA
FACOLTÀ DI INGEGNERIA

Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria Aerospaziale
Curriculum Spaziale
Orientamento Propulsione Elettrica

**Studio di schemi numerici impliciti,
precondizionati e di ordine elevato per flussi
barotropici**



Relatori

Prof.ssa Maria Vittoria Salvetti

Dr. François Beux

Candidato

Marco Bilanceri

ANNO ACCADEMICO 2006 - 2007

Sommario

La presente tesi è parte di una attività di ricerca volta allo sviluppo di un solutore numerico per flussi cavitanti. Il fenomeno della cavitazione riguarda la formazione di bolle di vapore all'interno di un liquido in movimento. Nel presente lavoro, per tenere conto del fenomeno della cavitazione, si è utilizzato un modello di fluido omogeneo equivalente. Questo fa sì che durante il moto si manifestino forti variazioni delle variabili di stato come pressione e densità. Tutto ciò comporta che solutori numerici pensati per questo ambito debbano essere in grado di far fronte a condizioni di flusso notevolmente differenti. Nel presente lavoro, partendo da uno schema numerico preesistente, sono state introdotte delle modifiche dello stesso e si sono validate con problemi classici della fluidodinamica numerica. In particolare, si è passati da un codice accurato al primo ordine ad un codice accurato al secondo ordine e si discute di come questa operazione possa richiedere comunque un basso costo computazionale. È stato inoltre introdotto un nuovo metodo di avanzamento temporale non lineare, al fine di valutare i vantaggi e i limiti di quelli lineari già presenti. Inoltre, è stato condotto uno studio sulle tecniche di preconditionamento utilizzate per codici comprimibili nel caso debbano simulare flussi incomprimibili. Si sono evidenziati alcuni problemi incontrati nel loro utilizzo e una possibile strategia di soluzione.

Indice

1	Introduzione	1
2	Cavitazione e leggi di stato barotropiche	3
2.1	Modelli di cavitazione	3
2.2	Scelta del modello di cavitazione	4
2.3	Definizione della legge di stato	5
2.4	Descrizione della legge di stato per la cavitazione	5
2.4.1	Modello della fase liquida	6
2.4.2	Modello di cavitazione	6
2.5	Legge di stato politropica	7
3	Formulazione matematica	9
3.1	Equazioni di bilancio	9
3.1.1	Equazioni 1D aumentate	10
3.2	Soluzioni integrali e iperbolicità	11
3.2.1	Iperbolicità	11
3.2.2	Soluzioni integrali	12
3.3	Il problema di Riemann	12
3.3.1	Soluzione del problema di Riemann	15
3.4	Soluzione del problema del moto in ugello	17
3.4.1	Soluzione nel caso generale	17
3.4.2	Soluzione nel caso di legge politropica	19
4	Descrizione del metodo numerico	21
4.1	Generalità sugli schemi numerici 1D	21
4.1.1	Discretizzazione spaziale	21
4.1.2	Discretizzazione temporale	23
4.2	Descrizione dello schema numerico per il primo ordine	25
4.2.1	Descrizione della funzione di flusso di Godunov	25
4.2.2	Funzione di flusso di Roe	25
4.2.3	Schema di Roe preconditionato per flussi a basso Mach	27
4.2.4	Definizione degli schemi discretizzati	29
4.2.5	Avanzamento temporale implicito linearizzato	30
4.2.6	Condizioni iniziali e al bordo	30
4.3	Schema numerico al secondo ordine	32
4.3.1	Ricostruzione MUSCL	32

4.3.2	Limitatori di pendenza	35
4.3.3	Schemi al secondo ordine completamente discretizzati	40
4.3.4	Tecnica DeC	43
4.3.5	Condizioni al bordo per lo schema al secondo ordine	45
5	Lavoro svolto sul preconditionatore	46
5.1	Analisi del primo caso	46
5.2	Ulteriori gruppi di prove	48
5.2.1	Secondo problema di Riemann cavitante	49
5.2.2	Problema di Riemann a basso Mach, con legge di stato poli- tropica	51
5.2.3	Implementazione di differenti solutori lineari	54
5.2.4	Moto in un condotto a basso numero di Mach	55
5.3	Spiegazione del problema	57
5.4	Modifica della legge del preconditionatore locale	60
6	Risultati sistema non lineare	66
6.1	Scelta iniziale del metodo di soluzione	66
6.2	Prima implementazione del sistema non lineare	68
6.3	Scelta di un nuovo metodo di soluzione di sistemi non lineari	72
6.4	Metodi di Newton-Krylov senza Jacobiano	74
6.5	Implementazione del sistema di soluzione non lineare	76
6.6	Caratteristiche del confronto	76
6.7	Simulazioni del moto in un ugello	77
6.8	Problema di Riemann con legge di stato politropica	79
6.9	Problema di Riemann con legge di stato cavitante	83
7	Risultati secondo ordine	89
7.1	Scelta delle simulazioni da eseguire	89
7.2	Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico	90
7.2.1	Primo problema: 2 onde di rarefazione	91
7.2.2	Secondo problema: 2 discontinuità	97
7.3	Gruppo II : moto supersonico in un ugello	102
7.4	Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach	110
8	Conclusioni	120
A	Andamento del numero di condizionamento	121

Elenco delle figure

2.1	Andamento tipico della legge di stato barotropica nella miscela per acqua a $T_L = 293.16$ K.	7
2.2	Andamento della velocità del suono corrispondente alla legge mostrata in figura 2.1. L'asse y è stato ridimensionato per facilità di lettura.	8
3.1	Rappresentazione schematica del problema di Riemann(3.17) nel caso in cui la 1-onda sia una rarefazione e la 3-onda uno shock.	15
5.1	Confronto dei risultati per B1, griglia GR-4-0, pressione	47
5.2	Confronto dei risultati per B1, griglia GR-4-0, velocità	48
5.3	Confronto dei risultati B3, griglia GR-3-0, pressione	49
5.4	Confronto dei risultati per B2, griglia GR-4-0, pressione	50
5.5	Confronto dei risultati per B2, griglia GR-4-0, velocità	50
5.6	Risultati B2 senza condizionatore, velocità del suono, oscillazioni	51
5.7	Confronto dei risultati B3, griglia GR-4-1, velocità	52
5.8	Confronto dei risultati B5, griglia GR-4-1, scalare passivo	53
5.9	Confronto dei risultati B7, griglia GR-4-1, pressione	53
5.10	Confronto dei risultati B8, griglia GR-4-1, densità	54
5.11	Confronto tra simulazione dimensionale e adimensionale, B10, griglia GR-0+1, densità	56
5.12	Confronto tra simulazione dimensionale e adimensionale, B10, griglia GR-0+1, velocità	57
5.13	Risultati per B11, pressione, caso non dimensionale, griglia GR-0+1, $\beta^2 = 10^{-10}$	58
5.14	Risultati per B11, pressione, caso non dimensionale, griglia GR-0+1, $\beta^2 = 10^{-8}$	58
5.15	Risultati andamento della pressione, condizionatore limitato	60
5.16	Risultati andamento della pressione, nuove condizioni al bordo	61
5.17	Risultati andamento della pressione per $M = 10^{-4}$, confronti tra vari valori di M^*	62
5.18	Risultati andamento della pressione per $M = 10^{-5}$, confronti tra vari valori di M^* e nessun condizionamento	63
5.19	Andamento delle leggi considerate per il condizionatore locale	63
5.20	Andamento delle leggi considerate per il condizionatore locale, dettaglio	64

5.21	Confronto tra vecchio preconditionatore, legge sinusoidale al sesto ordine e nessun preconditionatore, Mach 0.1	65
5.22	Confronto tra vecchio preconditionatore, legge variabile e nessun preconditionatore, Mach 0.2	65
6.1	Risultati per NL1, pressione	70
6.2	Risultati per NL1, velocità	70
6.3	Risultati per NL2, pressione	71
6.4	Risultati per NL2, velocità	72
6.5	Risultati per NL3, senza preconditionamento, densità	78
6.6	Risultati per NL3, con preconditionatore locale, pressione	78
6.7	Risultati per NL2, griglia GR-2+1, densità	80
6.8	Risultati per NL2, griglia GR-4+1, scalare passivo	81
6.9	Risultati per NL2, griglia GR-2-0, velocità	81
6.10	Risultati per NL2, griglia GR-3-0, pressione	82
6.11	Risultati per NL2, griglia GR-3-1, densità	82
6.12	Risultati per NL2, griglia GR-4-1, velocità	83
6.13	Risultati per NL2, griglia GR-2-1, densità	83
6.14	Risultati per NL4, griglia GR-2+1, pressione	85
6.15	Risultati per NL4, griglia GR-2+1, dettaglio densità	86
6.16	Risultati per NL4, griglia GR-3+1, velocità	86
6.17	Risultati per NL4, griglia GR-4+1, velocità del suono	87
6.18	Risultati per NL4, griglia GR-3-0, dettaglio densità	87
6.19	Risultati per NL4, griglia GR-4-0, velocità	88
6.20	Risultati per NL4, griglia GR-5.5-0, dettaglio pressione	88
7.1	Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+2, densità	92
7.2	Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+2, pressione	93
7.3	Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+0, scalare passivo	93
7.4	Confronto dei risultati S01, griglia GR-3+1, pressione	94
7.5	Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+1, pressione	94
7.6	Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+1, pressione	95
7.7	Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+2, velocità	95
7.8	Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+1, velocità	96
7.9	Confronto dei risultati S01, griglia GR-5-0, velocità	96
7.10	Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+2, densità	97
7.11	Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+1, densità	97
7.12	Andamento dell'errore dei risultati per S01, $\Delta t = 10^{-4}$, pressione	98
7.13	Andamento della pendenza dell'errore dei risultati per S01, $\Delta t = 10^{-4}$, pressione	100
7.14	Confronto dei risultati SO2, griglia GR-5-0, velocità	101
7.15	Confronto dei risultati SO2, griglia GR-4+1, pressione	101
7.16	Confronto dei risultati SO2, griglia GR-3+2, velocità	102
7.17	Confronto dei risultati SO2, griglia GR-2+2, densità	102
7.18	Andamento dell'errore dei risultati per SO2, $\frac{\Delta x}{\Delta t} = 10^5$, velocità	103
7.19	Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{+2}$, numero di Mach	106

7.20	Confronto dei risultati SO ₃ , $\Delta x = 10^{+2}$, densità	106
7.21	Confronto dei risultati SO ₃ , $\Delta x = 10^{+1}$, velocità	107
7.22	Confronto dei risultati SO ₃ , $\Delta x = 10^{-1}$, pressione	107
7.23	Confronto dei risultati SO ₃ , $\Delta x = 10^{-0}$, dettaglio densità in gola . .	108
7.24	Confronto dei risultati SO ₃ , $\Delta x = 10^{-0}$, dettaglio velocità all'uscita .	108
7.25	Andamento dell'errore in funzione della dimensione delle celle, densità	109
7.26	Andamento dell'errore in funzione della dimensione delle celle, velo- cità	109
7.27	Pendenza locale dell'errore in funzione della dimensione delle celle, SO ₃ , velocità	110
7.28	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-4+2, pressione	112
7.29	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-4+1, pressione	112
7.30	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-4+0, pressione	113
7.31	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-4+2, velocità	113
7.32	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-3+1, velocità	114
7.33	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-2+0, velocità	114
7.34	Confronto dei risultati SO ₄ , griglia GR-2+1, velocità	115
7.35	Confronto dell'errore SO ₄ , $\Delta t = 10^{-4}$, velocità	115
7.36	Confronto dell'errore SO ₄ , $\Delta x = 10^{+2}$, pressione	117
7.37	Confronto dell'errore SO ₄ , $\Delta x = 10^{+0}$, velocità	117
7.38	Confronto dell'errore SO ₄ , $\Delta t = 10^{-3}$, densità	118
7.39	Confronto dell'errore SO ₄ , $\Delta t = 10^{-4}$, velocità	119
7.40	Confronto dell'errore SO ₄ , $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante, densità	119

Elenco delle tabelle

5.1	Dati per il problema di Riemann cavitante	47
5.2	Griglie utilizzate per il caso B1	47
5.3	Dati per il secondo problema di Riemann cavitante	49
5.4	Casi considerati con legge di stato politropica	52
5.5	Casi per l'ugello.	56
5.6	Griglie utilizzate per i casi B9, B10 , B11	56
6.1	Problema per l'ugello.	69
6.2	Caratteristiche simulazione	69
6.3	Problemi considerati con legge di stato politropica	71
6.4	Caratteristiche simulazione problema di Riemann	71
6.5	Caso per l'ugello.	77
6.6	Tempi di calcolo necessari per il problema NL3	79
6.7	Griglie utilizzate per il problema NL2	80
6.8	Tempi di calcolo necessari per il problema NL2	84
6.9	Dati per il problema di Riemann cavitante	84
6.10	Griglie utilizzate per il problema NL4	84
6.11	Tempi di calcolo necessari per il problema NL4	85
7.1	Primo problema a numero di Mach generico	91
7.2	Griglie per SO1	91
7.3	Tempi di calcolo necessari per il problema SO1	98
7.4	Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante	99
7.5	Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante	99
7.6	Secondo problema per il primo gruppo	99
7.7	Griglie per SO2	100
7.8	Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante	103
7.9	Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante	104
7.10	Tempi di calcolo necessari per il problema SO2	104
7.11	Problema del moto supersonico in un l'ugello.	105
7.12	Griglie spaziali e massimo passo temporale per SO3	105
7.13	Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi	108

7.14 Problema di Riemann a basso numero di Mach	111
7.15 Griglie per SO4	111
7.16 Tempi di calcolo necessari per il problema SO4	116
7.17 Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δx costante	116
7.18 Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante	118
7.19 Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante	118

Capitolo 1

Introduzione

Il presente lavoro di tesi si inserisce in un'attività finalizzata allo sviluppo di un codice per la simulazione di flussi cavitanti in pompe per razzi a propellente liquido. Per descrivere il fenomeno della cavitazione si è utilizzato un modello di fluido omogeneo equivalente ed, in particolare, si è utilizzato il modello proposto da d'Agostino *et al.* in [1], che tiene conto degli effetti termici della cavitazione e dell'effetto della concentrazione dei nuclei attivi di cavitazione.

In tale contesto si ha un singolo fluido (liquido), le cui caratteristiche variano notevolmente fra le zone non cavitanti e cavitanti. In particolare, il flusso è praticamente incomprimibile nelle zone non cavitanti per poi diventare ad altissimo numero di Mach in quelle cavitanti. Questo comportamento è descritto da una legge di stato barotropica definita da un'equazione differenziale.

Per la simulazione numerica di flussi con le caratteristiche precedentemente descritte, esistono due principali alternative: l'utilizzo di un solutore per flussi incomprimibili con correzioni di comprimibilità, o di un solutore per flussi comprimibili, preconditionato per funzionare correttamente anche a bassi numeri di Mach.

È stata scelta la seconda alternativa e, in una precedente tesi di dottorato, [2], è stato sviluppato un codice numerico per la discretizzazione di flussi non viscosi barotropici e, in particolare, cavitanti. In [2], partendo da uno schema ai volumi finiti esplicito accurato al primo ordine spaziale e temporale, è stato introdotto un preconditionatore per non perdere in precisione nel caso di flussi quasi incomprimibili. La conseguente diminuzione del massimo passo di avanzamento temporale consentito avrebbe richiesto l'introduzione di uno schema implicito. A causa però del costo computazionale di uno schema del genere è stato preferito utilizzare uno schema implicito linearizzato. Questo metodo numerico ha rappresentato un miglioramento rispetto al caso esplicito ma, in presenza di flussi cavitanti, presenta comunque delle notevoli limitazioni sul passo temporale.

Scopo del presente lavoro è studiare il comportamento, tramite simulazioni monodimensionali, di una tecnica di ricostruzione MUSCL, che permetta di ottenere un'ordine di precisione due nello spazio, affiancata ad un avanzamento nel tempo implicito e linearizzato di tipo "Defect Correction". Inoltre si vuole valutare il comportamento degli schemi impliciti linearizzati tramite il confronto con uno implicito non linearizzato, allo scopo di valutare se la riduzione del passo di avanzamento temporale riscontrata nei flussi cavitanti sia causata dalla linearizzazione.

L'ambito del presente lavoro è ristretto al caso monodimensionale, anche se l'obiettivo finale è quello di avere un efficiente schema tridimensionale, in quanto è in queste condizioni che si possono valutare in modo accurato, in una prima fase, le modifiche che vengono fatte ad uno schema. Solo quelle che si rivelano valide possono poi venir utilizzate nei casi più complessi bidimensionali e tridimensionali e quindi le prove su problemi monodimensionali rimangono uno strumento indispensabile nello sviluppo di un codice, sia esso pensato per la cavitazione che per un altro fenomeno.

Il lavoro si articolerà nelle seguenti fasi: nel capitolo 2 si descriverà il fenomeno della cavitazione e i possibili approcci per la sua modellazione fisica. Successivamente nel capitolo 3 si illustrerà la formulazione matematica delle leggi fisiche che governano il fenomeno della cavitazione e si introdurranno il problema di Riemann e il moto di un flusso in un ugello, due problemi utilizzati per validare i risultati dei metodi numerici sviluppati. I fondamenti della discretizzazione numerica, insieme alle varie alternative per le funzioni di flusso numerico e per l'avanzamento temporale, saranno introdotti nel capitolo 4.

L'ultima parte del lavoro tratterà i risultati ottenuti: nel capitolo 5 si illustrerà una possibile soluzione a delle difficoltà incontrate nell'uso del preconditionatore, nel 6 verrà mostrato il confronto fra schema implicito non linearizzato e linearizzato. Infine, nel capitolo 7 si mostreranno i risultati ottenuti con il nuovo schema accurato all'ordine due nello spazio e nel tempo.

Capitolo 2

Cavitazione e leggi di stato barotropiche

La cavitazione è un complesso fenomeno fluidodinamico, che consiste nella la rapida crescita ed il conseguente collasso di cavità di vapore nel liquido. Queste cavità si originano da dei nuclei di cavitazione, quando la pressione del fluido diventa minore del valore di saturazione e rimane in questa condizione per un tempo sufficientemente lungo affinché il nucleo di cavitazione si attivi [3]. Una delle maggiori difficoltà nell'analisi di flussi cavitanti è la presenza all'interno del fluido di superfici libere la cui forma, dimensione ed evoluzione temporale non è nota *a priori* ma, in linea di principio, deve essere ottenuta come parte della soluzione del campo del flusso. I flussi cavitanti sono inoltre intrinsecamente non stazionari sia per scale microscopiche, con dimensioni caratteristiche comparabili alla dimensione della cavità, sia su scale macroscopiche. Questa natura dinamica della cavitazione, insieme alla presenza di effetti inerziali non trascurabili nel liquido e alla evaporazione/condensazione all'interfaccia liquido-vapore danno un'idea della complessità del fenomeno. Inoltre, le condizioni di equilibrio termodinamico non sono verificate e quindi, in linea di principio, è necessario utilizzare un'equazione differenziale che descriva il legame fra la pressione e la densità locali¹. Pertanto la cavitazione pone difficoltà sia sul piano della modellazione fisica che numerica.

2.1 Modelli di cavitazione

Attualmente, è possibile classificare i modelli per la descrizione di flussi cavitanti secondo le seguenti categorie:

- *Modelli a linea di corrente libera (free streamline)*, dove la regione cavitante è separata dal liquido da una interfaccia ben definita (vedi [4]);
- *modelli a fluido equivalente*, dove per tener conto della presenza delle due fasi vengono utilizzate medie di volume, temporali o d'insieme (vedi [5]);

¹In questo lavoro si considereranno soltanto flussi barotropici, in cui cioè vi è una corrispondenza biunivoca fra pressione e densità

- *modelli a simulazione diretta*, dove le equazioni di Navier-Stokes delle due fasi sono risolte simultaneamente.

A loro volta, i modelli a fluido equivalente si possono dividere in:

- *modelli omogenei*, dove le caratteristiche della cavitazione sono rappresentate in termini di un fluido a singola fase, le cui proprietà sono ottenute introducendo opportune ipotesi semplificative (vedi [6]),
- *modelli non-omogenei*, in cui le due fasi sono caratterizzate separatamente e i termini di interazione sono scelti in modo opportuno (vedi [7]),
- *modelli non-omogenei con dinamica delle cavità*, simili ai precedenti tranne per il fatto che vengono inclusi effetti evolutivi connessi al trasporto di massa, quantità di moto ed energia fra le due fasi (vedi [8]).

Nessuno di questi modelli è esente da limitazioni. I modelli a linea di corrente libera, dove un'interfaccia ben definita separa il liquido dalla regione cavitante, introducono complicazioni proibitive nelle configurazioni tridimensionali e non sono realistici nel caso di cavitazione termica tipica dei propellenti criogenici dei motori dei razzi. D'altro canto i metodi di simulazione diretta sono estremamente costosi in termini di risorse computazionali richieste e la loro accuratezza, teoricamente molto superiore agli altri modelli, è in pratica annullata dall'incertezza con cui è noto lo stato iniziale del sistema, in particolare per quanto riguarda la natura, il numero e la suscettibilità dei nuclei di cavitazione. Da quanto appena illustrato è chiaro che, soprattutto nelle applicazioni tecniche, la scelta del modello di cavitazione deve essere fatta considerando attentamente gli obiettivi che si vogliono raggiungere e i vincoli da rispettare, in modo da poter semplificare il problema includendo soltanto i fenomeni fisici essenziali.

2.2 Scelta del modello di cavitazione

Nelle applicazioni riguardanti la propulsione aerospaziale, come ad esempio le turbopompe di alimentazione del propellente dei razzi, gli effetti di lungo periodo della cavitazione sono tipicamente di scarso interesse a causa della limitata vita operativa di queste macchine. Queste applicazioni pongono invece particolare attenzione alle caratteristiche dinamiche e di pompaggio della macchina, proprietà essenzialmente legate alle caratteristiche macroscopiche del flusso. È perciò naturale pensare di utilizzare un modello a fluido equivalente, in cui si trascurano i dettagli dell'evoluzione della cavità e tutto il flusso è trattato come un fluido equivalente ottenuto con l'introduzione di opportune ipotesi semplificative. Nei liquidi cavitanti che presentano un pressione di vapore relativamente elevata, come la maggior parte dei propellenti criogenici, il trasferimento di calore all'interfaccia rappresenta l'interazione più importante fra le fasi in quanto questo fenomeno influenza anche la pressione nella cavità. Al contrario, in questi flussi lo scambio di massa e di quantità di moto giocano un ruolo di minore importanza: per questo motivo, le differenze di pressione e velocità fra le fasi possono essere trascurate e la scelta di un modello omogeneo

che tenga conto, almeno approssimativamente, degli effetti termici della cavitazione sembra essere un buon approccio alla simulazione di flussi cavitanti per applicazioni riguardanti la propulsione spaziale [2]. Fra i modelli esistenti quello proposto da d'Agostino *et al.* [1] presenta caratteristiche che lo rendono particolarmente interessante per i nostri scopi. In questo modello la miscela liquido/vapore si comporta in modo isentropico, cosicché è possibile usare l'equazione di bilancio dell'energia della miscela per valutare l'interazione di massa, dovuta alla condensazione/evaporazione, delle due fasi. In questo modo è possibile ottenere una relazione biunivoca fra la densità ρ e la pressione della miscela (cioè una legge di stato barotropica). Oltre a questo, sfruttando risultati ottenuti dallo studio di bolle sferiche isolate, il modello tiene conto anche degli effetti termici della cavitazione. Infine è possibile tener conto anche dell'effetto della concentrazione di nuclei attivi di cavitazione.

2.3 Definizione della legge di stato

Prima di descrivere il modello di cavitazione scelto introduciamo alcune definizioni generali: si indica con $D_\rho := [\rho_{min}, \rho_{sup})$ un intervallo ammissibile per la densità, una generica legge di stato barotropica si può allora definire come:

$$p = p(\rho) \quad , \quad \rho \in D_\rho \tag{2.1}$$

e deve verificare:

$$\frac{dp}{d\rho}(\rho) > 0 \quad , \quad \rho \in D_\rho \tag{2.2}$$

Grazie all'equazione 2.2 la pressione può variare nel dominio $D_p := [p_{min}, p_{sup})$, con $p_{min} = p(\rho_{min})$ e $p_{sup} = p(\rho_{sup})$. Chiaramente, perché la legge di stato abbia senso dal punto di vista fisico deve anche valere:

$$\rho_{min} > 0 \quad , \quad p_{min} > 0 \tag{2.3}$$

Infine introduciamo la definizione:

$$a := +\sqrt{\frac{dp}{d\rho}} \tag{2.4}$$

dove con a si intende, in analogia con la fluidodinamica classica, la velocità del suono del fluido descritto dalla legge di stato 2.1: l'equazione 2.2 garantisce che questa definizione sia ben posta, inoltre, nel caso del modello d'Agostino che ora introdurremo, questa analogia è maggiormente giustificata in virtù dell'approssimazione isentropica.

2.4 Descrizione della legge di stato per la cavitazione

Nel modello di cavitazione il dominio ammissibile per la densità è diviso in due sottodomini: uno superiore, dove il fluido si comporta come un liquido, e uno inferiore in cui il fenomeno della cavitazione deve essere tenuto in considerazione.

2.4.1 Modello della fase liquida

Si considera che il liquido sia a temperatura costante T_L . Indicando con p_{sat} e ρ_{Lsat} la pressione di saturazione e la densità di saturazione del liquido alla temperatura T_L e chiamando $\beta_L > 0$ il coefficiente di compressibilità isentropica del liquido alla temperatura T_L [9], la forma non dimensionale della legge di stato barotropica per il liquido è:

$$\bar{p} = \bar{p}_{liq}(\bar{\rho}) := 1 + \vartheta \ln(\bar{\rho}) \quad , \quad \bar{\rho} \in [1, \infty) \quad (2.5)$$

dove:

$$\bar{\rho} := \frac{\rho}{\rho_{Lsat}} \quad , \quad \bar{p} := \frac{p}{p_{sat}} \quad , \quad \vartheta := (\beta_L p_{sat})^{-1} \quad (2.6)$$

2.4.2 Modello di cavitazione

Il modello di cavitazione scelto introduce la seguente relazione differenziale, valida all'interno della regione cavitante, fra la densità e la pressione non dimensionali:

$$\frac{\bar{p} d\bar{\rho}}{\bar{\rho} d\bar{p}} = \bar{\rho} \{ (1 - \varepsilon) \vartheta^{-1} \bar{p} + \sigma_1 \varepsilon \bar{p}^{\sigma_2} \} + (1 - \bar{\rho}) \{ \sigma_3 \} \quad , \quad \bar{\rho} < 1 \quad (2.7)$$

dove:

- i parametri non dimensionali σ_1 , σ_2 e σ_3 sono definiti come:

$$\sigma_1 := g^* \left(\frac{p_c}{p_{sat}} \right)^\eta \quad , \quad \sigma_2 := -\eta \quad , \quad \sigma_3 := \frac{1}{\gamma_V}$$

dove p_c indica la pressione critica del fluido, γ_V rappresenta il rapporto dei calori specifici del vapore e g^* e η sono costanti che dipendono dal liquido preso in considerazione [3]. In particolare si ha che σ_2 e σ_3 dipendono solo dal particolare liquido preso in considerazione mentre σ_1 dipende anche dalla temperatura T_L ;

- il simbolo ε indica la funzione di $\bar{\rho}$:

$$\varepsilon = \varepsilon_\zeta(\bar{\rho}) := \left\{ \left\{ ((1 + \zeta)^3 - 1) \frac{1 - \bar{\rho}}{\bar{\rho}} \right\}^{-3} + 1 \right\}^{-1/3} \quad , \quad \bar{\rho} < 1 \quad (2.8)$$

che descrive la frazione di volume del liquido ($0 \leq \varepsilon \leq 1$) che è in equilibrio termico con la cavità. Il simbolo $\zeta > 0$ in (2.8) indica un parametro libero del modello che tiene conto degli effetti termici della cavitazione e della concentrazione di nuclei attivi di cavitazione [1].

La derivazione fisica del modello garantisce in particolare che il requisito (2.2) sia soddisfatto. Quindi, una volta assegnati i valori a T_L e ζ l'equazione differenziale ordinaria (2.7) può essere integrata numericamente a partire dalle condizioni iniziali:

$$\bar{p}(\bar{\rho} = 1) = 1 \quad (2.9)$$

Bisogna tener conto che, a causa di alcune approssimazioni introdotte nella derivazione del modello di cavitazione [1], l'integrazione può essere estesa solo fino ad un determinato valore $\bar{\rho}_{min}$ tale che:

$$\bar{\rho}_{min} \gg \frac{\rho_{Vsat}}{\rho_{Lsat}} \quad (2.10)$$

dove ρ_{Vsat} è la densità di saturazione del vapore alla temperatura T_L . La condizione (2.10) impedisce al modello di essere applicato per descrivere miscele liquido-vapore nel limite in cui si abbia soltanto vapore. Inoltre si può vedere che sia p che a sono continue attraverso il punto di saturazione, [2], cioè non presentano discontinuità passando dalla regione liquida a quella della miscela. A titolo di esempio in figura 2.1, è stata considerata acqua a $T_L = 293.16$ K, utilizzando due diversi valori per il parametro ζ . La velocità del suono (dimensionale) corrispondente a queste curve è mostrata in figura 2.2. Come si vede si hanno delle transizioni molto nette fra regioni praticamente incomprimibili (principalmente la regione liquida) e zone dove la velocità del suono è molto bassa e il fluido può facilmente diventare supersonico. Una transizione così rapida nella legge di stato del fluido pone quindi notevoli problemi soprattutto a causa delle forti discontinuità che si formano nel passaggio da zona cavitante a liquida. È evidente quindi che qualunque schema numerico che voglia trattare questo fenomeno deve quindi essere in grado di far fronte a queste difficoltà, fisiche e numeriche.

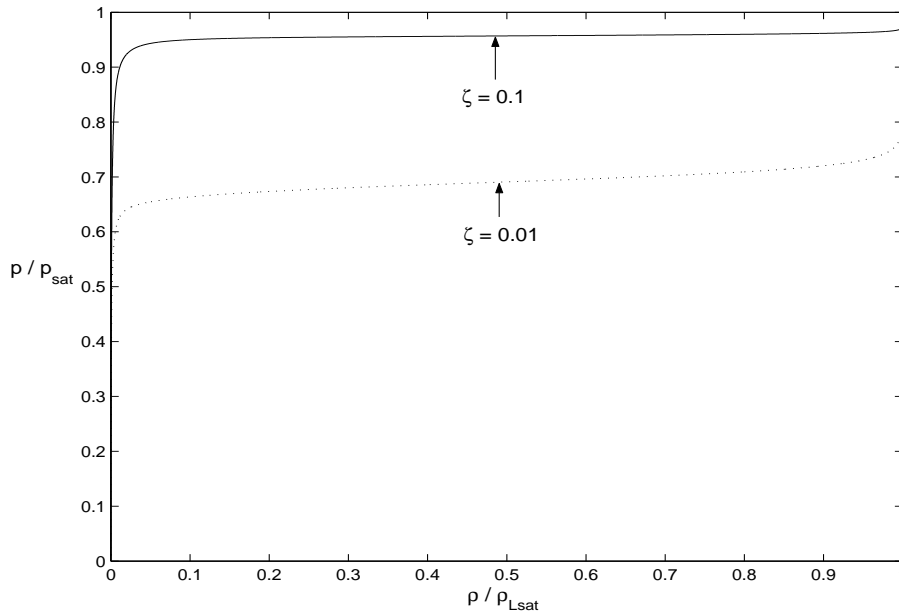


Figura 2.1: Andamento tipico della legge di stato barotropica nella miscela per acqua a $T_L = 293.16$ K.

2.5 Legge di stato politropica

La legge di stato cavitante, dal punto di vista numerico, pone dei problemi notevoli, che si aggiungono alle già non trascurabili difficoltà di dover simulare flussi a

generico numero di Mach in geometrie spesso complesse. Inoltre la legge cavitante è difficilmente trattabile in modo analitico, essendo definita tramite un'equazione differenziale integrabile solo per via numerica. È perciò ragionevole pensare, in una fase di sviluppo di uno schema numerico, di affiancare a questa legge, altre leggi di stato, più semplici e facilmente trattabili analiticamente. Si hanno così due vantaggi: il primo è la possibilità di avere a disposizione un maggior numero di soluzioni esatte a problemi particolari, utilizzabili per valutare il funzionamento del metodo numerico. Il secondo è che confrontando il comportamento del metodo su diverse leggi di stato si può stabilire se eventuali malfunzionamenti dipendono dalle caratteristiche del metodo stesso o sono dovute alla particolare legge usata, fornendo quindi un utile strumento di valutazione. La famiglia di leggi di stato che si è scelto di utilizzare è data da:

$$p = \kappa \rho^\varkappa + \gamma \quad (2.11)$$

con $\kappa > 0$, $\varkappa > 0$ e γ costanti (reali) da scegliere. Questa famiglia, per determinati valori dei suoi parametri liberi può descrivere alcune leggi classiche:

- per $\gamma = 0$ otteniamo la legge di stato politropica per i gas;
- per $\kappa = 2^{-1}$, $\varkappa = 2$ e $\gamma = 0$ si ottiene la legge di stato del problema “shallow water”, molto noto in letteratura (vedi [10]);
- per $\kappa = \varepsilon \rho_0^{-\varkappa}$ e $\gamma = -\varepsilon$, con $\varepsilon > 0$ e $\rho_0 > 0$ costanti note, si ottiene la legge di Tait classica, usata per descrivere liquidi comprimibili isentropici.

Da ora in avanti ci riferiremo a questa famiglia come ad una generica legge di stato politropica (anche se non completamente corretto per la possibile presenza di $\gamma \neq 0$), in quanto nel proseguo del lavoro si è praticamente sempre utilizzato il caso $\gamma = 0$.

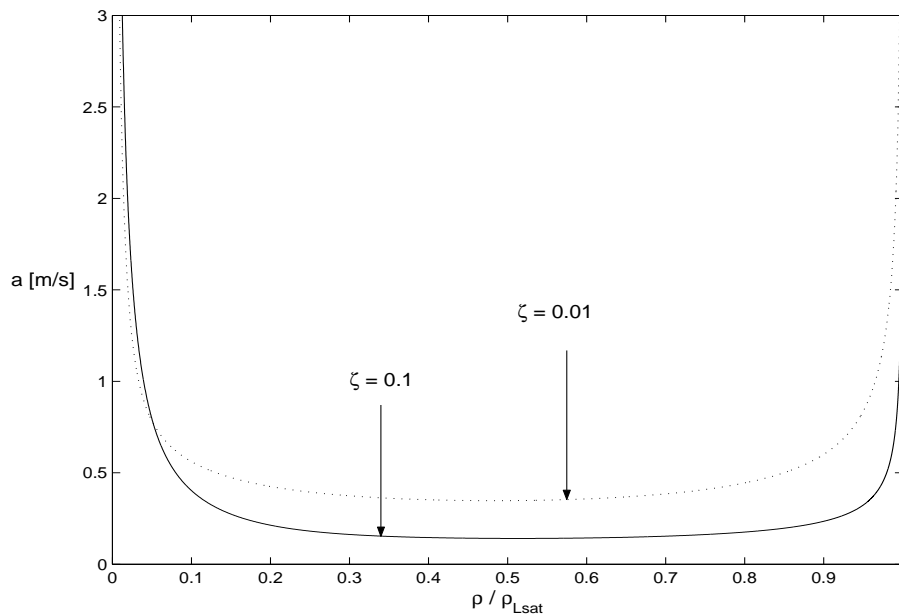


Figura 2.2: Andamento della velocità del suono corrispondente alla legge mostrata in figura 2.1. L'asse y è stato ridimensionato per facilità di lettura.

Capitolo 3

Formulazione matematica

L'ambiente matematico naturale per trattare dei problemi cavitanti illustrati nel capitolo 2 è certamente quello della fluidodinamica classica, per questo motivo in questo capitolo verranno riproposte le equazioni di bilancio che governano il moto, illustrando le ipotesi che sono alla base della forma in cui le utilizzeremo. Successivamente verranno riproposte alcune caratteristiche matematiche sulla struttura di queste equazioni e di una classe di loro soluzioni, in modo da poter descrivere il metodo di soluzione del problema di Riemann. Questo problema riveste un ruolo di notevole importanza per gli schemi numerici moderni, sia come problema test sia come base teorica per i metodi di discretizzazione dei flussi (di cui si parlerà nel capitolo 4). Alla conclusione di questo capitolo sarà poi discussa anche la soluzione di un altro problema, il flusso in un ugello convergente-divergente, che sarà utilizzato nel presente lavoro, insieme al problema di Riemann, per validare i risultati dello schema numerico.

3.1 Equazioni di bilancio

Come anticipato, come equazioni di bilancio si utilizzano le equazioni di Eulero della fluidodinamica. Queste equazioni descrivono il moto di un flusso non viscoso; tale approssimazione è giustificabile, in questo stadio dello sviluppo del codice numerico, in quanto [2]:

- I termini di tensione viscosa sono tipicamente trascurabili rispetto alle enormi azioni dinamiche delle moderne turbomacchine idrauliche utilizzate per sistemi di propulsione spaziale.
- Per queste applicazioni la dissipazione viscosa gioca un ruolo di secondo piano nell'equazione dell'energia se confrontata con il contributo dovuto alla conduzione del calore.

Inoltre verrà fatta anche l'approssimazione che non ci siano forze di volume, in quanto solitamente l'unica forza di volume presente è la forza peso, ed è trascurabile rispetto alle azioni dinamiche in gioco. Infine, poiché si è intenzionati a trattare soltanto flussi barotropici, in cui vi è quindi una corrispondenza univoca fra pressione e densità, l'equazione dell'energia risulta disaccoppiata dalle altre ed è perciò

possibile lavorare soltanto con le equazioni di bilancio di massa e quantità di moto. Seguendo l'approccio fatto in [2] definiamo $\hat{\mathbf{e}}^{(k)}$, $k = 1, 2, 3$ come k -esimo versore di un sistema di riferimento Cartesiano associato con lo spazio fisico. Inoltre indichiamo con $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ la velocità del flusso, con la k -esima componente indicata da u_k . Considerando \mathcal{V} , un arbitrario volume (regolare) nello spazio avente un contorno (regolare) \mathcal{S} su cui è definita la normale esterna $\hat{\mathbf{n}}$, si possono esprimere le equazioni (tridimensionali) del bilancio di massa e quantità di moto:

$$\partial_t \int_{\mathcal{V}} \mathbf{q} \, dV + \int_{\mathcal{S}} \left(\sum_{k=1}^3 \hat{n}_k \mathbf{f}^{(k)} \right) \, dS = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

dove \hat{n}_k rappresenta la k -esima componente di $\hat{\mathbf{n}}$, mentre i vettori \mathbf{q} e $\mathbf{f}^{(k)}$ sono definiti come:

$$\mathbf{q} := \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{f}^{(k)} := u_k \mathbf{q} + p \begin{pmatrix} 0 \\ \delta_{1k} \\ \delta_{2k} \\ \delta_{3k} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Il sistema è poi completato dalla legge di stato barotropica 2.1. Se la soluzione è sufficientemente regolare si può scrivere l'equazione 3.1 nella forma differenziale:

$$\partial_t \mathbf{q} + \sum_{k=1}^3 \partial_{x_k} \mathbf{f}^{(k)} = \mathbf{0} \quad (3.3)$$

Il sistema 3.3 è definito spesso anche come “sistema di leggi conservativo”, [11], e si dice che le equazioni sono scritte in forma “conservativa” poiché derivano direttamente dal principio di conservazione 3.1 applicando il teorema della divergenza. Il presente lavoro di tesi tratta lo sviluppo di un codice numerico nel caso monodimensionale, perciò si specializzeranno le equazioni 3.1 e 3.3 per questa applicazione. Nel caso monodimensionale (da ora in poi anche 1D) un volume di controllo arbitrario è un intervallo definito dai suoi estremi sull'asse x e si può quindi indicare con $[\alpha, \beta]$. La forma monodimensionale delle equazioni 3.1 e 3.3 è allora:

$$\partial_t \int_{\alpha}^{\beta} \mathbf{q}^{(x)} \, dx + \mathbf{f}^{(x)}|_{\beta} - \mathbf{f}^{(x)}|_{\alpha} = \mathbf{0} \quad (3.4)$$

$$\partial_t \mathbf{q}^{(x)} + \partial_x \mathbf{f}^{(x)} = \mathbf{0} \quad (3.5)$$

dove $\mathbf{q}^{(x)}$ e $\mathbf{f}^{(x)}$ sono definiti da:

$$\mathbf{q}^{(x)} := \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix} \quad \mathbf{f}^{(x)} := \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

essendo u l'unica componente di velocità.

3.1.1 Equazioni 1D aumentate

I bilanci monodimensionali 3.4 e 3.5 possono venire ampliati in modo tale da descrivere la legge di conservazione della massa di una non meglio determinata sostanza

che viene semplicemente trasportata con il flusso. A questa sostanza ci si riferisce solitamente come “scalare passivo” e per includere il suo bilancio nelle equazioni 3.4 e 3.5 bisogna modificare la 3.4 nel modo seguente:

$$W := \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho \xi \end{pmatrix} \quad F := \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u \xi \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

dove ξ indica la concentrazione dello scalare passivo e, la versione “aumentata” dei sistemi 3.4 e 3.5 data in [12] è:

$$\partial_t \int_{\alpha}^{\beta} W \, dx + F|_{\beta} - F|_{\alpha} = 0 \quad (3.8)$$

$$\partial_t W + \partial_x F = 0 \quad (3.9)$$

L’interesse per le equazioni 1D aumentate deriva dal fatto che in molti codici numerici tridimensionali la discretizzazione del problema 3.1 e 3.3 si basa su tecniche numeriche applicate a queste equazioni [2]. Questo è il motivo per cui nelle equazioni 3.8 e 3.9 si è cambiata la notazione rispetto alle formulazioni precedenti: da ora in avanti, salvo che non si dica esplicitamente il contrario, quando si parlerà delle equazioni di bilancio ci si riferirà a quelle 1D aumentate. È necessario fare un’ultima osservazione sulle equazioni 1D aumentate: poiché lo scalare passivo introduce una equazione disaccoppiata dal resto del sistema, anche il caso in cui vi siano un numero qualsiasi maggiore di uno di scalari passivi si può ricondurre al caso appena descritto.

3.2 Soluzioni integrali e iperbolicità

Esporremo adesso alcune caratteristiche della struttura del sistema di equazioni 1D aumentate. Queste nozioni saranno poi necessarie per la discussione del problema di Riemann, in sezione 3.3

3.2.1 Iperbolicità

Consideriamo la forma quasi-lineare del sistema di equazioni 3.9:

$$\partial_t W + J \cdot \partial_x W = 0 \quad (3.10)$$

dove J è lo Jacobiano della funzione $F(W)$ definita in (3.7):

$$J := \partial_W F \quad (3.11)$$

Il sistema quasi-lineare 3.10 si definisce iperbolico (in un determinato punto del campo del flusso) se J ha autovalori reali λ_j , ($j = 1, \dots, 3$) e il gruppo degli autovettori destri corrispondenti, \mathbf{r}_j , è linearmente indipendente. Inoltre il sistema si dice “strettamente iperbolico” se tutti gli autovalori sono distinti.

Si può verificare per sostituzione diretta che il sistema 3.10 è strettamente iperbolico con le coppie autovalore-autovettore date da:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_1 = u - a \quad , \quad \mathbf{r}_1 = (1, u - a, \xi)^T \\ \lambda_2 = u \quad \quad \quad , \quad \mathbf{r}_2 = (0, 0, 1)^T \\ \lambda_3 = u + a \quad , \quad \mathbf{r}_3 = (1, u + a, \xi)^T \end{array} \right. \quad (3.12)$$

3.2.2 Soluzioni integrali

In [11] un campo $\mathbf{z} \in L^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty); \mathbb{R}^m)$ è definito soluzione integrale del problema ai valori iniziali:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t \mathbf{z} + \partial_x \mathbf{f} = \mathbf{0} & \text{in } \mathbb{R} \times (0, \infty) \\ \mathbf{z} = \mathbf{z}^{(0)} & \text{on } \mathbb{R} \times \{t = 0\} \end{array} \right. \quad (3.13)$$

con $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{z})$, se è verificata l'uguaglianza:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (\mathbf{z} \cdot \partial_t \mathbf{v} + \mathbf{f} \cdot \partial_x \mathbf{v}) \, dx \, dt + \int_{-\infty}^\infty \mathbf{z}^{(0)} \cdot \mathbf{v}|_{t=0} \, dx = 0 \quad (3.14)$$

per tutte le funzioni di prova \mathbf{v} tali che \mathbf{v} è derivabile ed è a supporto compatto. Chiaramente se una funzione verifica l'equazione 3.13, integrando per parti l'equazione differenziale alle derivate parziali moltiplicata scalarmente per \mathbf{v} si ottiene la relazione 3.14. Viceversa una funzione che verifichi la 3.14 non è necessariamente soluzione di 3.13, per questo motivo le soluzioni integrali sono anche chiamate soluzioni “deboli” o “generalizzate”. Quanto appena detto è la definizione di soluzione integrale: questa definizione non implica che la soluzione generalizzata sia unica ed in generale questo non si verifica. È allora necessario introdurre altre condizioni che permettano di definire in modo univoco la soluzione integrale. Non si tratteranno in questa sede le tecniche utilizzate per risolvere questa ambiguità, per una descrizione più dettagliata si fa riferimento a [11], quello che si vuole sottolineare è che in assenza di uno di questi criteri si possono avere soluzioni integrali non corrette dal punto di vista fisico (come per esempio una onda d'urto di espansione in cui l'entropia diminuisce).

3.3 Il problema di Riemann

Introduciamo adesso il problema di Riemann: la soluzione di questo problema è alla base di molti schemi numerici moderni [12]. Per questo motivo si darà ora una descrizione del problema e della sua soluzione nel caso di una legge di stato barotropica convessa (la nozione di convessità verrà definita successivamente in questa sezione). Si entrerà nel dettaglio soltanto quanto necessario per poter definire la struttura della soluzione, per una descrizione approfondita si rimanda a [2], dove è trattata in dettaglio. Un problema di Riemann è un problema associato ad un sistema conservativo di equazioni, in cui la condizione iniziale è data da una funzione

a gradino:

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{z} + \partial_x \mathbf{f} = \mathbf{0} & \text{in } \mathbb{R} \times (0, \infty) \\ \mathbf{z} = \begin{cases} \mathbf{z}_L & \text{if } x < 0 \\ \mathbf{z}_R & \text{if } x > 0 \end{cases} & \text{on } \mathbb{R} \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (3.15)$$

con $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ e $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{z}) \in \mathbb{R}^m$.

Il problema 3.15 è dipendente anche dalla legge di stato introdotta per chiudere il sistema e quindi non è sempre nota la struttura della soluzione, ne se una soluzione esista. Nell'ipotesi che il sistema 3.15 sia strettamente iperbolico (come accade per le equazioni 1D aumentate) e che la legge di stato sia una generica legge di stato barotropica convessa, dove per convessa si intende¹:

$$\frac{d^2 p}{dv^2} > 0 \quad (3.16)$$

con $v := \rho^{-1}$, in [2] è stata trovata una procedura per calcolare la soluzione esatta al problema:

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_x F = \mathbf{0} & \text{in } \mathbb{R} \times (0, \infty) \\ W = \begin{cases} W_L & \text{if } x < 0 \\ W_R & \text{if } x > 0 \end{cases} & \text{on } \mathbb{R} \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (3.17)$$

La soluzione può essere costruita componendo alcune soluzioni particolari che derivano da tre diversi tipi di onde, dove il termine onde è utilizzato in analogia con la gasdinamica tradizionale in cui sono presenti onde d'urto e rarefazioni:

- Soluzione che deriva da una onda di rarefazione
- Soluzione che deriva da una onda d'urto
- Soluzione che deriva da discontinuità di contatto

Se indichiamo con $(\lambda_k, \mathbf{r}_k)$ ($k = 1, 2, 3$) le coppie autovalori-autovettori, reali e distinte a causa della stretta iperbolicità del sistema, abbiamo che ad ogni autovalore corrisponde una onda, l'onda k -esima o k -onda.

Onde di rarefazione

In una onda di rarefazione si hanno due generici stati sinistro e destro, \mathbf{z}_L e \mathbf{z}_R connessi da una regione in cui la soluzione varia con continuità. La soluzione nella regione di espansione è definita da:

$$\frac{x}{t} = \lambda_k(\mathbf{z}) \quad (3.18)$$

¹Si può verificare che tutte le leggi introdotte nel capitolo 2 sono convesse

mentre l'estensione di questa zona si ottiene come:

$$\lambda_k(\mathbf{z}_L) \leq \frac{x}{t} \leq \lambda_k(\mathbf{z}_R) \quad (3.19)$$

In pratica la soluzione è costante lungo le linee a $\frac{x}{t}$ costante: all'esterno della zona definita in 3.19 si ha o lo stato destro o lo stato sinistro, mentre all'interno della espansione si può calcolare la soluzione da 3.18.

Onde d'urto

In una onda d'urto la soluzione è composta da due regioni all'interno delle quali la soluzione è costante mentre all'interfaccia si ha una discontinuità di salto. Si ha quindi:

$$\mathbf{z}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{z}_L & \text{if } x < \sigma t \\ \mathbf{z}_R & \text{if } x > \sigma t \end{cases} \quad (3.20)$$

dove $\sigma = \sigma(\mathbf{z}_R, \mathbf{z}_L)$ è la velocità dell'onda d'urto. Una soluzione di questo tipo deve soddisfare ad altre due condizioni: la prima è la cosiddetta condizione di Rankine-Hugoniot che impone che il salto della funzione \mathbf{f} sia collegato al salto del vettore \mathbf{z} tramite σ cioè:

$$[\mathbf{f}] = \sigma [\mathbf{z}] \quad (3.21)$$

con $[\psi]$ che denota la differenza fra i limiti sinistro e destro di ψ quando si attraversa σ . Per le onde d'urto vi sono casi in cui la soluzione non è univocamente definita (vedi sezione 3.2.2), è perciò necessario aggiungere una ulteriore condizione, la condizione di Lax sull'entropia [13] che impone:

$$\lambda_k(\mathbf{z}_R) < \sigma(\mathbf{z}_R, \mathbf{z}_L) < \lambda_k(\mathbf{z}_L) \quad (3.22)$$

È importante sottolineare che generalmente si possono avere due soluzioni che verificano la 3.20, ma solo quella che verifica anche la 3.22 è considerata onda urto ed è una soluzione ammissibile.

Discontinuità di contatto

La soluzione in presenza di una discontinuità di contatto è data, come per una onda d'urto, da due regioni distinte separate all'interfaccia da una discontinuità, esattamente come nell'equazione 3.20. La differenza sta nel fatto che in questo caso la soluzione verifica invece la condizione:

$$\sigma = \sigma(\mathbf{z}_R, \mathbf{z}_L) = \lambda_k(\mathbf{z}_L) = \lambda_k(\mathbf{z}_R)$$

Per essere più chiari, in un presenza di una discontinuità di contatto la soluzione è composta da due regioni distinte che si muovono alla stessa velocità, senza perciò interagire. Nel caso di una onda d'urto, se vale la condizione 3.22, si ha invece che la regione sinistra tende a muoversi più rapidamente di quella destra e questo fa sì che le due regioni interagiscano formando l'onda (come nelle onde d'urto tradizionali).

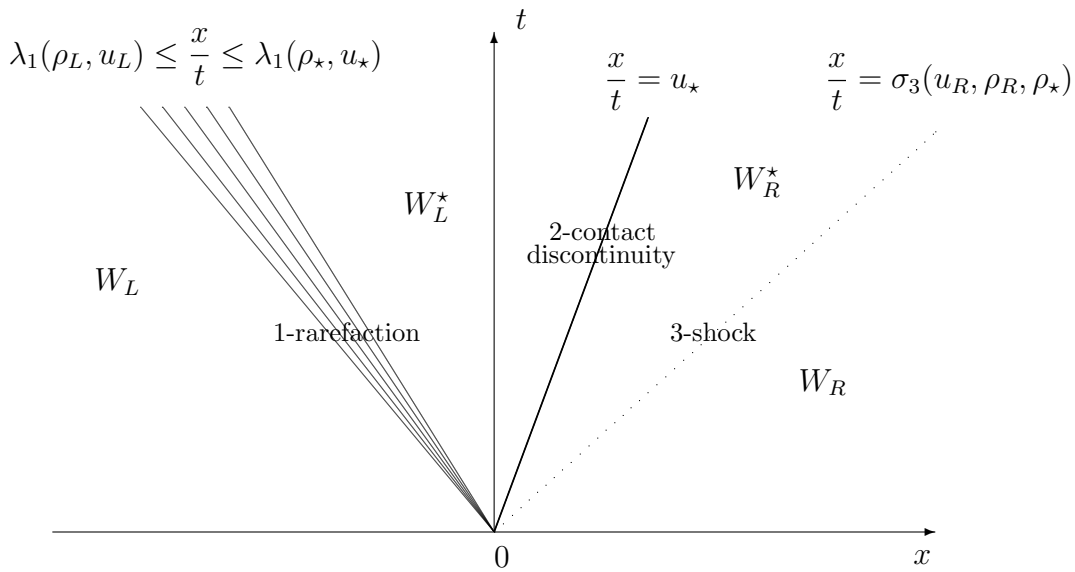


Figura 3.1: Rappresentazione schematica del problema di Riemann(3.17) nel caso in cui la 1-onda sia una rarefazione e la 3-onda uno shock.

3.3.1 Soluzione del problema di Riemann

La soluzione del problema di Riemann 3.15, nel caso di una generica legge barotropica convessa, tenendo presente quanto detto nella sezione precedente, può adesso venir descritta. La soluzione consiste di quattro diversi stati W_L , W_L^* , W_R^* e W_R , separati l'uno dall'altro da tre onde. Si ha che la 1-onda e la 3-onda possono essere o onde d'urto o rarefazioni, mentre la 2-onda è sempre una discontinuità di contatto. In figura 3.1 è mostrato un esempio della struttura della soluzione quando sono presenti le tre onde. Gli stati W_L e W_R sono dati dalle dalle condizioni iniziali del problema di Riemann mentre gli stati intermedi W_L^* e W_R^* hanno la forma:

$$W_S^* = (\rho_*, \rho_* u_*, \rho_* \xi_S)^T \quad \text{per } S \in \{L, R\}$$

Pertanto la soluzione è completamente determinata una volta che si siano determinati i valori ρ_* e u_* , e la posizione e la natura delle varie onde.

In [2], è stato proposto di determinare inizialmente ρ_* , che è la soluzione della equazione non lineare:

$$g_L(\rho) + g_R(\rho) + u_R - u_L = 0 \quad (3.23)$$

dove con g_L e g_R si intende:

$$g_S(\rho) = I_{[\rho \leq \rho_S]}(\rho) \psi(\rho_S, \rho) - I_{[\rho > \rho_S]}(\rho) \varphi(\rho_S, \rho) \quad \text{per } S \in \{L, R\}$$

e I_χ è una funzione che vale 1 se la condizione χ è verificata, 0 altrimenti. Le funzioni ψ e φ sono invece definite, per ogni coppia $\rho_1, \rho_2 > 0$, come :

$$\varphi(\rho_1, \rho_2) = - \left(\frac{(p(\rho_2) - p(\rho_1)) (\rho_2 - \rho_1)}{\rho_1 \rho_2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \psi(\rho_1, \rho_2) = \int_{\rho_1}^{\rho_2} \frac{a(r)}{r} dr$$

dove a è la velocità del suono. Poiché quindi nella equazione 3.23 tutte le grandezze sono note in funzione dell'unica incognita ρ , è possibile determinarne la soluzione ρ_* . Dopodiché, u_* si può ottenere da ρ_* utilizzando uno fra gli stati iniziali destro e sinistro e la relazione:

$$u_* = u_S - g_S(\rho_*) \quad \text{per } S \in \{L, R\} \quad (3.24)$$

Dal sistema 3.12 si vede che per il problema in esame il secondo autovalore è uguale alla velocità del flusso, perciò la conoscenza di u_* definisce completamente la 2-onda in quanto la velocità della discontinuità, σ_2 , è data semplicemente da u_* e quindi la linea di confine fra W_L^* e W_R^* si trova sulla linea $x/t = u_*$. È importante sottolineare che in generale la soluzione esatta del problema di Riemann non può essere ottenuta in una forma completamente analitica in quanto, ad eccezione di alcuni casi particolari, è necessario utilizzare una procedura numerica per risolvere l'equazione non lineare 3.23. Tuttavia è possibile dimostrare l'esistenza e l'unicità della soluzione nel caso in cui le velocità iniziali verificano la relazione [2]:

$$\sum_{S \in \{L, R\}} \varphi(\rho_{sup}, \rho_S) < u_R - u_L \leq \sum_{S \in \{L, R\}} \psi(\rho_{min}, \rho_S) \quad (3.25)$$

dove $[\rho_{min}, \rho_{sup}]$ è l'intervallo in cui la legge di stato barotropica può essere utilizzata (in generale si ha un valore $\rho_{min} > 0$ mentre ρ_{sup} può essere $+\infty$)

Rimangono da determinare la natura e la posizione della 1-onda e della 3-onda, queste sono dipendenti da $u_R - u_L$ e variano mentre $u_R - u_L$ passa dal valore minimo a quello massimo. Identificando con ρ_m e ρ_M il valore minimo e massimo della densità dei due stati iniziali, $\rho_M = \max(\rho_L, \rho_R)$ e $\rho_m = \min(\rho_L, \rho_R)$, si possono distinguere tre diversi casi:

- $u_R - u_L < \varphi(\rho_m, \rho_M)$: con questa condizione si ha $\rho_M < \rho_* < \rho_{sup}$ e sia la 1-onda che la 3-onda sono onde d'urto;
- $\varphi(\rho_m, \rho_M) \leq u_R - u_L < \psi(\rho_m, \rho_M)$: con questa condizione si ha $\rho_m < \rho_* \leq \rho_M$; c'è una onda d'urto fra ρ_* e ρ_m , e una rarefazione fra ρ_* e ρ_M ;
- $u_R - u_L \geq \psi(\rho_m, \rho_M)$: in questo caso si ha $\rho_{min} \leq \rho_* \leq \rho_m$ e sia la 1-onda che la 3-onda sono rarefazioni.

Gli estremi delle onde di rarefazione sono dati da:

- 1-rarefazione: $\lambda_1(\rho_L, u_L) \leq \frac{x}{t} \leq \lambda_1(\rho_*, u_*)$
- 3-rarefazione: $\lambda_3(\rho_*, u_*) \leq \frac{x}{t} \leq \lambda_3(\rho_R, u_R)$

con gli autovalori λ_k definiti in 3.12. Nel caso di onde d'urto, la velocità della discontinuità σ_k , che ne definisce la posizione, può essere espressa da:

$$\text{per } k \in \{1, 3\} \quad \sigma_k = u_{S_k} + (k - 2) \left(\frac{\rho_* p(\rho_{S_k}) - p(\rho_*)}{\rho_{S_k} \rho_{S_k} - \rho_*} \right)^{\frac{1}{2}}$$

dove si intende $S_1 = L$ e $S_3 = R$. La soluzione per ξ invece è determinata completamente dalla posizione della discontinuità di contatto, cioè da ρ_* e u_* . Poiché però, come già detto, l'equazione dello scalare passivo è disaccoppiata dalle altre, ξ non influenza in nessun modo la soluzione per la velocità e la densità e quindi può essere risolta a parte.

3.4 Soluzione del problema del moto in ugello

Introduciamo adesso il problema del moto in un ugello, problema che useremo nel presente lavoro, insieme al problema di Riemann, per validare lo schema numerico. Divideremo la discussione in due parti: la prima riguarda il caso generale, in cui si assume di utilizzare una generica legge di stato barotropica. Nella seconda parte specializzeremo la discussione nel caso di un legge politropica (nel senso inteso in sezione 2.11).

3.4.1 Soluzione nel caso generale

Consideriamo adesso il secondo problema che vogliamo utilizzare come problema test nelle simulazioni: il flusso in un condotto. In generale il moto di un fluido in un condotto ha caratteristiche almeno bidimensionali, se non altro per il fatto che la variazione della sezione è causa di una componente non assiale nella velocità. Tuttavia sotto alcune ipotesi queste caratteristiche multidimensionali possono essere trascurate. Non essendo intenzionati a discutere le ipotesi necessarie alla derivazione del problema partendo dalle equazioni di Navier-Stokes, ipotesi comunque reperibili in ogni buon libro di fluidodinamica, semplicemente definiamo come il problema del moto di un fluido barotropico in un condotto il problema definito dalle equazioni:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha}^{\beta} A \rho dx + \rho u A|_{\beta} - \rho u A|_{\alpha} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\alpha}^{\beta} A \rho u dx + \rho u^2 A|_{\beta} - \rho u^2 A|_{\alpha} = -p A|_{\beta} + p A|_{\alpha} + \bar{p}(A(\beta) - A(\alpha)) \\ p = p(\rho) \end{array} \right. \quad (3.26)$$

Dove α e β sono i generici estremi di un segmento sull'asse x , l'asse del moto, p , ρ e u sono funzioni incognite dello spazio e del tempo, mentre A è una funzione nota dello spazio cioè:

$$p = p(x, t) \quad \rho = \rho(x, t) \quad u = u(x, t) \quad A = A(x)$$

infine \bar{p} è il valore medio della pressione nell'intervallo $[\alpha, \beta]$. Chiaramente, nell'ottica del moto di un fluido in un ugello la funzione A è la sezione variabile del condotto. In particolare siamo interessati a soluzioni sufficientemente regolari della 3.26 che

3.4. Soluzione del problema del moto in ugello

verifichino²:

$$\begin{cases} A \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u A}{\partial x} = 0 \\ A \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 A}{\partial x} = -A \frac{\partial p}{\partial x} \\ p = p(\rho) \end{cases} \quad (3.27)$$

Prima di passare al metodo di calcolo della soluzione vale la pena notare che le equazioni 3.27 possono essere messe nella forma :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\frac{\rho u}{A} \frac{dA}{dx} \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\rho u^2}{A} \frac{dA}{dx} \\ p = p(\rho) \end{cases} \quad (3.28)$$

ciò sono una generalizzazione delle equazioni 3.5 nella forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}^{(x)} + \partial_x \mathbf{f}^{(x)} = \mathbf{s} \quad (3.29)$$

dove \mathbf{s} è dato è:

$$\mathbf{s} := -\frac{1}{A} \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \end{pmatrix} \frac{dA}{dx} \quad (3.30)$$

Perciò possiamo considerare le equazioni 3.28 come le normali equazioni monodimensionali con l'aggiunta di un termine sorgente.

Tornando al nostro problema, siamo in cerca di soluzioni stazionarie, cioè soluzioni che verifichino $\partial_t \psi = 0$, dove ψ è una qualunque grandezza. Queste soluzioni devono quindi risolvere il sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho u A}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \rho u^2 A}{\partial x} = -A \frac{\partial p}{\partial x} \\ p = p(\rho) \end{cases} \quad (3.31)$$

Definiamo:

$$\mathcal{M} = \rho u A|_{\gamma}$$

dove γ è un generico punto sull'asse x . Per la prima delle equazioni 3.31 \mathcal{M} è costante, e sostituendo la prima di queste equazioni nella seconda si ottiene:

$$\frac{\mathcal{M}}{A} \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.32)$$

²In linea di principio la discussione che segue, con le opportune modifiche è valida anche senza che vengano fatte richieste di regolarità per la soluzione

3.4. Soluzione del problema del moto in ugello

Sempre dalla prima delle 3.31 deriva che:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{u}{\rho A} \frac{\partial \rho A}{\partial x} \quad (3.33)$$

e quindi la 3.32 prende infine la forma:

$$\frac{\mathcal{M}^2}{\rho^3 A^3} \frac{\partial \rho A}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.34)$$

il termine a sinistra dell'uguale è integrabile in forma chiusa, quello a destra, a causa della legge barotropica, è una funzione della sola ρ . Si può quindi ottenere la soluzione per la densità:

$$\frac{\mathcal{M}^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2(\alpha) A^2(\alpha)} - \frac{1}{\rho^2(\beta) A^2(\beta)} \right) = \int_{\rho(\alpha)}^{\rho(\beta)} \frac{a^2}{\rho} d\rho \quad (3.35)$$

dove a indica la velocità del suono, come già definita in 2.4. Nella equazione 3.35 non si è potuto esplicitare il termine a destra dell'uguale a causa della generalità della legge barotropica presa in considerazione. In ogni caso, note ρ e u in un punto (ad esempio dalle condizioni al bordo) la 3.35 è una equazione per la sola ρ in cui tutti gli altri termini sono noti o funzione della densità. Calcolata quindi ρ da questa equazione si può ricavare u dalla costanza di \mathcal{M} cioè:

$$u(\beta) = \frac{\mathcal{M}}{\rho(\beta) A(\beta)} \quad (3.36)$$

La soluzione del problema del moto in un ugello nel caso stazionario è quindi completamente determinata. Bisogna però dire che la risoluzione della 3.35 può essere notevolmente complicato e, a seconda della legge di stato che si vuole utilizzare, può richiedere una preliminare integrazione numerica del termine a destra dell'uguale nella 3.35. Ciononostante, la soluzione così come è definita nella 3.35 è esatta e perciò è possibile utilizzare algoritmi che la calcolino con la precisione voluta.

3.4.2 Soluzione nel caso di legge politropica

Per il caso della legge politropica 2.11 è possibile integrare in forma chiusa anche il termine a sinistra dell'uguale nella 3.35 ed arrivare ad una equazione non lineare la cui soluzione dà la densità nel punto considerato. Dobbiamo distinguere due possibilità: il caso in cui \varkappa è uguale a 1 e il caso in cui è diverso.

\varkappa uguale a 1

Se \varkappa è uguale a 1 la 3.35 diventa:

$$\frac{\mathcal{M}^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2(\alpha) A^2(\alpha)} - \frac{1}{\rho^2(\beta) A^2(\beta)} \right) = \int_{\rho(\alpha)}^{\rho(\beta)} \frac{\kappa}{\rho} d\rho \quad (3.37)$$

e integrando:

$$\kappa \ln \left(\frac{\rho(\beta)}{\rho(\alpha)} \right) + \frac{\mathcal{M}^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2(\beta) A^2(\beta)} - \frac{1}{\rho^2(\alpha) A^2(\alpha)} \right) = 0 \quad (3.38)$$

Dalla soluzione di questa equazione si trova $\rho(\beta)$ e dalla 3.36 si determinata $u(\beta)$.

3.4. Soluzione del problema del moto in ugello

\varkappa diverso da 1

In questo caso si la 3.35 diventa:

$$\frac{\mathcal{M}^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2(\alpha)A^2(\alpha)} - \frac{1}{\rho^2(\beta)A^2(\beta)} \right) = \int_{\rho(\alpha)}^{\rho(\beta)} \kappa \varkappa \rho^{\varkappa-2} d\rho \quad (3.39)$$

e integrando:

$$\frac{\kappa \varkappa}{\varkappa - 1} (\rho^{\varkappa-1}(\beta) - \rho^{\varkappa-1}(\alpha)) + \frac{\mathcal{M}^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2(\beta)A^2(\beta)} - \frac{1}{\rho^2(\alpha)A^2(\alpha)} \right) = 0 \quad (3.40)$$

Infine dalla equazione 3.36 si determinata $u(\beta)$.

Capitolo 4

Descrizione del metodo numerico

In questo capitolo verrà mostrato il metodo numerico che è stato usato per il presente lavoro di tesi. La descrizione seguirà lo stesso approccio usato in [2] e si articolerà in tre parti principali:

- La prima parte tratterà di definizioni e concetti generali degli schemi numerici monodimensionali, sezione 4.1
- La seconda parte descriverà le caratteristiche dello schema numerico al primo ordine sviluppato in [2], sezione 4.2
- L'ultima parte esporrà le proprietà dello schema numerico al secondo ordine, sviluppate in questo lavoro, sezione 4.3

Lo schema numerico che verrà esposto permette di discretizzare le equazioni monodimensionali (da ora in poi 1D) aumentate descritte nel capitolo 3. In particolare verrà considerata la forma integrale delle equazioni delle leggi di conservazione in modo da poter risolvere problemi come quello di Riemann introdotto nel capitolo 3. Inoltre lo schema si basa su tecniche di cattura degli shock, in modo da poter approssimare anche soluzioni discontinue (vedi [11], [12]).

4.1 Generalità sugli schemi numerici 1D

In questa sezione saranno introdotti i concetti base rilevanti per la discretizzazione delle leggi di conservazioni mostrate nel capitolo 3. Le nozioni che saranno illustrate sono valide principalmente per gli schemi al primo ordine, successivamente, nella sezione 4.3, si evidenzieranno le modifiche necessarie per renderle valide anche per il secondo ordine. La discussione non vuole essere esaustiva e per maggiori dettagli si rimanda a libri di testo specifici (ad esempio [11] e [12]) e alla tesi di dottorato [2] in cui è stato sviluppato lo schema.

4.1.1 Discretizzazione spaziale

Per la discretizzazione del problema 3.9 è stato usato un approccio ai volumi finiti. Il dominio spaziale è diviso in N_c celle, individuate dall'indice $i \in \mathcal{I} := \{1, \dots, N_c\}$.

La cella i -esima si estende sull'intervallo $C_i := (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, con $x_{i-1/2} < x_{i+1/2}$, ed ha misura Δx_i . Su C_i la soluzione esatta $W(x, t)$ è approssimata da una funzione semidiscretizzata $W_i(t)$, che è considerata una approssimazione del valore medio di $W(x, t)$ in C_i :

$$W_i(t) \approx \frac{1}{\Delta x_i} \int_{C_i} W(x, t) dx \quad (4.1)$$

Il sistema di equazioni differenziali che definiscono W_i è ottenuto discretizzando il bilancio integrale della equazione 3.8 sul volume di controllo C_i . Grazie all'equazione 4.1, la derivata temporale 3.8 si può approssimare come:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{C_i} W(x, t) dx \approx \Delta x_i \frac{d}{dt} W_i \quad (4.2)$$

mentre il flusso fra due celle F definito in 3.7 si approssima introducendo una opportuna funzione di flusso numerica, Φ , che dipende dalla soluzione semidiscretizzata.

Flusso numerico

Definiamo π_i come l'insieme degli indici che identificano le celle adiacenti a C_i , cioè:

$$\pi_i := \{i - 1, i + 1\} \quad (4.3)$$

Solitamente si assume per Φ una dipendenza locale dai valori dei vettori di stato delle celle e quindi il flusso che attraversa il confine fra C_i e C_j verso C_j è comunemente approssimato da:

$$\Phi(W_i, W_j, s_{ij}) \quad , \quad j \in \pi_i \quad (4.4)$$

dove s_{ij} è definito tramite la funzione segno:

$$s_{ij} := \text{sign}(j - i) \quad , \quad j \in \pi_i \quad (4.5)$$

In generale il flusso numerico deve verificare alcuni requisiti basilari:

$$\Phi(W_j, W_i, s_{ji} = -s_{ij}) = -\Phi(W_i, W_j, s_{ij}) \quad (4.6)$$

$$\Phi(W_i, W_j = W_i, s_{ij}) = s_{ij} F(W_i) \quad (4.7)$$

La proprietà 4.6, di conservazione del flusso, deriva dalle funzioni di flusso continue e consente di associare il flusso numerico con i vettori di stato al bordo fra le celle, in modo tale da poter definire uno schema numerico “conservativo”, cioè uno schema che è in grado di convergere a soluzioni integrali discontinue delle equazioni. La proprietà 4.7 impone invece che lo schema sia consistente, cioè che nel limite in cui la differenza fra gli stati si annulla, la funzione di flusso numerica sia uguale a quella analitica.

L'approccio di Godunov

Nell'approccio di Godunov, proposto originariamente in [14], l'approssimazione costante a tratti W_i ($i \in \mathcal{I}$) viene usata per definire un problema di Riemann locale (del tipo mostrato nella equazione 3.17) a tutte le interfacce $x_{(i+j)/2}$ ($j \in \pi_i$). Il flusso numerico fra C_i e C_j può venir costruito sia utilizzando la soluzione esatta del problema di Riemann (approccio descritto in 4.2.1) o una sua approssimazione (descritto in 4.2.2).

Condizioni al bordo

Utilizzando le equazioni 4.2 e 4.4 si ottiene un gruppo di approssimazioni semidiscretizzate del bilancio 3.8, che viene completamente definito una volta scelta la funzione di flusso numerico:

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} W_i + \sum_{j \in \pi_i} \Phi(W_i, W_j, s_{ij}) = \mathbf{0} \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.8)$$

Per le celle di estremità, cioè per $i = 1$ and $i = N_c$ lo schema 4.8 non è definito: bisogna perciò introdurre opportune condizioni al bordo per completare la definizione della formulazione semidiscretizzata. A questo scopo, due vettori di stato fittizi W_0 e W_{N_c+1} vengono introdotti. A differenza delle altre celle, a questi vettori va assegnato un valore secondo un logica che modelli le condizioni al bordo scelte. Fatta questa operazione si utilizzare lo schema 4.8 per tutte le celle C_i ($i \in \mathcal{I}$).

4.1.2 Discretizzazione temporale

Si può ottenere uno schema completamente discretizzato (da ora in poi discretizzato) che approssimi l'equazione 3.8 considerandola una equazione differenziale ordinaria ¹. La soluzione discreta al tempo $n+1$, indica nella cella C_i con W_i^{n+1} , può quindi essere ottenuta da quella al tempo n usando molteplici tecniche di integrazione numerica. Quelle che verranno utilizzate nel nostro schema e che ora verranno descritte sono:

- Avanzamento temporale esplicito
- Avanzamento temporale implicito
- Avanzamento temporale implicito linearizzato

Avanzamento temporale esplicito

Si parla di avanzamento temporale esplicito quando, nello schema 4.8 l'unica grandezza che dipende dalla soluzione al tempo $n + 1$ è la derivata temporale e, in particolare, non la funzione di flusso numerico. Come esempio si può quindi ottenere uno schema esplicito completamente discretizzato utilizzando la tecnica di

¹Un approccio di questo tipo, che opera in modo indipendente la discretizzazione spaziale e temporale è conosciuto come “metodo delle linee”

integrazione di Eulero che approssima la derivata prima con le differenze finite fra la soluzione al tempo $n + 1$ e n , calcolando il flusso numerico al tempo n (vedi [15]):

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \sum_{j \in \pi_i} \Phi(W_i^n, W_j^n, s_{ij}) \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.9)$$

dove:

$$\Delta^n(\cdot) := (\cdot)^{n+1} - (\cdot)^n \quad (4.10)$$

Avanzamento temporale implicito

Si ha uno schema di avanzamento temporale implicito quando la funzione di flusso numerico dipende dalla soluzione al tempo $n + 1$. Analogamente al caso esplicito, si ha quindi uno schema implicito approssimando la derivata temporale dello schema 4.8 con le differenze finite all'indietro:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta t} \Delta^n W_i + \sum_{j \in \pi_i} \Phi(W_i^{n+1}, W_j^{n+1}, s_{ij}) = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.11)$$

Questo schema ha il vantaggio di permettere un avanzamento temporale con passi di dimensioni maggiori, in quanto gli schemi impliciti non sono soggetti alle limitazioni di passo temporale dovute al vincolo di stabilità di tipo CFL [16]. Come svantaggio si ha che uno schema come quello mostrato nella equazione 4.11 conduce ad un sistema non lineare se la funzione di flusso non è lineare e questo comporta che la sua soluzione richieda notevoli risorse computazionali rispetto al suo equivalente esplicito. Nell'ottica di utilizzare questo schema come banco di prova per un metodo tridimensionale bisogna tener presente che, benché per un codice monodimensionale sia possibile utilizzare questo tipo di schema, per un equivalente tridimensionale dello schema 4.11 le risorse computazionali necessarie sono difficilmente reperibili.

Avanzamento temporale implicito linearizzato

Si può ottenere un compromesso accettabile fra avanzamento temporale completamente esplicito e completamente implicito ricorrendo ad uno schema di avanzamento implicito linearizzato. Un possibile approccio è basato sull'ipotesi che esistano due matrici \mathbf{A} e \mathbf{B} , opportunamente definite, tali da fornire una linearizzazione approssimata della funzione di flusso numerico² cioè:

$$\Delta^n \Phi_{ij} \approx \mathbf{A}_{ij}^n \cdot \Delta^n W_i + \mathbf{B}_{ij}^n \cdot \Delta^n W_j \quad (4.12)$$

dove:

$$\Phi_{ij}^n := \Phi(W_i^n, W_j^n, s_{ij})$$

e:

$$\begin{cases} \mathbf{A}_{ij}^n & := \mathbf{A}(W_i^n, W_j^n, s_{ij}) \\ \mathbf{B}_{ij}^n & := \mathbf{B}(W_i^n, W_j^n, s_{ij}) \end{cases} \quad (4.13)$$

²È necessario usare questa approssimazione in quanto, in generale, la funzione di flusso non è differenziabile

4.2. Descrizione dello schema numerico per il primo ordine

Sostituendo l'equazione 4.12 in 4.11, si ottiene:

$$\left(\frac{\Delta x_i}{\Delta^n t} \mathbf{I} + \sum_{j \in \pi_i} \mathbf{A}_{ij}^n \right) \cdot \Delta^n W_i + \sum_{j \in \pi_i} \mathbf{B}_{ij}^n \cdot \Delta^n W_j = - \sum_{j \in \pi_i} \Phi_{ij}^n \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.14)$$

Questo è uno sistema lineare per le incognite $\Delta^n W_i$: una volta risolto la soluzione al tempo $n + 1$ si ottiene con $W_i^{n+1} = W_i^n + \Delta^n W_i$. Lo svantaggio dello schema 4.14 è che introduce una approssimazione ulteriore rispetto a quello implicito, il vantaggio è che richiede un quantitativo di risorse computazionali notevolmente inferiori.

4.2 Descrizione dello schema numerico per il primo ordine

Verranno ora discussi i diversi schemi numerici al primo ordine utilizzati nel presente lavoro: inizialmente sarà descritta le struttura delle differenti funzioni di flusso numerico per il primo ordine, successivamente sarà illustrata la struttura dei diversi schemi completamente discretizzati che si ottengono.

4.2.1 Descrizione della funzione di flusso di Godunov

Definiamo

$$W_{rp}(W_l, W_r, \zeta)$$

come la soluzione, in corrispondenza di $x/t = \zeta$, del problema di Riemann avente come stati iniziali “sinistro” e “destro” W_l e W_r . Il flusso numerico di Godunov all'interfaccia $x_{(i+j)/2}$, con $j \in \pi_i$ e π_i definito da (4.3), è allora dato dalla funzione di flusso analitica F in corrispondenza del vettore:

$$W_{rp}(W_{l_{ij}}, W_{r_{ij}}, 0)$$

dove:

$$L_{ij} := \min(i, j) \quad , \quad R_{ij} := \max(i, j)$$

e $\zeta = 0$ (cioè $x = 0$) è scelta in quanto nel sistema di riferimento locale è la posizione dell'interfaccia rispetto a cui si definiscono gli stati iniziali del problema. La direzione del flusso di Godunov si può definire nel seguente modo:

$$\Phi^{GOD}(W_i, W_j, s_{ij}) := s_{ij} F(W_{rp}(W_{L_{ij}}, W_{R_{ij}}, 0)) \quad , \quad j \in \pi_i \quad (4.15)$$

con s_{ij} definita in 4.5. Per il caso di una generica legge di stato barotropica convessa si può allora costruire la funzione di flusso di Godunov calcolando la soluzione $W_{rp}(\cdot, \cdot, \cdot)$ del problema di Riemann come mostrato in sezione 3.3.1

4.2.2 Funzione di flusso di Roe

La funzione di flusso di Roe, originariamente proposta in [17], è una scelta comune fra quelli che desiderano seguire utilizzare uno schema con approccio del tipo di

4.2. Descrizione dello schema numerico per il primo ordine

Godunov (sezione 4.1.1). A differenza dei solutori di Riemann approssimati, che definisco la funzione di flusso calcolando quella analitica F in corrispondenza di un opportuno vettore di stato, il metodo di Roe ottiene in modo “diretto” una approssimazione del flusso fra le celle, cioè non richiede di definire nessun vettore di stato ausiliario.

Per fare questo, il metodo introduce un problema di Riemann approssimato, in particolare lineare, per ogni interfaccia tra le celle. Il flusso numerico è allora ottenuto risolvendo in modo esatto il problema di Riemann approssimato.

Il problema di Riemann approssimato è ottenuto sostituendo all’equazione differenziale non lineare 3.17 l’equazione lineare:

$$\partial_t W + \tilde{J}_{lr} \cdot \partial_x W = 0 \quad (4.16)$$

dove \tilde{J}_{lr} è una matrice opportuna, detta “matrice di Roe” e dipende dagli stati destro e sinistro, W_l and W_r :

$$\tilde{J}_{lr} := \tilde{J}(W_l, W_r) \quad (4.17)$$

Per ogni (W_l, W_r) la matrice di Roe, \tilde{J} , deve avere le seguenti proprietà:

(RM1) $\tilde{J}(W_l, W_r)$ è diagonalizzabile con autovalori reali;

(RM2) $\lim_{W_l, W_r \rightarrow W^*} \tilde{J}(W_l, W_r) = \frac{\partial F}{\partial W}(W^*)$;

(RM3) $\tilde{J}(W_l, W_r) (W_r - W_l) = F(W_r) - F(W_l)$.

La prima proprietà ci garantisce che il problema rimanga iperbolico anche dopo che si sostituisce il problema di Riemann originale con quello linearizzato. La seconda condizione garantisce la consistenza dello schema mentre la terza garantisce che il metodo sia conservativo. Dalla conoscenza della soluzione del problema di Riemann linearizzato, consultabile in [12], è possibile esprimere il flusso da W_l a W_r come:

$$\Phi_{l,r} = \Phi(W_l, W_r) = \frac{F(W_l) + F(W_r)}{2} - \frac{1}{2} |\tilde{J}(W_l, W_r)| (W_r - W_l) \quad (4.18)$$

Dove $|\tilde{J}|$ è definito come $|\tilde{J}| = T |\Lambda| T^{-1}$, con $|\Lambda|_{ij} = |\lambda_i| \delta_{ij}$, essendo rispettivamente λ_i e T l’autovalore i -esimo e la matrice degli autovettori destri associati a \tilde{J} . È sempre possibile applicare $|\tilde{J}|$ grazie alla proprietà RM1.

Chiaramente la matrice di Roe, introdotta per la prima volta in [17] per le equazioni di Eulero applicate ad un gas perfetto, dipende specificamente dal problema iperbolico considerato. Per una generica legge di tipo barotropico è stato dimostrato in [2] che la matrice di Roe assume la forma:

$$\tilde{J}_{lr} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \\ a_{lr}^2 - u_{lr}^2 & 2 u_{lr} & 0 & \\ -u_{lr} \xi_{lr} & \xi_{lr} & u_{lr} & \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

dove, indicando con Δ^{lr} z :

$$\Delta^{lr} z := z_r - z_l \quad (4.20)$$

a_{lr} è dato da:

$$a_{lr} := \begin{cases} \left(\frac{\Delta^{lr} p}{\Delta^{lr} \rho} \right)^{\frac{1}{2}} & \text{if } \rho_r \neq \rho_l \\ a(\rho_\star) & \text{if } \rho_r = \rho_l = \rho_\star \end{cases} \quad (4.21)$$

e u_{lr} e ξ_{lr} sono le medie di Roe definite da:

$$\begin{cases} u_{lr} := \frac{\sqrt{\rho_l} u_l + \sqrt{\rho_r} u_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}} \\ \xi_{lr} := \frac{\sqrt{\rho_l} \xi_l + \sqrt{\rho_r} \xi_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}} \end{cases} \quad (4.22)$$

Per ulteriori dettagli sullo schema di Roe e sulla sua specializzazione per una generica legge di stato barotropica si rimanda a [2], [12] e alla bibliografia di questi testi.

4.2.3 Schema di Roe preconditionato per flussi a basso Mach

È noto in letteratura che gli schemi numerici concepiti per simulare flussi comprimibili, nel caso in cui debbano simulare flussi a basso numero di Mach, cioè praticamente incomprimibili, sono soggetti a problemi di accuratezza. Una prima soluzione della questione è apparsa in [18] per la legge di stato del gas perfetto, mentre per una generica legge di stato barotropica il problema è trattato in [19].

Partendo dal sistema:

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} W_i + \sum_{j \in \pi_i} \phi(W_i, W_j, s_{ij}) = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.23)$$

in questo articolo si assume che, identificato un numero di Mach caratteristico M_\star , nel limite in cui $M_\star \rightarrow 0$, si possano esprimere le variabili come una espansione in serie di potenze di M_\star cioè:

$$\begin{cases} \rho(x, t) = \rho_0(x, t) + M_\star \rho_1(x, t) + M_\star^2 \rho_2(x, t) + \dots \\ u(x, t) = u_0(x, t) + M_\star u_1(x, t) + M_\star^2 u_2(x, t) + \dots \\ p(x, t) = p_0(x, t) + M_\star p_1(x, t) + M_\star^2 p_2(x, t) + \dots \end{cases} \quad (4.24)$$

per il problema continuo e:

$$\begin{cases} \rho_i(t) = \rho_{0i}(t) + M_\star \rho_{1i}(t) + M_\star^2 \rho_{2i}(t) + \dots \\ u_i(t) = u_{0i}(t) + M_\star u_{1i}(t) + M_\star^2 u_{2i}(t) + \dots \\ p_i(t) = p_{0i}(t) + M_\star p_{1i}(t) + M_\star^2 p_{2i}(t) + \dots \end{cases} \quad (4.25)$$

4.2. Descrizione dello schema numerico per il primo ordine

per lo schema semidiscretizzato³. In [19], sostituendo, rispettivamente, le equazioni 4.24 e 4.25, nel sistema 4.23 per ottenere l'andamento della pressione nel caso continuo e nel caso semidiscretizzato si ottiene:

$$p(x, t) = \bar{p}_0(t) + M_\star \bar{p}_1(t) + M_\star^2 p_2(x, t) + \dots \quad (4.26)$$

per la soluzione analitica mentre:

$$p_i(t) = \tilde{p}_0(t) + M_\star p_{1i}(t) + \dots \quad (4.27)$$

per la soluzione dello schema numerico di Roe. Come si vede dalla equazione 4.26, le oscillazioni di pressione nel caso continuo sono proporzionali a M_\star^2 mentre nella equazione 4.27, per il caso semidiscretizzato, sono proporzionali a M_\star , da qui la necessità di correggere il funzionamento dello schema numerico per bassi numeri di Mach.

Lo schema viene allora preconditionato, modificando il flusso numerico di Roe, che diventa:

$$\Phi_{ij}^{ROE,p} = \frac{F(W_i) + F(W_j)}{2} - \frac{1}{2} (P_{ij})^{-1} \cdot \left| P_{ij} \cdot \left(s_{ij} \tilde{J}_{ij} \right) \right| (W_j - W_i) \quad (4.28)$$

dove la matrice P_{ij} è definita da:

$$P_{ij} := \mathbf{I} + (\beta^2 - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ u_{ij} & 0 & 0 \\ \xi_{ij} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

con \mathbf{I} la matrice identità e β^2 parametro libero da scegliere. Per le motivazioni che portano a modificare la funzione di flusso di Roe nel modo indicato nella equazione 4.28 e sulla natura della struttura della matrice P si rimanda a [2] e [19]. Nel contesto di questo lavoro è sufficiente tenere presente che la matrice di preconditionamento P agisce sul termine di upwind dello schema numerico, cioè influisce sulla dissipazione di energia del metodo. Ripetendo i passi fatti per il caso non preconditionato, in [19] si dimostra che l'andamento della pressione nel limite $M_\star \rightarrow 0$ per lo schema 4.28 è dato da:

$$p_i(t) = \hat{p}_0(t) + M_\star \hat{p}_1(t) + M_\star^2 p_{2i}(t) + \dots \quad (4.30)$$

cioè esibisce un andamento qualitativamente simile a quello della soluzione continua, sotto la condizione che :

$$\beta \propto M_\star \quad (4.31)$$

con un coefficiente di proporzionalità dell'ordine dell'unità. Lo schema numerico semidiscretizzato 4.28, sotto la condizione 4.31 è quindi teoricamente in grado di calcolare in modo corretto sia i flussi comprimibili che incomprimibili.

³Nello studio fatto in [19] non appare lo scalare passivo ξ in quanto l'equazione che lo definisce è disaccoppiata dalle altre e non influenza il flusso del campo, inoltre lo studio è fatto prima che sia fatta la discretizzazione temporale, indipendentemente quindi dalla tecnica di integrazione del sistema 4.23

Strategia di preconditionamento locale

La strategia di preconditionamento mostrata fino ad ora è una strategia di preconditionamento globale, si basa cioè sulla definizione di un numero di Mach caratteristico, M_* , che verrà utilizzato per definire il preconditionatore. In un flusso generico, dove vi possono essere zone ad alto e a basso numero di Mach di uguale importanza, come per esempio accade con il flusso intorno ad un profilo alare, definire un valore unico di riferimento può essere un compito di difficile soluzione. È perciò ragionevole pensare di utilizzare allora una strategia di preconditionamento locale dove al posto di β si definisce β_{ij} , cioè un parametro di preconditionamento proporzionale a M_{ij} , un numero di Mach rappresentativo per i due vettori di stato in celle adiacenti W_i e W_j . Inoltre, poichè dallo studio teorico fatto in [19] risulta che β deve essere proporzionale al numero di Mach al quadrato per bassi numeri di Mach, mentre per numeri di Mach elevati non è necessario il preconditionamento, si può definire una strategia di preconditionamento locale così fatta:

$$\beta_{ij}^2 := 1 - \exp\left(-(\bar{M}_{ij})^2\right) \quad (4.32)$$

dove il Mach caratterizzante l'interfaccia fra le celle è definito da:

$$\bar{M}_{ij} := \frac{|u_{ij}|}{a_{ij}} \quad (4.33)$$

in questo modo β_{ij}^2 ha l'andamento corretto per bassi numeri di Mach e il preconditionatore si disattiva progressivamente quando il Mach cresce.

4.2.4 Definizione degli schemi discretizzati

Adesso che si sono introdotte le funzioni di flusso numerico nelle sezioni 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3, possiamo definire completamente lo schema discretizzato al primo ordine spaziale e temporale usato nel presente lavoro di tesi. Per quanto riguarda l'avanzamento temporale esplicito si ha semplicemente:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta n t} \Delta^n W_i = -(\Phi_{i,i+1}^n - \Phi_{i-1,i}^n) \quad (4.34)$$

mentre per l'avanzamento temporale implicito:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta n t} \Delta^n W_i = -(\Phi_{i,i+1}^{n+1} - \Phi_{i-1,i}^{n+1}) \quad (4.35)$$

Nella equazione 4.34 la funzione di flusso numerico Φ può essere una qualunque fra quelle discusse nelle sezioni dalla 4.2.1 alla 4.2.3, cioè una fra il flusso di Godunov, Roe e Roe preconditionato, sia globalmente che localmente. Per quanto riguarda l'avanzamento temporale implicito, mostrato in 4.35, nel presente lavoro sono state utilizzate solo le possibili alternative fra i flussi di Roe. Poichè lo sviluppo e l'implementazione dell'avanzamento temporale implicito rappresentano una parte del presente lavoro di tesi, si rimanda al capitolo 6 per una loro più approfondita descrizione. Sia nella equazione 4.34 che nella 4.35 si può vedere come la derivata temporale sia stata approssimata tramite differenze finite, utilizzando rispettivamente il metodo di Eulero "in avanti" e "all'indietro".

4.2.5 Avanzamento temporale implicito linearizzato

Lo schema implicito 4.35 può essere riscritto come:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta t} \Delta^n W_i + \Delta^n \Phi_{i,i+1} - \Delta^n \Phi_{i-1,i} = -(\Phi_{i,i+1}^n - \Phi_{i-1,i}^n) \quad (4.36)$$

Per avere uno schema implicito linearizzato si devono allora trovare le due matrici A e B tali che sia valida la relazione 4.12. In [2] è stato dimostrato che per lo schema di Roe preconditionato, utilizzando:

$$\begin{cases} \mathbf{A}(W_i^n, W_j^n, s_{ij}) = (P_{ij}^n)^{-1} \cdot \left(P_{ij}^n \cdot \left(s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n \right) \right)^+ \\ \mathbf{B}(W_i^n, W_j^n, s_{ij}) = (P_{ij}^n)^{-1} \cdot \left(P_{ij}^n \cdot \left(s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n \right) \right)^- \end{cases} \quad (4.37)$$

dove con Z^\pm si intende

$$Z^\pm = \frac{1}{2} (Z \pm |Z|) \quad (4.38)$$

l'errore nel calcolo di $\Delta^n \Phi$ è dell'ordine di $O((\Delta t)^2, \Delta t \Delta x)$, e perciò può essere trascurato in uno schema di primo ordine. Si ottiene allora il sistema implicito linearizzato che utilizza la funzione di flusso di Roe:

$$\mathbf{L}_{(-1)}^{i,n} \cdot \Delta^n W_{i-1} + \mathbf{L}_{(0)}^{i,n} \cdot \Delta^n W_i + \mathbf{L}_{(+1)}^{i,n} \cdot \Delta^n W_{i+1} = \mathbf{I}^{i,n} \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.39)$$

dove le matrici dei coefficienti L sono definite da:

$$\begin{cases} \mathbf{L}_{(-1)}^{i,n} := - \left(P_{(i-1)i}^n \right)^{-1} \cdot \left(P_{(i-1)i}^n \cdot \tilde{J}_{(i-1)i}^n \right)^+ \\ \mathbf{L}_{(0)}^{i,n} := \frac{\Delta x_i}{\Delta t} \mathbf{I} \\ \mathbf{L}_{(+1)}^{i,n} := \left(P_{i(i+1)}^n \right)^{-1} \cdot \left(P_{i(i+1)}^n \cdot \tilde{J}_{i(i+1)}^n \right)^- \\ \mathbf{I}^{i,n} := \phi_{(i-1)i}^{ROE,p,n} - \phi_{i(i+1)}^{ROE,p,n} \end{cases} \quad (4.40)$$

Nel caso si voglia utilizzare lo schema non preconditionato, basta sostituire alla matrice P_{ij} la matrice identità.

4.2.6 Condizioni iniziali e al bordo

Per concludere la descrizione dei vari schemi numerici al primo ordine utilizzati in questo lavoro, è necessario parlare delle condizioni iniziali e al contorno associate ai due problemi test su cui si proverà il codice, il problema di Riemann e il moto in un ugello convergente-divergente (descritti nel capitolo 3).

Condizioni iniziali per il problema di Riemann

Per il problema di Riemann si partirà sempre da una condizione iniziale in cui la discontinuità è collocata a $x = 0$. Inoltre la discretizzazione spaziale, fatta con dimensione costante delle celle, pari a Δx , è tale da far sì che il confine destro della cella $C_{\bar{s}}$ ($\bar{s} \in \mathcal{I}$, $\bar{s} < N_c$) è sempre collocato a $x = 0$. Le condizioni iniziali per il problema di Riemann possono allora essere così definite:

$$W_i^0 := \begin{cases} W_l & i = 1, \dots, \bar{s} \\ W_r & i = \bar{s} + 1, \dots, N_c \end{cases} \quad (4.41)$$

Condizioni al bordo per il problema di Riemann

La scelta delle condizioni al bordo per questo problema è quella delle condizioni al bordo trasmissive cioè i vettori di stato fittizi W_0^n e $W_{N_c+1}^n$, introdotti in sezione 4.1.1 sono definiti come:

$$W_0^n = W_1^n \quad , \quad W_{N_c+1}^n = W_{N_c}^n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.42)$$

Con queste condizioni si cerca di modellare una condizione in cui la soluzione agli estremi del dominio è libera di evolvere, tipica dei problemi che nella realtà hanno un dominio non limitato.

Schema numerico e condizioni iniziali per il moto in un ugello

Prima di descrivere le condizioni iniziali e al bordo per il problema del moto in un ugello, è necessario sottolineare che, a causa della variazione di area del condotto, se si vuole studiare una soluzione monodimensionale, è necessario modificare lo schema 4.23 introducendo un ulteriore termine sorgente in grado di modellare la variazione della sezione di passaggio. Lo schema numerico semidiscretizzato diventa allora:

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} W_i + \sum_{j \in \pi_i} \Phi(W_i, W_j, s_{ij}) = \mathbf{s}_i \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.43)$$

dove:

$$\mathbf{s}_i \approx \int_{C_i} \mathbf{s} \, dx$$

ed \mathbf{s} è definito nella sezione 3.4. Si può allora definire \mathbf{s}_i come:

$$\mathbf{s}_i := \gamma_i \begin{pmatrix} \rho_i u_i \\ \rho_i u_i^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

con

$$\gamma_i := \ln \left(\frac{A(x_{i-1/2})}{A(x_{i+1/2})} \right)$$

Si può notare che il termine sorgente discreto \mathbf{s}_i abbia una componente in più del suo equivalente continuo definito in 3.4 in quanto nella definizione del problema del moto dell'ugello non abbiamo incluso lo scalare passivo. Imponendo però allo scalare

4.3. Schema numerico al secondo ordine

passivo una condizione iniziale ovunque nulla e con questa definizione del termine sorgente per lo schema numerico, si ottiene un sistema equivalente a quello con sole due componenti⁴. Una volta aggiunto il termine sorgente si può poi discretizzare lo schema 4.43 con un metodo di avanzamento temporale fra quelli già visti. Come condizione iniziali per il moto nell'ugello è utilizzato un campo uniforme:

$$W_i^0 = W_\infty \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.44)$$

Condizioni al bordo per il moto in un ugello

Le due condizioni al bordo nel caso del moto in un condotto sono differenti: all'ingresso si usa una condizione di tipo di Dirichlet, definendo W_0^n con:

$$W_0^n = W_\infty \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.45)$$

cercando di modellare una condizione in cui agli estremi del dominio si ha un valore costante e determinato, all'uscita del condotto si lascia la soluzione invece libera di evolvere, utilizzando quindi una condizione al bordo trasmissiva:

$$W_{N_c+1}^n = W_{N_c}^n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.46)$$

4.3 Schema numerico al secondo ordine

In generale, quando si ha a disposizione uno schema numerico al primo ordine, è possibile ottenere uno schema di ordine superiore, sia temporale che spaziale, senza che questa operazione richieda di ridefinire lo schema dalla base.

Per aumentare l'ordine di uno schema sono presenti in letteratura numerose tecniche, ognuna con determinati pregi e difetti. Fra tutte, le più note sono la tecnica di estrapolazione dei flussi numerici e la tecnica di ricostruzione MUSCL (dove la sigla sta per Monotone Upstream-centred Schemes for Conservation Laws, il nome del primo codice che implementava questo metodo, presentato da van Leer in [20]). In questa sezione si mostrerà la tecnica di ricostruzione MUSCL e la sua applicazione al nostro caso. Si descriveranno quindi le problematiche legate alla introduzione di questa strategia e le misure necessarie per evitarle, dopodiché si introdurrà l'estensione al secondo ordine temporale dello schema. Infine, dopo aver illustrato la tecnica del “ Defect Correction” (da ora in poi DeC) utilizzata per ridurre il costo computazionale dello schema senza ridurre l'ordine di precisione, si mostrerà lo schema numerico completo al secondo ordine.

4.3.1 Ricostruzione MUSCL

Seguiremo adesso l'approccio proposto in [21] per descrivere la tecnica di ricostruzione MUSCL: questa tecnica si basa sull'osservazione che l'accuratezza spaziale al primo ordine degli schemi basati sull'approccio di Godunov non è una caratteristica

⁴Si è scelto questo approccio in modo da poter simulare con lo stesso codice numerico due problemi che altrimenti avrebbero avuto dimensione del vettore delle variabili di stato diverse.

intrinseca dello schema, ma è causata dal considerare la soluzione come una funzione costante a tratti. Questa fase della discretizzazione, detta fase di proiezione, è mostrata nella equazione 4.1 e non è legata alla fase in cui agisce il metodo di Godunov che, ricordiamo, risolve il problema di Riemann definito all'interfaccia fra le celle. Perciò, come dimostrato e messo in pratica da van Leer in una serie di articoli, [20] [22], [23] è sufficiente agire sulla fase di proiezione per poter ottenere approssimazioni spaziali di ordine più elevato. Per fare questo, si estrapolano i valori delle variabili di stato all'interfaccia fra le celle dalla conoscenza della soluzione (media) delle celle vicine. Questa è in sintesi l'idea alla base della ricostruzione MUSCL. Intuitivamente, se considerare la soluzione costante a tratti fornisce una approssimazione al primo ordine, rappresentarla come lineare a tratti darà il secondo ordine e una rappresentazione parabolica all'interno delle celle porterà al terzo ordine. Per convincersene basta pensare che una soluzione lineare nel primo caso e una parabola nel secondo caso sono correttamente rappresentate⁵.

Consideriamo adesso una generica rappresentazione parabolica delle variabili di stato all'interno delle celle:

$$\begin{cases} W(x) = W_i + \frac{1}{\Delta x}(x - x_i)\delta_i W + \frac{3\kappa}{2\Delta x^2} \left[(x - x_i)^2 - \frac{\Delta x^2}{12} \right] \delta_i^2 W \\ x_{i-1/2} < x < x_{i+1/2} \end{cases} \quad (4.47)$$

dove W_i è definito in 4.1 e $\delta_i W$ e $\delta_i^2 W$ sono tali che $\frac{\delta_i W}{\Delta x}$ e $\frac{\delta_i^2 W}{\Delta x^2}$ sono delle approssimazioni della derivata prima e seconda della soluzione nella cella i . Nel caso $3\kappa = 1$ l'equazione 4.47 è il corretto sviluppo di Taylor in x fino al secondo ordine e questa rappresentazione parabolica è accurata fino al terzo ordine. Per altri valori del parametro κ si ha invece una rappresentazione accurata al secondo ordine con un generico termine di secondo grado. L'introduzione del termine di secondo grado nonostante la precisione al secondo ordine è causata dalla pratica comune di utilizzare nella definizione di $\delta_i W$ entrambe le celle adiacenti alla cella i -esima: i due valori W_{i-1} e W_{i+1} possono venir utilizzati in molteplici modi diversi, fornendo comunque approssimazioni precise almeno fino al secondo ordine, da qui allora la necessità di distinguere i vari approcci tramite il termine di secondo grado. Per definire la relazione 4.47 bisogna stimare quindi la derivata prima e seconda, in modo da introdurre un errore almeno di un ordine superiore alla approssimazione della soluzione che si vuol dare: approssimando la derivata prima con un errore proporzionale a Δx^2 e la derivata seconda con errore proporzionale a Δx , si può quindi mantenere una accuratezza fino al terzo ordine. Utilizzando solo i valori (medi) della soluzione nelle celle adiacenti, si ottengono le due approssimazioni:

$$\delta_i W = \frac{W_{i+1} - W_{i-1}}{2} \quad (4.48a)$$

$$\delta_i^2 W = W_{i+1} - 2W_i + W_{i-1} \quad (4.48b)$$

⁵Non si darà in questa sede una dimostrazione di quanto detto, per maggiori dettagli si rimanda a [11] e [21]

Sostituendo queste due equazioni nella 4.47 e specializzando per $x = x_i \pm \Delta x/2$, si ottengono i valori alle due interfacce della cella i :

$$W_{i+1/2}^- = U_i + \frac{1}{4}(1 - \kappa)(U_i - U_{i-1}) + \frac{1}{4}(1 + \kappa)(U_{i+1} - U_i) \quad (4.49a)$$

$$W_{i-1/2}^+ = U_i - \frac{1}{4}(1 + \kappa)(U_i - U_{i-1}) + \frac{1}{4}(1 - \kappa)(U_{i+1} - U_i) \quad (4.49b)$$

dove con gli apici $-$ e $+$ si intendono il lato sinistro (cella con indice minore) e destro (cella con indice maggiore) dell'interfaccia considerata.

Le equazioni 4.49 sono meglio conosciute nelle forma in cui al posto di κ si ha $\beta = \frac{1-\kappa}{2}$ (notiamo per inciso che si ha $3\beta = 1$ quando $3\kappa = 1$): finora si è usata κ per arrivare in modo più semplice al sistema 4.49, da adesso in poi si utilizzerà la forma con β . È interessante osservare che il primo termine dopo l'uguaglianza nelle equazioni 4.49 corrisponde a quello degli schemi al primo ordine, mentre è la dipendenza dai valori delle celle adiacenti che permette di approssimare la soluzione con un ordine maggiore: per ragioni che saranno chiare in seguito, è utile allora scrivere il sistema 4.49, facendo uso di β al posto di κ , nella forma:

$$W_{i+1/2}^- = W_i + \frac{\Psi}{2} [(1 - \beta)(W_{i+1} - W_i) + \beta(W_i - W_{i-1})] \quad (4.50a)$$

$$W_{i+1/2}^+ = W_{i+1} - \frac{\Psi}{2} [(1 - \beta)(W_{i+1} - W_i) + \beta(W_{i+2} - W_{i+1})] \quad (4.50b)$$

Quando Ψ è 0 si ottiene lo schema al primo ordine, quando è 1 si riottiene quello di ordine superiore, perciò possiamo utilizzare un'unica forma per descrivere approssimazioni di precisione differente, torneremo su questo argomento nella sezione 4.3.2. Consideriamo adesso il sistema 4.50 con $\Psi = 1$, dato un generico flusso numerico al primo ordine

$$\Phi_{i,i+1} = \Phi(W_i, W_{i+1}, s_{i,i+1})$$

il corrispondente flusso numerico accurato al secondo ordine spaziale è dato da [21]:

$$\Phi_{i,i+1}^2 = \Phi(W_{i+1/2}^-, W_{i+1/2}^+, s_{i,i+1}) \quad (4.51)$$

e il corrispondente schema numerico semidiscretizzato è

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} W_i + \sum_{j \in \pi_i} \Phi^2 \left(W_{\frac{i+j}{2}}^-, W_{\frac{i+j}{2}}^+, s_{ij} \right) = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.52)$$

dove per \mathcal{I} e π_i valgono le definizioni date nella sezione 4.1.1. È importante sottolineare che si è detto “flusso numerico accurato al secondo ordine”, indipendentemente dal fatto che l'approssimazione 4.47 possa essere accurata anche fino al terzo ordine. Questo perché la precisione con cui viene descritta la soluzione all'interno della cella non è necessariamente la stessa della funzione di flusso numerico applicata ai vettori di stato estrapolati, W^- e W^+ . In particolare per funzioni di flusso non lineari non esistono ricostruzioni MUSCL in grado di ottenere una precisione maggiore dell'ordine due [24]⁶.

⁶Questo non vuol dire che tutte le ricostruzioni MUSCL di ordine superiore al secondo siano equivalenti. Per una approfondimento maggiore su questo tema si rimanda a [25].

Con lo schema semidiscretizzato 4.52 sarebbe teoricamente già possibile passare a descrivere la discretizzazione temporale. Purtroppo è noto in letteratura che schemi di questo genere sono soggetti a oscillazioni non fisiche in presenza di discontinuità. Per questo, prima di passare ad uno schema completamente discretizzato, si illustreranno le caratteristiche che deve possedere uno schema in modo da riottenere il corretto andamento anche in presenza di discontinuità.

4.3.2 Limitatori di pendenza

Come si è detto, si può ottenere da uno schema accurato al primo ordine, uno al secondo ordine, tramite la tecnica di ricostruzione MUSCL. Questo procedimento genera però delle oscillazioni non fisiche nello schema, oscillazioni che, è stato dimostrato, non sono presenti nelle soluzioni analitiche delle equazioni di Eulero [21]. In particolare le oscillazioni si creano in presenza di discontinuità o di gradienti elevati della derivata prima della soluzione. Introdurremo adesso una proprietà che uno schema deve possedere perché non siano presenti queste oscillazioni.

TVD

L'acronimo TVD sta per "Total Variation Diminishing"; la definizione di variazione totale di una soluzione discreta u per una legge di conservazione scalare è data da:

$$TV(u) \equiv \sum_i |u_{i+1} - u_i| \quad (4.53)$$

ed uno schema numerico si dice TVD se per ogni tempo e per ogni u è valido che:

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (4.54)$$

La nozione di schema TVD, introdotta da Harten in [26]⁷ e [27] è importante in quanto collegata alla definizione di schema che preserva la monotonia. Uno schema preserva la monotonia se:

- Nel dominio computazionale non può essere creato nessun nuovo estremo
- Il valore di un minimo locale è non decrescente mentre il valore di un massimo locale è non crescente

È chiaro che in uno schema che abbia queste proprietà non si possono creare, partendo da una soluzione corretta, oscillazioni non fisiche. L'interesse per gli schemi TVD sta nel fatto che ogni schema TVD preserva la monotonia, e in questo modo la condizione 4.54 è anche una condizione sufficiente perché non si creino oscillazioni non fisiche nella soluzione. Godunov, in [14], ha però dimostrato che non esistono schemi lineari di ordine superiore al primo che siano TVD. Per questo motivo è necessario introdurre in un generico schema di secondo ordine fattori di correzione non lineari.

⁷riedizione dell'articolo originale

Limitatori di pendenza e di flusso

I fattori di correzione non lineari sono noti in letteratura come “limiters”, in quanto questi oggetti agiscono in modo da limitare o il flusso fra le celle (limitatori di flusso) o i gradienti nella ricostruzione MUSCL (limitatori di pendenza). I limitatori sono stati introdotti inizialmente in [28] e [29]⁸ successivamente sono stati sviluppati approfonditamente in [30].

Concentrando l’attenzione su di un caso scalare, poichè le oscillazioni non fisiche nel caso di ricostruzione MUSCL sono dovute al gradiente della soluzione numerica, è necessario agire su queste quantità e quindi, al posto di $u_{i+1/2}^-$, il valore ricostruito di u all’interfaccia sinistra della cella C_i , si deve usare la grandezza:

$$\tilde{u}_{i+1/2}^- = u_i + \frac{1}{2} \left[\Theta_{i+1/2}^-(1 - \beta)(u_{i+1} - u_i) + \Theta_{i-1/2}^+ \beta(u_i - u_{i-1}) \right] \quad (4.55)$$

dove si ha

$$\Theta_{i+1/2}^- = \Theta(r_{i+1/2}^-) \quad \Theta_{i-1/2}^+ = \Theta(r_{i-1/2}^+)$$

con $r_{\frac{i+j}{2}}^-$ e $r_{\frac{i+j}{2}}^+$ così definiti:

$$r_{\frac{i+j}{2}}^+ = \frac{1}{r_{\frac{i+j+2}{2}}^-} = \frac{u_{i+1} - u_{j+1}}{u_i - u_j} \quad (4.56)$$

Analogamente, al posto di $u_{i+1/2}^+$, si userà:

$$\tilde{u}_{i+1/2}^+ = u_{i+1} - \frac{1}{2} \left[\Theta_{i+1/2}^+(1 - \beta)(u_{i+1} - u_i) + \Theta_{i+3/2}^- \beta(u_{i+2} - u_{i+1}) \right] \quad (4.57)$$

con analoghe definizioni per $\Theta_{i+1/2}^+$ e $\Theta_{i+3/2}^-$. La funzione Θ è la funzione limitatrice di pendenza, chiamata così in quanto agisce sui gradienti della ricostruzione MUSCL in un modo, da definire, che dipende dal rapporto fra due gradienti in celle consecutive. Prima di procedere è necessario spendere due parole sulla struttura delle equazioni 4.55 e 4.57. Queste agiscono ridefinendo la ricostruzione MUSCL: siccome negli schemi al primo ordine non vi sono oscillazioni non fisiche e in quelli al secondo ottenuti con la tecnica MUSCL invece compaiono, deve essere questa procedura che genera le oscillazioni, è giusto quindi pensare di agire solo sui parametri che essa introduce, cioè i gradienti della soluzione fra le celle. Per quanto riguarda la dipendenza della funzione Θ soltanto da un argomento, in particolare il rapporto fra due gradienti, questa è una scelta fatta per restringere il campo di funzioni con cui cercare di ottenere uno schema TVD. Sebbene in linea di principio sia comunque possibile scegliere funzioni che dipendono anche da altre grandezze, in questa sede seguiremo l’approccio classico che si appoggia ai risultati ottenuti in [30] con la Θ dipendente solo da i rapporto fra i gradienti della soluzione.

Le equazioni 4.55 e 4.57 sono di solito usate mettendo in evidenza la struttura composta dal termine senza ricostruzione MUSCL e da una funzione limitatrice che va

⁸riedizione dell’articolo originale

a moltiplicare un gradiente cioè:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{i+1/2}^- &= u_i + \frac{1}{2} \left[(1 - \beta) \Theta \left(\frac{1}{r_{i-1/2}^+} \right) r_{i-1/2}^+ + \beta \Theta(r_{i-1/2}^+) \right] (u_i - u_{i-1}) \\ \tilde{u}_{i-1/2}^+ &= u_{i+1} - \frac{1}{2} \left[(1 - \beta) \Theta \left(\frac{1}{r_{i+3/2}^-} \right) r_{i+3/2}^- + \beta \Theta(r_{i+3/2}^-) \right] (u_{i+2} - u_{i+1})\end{aligned}\quad (4.58)$$

Definendo

$$\begin{aligned}\Psi_i^- &= \left[(1 - \beta) \Theta \left(\frac{1}{r_{i-1/2}^+} \right) r_{i-1/2}^+ + \beta \Theta(r_{i-1/2}^+) \right] \\ \Psi_{i+1}^+ &= \left[(1 - \beta) \Theta \left(\frac{1}{r_{i+3/2}^-} \right) r_{i+3/2}^- + \beta \Theta(r_{i+3/2}^-) \right]\end{aligned}$$

si ha infine che:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{i+1/2}^- &= u_i + \frac{1}{2} \Psi_i^- (u_i - u_{i-1}) \\ \tilde{u}_{i-1/2}^+ &= u_{i+1} - \frac{1}{2} \Psi_{i+1}^+ (u_{i+2} - u_{i+1})\end{aligned}\quad (4.59)$$

Confrontando questa equazione con la 4.50 si può notare l'analogia formale fra le due espressioni: in entrambi i casi abbiamo uno stato all'interfaccia delle celle che è data da un termine al primo ordine più un gradiente di ordine superiore moltiplicato per una funzione. La differenza sta nel fatto che mentre la 4.50 era una definizione formale, con la funzione che poteva assumere solo i valori 0 e 1 e serviva a raggruppare in una unica formulazione una ricostruzione al primo ordine o di ordine superiore, in questo caso abbiamo una funzione Ψ non lineare da definire in modo che lo schema sia TVD.

È importante notare che se è valida la relazione:

$$\Theta(r) = r \Theta \left(\frac{1}{r} \right) \quad (4.60)$$

si ha:

$$\Psi(r) = \Theta(r) \quad (4.61)$$

cioè il limitatore di pendenza definisce anche la funzione Ψ . Nell'ipotesi che sia valida la proprietà 4.60, in [30] si definisce le proprietà che deve avere la funzione $\Psi(r)$ affinché il flusso numerico:

$$\Phi_{i,i+1}^{2,l} = \Phi(\tilde{u}_{i+1/2}^-, \tilde{u}_{i+1/2}^+, s_{i,i+1}) \quad (4.62)$$

cioè la funzione di flusso applicata agli stati ricostruiti "limitati", sia TVD. Lo studio fatto in [30], definisce la regione di valori ammissibili per la funzione Ψ in modo che il flusso numerico 4.62 sia TVD e accurato al secondo ordine per $r > 0$ e sia TVD e accurato al primo ordine per $r \leq 0$ (cioè in presenza di un massimo o minimo locali, dove si avrebbero altrimenti oscillazioni non fisiche). Non illustreremo tutto il procedimento con cui si definisce la regione ammissibile per la funzione Ψ , per questo argomento si rimanda a [30], quello che ci interessa sottolineare è che anche

sotto questi vincoli, è possibile scegliere fra una varietà di funzioni possibili. Un elenco dettagliato dei più utilizzati limitatori esistenti si trova in [21]. Il fatto che esistano a disposizione varie soluzioni è causato dal modo di agire delle stesse: alcuni limitatori riescono a descrivere in modo accurato le discontinuità, ma tendono a squadrare la soluzione del problema anche in presenza di variazioni graduali della soluzione. Altri invece si comportano in modo opposto, smussando eccessivamente le discontinuità. In questo lavoro si è considerato il limitatore di pendenza proposto nel 1982 in [31], definito come:

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{r^2 + r}{1 + r^2} & r > 0 \\ 0 & r \leq 0 \end{cases} \quad (4.63)$$

Definita allora la funzione Ψ possiamo estendere l'applicazione del limitatore di pendenza dal caso scalare al caso di un sistema di equazioni, semplicemente applicando il limitatore singolarmente ad ogni componente del vettore delle variabili di stato, cioè si può scrivere:

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{i+1/2}^- &= W_i + \frac{1}{2} \Lambda_i^- (W_i - W_{i-1}) \\ \tilde{W}_{i-1/2}^+ &= W_{i+1} - \frac{1}{2} \Lambda_{i+1}^+ (W_{i+2} - W_{i+1}) \end{aligned} \quad (4.64)$$

dove le matrici Λ^- e Λ^+ sono diagonali e definite come:

$$\Lambda_i^- = \begin{pmatrix} \Psi_{i,1}^- & 0 & 0 \\ 0 & \Psi_{i,2}^- & 0 \\ 0 & 0 & \Psi_{i,3}^- \end{pmatrix} \quad \Lambda_{i+1}^+ = \begin{pmatrix} \Psi_{i+1,1}^+ & 0 & 0 \\ 0 & \Psi_{i+1,2}^+ & 0 \\ 0 & 0 & \Psi_{i+1,3}^+ \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

in cui con $\Psi_{i,k}^-$ si indica $\Psi_i^-(r_{i-1/2}^+)$, con $r_{i-1/2}^+$ calcolato sulla k -esima componente di W_i e, in modo analogo si può definire anche $\Psi_{i+1,k}^+$. Una volta estesa l'applicazione dei limitatori di pendenza al caso vettoriale, l'estensione dell'equazione 4.62 è banalmente:

$$\Phi_{i,i+1}^{2,l} = \Phi(\tilde{W}_{i+1/2}^-, \tilde{W}_{i+1/2}^+, s_{i,i+1}) \quad (4.66)$$

e si può quindi introdurre la classe di schemi semidiscretizzati:

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} W_i + \sum_{j \in \pi_i} \Phi^{2,l} \left(\frac{\tilde{W}_{i+j}^-}{2}, \frac{\tilde{W}_{i+j}^+}{2}, s_{ij} \right) = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.67)$$

dove la funzione di flusso numerico Φ può essere una qualunque fra quella di Godunov e Roe, preconditionato o non preconditionato, introdotte in sezione 4.2. Questa classe di schemi è TVD ed ha una accuratezza spaziale variabile, fra il primo e il secondo ordine: in particolare per soluzioni continue e senza rapide variazioni del gradiente della soluzione, si raggiunge il secondo ordine. Da ora in poi, in tutti quei casi in cui ci riferiremo indifferentemente ad un flusso numerico al secondo ordine, lo indicheremo con $\Phi^{2,*}$, mentre per il flusso senza limitatori di pendenza useremo Φ^2 e per quello con i limitatori useremo $\Phi^{2,l}$. Analogamente, per riferirci alle corrispondenti variabili di stato ricostruite useremo i simboli \hat{W}^+ e \hat{W}^- .

Implementazione numerica del limitatore di pendenza

La definizione della funzione Ψ in 4.63, nel momento che si voglia implementare questa equazione in uno schema numerico, pone il problema del calcolo di r , il rapporto fra due variazioni consecutive del valore della soluzione. Limitatamente a questo paragrafo, indichiamo r come:

$$r = \frac{\Delta_2}{\Delta_1}$$

senza determinare in modo più preciso i due gradienti. È chiaro che nel limite $\Delta_1 \rightarrow 0$ e contemporaneamente $\Delta_2 \rightarrow 0$, r non è definito in quanto si avrebbe una forma $\frac{0}{0}$. Da un punto di vista numerico questo equivale a chiedersi come definire r se Δ_1 e Δ_2 sono entrambi $\ll 1$. Il limitatore di pendenza dipende solo da r ma il fatto che i due Δ siano piccoli non dà nessuna informazione sul loro rapporto: in molte situazioni di interesse pratico può capitare di avere zone della soluzione che variano spazialmente in modo molto graduale, cioè zone in cui, teoricamente, lo schema 4.67 dovrebbe garantire il secondo ordine di precisione. È perciò necessario trovare un modo che permetta di calcolare r o le funzioni che da esse dipendono in modo corretto anche quando Δ_1 e Δ_2 sono entrambi di entità ridotta ma dello stesso ordine di grandezza. La procedura proposta nel presente lavoro di tesi si basa sull'osservazione che, entrambe le equazioni 4.59 si possono scrivere, utilizzando la notazione di questo paragrafo, come:

$$\tilde{u}^\pm = u \mp \frac{1}{2} \Psi^\pm \Delta_1 \quad (4.68)$$

Il secondo termine dopo l'uguaglianza è l'unico che dipende da r e, sfruttando la definizione di Ψ nell'equazione 4.63 può essere riscritto come (se $r > 0$):

$$\Psi \Delta_1 = \Delta_1 \Delta_2 \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{\Delta_1^2 + \Delta_2^2} \quad (4.69)$$

Con questa equazione in mente la procedura di calcolo del limitatore di pendenza si può così esporre:

1. Calcolo di $\Delta_1 \Delta_2$.
2. Poiché si ha che $r \leq 0 \iff \Delta_1 \Delta_2 \leq 0$, se $\Delta_1 \Delta_2 \leq 0$ abbiamo, esattamente $\Psi \Delta_1 = 0$ (o perché r è minore di zero o perché è $\Delta_1 \Delta_2$ ad essere zero
3. In caso $\Delta_1 \Delta_2 > 0$ ⁹, visto che si ha sempre $\Delta_1^2 + \Delta_2^2 > \Delta_1 \Delta_2$, possiamo fare la divisione fra questi due numeri
4. Infine si moltiplica il risultato per $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$

⁹Osserviamo che questo è uno zero numerico, cioè si esclude anche la possibilità che il prodotto $\Delta_1 \Delta_2$ sia inferiore al minimo numero rappresentabile

Il vantaggio di questa procedura sta in due punti chiave. Per prima cosa, fare il controllo della positività di r basandosi su $\Delta_1\Delta_2$ permette di evitare anche che $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$ sia uno zero numerico, cioè che pur essendo almeno uno fra Δ_1 e Δ_2 diverso da zero il quadrato di questi numeri sia tale da essere minore del più piccolo numero rappresentabile. In secondo luogo, in tutti quei casi in Δ_1 e Δ_2 sono circa uguali, cioè quando è ragionevole avere il secondo ordine di accuratezza, calcolare separatamente $\Delta_1\Delta_2$ e $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$ e poi dividerli porta a dividere due numeri che sono circa uno il doppio dell'altro, minimizzando l'effetto dell'errore di troncamento che sia ha quando si calcolano. Infine un ultimo vantaggio di questa procedura è che non introduce nessun parametro arbitrario (per esempio nessun ϵ per evitare divisioni per zero) per il calcolo della funzione.

4.3.3 Schemi al secondo ordine completamente discretizzati

Una volta introdotti le funzioni di flusso numerico al secondo ordine, è possibile scegliere un metodo di integrazione degli schemi semidiscretizzati per ottenere uno schema completamente discretizzato: esporremo adesso la struttura degli schemi con avanzamento temporale esplicito, implicito e implicito linearizzato nel caso del secondo ordine, dopodiché introdurremo una nuova tecnica di avanzamento temporale non presente per gli schemi al primo ordine, la tecnica del “Defect Correction”, da ora in poi DeC.

Avanzamento temporale esplicito

Per ottenere un avanzamento temporale esplicito è possibile utilizzare il metodo di Heun: in questo metodo, utilizzando sempre i flussi numerici al secondo ordine, si calcola prima la soluzione che si avrebbe con il normale metodo di Eulero al primo ordine, dopodiché si calcola il flusso che si avrebbe con questa soluzione. La soluzione al tempo $n + 1$ è ottenuta allora usando come flusso la media di quello al tempo n e di quello ottenuto usando il metodo di Eulero al primo ordine, cioè:

$$\frac{\Delta x_i}{\Delta n t} \Delta^n W_i = -\frac{1}{2} \sum_{j \in \pi_i} \left(\Phi^{2,*} \left(\hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{-,n}, \hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{+,n}, s_{ij} \right) + \Phi^{2,*} \left(\hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{-,\bar{n}}, \hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{+,\bar{n}}, s_{ij} \right) \right) \quad (4.70)$$

dove \bar{n} è un tempo fittizio e $\hat{W}^{\bar{n}}$ è dato da:

$$\hat{W}_i^{\bar{n}} = \hat{W}_i^n - \frac{\Delta n t}{\Delta x_i} \sum_{j \in \pi_i} \Phi^{2,*} \left(\hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{-,n}, \hat{W}_{\frac{i+j}{2}}^{+,n}, s_{ij} \right) \quad (4.71)$$

Come nel caso del primo ordine, è possibile usare una qualunque delle funzioni di flusso introdotte, sia Godunov, che Roe con o senza preconditionatore.

Avanzamento temporale implicito

Nel caso dell'avanzamento temporale implicito, non è conveniente usare il metodo di Heun, in quanto sarebbe necessario risolvere due sistemi non lineari per ogni

passo temporale. Si è perciò deciso di implementare un metodo BDF (“Backward Differentiation Formulas”) cioè:

$$\frac{3\Delta x_i}{2\Delta t} \Delta^n W_i = - \left(\frac{W_i^{n-1} - W_i^n}{2\Delta t} + \Phi_{i,i+1}^{2,*,n+1} - \Phi_{i-1,i}^{2,*,n+1} \right) \quad (4.72)$$

In questa equazione si è snellita la notazione omettendo le dipendenze di $\Phi^{2,*,n+1}$ dalle variabili di stato, si è introdotto l’apice $n + 1$ per specificare il tempo a cui i flussi vanno valutati. Analogamente al primo ordine, con questo avanzamento temporale si è deciso di non utilizzare la funzione di flusso di Godunov.

Avanzamento temporale implicito linearizzato

Nel caso dell’avanzamento temporale implicito linearizzato, in analogia a quanto fatto nel caso al primo ordine, vale l’approssimazione:

$$\begin{aligned} \Delta^n \Phi_{i,i+1}^2 \simeq & (P_{i,i+1}^{2,*,n})^{-1} \cdot \left(P_{i,i+1}^{2,*,n} \cdot \tilde{J}_{i,i+1}^{2,*,n} \right)^+ \Delta^n \hat{W}_{i+1/2}^- \\ & + (P_{i,i+1}^{2,*,n})^{-1} \cdot \left(P_{i,i+1}^{2,*,n} \cdot \tilde{J}_{i,i+1}^{2,*,n} \right)^- \Delta^n \hat{W}_{i+1/2}^+ \end{aligned} \quad (4.73)$$

in cui con $P^{2,*,n}$ e $\tilde{J}^{2,*,n}$ si intendono la matrice di preconditionamento e la matrice di Roe applicate agli stati ricostruiti al tempo n . È opportuno adesso trattare in modo separato il caso con limitatori di pendenza presenti o non attivi. Senza i limitatori di pendenza, mettendo in forma esplicita W^+ e W^- , si ottiene lo schema:

$$\tilde{B}_{-2}^{i,n} \Delta^n W_{i-2} + \tilde{B}_{-1}^{i,n} \Delta^n W_{i-1} + \tilde{B}_0^{i,n} \Delta^n W_i + \tilde{B}_1^{i,n} \Delta^n W_{i+1} + \tilde{B}_2^{i,n} \Delta^n W_{i+2} = b_i^n \quad (4.74)$$

dove le matrici dei coefficienti $\tilde{B}_k^{i,n}$, in cui il passo di discretizzazione è mantenuto costante, sono definite da:

$$\left\{ \begin{aligned} \tilde{B}_{-2}^{i,n} &= \frac{\beta}{2} \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \\ \tilde{B}_2^{i,n} &= -\frac{\beta}{2} \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \\ \tilde{B}_{-1}^{i,n} &= -\frac{\beta}{2} \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} + \frac{\beta-1}{2} \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} - \left(\beta + \frac{1}{2} \right) \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \\ \tilde{B}_1^{i,n} &= \frac{\beta}{2} \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} + \frac{1-\beta}{2} \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} + \left(\beta + \frac{1}{2} \right) \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \\ \tilde{B}_0^{i,n} &= \frac{3}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{1-\beta}{2} \left(\tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} - \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \right) + \left(\beta + \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} - \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \right) \\ b_i^n &= - \left(\frac{W_i^{n-1} - W_i^n}{2\Delta t} + \Phi_{i,i+1}^{2,n} - \Phi_{i-1,i}^{2,n} \right) \end{aligned} \right. \quad (4.75)$$

4.3. Schema numerico al secondo ordine

e la matrice $A^{\pm,n}$ indica la matrice di Roe applicata ai flussi ricostruiti, al tempo n , preconditionata cioè $(P^{2,n})^{-1} \cdot (P^{2,n} \cdot \tilde{J}^{2,n})^{\pm}$, (nel caso non si voglia il preconditionatore basta sostituire la matrice $P^{2,n}$ con l'identità). Dalla definizione dei coefficienti in 4.75 si può vedere come adesso il sistema sia diventato pentadiagonali a blocchi, cioè meno sparso ed inoltre di espressione più complessa, rispetto al caso al primo ordine, che come mostrato in 4.39 era tridiagonale a blocchi.

Nel caso invece si vogliono utilizzare i limitatori di pendenza, osservando l'equazione 4.73 si può notare che è necessario eliminare una ulteriore non linearità. Infatti i coefficienti che definiscono \tilde{W}^{\pm} non sono più costanti ed è necessario perciò effettuare una linearizzazione: si è scelto perciò di congelare i valori dei limitatori di pendenza al tempo t^n ottenendo nuovamente un sistema lineare. Si ottiene allora lo schema implicito linearizzato con limitatori di pendenza:

$$\tilde{C}_{-2}^{i,n} \Delta^n W_{i-2} + \tilde{C}_{-1}^{i,n} \Delta^n W_{i-1} + \tilde{C}_0^{i,n} \Delta^n W_i + \tilde{C}_1^{i,n} \Delta^n W_{i+1} + \tilde{C}_2^{i,n} \Delta^n W_{i+2} = c_i^n \quad (4.76)$$

dove le matrici dei coefficienti $\tilde{C}_k^{i,n}$ sono definite da:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{C}_{-2}^{i,n} = \frac{1}{2} \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \Lambda_{i-1}^{-,n} \\ \tilde{C}_2^{i,n} = -\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \Lambda_{i+1}^{+,n} \\ \tilde{C}_{-1}^{i,n} = -\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} \Lambda_i^{-,n} - \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \Lambda_{i-1}^{-,n} \right) \\ \tilde{C}_1^{i,n} = \frac{1}{2} \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \Lambda_{i+1}^{+,n} + \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \Lambda_{i+1}^{+,n} \right) \\ \tilde{C}_0^{i,n} = \frac{3}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} + \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \Lambda_i^{-,n} \right) - \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \Lambda_i^{+,n} \right) \\ c_i^n = - \left(\frac{W_i^{n-1} - W_i^n}{2\Delta t} + \Phi_{i,i+1}^{2,l,n} - \Phi_{i-1,i}^{2,l,n} \right) \end{array} \right. \quad (4.77)$$

e si è indicato con \mathbf{I} la matrice identità e con A^{\pm} la matrice di Roe applicata ai flussi ricostruiti con limitatore di pendenza attivo, al tempo n e preconditionata cioè $(P^{2,l,n})^{-1} \cdot (P^{2,l,n} \cdot \tilde{J}^{2,l,n})^{\pm}$, (nel caso non si voglia il preconditionatore basta sostituire la matrice $P^{2,l,n}$ con l'identità).

L'apparente maggiore semplicità della equazione 4.77 rispetto a 4.75 non deve trarre in inganno, in quanto è data solo dalla notazione: i coefficienti che compaiono in 4.75 sono dati da prodotti fra uno scalare costante ad ogni istante di tempo e una matrice, invece in 4.75 compaiono prodotti fra matrici, ed entrambe variano da istante a istante. Di notevole importanza è anche il fatto che i coefficienti $\tilde{C}_k^{i,n}$ del sistema 4.76, nel caso in cui sia valida la relazione 4.60, non sono definiti in modo

univoco. Nel nostro caso infatti si è preferito usare i coefficienti $\tilde{C}_k^{i,n}$ definiti come:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{C}_{-2}^{i,n} = \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \frac{\beta}{2} \Lambda_{i-3/2}^{+,n} \\ \tilde{C}_2^{i,n} = -\tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \frac{\beta}{2} \Lambda_{i+3/2}^{-,n} \\ \tilde{C}_{-1}^{i,n} = -\tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} \frac{\beta}{2} \Lambda_{i-1/2}^{+,n} - \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \frac{1-\beta}{2} \Lambda_{i-1/2}^{+,n} \\ \quad - \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \left(\mathbf{I} + \frac{\beta-1}{2} \Lambda_{i-1/2}^{-,n} + \frac{\beta}{2} \Lambda_{i-3/2}^{+,n} \right) \\ \tilde{C}_1^{i,n} = \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \frac{\beta}{2} \Lambda_{i+1/2}^{-,n} + \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} \frac{1-\beta}{2} \Lambda_{i+1/2}^{-,n} \\ \quad \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \left(\mathbf{I} + \frac{\beta-1}{2} \Lambda_{i+1/2}^{+,n} + \frac{\beta}{2} \Lambda_{i+3/2}^{-,n} \right) \\ \tilde{C}_0^{i,n} = \frac{3}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} - \tilde{A}_{i-1,i}^{+,n} \frac{1-\beta}{2} \Lambda_{i-1/2}^{-,n} + \tilde{A}_{i,i+1}^{-,n} \frac{1-\beta}{2} \Lambda_{i+1/2}^{+,n} \\ \quad \tilde{A}_{i,i+1}^{+,n} \left(\mathbf{I} + \frac{\beta-1}{2} \Lambda_{i+1/2}^{-,n} + \frac{\beta}{2} \Lambda_{i-1/2}^{+,n} \right) \\ \quad - \tilde{A}_{i-1,i}^{-,n} \left(\mathbf{I} + \frac{\beta-1}{2} \Lambda_{i-1/2}^{+,n} + \frac{\beta}{2} \Lambda_{i+1/2}^{-,n} \right) \\ c_i^n = - \left(\frac{W_i^{n-1} - W_i^n}{2\Delta t} + \Phi_{i,i+1}^{2,l,n} - \Phi_{i-1,i}^{2,l,n} \right) \end{array} \right. \quad (4.78)$$

con il solito significato per la matrice A^\pm . Questa forma, anche soltanto visivamente, è notevolmente più complicata della precedente, ma ha il vantaggio di trattare nello stesso modo i termini che compaiono nella ricostruzione MUSCL. Inoltre è l'unica possibile nel caso non valga la proprietà 4.60.

4.3.4 Tecnica DeC

Come abbiamo visto, aumentare l'ordine dal primo al secondo ordine, fa sì che il sistema passi da essere tridiagonale a blocchi a essere pentadiagonale a blocchi. In uno schema bidimensionale o tridimensionale l'aumento sarebbe anche maggiore: invertire matrici che sono sempre meno sparse, cioè con più elementi diversi da zero, è computazionalmente costoso, oltre ad aumentare la possibilità che si presentino errori di troncamento. Una tecnica che permette di mantenere l'accuratezza al secondo ordine ma richiede l'inversione soltanto di una matrice tridiagonale a blocchi (cioè sostanzialmente del primo ordine) è la tecnica del "Defect Correction" [32]. In forma generale, la tecnica DeC parte da uno schema implicito accurato all'ordine p

4.3. Schema numerico al secondo ordine

spazialmente e q temporalmente, in cui la derivata temporale sia approssimata da un metodo BDF, cioè parte dal sistema non lineare:

$$\mathcal{L}_p(W^{n+1}) = 0 \quad \text{con } \mathcal{L}_p(\mathcal{W}) = \frac{1}{\Delta^{n_t} t} \left(a_{q,0}^n \mathcal{W} - \sum_{i=1}^q a_{q,i}^n W^{n+1-i} \right) + \Phi^{(p)}(\mathcal{W}) \quad (4.79)$$

La tecnica DeC agisce nella fase di linearizzazione dello schema implicito: invece di cercare una approssimazione del tipo:

$$\Phi^{(p)}(W^{n+1}) \simeq \Phi^{(p)}(W_h^n) + M^{(p)} \Delta^n W \quad (4.80)$$

dove $M^{(p)}$ è una matrice che permette di approssimare la variazione temporale di un flusso di ordine p (confronta con l'equazione 4.73), la tecnica DeC considera in modo iterativo problemi lineari più semplici, con un algoritmo di tipo a punto fisso applicato a schemi di ordine m , $1 \leq m < p$:

$$\left[\begin{array}{l} \mathcal{W}^0 \text{ dato} \\ \text{per } s = 0, s_M - 1 \quad \mathcal{L}_m(\mathcal{W}^{s+1}) = \mathcal{L}_m(\mathcal{W}^s) - \mathcal{L}_p(\mathcal{W}^s) \\ \mathcal{W}^{n+1} = \mathcal{W}^{s_M} \end{array} \right.$$

L'approssimazione 4.80 è allora applicata allo schema di ordine m cioè:

$$\Phi^{(m)}(\mathcal{W}^{s+1}) \simeq \Phi^{(m)}(\mathcal{W}^s) + M^{(m)}(\mathcal{W}^s) \left(\mathcal{W}^{s+1} - \mathcal{W}^s \right) \quad (4.81)$$

in questo modo si ottiene un sistema lineare che ad ogni iterazione s si può esprimere come:

$$\left[\frac{a_{q,0}^n}{\Delta^{n_t} t} I + M^{(m)}(\mathcal{W}^s) \right] \Delta^s \mathcal{W} = - \left[\frac{1}{\Delta^{n_t} t} \left(a_{q,0}^n \mathcal{W}^s - \sum_{i=1}^q a_{q,i}^n W^{n+1-i} \right) + \Psi_h^{(p)}(\mathcal{W}^s) \right]$$

Applicando questa tecnica al nostro caso particolare si ottiene che la s -esima iterazione DeC è data da:

$$\left(\frac{3}{2\Delta t} I + M^{(1)}(\mathcal{W}^s) \right) \Delta^s \mathcal{W} = - \left(\frac{3\mathcal{W}^s - 4W^n + W^{n-1}}{2\Delta t} + \Phi^{(2,*)}(\mathcal{W}^s) \right) \quad (4.82)$$

Idealmente, per arrivare a convergenza, bisognerebbe fare un numero infinito di iterazioni: questo non è chiaramente possibile e non giustificherebbe in nessun modo l'introduzione di questa tecnica per risparmiare tempo di calcolo. Tuttavia, in realtà, è necessario completare solo un ristretto numero di equazioni DeC per raggiungere un'ordine di precisione più elevato: in [18] è stato dimostrato che con $s_M \geq p/(m+1)$ si raggiunge un ordine di precisione pari a p se vi è un legame lineare fra discretizzazione spaziale e passo temporale e se si impone $\mathcal{W}^0 = W^n$. Il vantaggio di questa tecnica è chiaro se si pensa che invertire una matrice pentadiagonale richiede un tempo maggiore del doppio di quello necessario a invertire una matrice tridiagonale,

perciò, anche facendo più di una iterazione DeC, è possibile risparmiare tempo senza perdere in accuratezza. Applicando allora la tecnica DeC al nostro caso si ha:

$$\tilde{\mathcal{B}}_{-1}^{i,s} \Delta^s \mathcal{W}_{i-1} + \tilde{\mathcal{B}}_0^{i,s} \Delta^s \mathcal{W}_i + \tilde{\mathcal{B}}_1^{i,s} \Delta^s \mathcal{W}_{i+1} = \tilde{\mathcal{S}}_i^s \quad (4.83)$$

dove le matrici dei coefficienti $\tilde{\mathcal{B}}_k^{i,s}$ sono date da:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{B}}_{-1}^{i,s} = -A^+(\mathcal{W}_{i-1}^s, \mathcal{W}_i^s), \quad \tilde{\mathcal{B}}_1^{i,s} = A^-(\mathcal{W}_i^s, \mathcal{W}_{i+1}^s) \\ \tilde{\mathcal{B}}_0^{i,s} = 3 \frac{\Delta x}{\Delta t} I + A^+(\mathcal{W}_i^s, \mathcal{W}_{i+1}^s) - A^-(\mathcal{W}_{i-1}^s, \mathcal{W}_i^s) \\ \tilde{\mathcal{S}}_i^s = - \left(\frac{3\mathcal{W}_i^s - 4\mathcal{W}_i^n + \mathcal{W}_i^{n-1}}{2\Delta t} + \Phi_{i,i+1}^{2,*,s}(\hat{\mathcal{W}}_{i+1/2}^{-,s}, \hat{\mathcal{W}}_{i+1/2}^{+,s}) \right. \\ \left. - \Phi_{i-1,i}^{2,*,s}(\hat{\mathcal{W}}_{i-1/2}^{-,s}, \hat{\mathcal{W}}_{i-1/2}^{+,s}) \right) \end{array} \right. \quad (4.84)$$

dove A^\pm è definita come $(P)^{-1} \cdot (P \cdot \tilde{J})^\pm$ cioè è a matrice di Roe preconditionata (o non preconditionata) utilizzata *senza* i valori ricostruiti delle celle ma con i valori delle celle considerati come costanti a tratti, cioè come nel caso del primo ordine.

4.3.5 Condizioni al bordo per lo schema al secondo ordine

Portando lo schema numerico dal primo al secondo ordine di accuratezza, è necessario modificare le condizioni al bordo: infatti, in questo caso, bisogna introdurre non soltanto i due vettori ausiliari W_0 e W_{N_c+1} ma, affinché lo schema semidiscretizzato sia definito anche per la prima e l'ultima cella, è necessario introdurre altri due vettori di stato ausiliari indicati con W_{-1} e W_{N_c+2} . Per quanto riguarda le condizioni iniziali, invece, non è necessario fare nessuna modifica a quanto detto per il primo ordine.

Condizioni al bordo per il problema di Riemann

Volendo mantenere condizioni al bordo trasmissive per il problema di Riemann, è necessario imporre le condizioni:

$$W_{-1}^n = W_0^n = W_1^n \quad , \quad W_{N_c+2}^n = W_{N_c+1}^n = W_{N_c}^n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.85)$$

Condizioni al bordo per il moto in un ugello

In modo analogo al problema di Riemann, le condizioni al bordo per il moto in un ugello diventato:

$$W_{-1}^n = W_0^n = W_\infty^n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.86)$$

all'ingresso del condotto (condizione di Dirichlet) e all'uscita (trasmissiva):

$$W_{N_c+2}^n = W_{N_c+1}^n = W_{N_c}^n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.87)$$

Capitolo 5

Lavoro svolto sul preconditionatore

Nello svolgimento del presente lavoro di tesi si sono riscontrate difficoltà nella simulazione di problemi di Riemann cavitanti qualora il preconditionatore, globale o locale fosse attivo. Dato che il corretto funzionamento dello stesso è necessario in molte situazioni di interesse pratico, come per esempio in prossimità del bordo d'attacco di un profilo alare, è stato necessario indagare in modo approfondito sulle cause del problema. Si sono perciò fatte ulteriori simulazioni spaziando dal problema di Riemann con legge di stato cavitante fino al moto in un condotto con legge di stato politropica. I dati così ottenuti hanno permesso di definire l'origine del problema e una strategia di soluzione incentrata sulla modifica della legge del preconditionatore locale. La sequenza temporale delle attività svolte per analizzare i dati, definire le cause del problema e migliorare i risultati si possono così riassumere:

- Analisi dei risultati delle prime simulazioni fatte
- Esame di differenti problemi per raccogliere nuovi dati
- Prova di metodi per la risoluzione dei sistemi non lineari alternativi a quello già considerato, per escludere cause derivanti dalla particolare libreria implementata
- Definizione delle cause del malfunzionamento
- Modifica della legge di definizione del preconditionatore locale

5.1 Analisi del primo caso

Il primo caso analizzato è riportato in tabella 5.1. Come condizione iniziale si hanno valori della velocità uguali e opposti all'interfaccia tra stato destro e sinistro, successivamente si creano due onde di rarefazioni simmetriche che si propagano allontanandosi.

Il numero di Mach del problema è pari a $7 \cdot 10^{-5}$, perciò sarebbe ragionevole fare simulazioni con il preconditionatore attivo. Inoltre, a causa della presenza di una zona cavitante, il numero di Mach varia fino ad arrivare ad un massimo di $1.5 \cdot 10^{-2}$ coprendo quindi più di due ordini di grandezza. Pertanto, la soluzione che dovrebbe

Problema	Liquid	T_L	ζ	ρ_L	u_L	ρ_R	u_R	t_{eval}
B1	water	293.16	0.1	998	-0.1	998	0.1	1

Tabella 5.1: Dati per il problema di Riemann cavitante

Griglia	Problema	Δx	Δt
GR-2-0	B1	10^0	10^{-2}
GR-3-0	B1		10^{-3}
GR-4-0	B1		10^{-4}
GR-2-1	B1	10^{-1}	10^{-2}
GR-3-1	B1		10^{-3}
GR-4-1	B1		10^{-4}

Tabella 5.2: Griglie utilizzate per il caso B1

fornire i risultati migliori dovrebbe essere quella con preconditionatore locale. Sono state fatte simulazioni utilizzando sei diverse griglie, ottenute variando la discretizzazione spaziale e il passo temporale, come mostrato in tabella 5.2. Un esempio dei risultati che si ottengono sono mostrati nelle figure 5.1 e 5.2, ottenute con la griglia GR-4-0 di tabella 5.1.

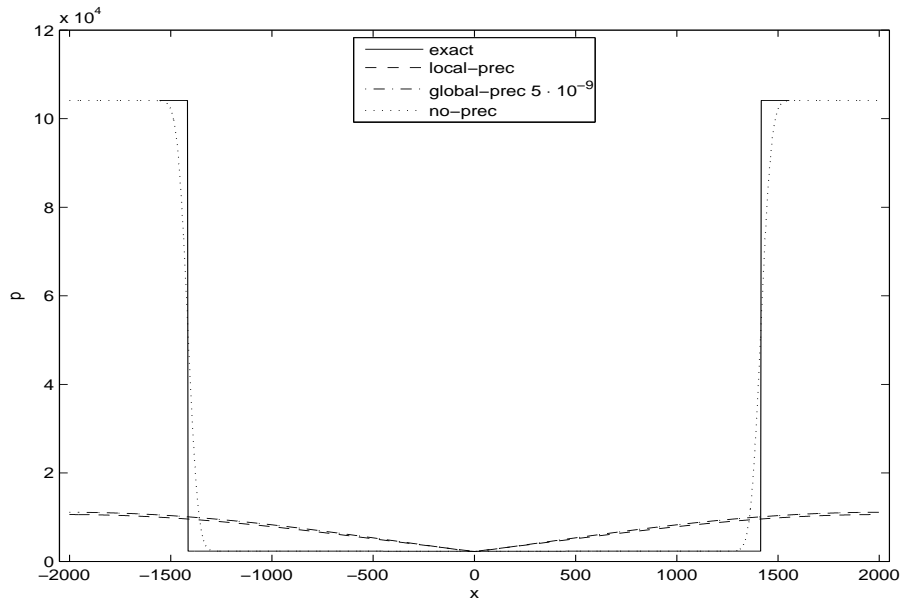


Figura 5.1: Confronto dei risultati per B1, griglia GR-4-0, pressione

I grafici mostrati della pressione e della velocità sono rappresentativi di quelli che si ottengono per le altre variabili. È importante sottolineare come in tutti i casi

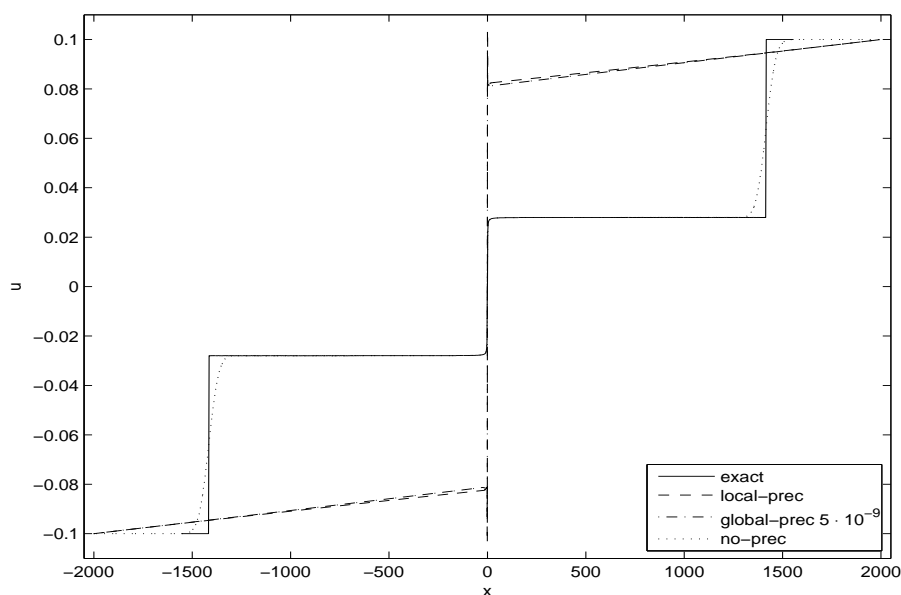


Figura 5.2: Confronto dei risultati per B1, griglia GR-4-0, velocità

con preconditionatore attivo si perda la soluzione o non si arrivi neppure a convergenza (come per esempio con la griglia GR-2-1) mentre senza preconditionatore si ottengono sempre soluzioni corrette, coerenti con la discretizzazione numerica.

5.2 Ulteriori gruppi di prove

Per il caso B1 sono state fatte complessivamente 18 simulazioni, usando sei griglie e le tre opzioni possibili per il preconditionamento, globale, locale e inattivo. In questo modo si è esclusa la possibilità che i problemi fossero causati da un passo temporale troppo grande o dalla dimensione delle celle troppo elevata, anche perché usando una discretizzazione spaziale più fine i problemi di convergenza sono anzi aumentati invece di diminuire. D'altronde, avendo sempre lavorato su un solo problema di Riemann, non è possibile stabilire se le difficoltà incontrate derivino dal particolare problema considerato o siano comuni a più casi. Si è quindi deciso di fare altre simulazioni per cercare di caratterizzare meglio le condizioni in cui il codice falliva, in particolare si sono individuati tre gruppi di prove:

- Il primo gruppo è un problema di Riemann cavitante a $\text{Mach } 7 \cdot 10^{-3}$, sezione 5.2.1
- Il secondo gruppo è composto da problemi di Riemann a Mach di volta in volta più basso, con legge di stato politropica, sezione 5.2.2
- Il terzo gruppo riguarda il moto in un ugello a basso numero di Mach, con legge di stato politropica, sezione 5.2.4

Problema	Liquid	T_L	ζ	ρ_L	u_L	ρ_R	u_R	t_{eval}
B2	water	293.16	0.1	998	10	998	10.2	1

Tabella 5.3: Dati per il secondo problema di Riemann cavitante

5.2.1 Secondo problema di Riemann cavitante

Si è scelta di introdurre un secondo problema di Riemann cavitante, a Mach $7 \cdot 10^{-3}$, in quanto in un caso analogo, ma con legge di stato politropica, si è giunti a convergenza sia con preconditionatore spento che con preconditionatore attivo, globale o locale. Il caso con legge di stato politropica sarà descritto più in dettaglio nella sezione 5.2.2, dove vi si fa riferimento con la sigla B3. La figura 5.3 mostra come i risultati dell'andamento della pressione di questo problema, ottenuti con la griglia GR-3-0 di tabella 5.2, siano in buon accordo con la soluzione esatta. Il problema

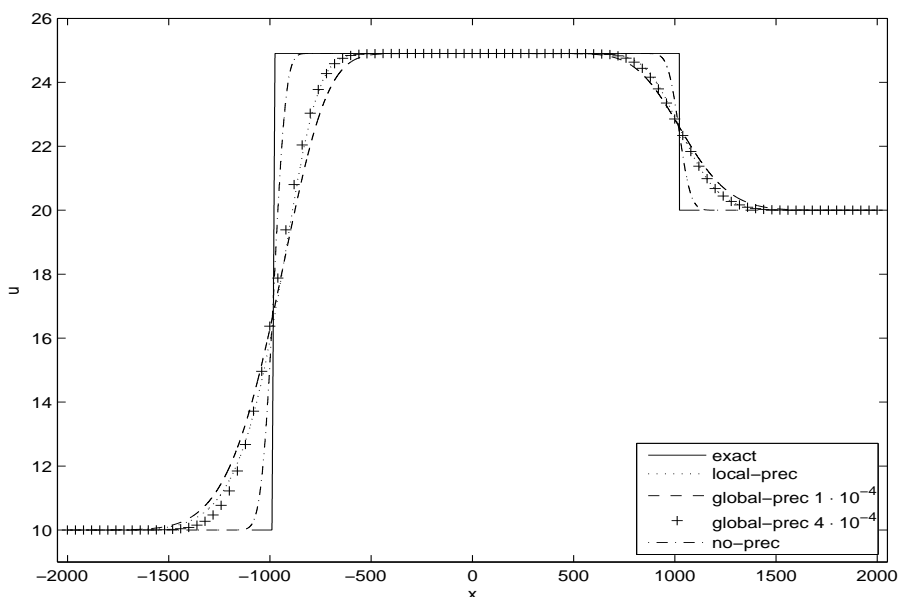


Figura 5.3: Confronto dei risultati B3, griglia GR-3-0, pressione

cavitante analizzato è invece mostrato in tabella 5.2.1 ed è analogo a quello precedente: in entrambi si hanno due rarefazioni che si propagano in senso opposto con la differenza che il Mach iniziale qui è $7 \cdot 10^{-3}$. L'idea alla base di questa scelta era che se le simulazioni con e senza preconditionatore avessero fornito risultati corretti, questo avrebbe confermato l'ipotesi che il problema del codice riguardasse il basso numero di Mach caratterizzante il primo caso. I risultati ottenuti hanno però smentito questa teoria, come mostrano le figure 5.4, 5.5, ottenute con la griglia GR-4-0 di tabella 5.2

Come si può vedere dalle figure, il preconditionatore locale ha degli andamenti completamente differenti dalla soluzione esatta, mentre il preconditionatore globale sembra riuscire a seguire meglio la soluzione analitica anche se il picco centrale nella

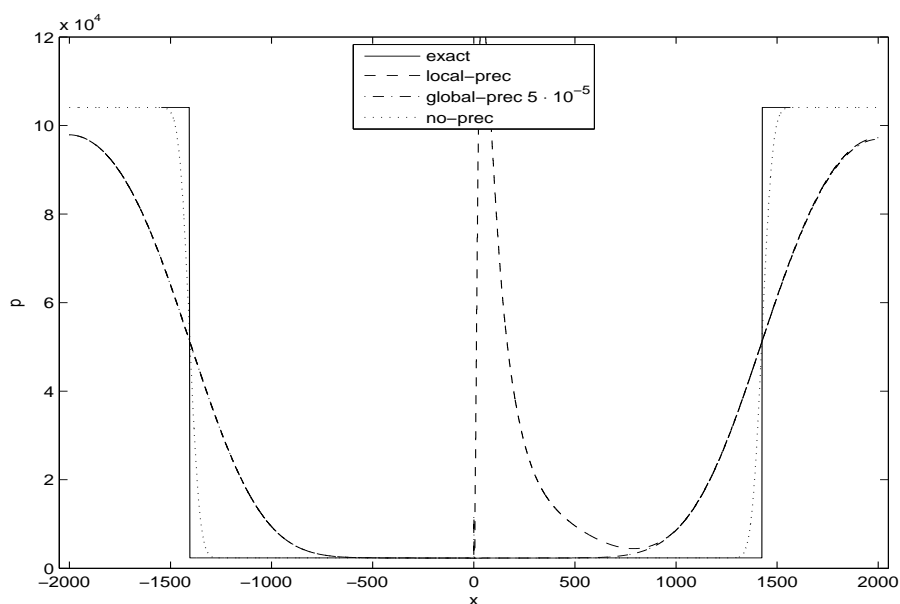


Figura 5.4: Confronto dei risultati per B2, griglia GR-4-0, pressione

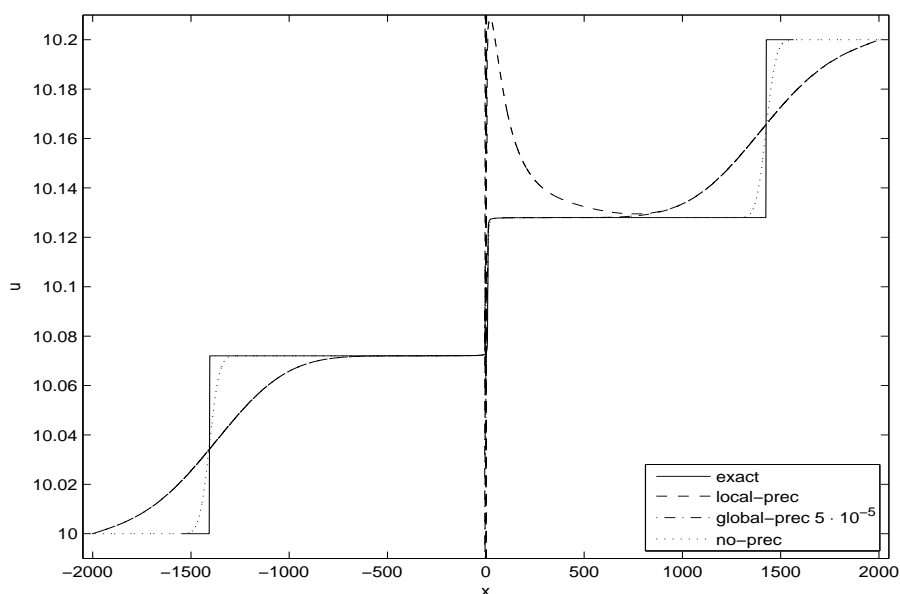


Figura 5.5: Confronto dei risultati per B2, griglia GR-4-0, velocità

pressione, che è ancora più accentuato nel grafico della velocità, è un errore non accettabile. Anche per questo problema le simulazioni sono state fatte su più griglie, in particolare si è scelto di usare le griglie GR-4-0 e GR-4-1, come definite in tabella 5.2. Sono state scelte in quanto corrispondono al minimo passo temporale considerato e hanno confermato l'osservazione che raffinando la griglia spaziale si hanno maggiori problemi di convergenza con preconditionatore attivo. Da questo gruppo di simulazioni emerge però anche un fatto nuovo: la scelta di disattivare il preconditionatore sembra essere esente da problemi ma, se si osserva l'andamento

della velocità del suono, mostrata in figura 5.6, si può vedere come compaiano delle oscillazioni spurie. Queste oscillazioni sono visibili nel grafico della velocità del suono e non in quello della densità a causa dell'elevata sensibilità della prima rispetto alle variazioni della seconda.

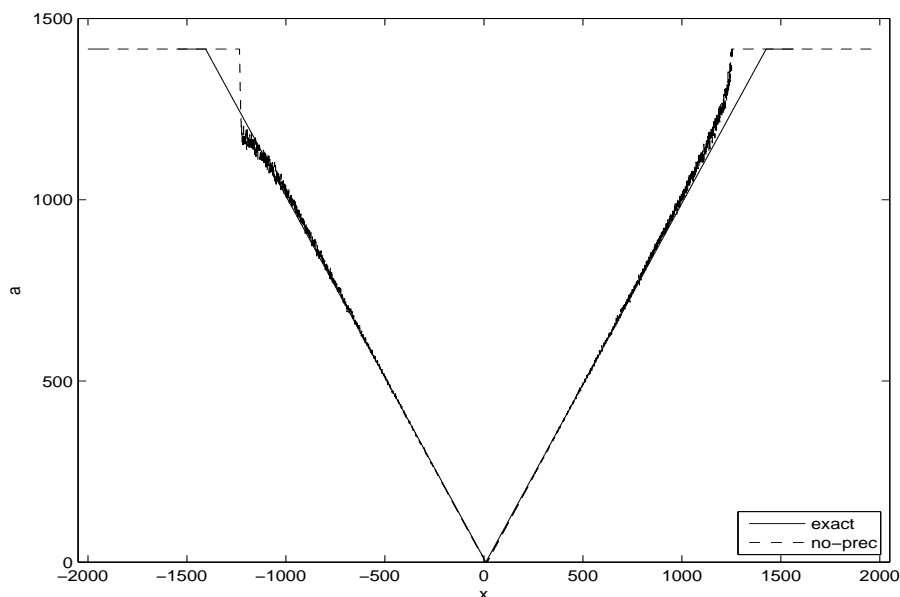


Figura 5.6: Risultati B2 senza preconditionatore, velocità del suono, oscillazioni

I dati raccolti con le simulazioni fatte sul questo secondo problema di Riemann permettono già di trarre alcune conclusioni:

- Il problema non può essere dipendente solo dal numero di Mach infatti, seppur con leggi di stato differenti, a parità di Mach il preconditionatore ha fornito risultati corretti (legge di stato politropica) ed errati (legge di stato cavitante).
- Non è garantito che il problema riguardi esclusivamente il preconditionatore, in quanto anche il caso non preconditionato, pur senza perdere la soluzione mostra delle oscillazioni che sono un sintomo di instabilità.

5.2.2 Problema di Riemann a basso Mach, con legge di stato politropica

I risultati ottenuti con i precedenti gruppi di simulazioni hanno messo in luce delle differenze di funzionamento tra le leggi di stato considerate. Per questo motivo si è scelto di introdurre un gruppo di prove con legge di stato politropica e numero di Mach caratteristico via via decrescente, in modo da poter stabilire se il problema riguardasse solo la cavitazione e quanto influisca il numero di Mach. I casi introdotti sono mostrati in tabella 5.4 Nei casi selezionati si sviluppano onde di rarefazione, anche se la zona di espansione è poco estesa [2]. La velocità del suono è costante e si analizza il comportamento della soluzione facendo variare il numero di Mach su sei diversi ordini di grandezza, da $1 \cdot 10^{-2}$ fino a $1 \cdot 10^{-7}$. Un sunto dei risultati ottenuti

Problema	κ	\varkappa	γ	ρ_L	u_L	ξ_L	ρ_R	u_R	ξ_R	M_∞
B3	10^6	1	0	1.02	10	2	1	20	4	10^{-2}
B4					1			10^{-3}		
B5					10^{-1}			$2 \cdot 10^{-1}$		10^{-4}
B6					10^{-2}			$2 \cdot 10^{-2}$		10^{-5}
B7					10^{-3}			$2 \cdot 10^{-3}$		10^{-6}
B8					10^{-4}			$2 \cdot 10^{-4}$		10^{-7}

Tabella 5.4: Casi considerati con legge di stato politropica

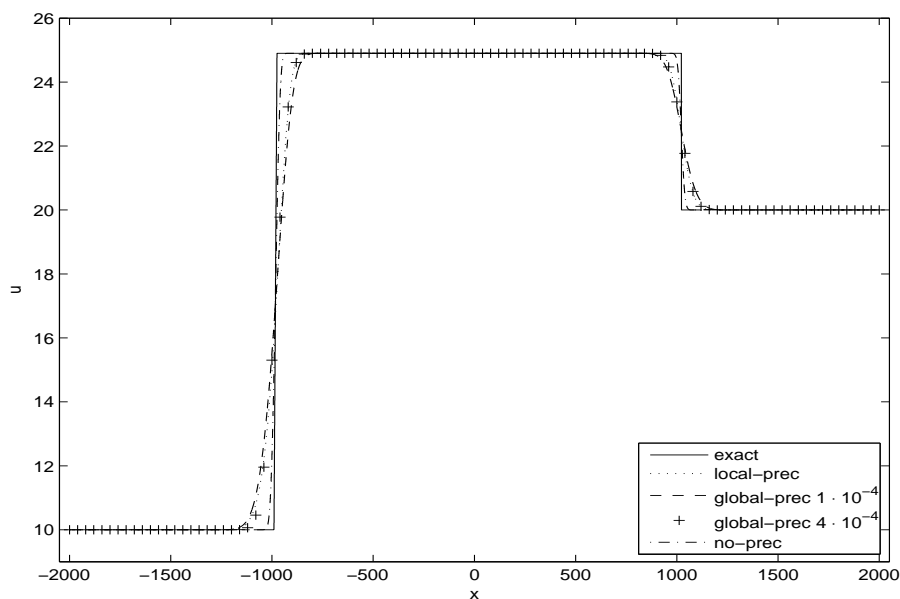


Figura 5.7: Confronto dei risultati B3, griglia GR-4-1, velocità

è mostrato nelle figure 5.7, 5.8, 5.9, 5.10.

Tutte le simulazioni sono state fatte usando la griglia più raffinata, la GR-4-1. Per il problema B3 sono stati usati due differenti valori per il parametro β del preconditionatore globale, corrispondenti rispettivamente al Mach iniziale dello stato destro e di quello sinistro. Una volta verificato che l'accuratezza della soluzione non variava sensibilmente, si è scelto di testare gli altri casi con un solo valore per il preconditionatore globale. Dalle figure si ottengono dei dati significativi:

- il carattere dissipativo del preconditionatore è sempre più accentuato al diminuire del numero di Mach, infatti pur senza mai perdere la soluzione, minore è il Mach maggiore è lo scostamento dalla soluzione esatta agli estremi del dominio (vedi figure 5.9, 5.10)
- anche con legge di stato politropica, sebbene in misura minore, il preconditionatore locale o globale tende a scostarsi dalla soluzione esatta.

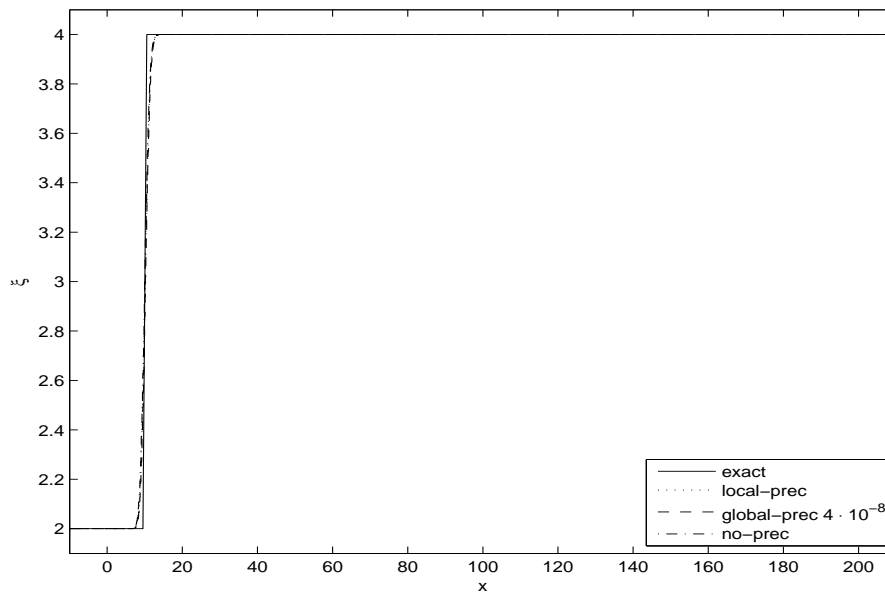


Figura 5.8: Confronto dei risultati B5, griglia GR-4-1, scalare passivo

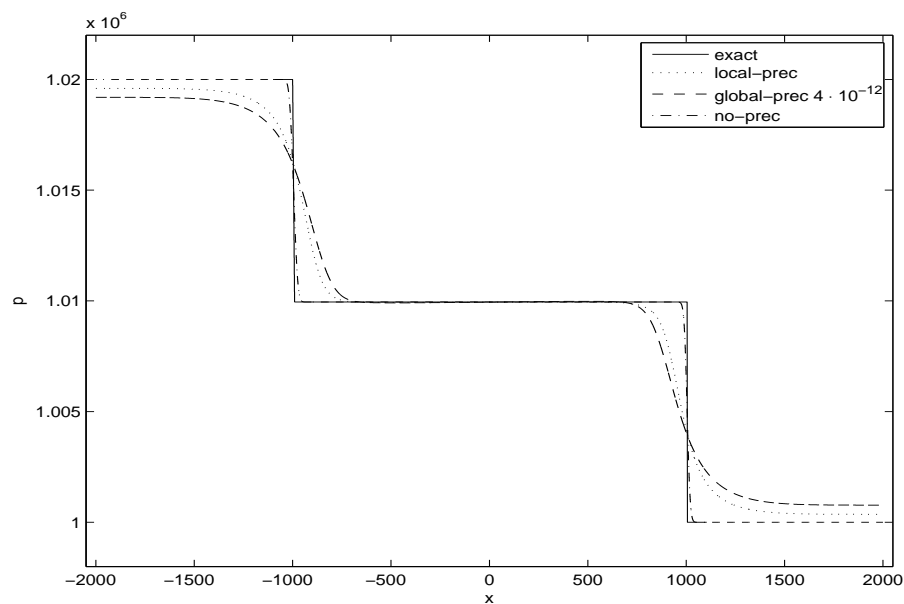


Figura 5.9: Confronto dei risultati B7, griglia GR-4-1, pressione

Da questi dati si può perciò concludere che il problema del preconditionatore non deriva dalla particolare legge di stato utilizzata, anche se il caso cavitante ne è maggiormente interessato. Inoltre viene messo in luce come il numero di Mach sia più un'aggravante del problema piuttosto che la vera causa scatenante.

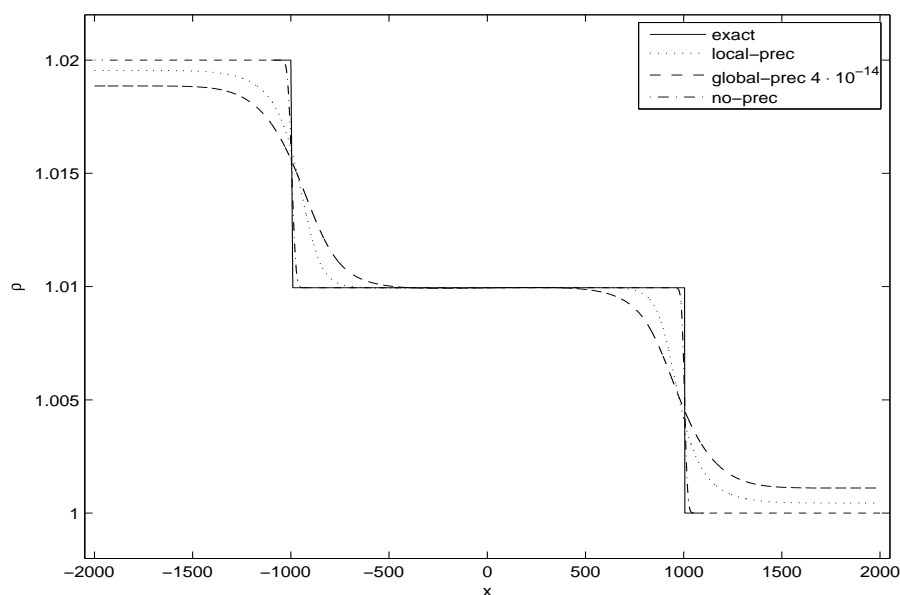


Figura 5.10: Confronto dei risultati B8, griglia GR-4-1, densità

5.2.3 Implementazione di differenti solutori lineari

Il passo successivo per caratterizzare la natura problema è stato quello di utilizzare differenti solutori lineari. Nel codice infatti, come si è visto nel capitolo 4 la soluzione al passo $n + 1$ è ottenuta dalla soluzione al passo n tramite il sistema :

$$\begin{cases} A\Delta W = b \\ W^{n+1} = W^n + \Delta W \end{cases} \quad (5.1)$$

dove $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $b \in \mathbb{R}^m$ ed m è dato dal numero di celle della griglia spaziale moltiplicato per le dimensioni del vettore di stato. È chiaro quindi che se l'algoritmo per la soluzione del sistema lineare non è sufficientemente accurato, si può perdere la soluzione del problema già dopo pochi passi temporali. Nel codice attuale è implementata la routine DGBSV della libreria Lapack¹, che risolve il sistema lineare fattorizzando la matrice A tramite la decomposizione LU. Per escludere la possibilità che i problemi riscontrati derivassero dalla particolare routine utilizzata si sono quindi implementati altri due metodi per la soluzione del sistema non lineare. Il primo è la routine DGBSVX, questa è una versione avanzata della già implementata DGBSV, e permette di avere un maggior controllo sulla soluzione del sistema lineare. In particolare è possibile riequilibrare la matrice A del sistema preconditionandola, si può raffinare la soluzione ottenuta per diminuire l'errore e viene fornito una stima del numero di preconditionamento della matrice. Per ulteriori informazioni si rimanda al sito della libreria. Sia la routine DGBSVX che la DGBSV sono metodi diretti cioè forniscono la soluzione del sistema lineare in un numero finito e determinato di operazioni elementari, tramite la fattorizzazione della matrice. Al contrario il terzo metodo scelto per risolvere il sistema è un metodo iterativo, basato sui sottospazi di

¹<http://www.netlib.org/lapack>

Krylov in congiunzione con il metodo dei minimi residui generalizzati (GMRES) ed è fornito dalla libreria PETSc². Per una descrizione più approfondita di questo algoritmo si rimanda al capitolo 6. I due metodi sono stati poi implementati nel codice e sono state fatte delle nuove simulazioni sul problema B1, con preconditionatore attivo e disattivo. I grafici dei risultati non sono mostrati in quanto sostanzialmente identici a quelli già ottenuti, fatto che dimostra che il problema incontrato non dipende dal particolare algoritmo utilizzato. Un dato che però non risulta dai grafici delle simulazioni è il numero di condizionamento del sistema che viene stimato dalla routine DGBSVX: il suo valore passa da un minimo di circa 10 senza preconditionatore fino ad un massimo 10^7 con preconditionatore locale. Questi due valori sono solo indicativi e rappresentano la condizione più favorevole e quella più sfavorevole, poichè il numero di condizionamento dipende dalla discretizzazione spaziale e temporale, in particolare aumenta se aumenta il passo temporale o diminuisce la dimensione delle celle. La spiegazione di questo andamento è riportata in appendice A. Da questi dati si può perciò dedurre che esiste una concreta possibilità di avere significativi errori di troncamento, ed è quindi necessario fare delle prove volte a verificare questa ipotesi.

5.2.4 Moto in un condotto a basso numero di Mach

Dalle analisi fatte emerge la possibilità che i problemi incontrati nella simulazione di problemi di Riemann con preconditionatore attivo siano almeno in parte riconducibili ad errori di troncamento numerico. Per provare questa ipotesi si sono fatte delle simulazioni del moto in un condotto. Si è scelto questo tipo di problema in quanto lo studio teorico del preconditionatore, sviluppato in [19], si basa su proprietà di regolarità della soluzione: i problemi di Riemann per loro natura partono sempre da una condizione iniziale discontinua in cui non è garantita la validità dello studio. Nel moto in un condotto a basso numero di Mach al contrario, il preconditionatore è necessario per ottenere la soluzione corretta e quindi eventuali errori nella stessa devono essere attribuiti a cause differenti. I problemi utilizzati per questo gruppo di prove sono elencati in tabella 5.5 e le griglie su cui sono stati testati in 5.6. Si è scelto di utilizzare un solo passo temporale in quanto per il moto in un ugello lo schema implicito permette di aumentare Δt a piacimento, perciò per l'analisi che si vuol fare si può ritenere che l'effetto sia trascurabile. La particolarità di questo gruppo di simulazioni è che per ogni numero di Mach la simulazione è stata fatta girare lavorando una volta con variabili adimensionalizzate e una volta con variabili dimensionali. In questo modo, confrontando i due risultati, si può stabilire se vi siano problemi di troncamento numerico o meno.

Il Mach di queste simulazioni parte da 10^{-3} , già provato senza difficoltà in molte simulazioni in altri lavori ([2], [19]) e in questo caso, come ci si aspettava, si hanno gli stessi risultati sia con variabili dimensionali che adimensionali. Invece i risultati per Mach 10^{-4} sono mostrati nelle figure 5.11 e 5.12. Da queste figure si vede come, escludendo la velocità, le simulazioni con variabili dimensionali inizino ad essere affette da problemi numerici (gli errori sono piccolissimi, dell'ordine di 10^{-8} ma

²<http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/>

Problema	κ	\varkappa	ρ_∞	u_∞	A_{min}/A_∞	M_∞
B9	0.5	2	900	$3 \cdot 10^{-2}$	0.90	10^{-3}
B10				$3 \cdot 10^{-3}$		10^{-4}
B11				$3 \cdot 10^{-4}$		10^{-5}

Tabella 5.5: Casi per l'ugello.

Griglia	Δx	Δt
GR-0+1	10	1
GR-0-0	1	1

Tabella 5.6: Griglie utilizzate per i casi B9, B10 , B11

presenti).

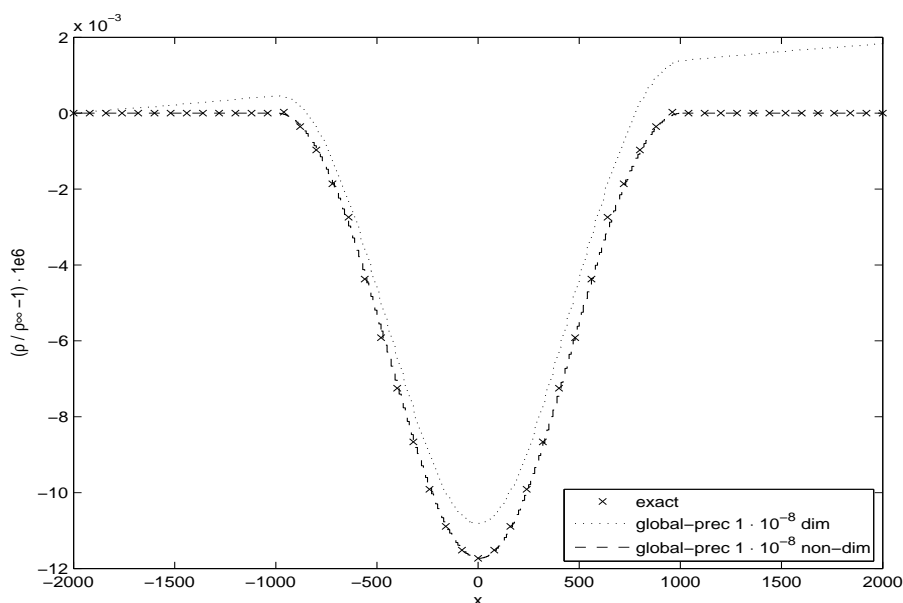


Figura 5.11: Confronto tra simulazione dimensionale e adimensionale, B10, griglia GR-0+1, densità

Per Mach pari 10^{-5} anche le simulazioni con variabili adimensionali risultano affette da problemi numerici, come mostrato in figura 5.13 Il fatto che si tratti di problemi numerici è ulteriormente confermato dalla figura 5.14. Questa figura è stata ottenuta usando un valore del parametro del preconditionatore β^2 di 10^{-8} invece di quello teoricamente corretto di 10^{-10} : la matrice di preconditionamento infatti, è tanto peggio condizionata quanto minore è β (per Mach nullo è singolare, vedi capitolo 4), quindi aumentandone il valore si dovrebbero ridurre i problemi di origine numerica, come conferma la figura. Grazie a questa ultima serie di dati, correlati con gli

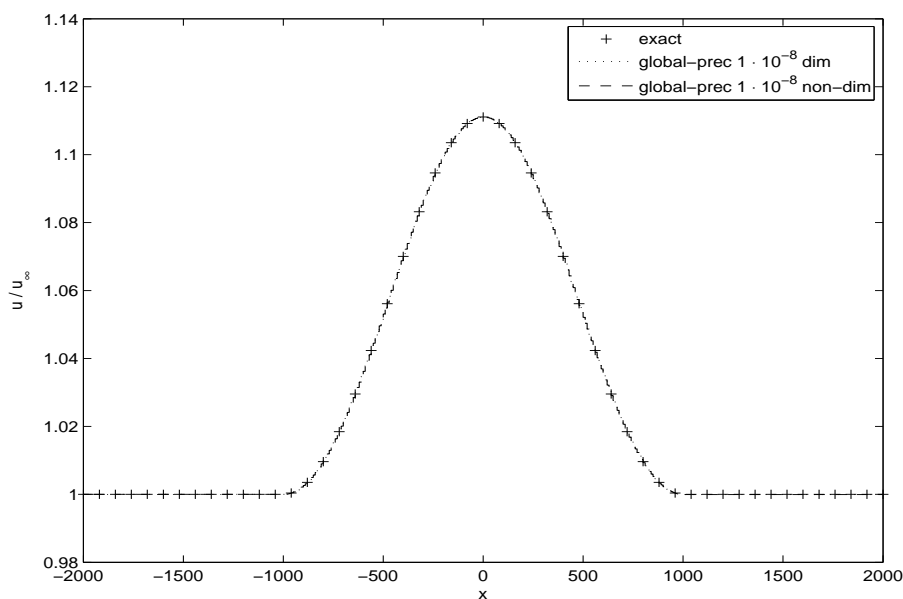


Figura 5.12: Confronto tra simulazione dimensionale e adimensionale, B10, griglia GR-0+1, velocità

altri già ottenuti, si è potuto formulare una ipotesi onnicomprensiva che spiegasse l'origine del mal funzionamento.

5.3 Spiegazione del problema

Dalle analisi fatte è stato possibile risalire alle cause dei malfunzionamenti, che possono essere così riassunte: i problemi riscontrati hanno due origini, da un lato sono frutto di problemi di troncamento, accentuati dalla particolare forma della legge di stato cavitante, dall'altro sono causati dal funzionamento del preconditionatore in presenza di brusche variazioni delle variabili di stato. Per quanto riguarda il troncamento numerico, a sostenere questa spiegazione abbiamo:

- il funzionamento del preconditionatore nel caso dell'ugello: poichè al diminuire del numero di Mach la matrice di preconditionamento tende a diventare singolare, è più facile che si perdano cifre significative. Infatti tutti i casi analizzati esibiscono crescenti problemi al diminuire del numero di Mach e alcuni come il B11 hanno risultati migliori se usati con un valore di preconditionamento "sbagliato".
- la maggior sensibilità del preconditionatore locale nelle zone a numero di Mach locale molto basso : come si vede in figura 5.4 le soluzioni con i due tipi di preconditionatore sono analoghe tranne che per il picco centrale trovato nel caso locale. Ma proprio al centro il numero di Mach della soluzione analitica è esattamente zero, e da questo deriva che il preconditionatore locale in quel punto è più soggetto a problemi numerici.

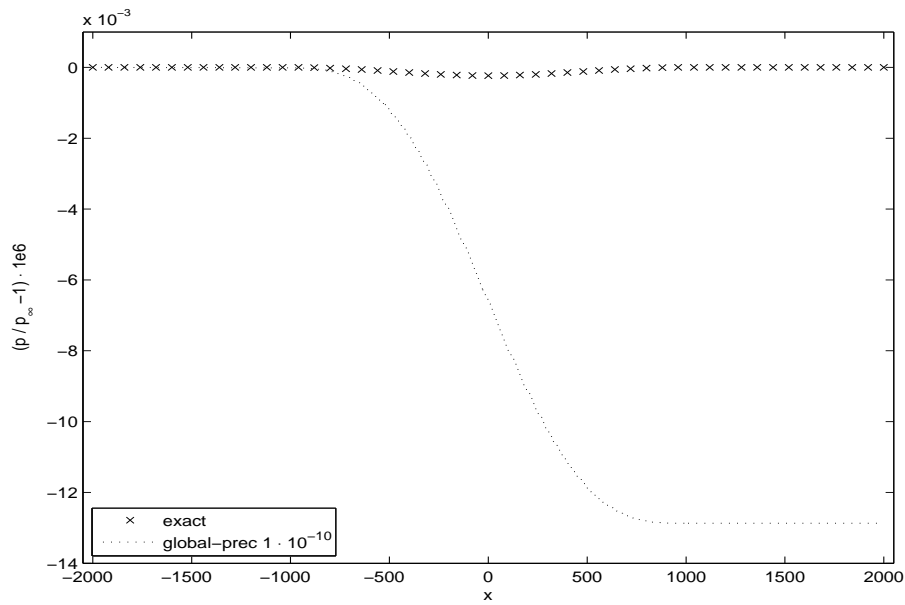


Figura 5.13: Risultati per B11, pressione, caso non dimensionale, griglia GR-0+1, $\beta^2 = 10^{-10}$

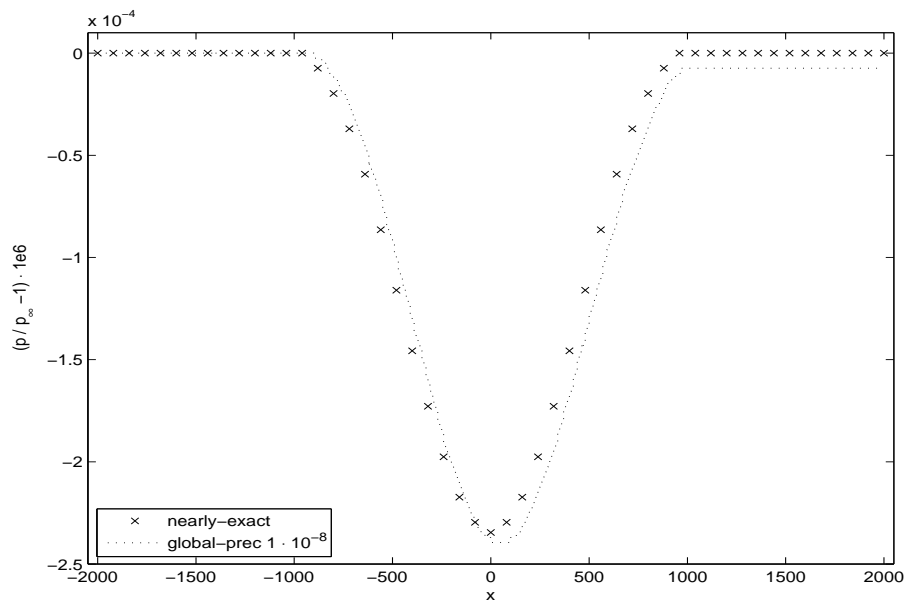


Figura 5.14: Risultati per B11, pressione, caso non dimensionale, griglia GR-0+1, $\beta^2 = 10^{-8}$

- la legge di stato cavitante è più soggetta a questo problema a causa dei suoi forti gradienti sia nella derivata prima che seconda che fanno sì che piccoli errori nella densità diventino facilmente osservabili nella pressione e nella velocità del suono.

A questa spiegazione si potrebbe obiettare che il secondo problema di Riemann cavitante, nonostante fosse a Mach maggiore del primo, crea maggiori problemi

anche al caso non preconditionato. Questo è vero ma in realtà, col senno di poi, il secondo caso cavitante non è altro che il primo visto da un osservatore che si muove a velocità costante pari a 10.1 metri al secondo. Questo comporta che da un punto di vista teorico i due casi sono identici, come confermato dalla soluzione analitica, mentre da un punto di vista numerico questo fa sì che servano due cifre significative in più per avere la soluzione con la stessa precisione³: se ci sono problemi di troncamento non possono che esserne aggravati.

Gli errori di troncamento numerico sono sufficienti a spiegare i risultati errati nelle simulazioni nel moto in un condotto a basso numero di Mach. Per quanto riguarda invece i problemi di Riemann cavitanti, vi è una seconda causa che rende i risultati preconditionati così distinti da quelli corretti. Per spiegarla è necessario ricordare cosa fa esattamente il preconditionatore:

- Il preconditionatore smorza le oscillazioni delle pressione
- l'intensità delle oscillazioni che è in grado di smorzare dipende dal parametro β
- di fatto il preconditionatore aumenta la dissipazione in presenza di oscillazioni superiori rispetto a quelle che si dovrebbero avere secondo il suo parametro β

Questo meccanismo funziona senza problemi (numerica a parte) per soluzioni regolari ma per soluzioni discontinue il preconditionatore cercherà di smorzare la discontinuità e in questo modo verrà dissipata energia che sarebbe dovuta rimanere nel fluido provocando un livellamento di tutta la soluzione. Tutto ciò è particolarmente vero nei problemi di Riemann cavitanti analizzati infatti:

- Le condizioni al bordo sono trasmissive: non c'è quindi nessuna fonte di energia esterna che può reintegrare l'energia persa
- il salto della pressione nella soluzione corrisponde sempre all'interfaccia tra liquido e vapore: anche una piccola variazione di densità è sufficiente per entrare nella fase cavitante e di fatto far scomparire il salto.

Anche in questo caso si potrebbe obiettare che la soluzione del problema di Riemann cavitante è fatta da rarefazioni, quindi non è discontinua, perciò il preconditionatore non dovrebbe creare nessun tipo di problema. Bisogna però considerare due aspetti, il primo (motivazione debole) è che comunque quella soluzione è stata generata partendo da una soluzione discontinua, e questo nel codice numerico può aver avuto il suo peso, almeno nelle prime iterazioni. Il secondo, più convincente, è che benché la soluzione sia continua, all'interfaccia liquido vapore il salto è molto brusco, mentre il numero di Mach rimane comunque piccolo, perciò è facile che quel salto dal codice sia visto più come una discontinuità (il preconditionatore lavora proprio sulla pressione) piuttosto che come un tratto continuo. Per sostenere questa tesi si sono fatte due prove *ad hoc*. La prima, fatta con una dimensione Δx pari a 1 e un passo temporale Δt pari a $5 \cdot 10^{-5}$, riguarda la simulazione del primo problema cavitante con un valore

³ Per fare un esempio se nel primo caso si passa da una velocità di 0.1 ad 0.02, nel secondo caso la stessa variazione sarà da 10.2 a 10.12 richiedendo quindi l'uso di più cifre significative.

5.4. Modifica della legge del preconditionatore locale

del preconditionatore di $5 \cdot 10^{-5}$, cioè quattro ordini di grandezza superiore a quello che dovrebbe avere, in questo modo l'energia che può dissipare il preconditionatore è molto minore e questo si traduce in un minor livellamento della soluzione come mostrato in figura 5.15. La soluzione trovata in questo caso ha un andamento generale corretto anche se calcola un valore agli estremi del dominio minore di quello esatto. Questo errore è comunque paragonabile a quelli riscontrati nei casi B3-B8. I risultati della seconda prova, eseguita con una griglia con Δx pari 1 e un passo

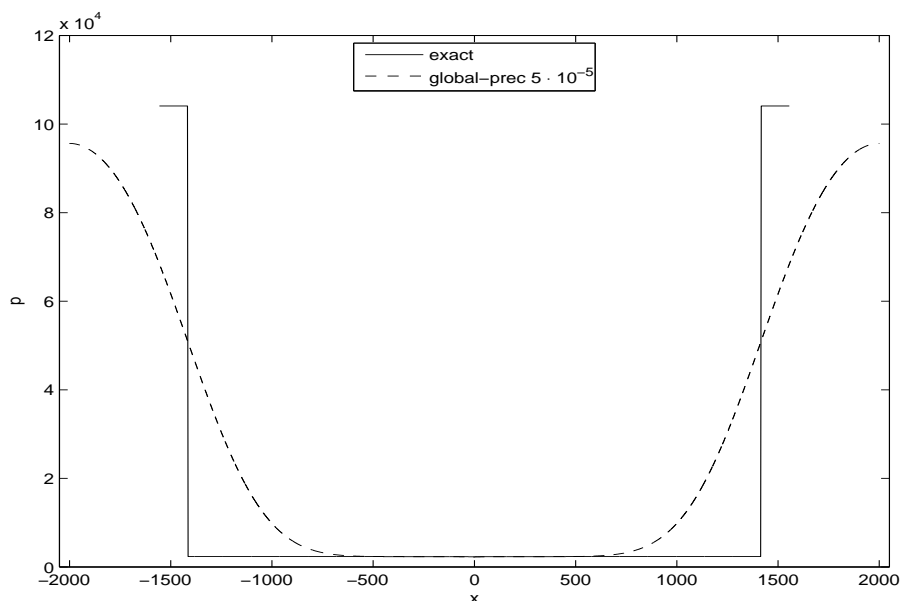


Figura 5.15: Risultati andamento della pressione, preconditionatore limitato

temporale Δt pari $1 \cdot 10^{-5}$, sono mostrati in figura 5.16. Questa simulazione è stata eseguita con il parametro del preconditionatore pari a $5 \cdot 10^{-5}$ e cambiando le condizioni al bordo. Infatti invece di imporre condizioni di gradiente nullo, come visto nel capitolo 4, si sono imposte le velocità di ingresso e di uscita con un valore pari a quello della soluzione esatta: questa modifica introduce una fonte di energia, seppur modesta, e la conseguenza è che la soluzione si modifica in modo da cercare di arrivare al valore imposto (quello corretto) ma subito decresce, a riprova che vi è una fonte di dissipazione che impedisce ai valori della pressione di rimanere costanti (cosa che invece succede senza preconditionatore anche senza queste BC).

5.4 Modifica della legge del preconditionatore locale

L'analisi finora fatta ha portato a trovare delle spiegazioni dei malfunzionamenti del programma con il preconditionatore. Questi tendono a verificarsi con più facilità per bassi numeri di Mach quando il preconditionatore è indispensabile. Perciò sarebbe gradito che le modifiche necessarie per risolvere il problema non alterino il funzionamento del preconditionatore. Attualmente non sembra possibile trovare

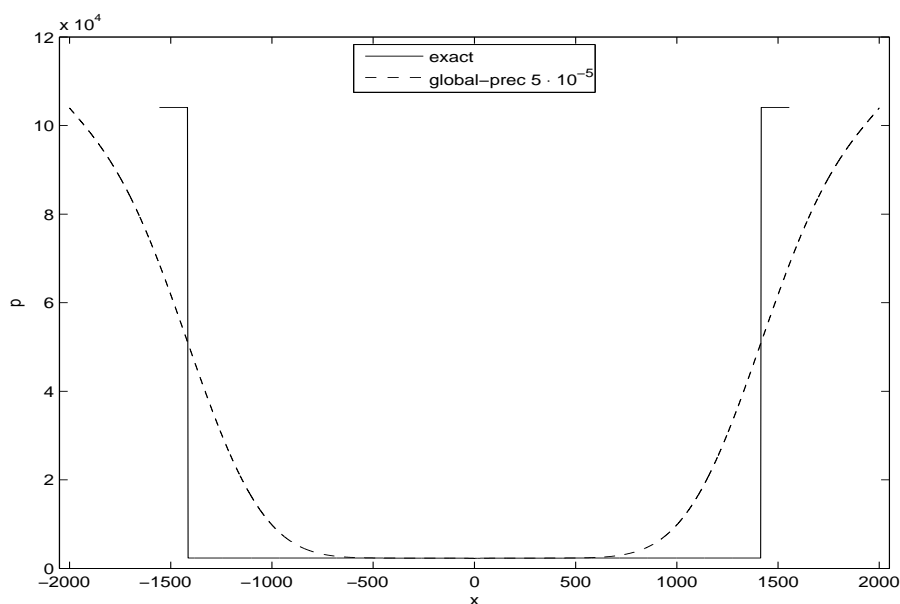


Figura 5.16: Risultati andamento della pressione, nuove condizioni al bordo

una soluzione che eviti completamente di modificare il preconditionatore, perciò si riterrà un buon risultato una soluzione che non modifichi il preconditionatore nelle zone di maggior interesse pratico e riesca a limitare gli errori nelle altre. Una strategia che agisca in modo differente in condizioni differenti è più facilmente ottenibile lavorando sulla definizione del preconditionatore locale, in quanto quello globale fissa una volta per tutte un Mach di riferimento, il che equivale a fissare le oscillazioni della pressione indipendentemente dal reale numero di Mach all'interno delle celle. La soluzione che si propone si basa su alcune proprietà del codice, del preconditionatore (vedi sezione 4.2.3) e dei flussi che siamo interessati a simulare, in particolare:

- il codice è pensato per simulare flussi a generico numero di Mach, non specificatamente a basso numero di Mach
- le oscillazioni della pressione senza preconditionamento a basso numero di Mach sono proporzionali a M (numero di Mach)
- le oscillazioni della pressione a basso numero di Mach dovrebbero invece essere proporzionali a M^2

Come conseguenza si ha che :

- L'errore assoluto senza preconditionatore, cioè pressione vera meno pressione calcolata è proporzionale a M
- L'errore relativo senza preconditionatore, cioè oscillazioni calcolate diviso oscillazioni vere sono proporzionali a $1/M$

5.4. Modifica della legge del preconditionatore locale

Da questo deriva che l'errore assoluto tende a decrescere con il Mach, mentre quello relativo esplode. Possiamo allora scegliere un numero di Mach tale da rendere l'errore assoluto senza preconditionatore piccolo e adottare una strategia che mantenga il preconditionatore proporzionale al Mach al quadrato fino a tale valore e poi lo mantenga costante. In questo modo se il Mach di soglia, da ora in avanti M^* è scelto adeguatamente si può da un lato mantenere il corretto andamento della soluzione fino a quel valore, dall'altro si evitano problemi numerici e di eccessiva dissipazione. Inoltre per flussi a Mach minore di M^* , anche se si possono avere oscillazioni superiori a quelle corrette queste rimangono comunque inferiori a M^{*2} .

Si è scelto di usare come valore di soglia $M^* = 10^{-3}$ e come prima analisi è stato considerato il moto in un ugello con Mach pari sia a 10^{-4} che a 10^{-5} , in risultati delle simulazioni, eseguite con la griglia GR-0+1 di tabella 5.6, sono mostrati nelle figure 5.17, 5.18. Come era ragionevole aspettarsi usare un valore di clip per il

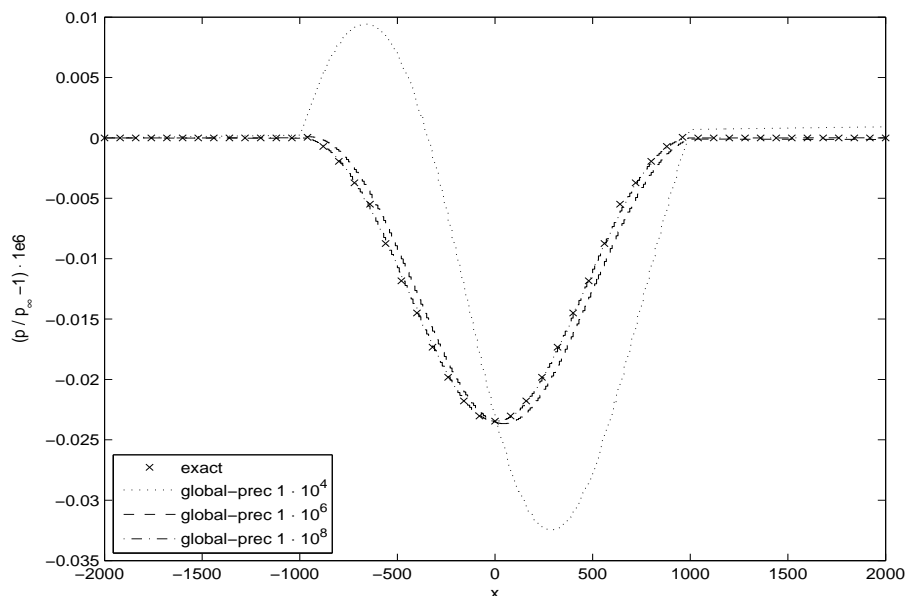


Figura 5.17: Risultati andamento della pressione per $M = 10^{-4}$, confronti tra vari valori di M^*

preconditionatore comporta degli errori, questi, calcolati come errori relativi possono essere alti (sono quelli che mostrano le figure) ma come errori assoluti inferiori a 10^{-9} e perciò accettabili. Inoltre, come si vede in figura 5.18, si ha comunque un notevole miglioramento rispetto al caso non preconditionato.

Oltre alle modifiche per bassissimi valori del numero di Mach si è deciso di operare anche per alti valori del Mach. Poichè infatti lo studio teorico [19] dice solo come deve essere l'andamento di β per bassi Mach, si è liberi di scegliere l'andamento per alti Mach e, visto che il preconditionatore può creare problemi e non sembra utile sopra un certo Mach, pare opportuno disattivarlo appena possibile. Le curve prese in considerazione, tutte tendenti a x^2 in prossimità dello zero, sono mostrate nelle figure 5.19 e 5.20. La legge esponenziale è quella usata fino ad adesso, lo svantaggio di questo tipo di legge è che tende naturalmente ad uno, lo svantaggio è che lo fa molto lentamente lasciando il preconditionatore attivo anche in moto supersonico.

5.4. Modifica della legge del preconditionatore locale

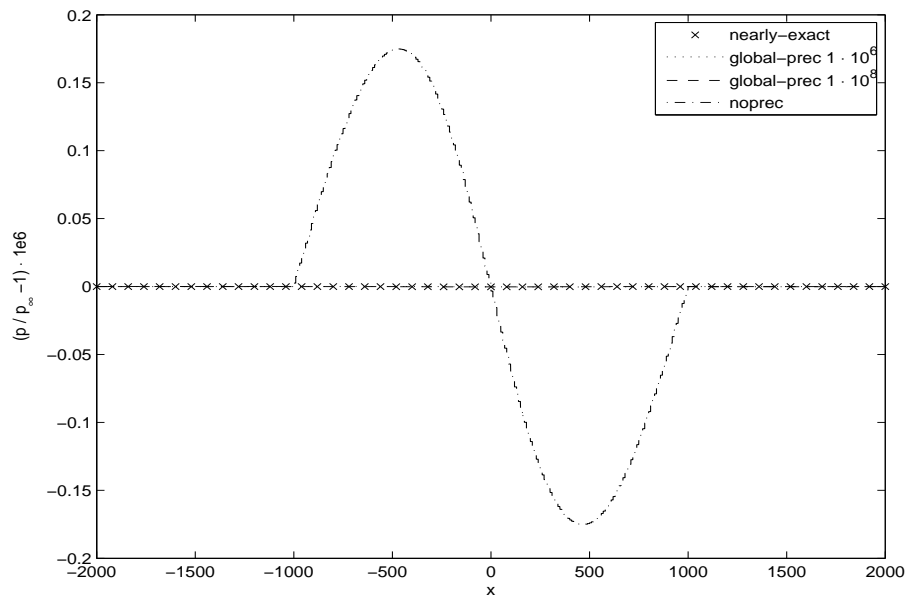


Figura 5.18: Risultati andamento della pressione per $M = 10^{-5}$, confronti tra vari valori di M^* e nessun preconditionamento

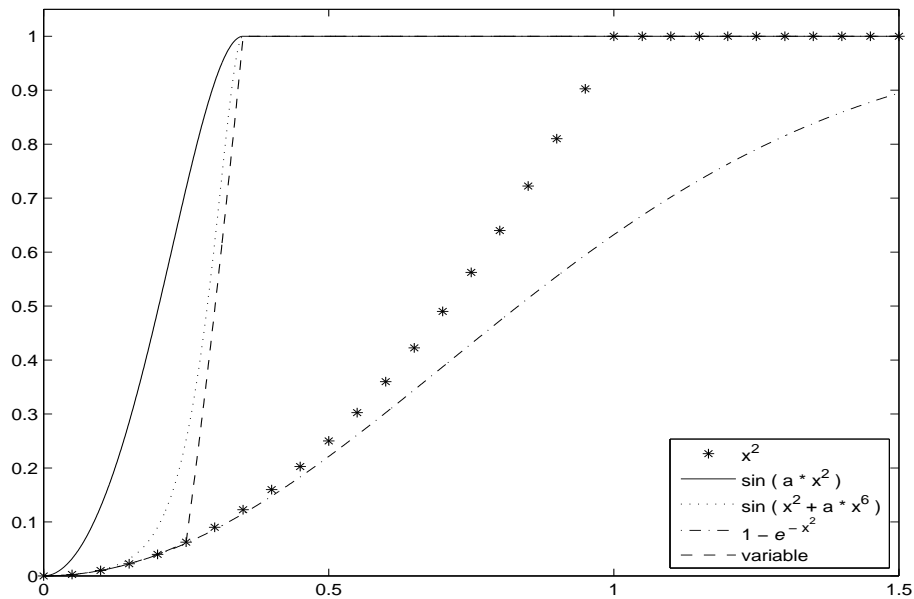


Figura 5.19: Andamento delle leggi considerate per il preconditionatore locale

Le due leggi sinusoidali sono gli esempi di una classe che può essere resa tanto più simile ad x^2 quanti più termini sono introdotti nell'argomento del seno, ed hanno anche il vantaggio di arrivare naturalmente ad uno con derivata prima nulla, il che permette un raccordo morbido con il tratto costante. Come svantaggio richiedono di definire il punto in cui si vuole spegnere il preconditionatore, ed inoltre il numero di termini che servono per rimanere prossimi a x^2 è elevato. La legge indicata come variabile è definita a tratti ed è uguale a x^2 per bassi numeri di Mach, dopo

5.4. Modifica della legge del preconditionatore locale

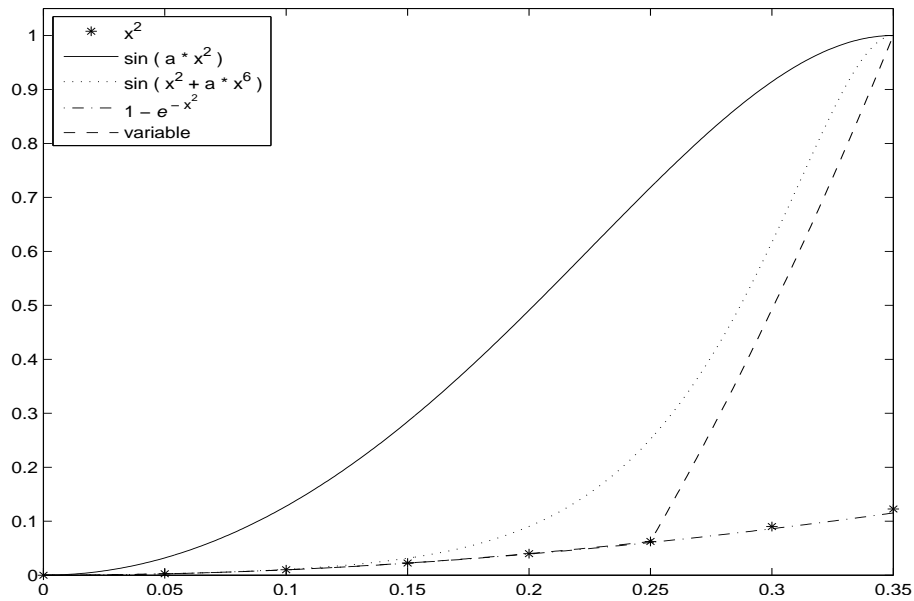


Figura 5.20: Andamento delle leggi considerate per il preconditionatore locale, dettaglio

ha un tratto lineare fino ad uno: ha il vantaggio della semplicità di calcolo e non introduce errori per bassi Mach, ma devono essere scelti arbitrariamente due punti per definirla completamente.

Con tutte queste leggi sono state fatte delle prove a Mach 0.1 e 0.2, il primo è un valore per cui si dovrebbe avere ancora bisogno del preconditionatore, con un alto errore assoluto in assenza dello stesso, il secondo è un valore per cui il preconditionatore dovrebbe risultare superfluo. Alcuni dei risultati sono mostrati in figura 5.21 e 5.22: da queste si può osservare che nonostante la maggior complicazione e costo computazionale le leggi sinusoidali non offrano sufficienti vantaggi sulla più semplice legge definita a tratti. Perciò, tenendo anche conto che per valori del numero di Mach superiori a 0.2 non si hanno differenze apprezzabili tra caso preconditionato e non preconditionato, e che quindi la scelta dei punti che definiscono la legge variabile non è critica, si è scelta questa alternativa per il preconditionatore.

5.4. Modifica della legge del preconditionatore locale

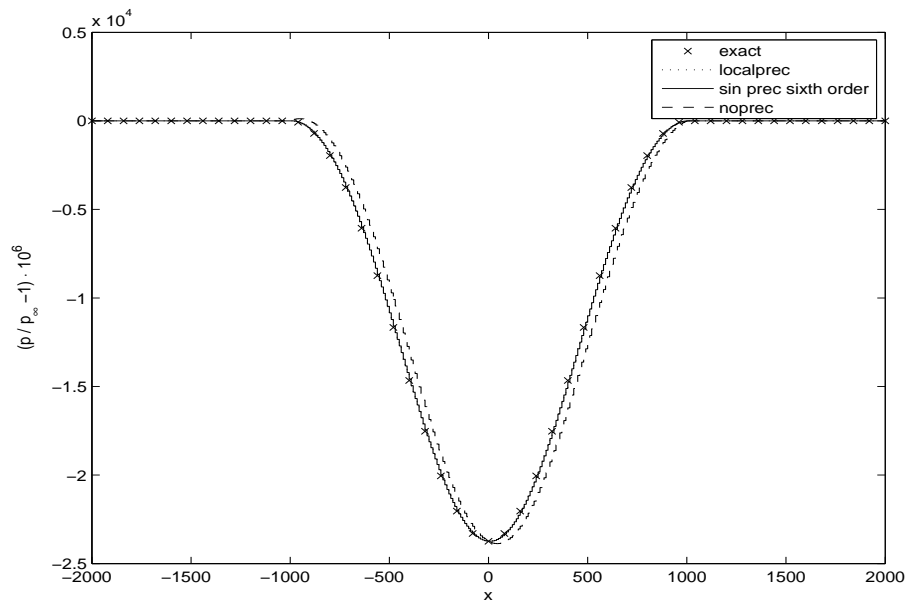


Figura 5.21: Confronto tra vecchio preconditionatore, legge sinusoidale al sesto ordine e nessun preconditionatore, Mach 0.1

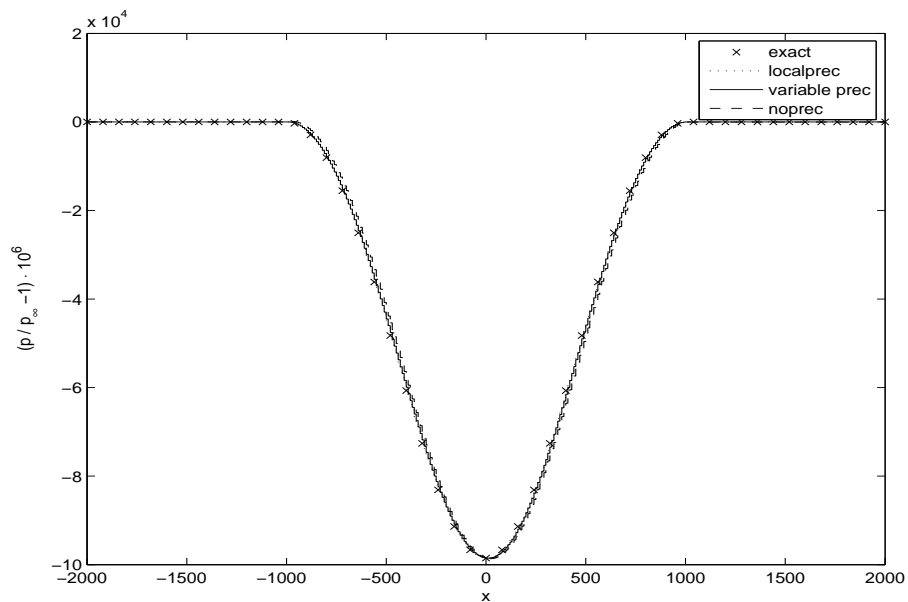


Figura 5.22: Confronto tra vecchio preconditionatore, legge variabile e nessun preconditionatore, Mach 0.2

Capitolo 6

Risultati sistema non lineare

Si è visto nel capitolo 4 come, a causa dei limiti sul passo temporale degli schemi espliciti, sia stato introdotto uno schema implicito. La non linearità di questo schema è stata poi la causa dell'introduzione dello schema implicito linearizzato, più vantaggioso dal punto di vista del costo computazionale. Anche se l'implementazione di uno schema completamente implicito non è praticamente fattibile per uno codice tridimensionale, per il caso monodimensionale trattato nel presente lavoro i costi computazionali di uno schema del genere sono comunque alla portata di un normale personal computer. Avendone la possibilità, pare perciò utile comparare lo schema implicito con la sua versione linearizzata, almeno nel caso monodimensionale, per valutare la bontà della linearizzazione in funzione del confronto fra i risultati. Poiché lo schema implicito non verrà però utilizzato per casi tridimensionali, non sarebbe giustificato lo sviluppo di un solutore di sistemi non lineari specifico per il nostro problema. Piuttosto si è preferito scegliere di implementare librerie già sviluppate e utilizzabili liberamente che fossero in grado di risolvere il nostro sistema.

6.1 Scelta iniziale del metodo di soluzione

Come prima cosa è necessario scegliere il metodo di soluzione da utilizzare per il sistema non lineare. Poiché vogliamo implementare questo metodo da librerie disponibili, è preferibile scegliere fra i metodi più diffusi. Chiaramente il più noto e semplice è il metodo di Newton, che è così definito: si vuole risolvere il sistema:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad \mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (6.1)$$

Scelto $\mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^n$, valore di tentativo per la soluzione e indicando con $\mathbf{J}(\mathbf{u}^*)$ la matrice Jacobiana applicata in \mathbf{u}^* (cioè $\mathbf{J} = \partial_{\mathbf{u}}\mathbf{F}|_{\mathbf{u}^*}$), si itera secondo lo schema seguente:

$$\begin{cases} \mathbf{J}(\mathbf{u}^k) \delta \mathbf{u}^k = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^k) \\ \mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \delta \mathbf{u}^k \end{cases} \quad (6.2)$$

fino a che non risulta soddisfatto uno o più criteri di arresto, i più comuni dei quali sono il valore assoluto del residuo :

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{u}^k)\| < tol_{abs} \quad (6.3)$$

il valore relativo del residuo:

$$\frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{u}^k)\|}{\|\mathbf{F}(\mathbf{u}^0)\|} < tol_{rel} \quad (6.4)$$

e la dimensione relativa del passo di iterazione:

$$\frac{\|\delta\mathbf{u}^k\|}{\|\mathbf{u}^k\|} < tol_{update} \quad (6.5)$$

Il metodo di Newton, nella sua forma base ha il grande vantaggio della semplicità ma presenta anche alcuni problemi, legati alla necessità di avere una buona stima iniziale della soluzione affinché il metodo converga ([33], [34]). Purtroppo non è sempre possibile disporre di un buon candidato iniziale perciò sono state sviluppate delle opportune strategie, dette di globalizzazione. Queste in pratica guidano l'algoritmo fino a quando la soluzione calcolata non entra nella regione di convergenza del metodo di Newton, dopodiché il metodo procede normalmente. Più nel dettaglio, considerando il sistema 6.2 i metodi di globalizzazione agiscono nella fase di aggiornamento della soluzione, perciò in generale non si avrà più che \mathbf{u}^{k+1} è determinato dal passo del metodo di Newton. In letteratura si trovano moltissime strategie di globalizzazione, le più comuni fra queste sono le cosiddette “line search” e “trust region”.

Nel metodo line search si assume che l'aggiornamento della soluzione calcolato con il metodo di Newton, $\delta\mathbf{u}$, rappresenti la direzione in cui muoversi. La nuova soluzione di tentativo sarà allora:

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + s\delta\mathbf{u}^k \quad (6.6)$$

dove s è uno scalare e la sua scelta rappresenta il cuore dell'algoritmo di line search. Il più semplice test che si può fare per determinare s è:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}^k + s\delta\mathbf{u}^k) < \mathbf{F}(\mathbf{u}^k) \quad (6.7)$$

ma esistono altre strategie più sofisticate reperibili in [35].

Il metodo trust region invece differisce dal line search per una importante caratteristica. Con questa strategia non si è più obbligati a muoversi lungo la direzione fornita dal metodo di Newton ma la soluzione viene aggiornata scegliendo $\delta\mathbf{u}$ in modo da minimizzare la norma del modello lineare locale di \mathbf{F} all'interno di una specifica regione, la trust region [34]. Infatti il nome trust region deriva dal fatto che si cerca la soluzione in una regione “fidata”, dove si ritiene valida l'approssimazione:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}^k) + \mathbf{J}(\mathbf{u}^k)\delta\mathbf{u}^k \approx \mathbf{F}(\mathbf{u}^k + \delta\mathbf{u}^k) \quad (6.8)$$

All'interno di questa regione si fa un passo di ampiezza tale da minimizzare $\|\mathbf{F}\|$. In formule abbiamo:

$$\delta\mathbf{u} = \arg \min_{\|\delta\mathbf{u}\| \leq \delta} \|\mathbf{F}(\mathbf{u}^k) + \mathbf{J}(\mathbf{u}^k)\delta\mathbf{u}\| \quad (6.9)$$

dove δ è il raggio della trust region. È importante sottolineare come, nel caso il passo ottenuto con il metodo di Newton abbia norma inferiore a δ , il metodo trust region

fornisca la stessa soluzione. Quando invece lo Jacobiano del sistema è malcondizionato, i due metodi possono fornire direzioni di avanzamento diverse. Calcolare in modo esatto il passo indicato nella equazione 6.9 è solitamente computazionalmente dispendioso perciò sono stati sviluppati vari metodi per approssimarlo. Il più comune tra questi è il passo *dogleg* sviluppato originariamente in [36] e [37]. In questo metodo il passo nella equazione 6.9 è approssimato da una combinazione lineare di due tipi di avanzamento: il primo è quello fornito dal metodo di Newton, il secondo è quello fornito da un metodo di discesa di direzione di massima pendenza, in cui il funzionale da minimizzare è il quadrato della norma di \mathbf{F} :

$$\delta \mathbf{u}^k = -\alpha \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{u}^k) \mathbf{F}(\mathbf{u}^k) - \beta \nabla \|\mathbf{F}\|_2^2 \quad (6.10)$$

L'algoritmo di scelta del valore dei coefficienti α e β dipende dal particolare metodo usato e non sarà qui discussa, è comunque importante ricordare che questo aggiornamento della soluzione, per quanto a prima vista sembri completamente diverso da quello nella equazione 6.9 è una sua approssimazione. Per ulteriori approfondimenti sul metodo trust region si rimanda a [34],[38].

6.2 Prima implementazione del sistema non lineare

Da quanto detto nella sezione precedente, pare opportuno scegliere una libreria che implementi un metodo derivato dal metodo di Newton che incorpori anche una procedura di globalizzazione. Quest'ultima nel nostro caso è necessaria in quanto, dovendo simulare dei problemi non stazionari, non è praticabile la strada di scegliere una soluzione di tentativo *ad hoc* per ogni passo temporale, ma bisogna accontentarci di usare come punto di partenza la soluzione al tempo precedente. Tra le varie librerie disponibili liberamente in rete, sono state considerate le minpack¹ e le GSL². La libreria GSL è scritta in linguaggio C++ ed è una insieme di funzioni matematiche fra cui anche un solutore di sistemi di equazioni non lineari. Questo solutore è derivato dalla libreria minpack ed ha caratteristiche analoghe perciò, a meno che non sia specificato il contrario, tutte le caratteristiche di una libreria sono attribuibili anche all'altra. Il motivo per cui sono state implementate due algoritmi così simili risiede nella differenza dei criteri di arresto disponibili e nella gestione della memoria che verranno descritti successivamente.

Il solutore di queste librerie è basato sull'algoritmo introdotto in [37], che è un metodo di Newton con l'aggiunta di una strategia di globalizzazione basata sul trust region, in particolare il passo di iterazione è il passo *dogleg* discusso nella sezione precedente. Nel nostro caso non disponiamo di una routine che fornisca lo Jacobiano del sistema, necessario per questo metodo, perciò questo verrà approssimato tramite differenze finite, tramite una opzione disponibile in entrambe le librerie. Si ha perciò:

$$\mathbf{J}_j \approx \frac{\mathbf{F}(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{e}_j) - \mathbf{F}(\mathbf{u})}{\epsilon} \quad (6.11)$$

¹disponibili all'indirizzo <http://www.netlib.org/minpack/>

²disponibili all'indirizzo <http://www.gnu.org/software/gsl/>

6.2. Prima implementazione del sistema non lineare

dove J_j è la j -esima colonna dello Jacobiano approssimato, ϵ è uno scalare scelto dalla libreria e \mathbf{e}_j è il j -esimo vettore della base canonica di \mathbb{R}^n . La memoria allocata per lo Jacobiano varia sensibilmente tra le due librerie: le librerie minpack permettono di specificare se lo Jacobiano è una matrice a bande, cioè se tutti gli elementi diversi da zero si trovano su un gruppo di diagonali intorno a quella principale (l'esempio più semplice è la matrice tridiagonale) e memorizzano solo questi valori. Per contro le librerie GSL non permettono di specificare questa opzione e memorizzano sempre n^2 valori, dove n è la dimensione del sistema

Per quanto riguarda i criteri di arresto, le librerie minpack permettono solo un controllo sulla dimensione relativa del passo di iterazione (come nella equazione 6.5), mentre le librerie GSL, permettono anche un controllo del tipo:

$$\sum_i |\mathbf{F}_i| \leq tol_{abs} \quad (6.12)$$

dove con \mathbf{F}_i si indica la i -esima componente della funzione \mathbf{F} . Inoltre le librerie GSL danno la possibilità di fornire all'utente un suo criterio di convergenza. Le due librerie sono state descritte così in dettaglio in quanto i risultati che ora si esporranno possono essere spiegati solo tenendo presente queste caratteristiche.

Sono state fatte prove usando come casi alcuni problemi di Riemann e il moto in un ugello a basso numero di Mach, sia con legge di stato cavitante che politropica. Il miglior risultato ottenuto con le librerie minpack, dove per miglior risultato si intende la simulazione con la griglia spaziale più raffinata con cui il solutore non lineare giunge a convergenza, riguarda il caso riportato in tabella 6.1 La simulazione

Problema	κ	\varkappa	ρ_∞	u_∞	A_{min}/A_∞	M_∞
NL1	1	10^6	1	1	0.10	10^{-3}

Tabella 6.1: Problema per l'ugello.

è stata fatta girare con le caratteristiche mostrate in tabella 6.2 mentre i risultati ottenuti sono mostrati nelle figure 6.1 e 6.2. È importante sottolineare come

Δx	N Celle	Δt	t_{max}
10	400	1	300

Tabella 6.2: Caratteristiche simulazione

gli errori nel grafico della pressione, figura 6.1 siano da imputare al fatto che la soluzione numerica non è ancora arrivata in regime stazionario. Tuttavia, confrontando questo risultato con prova analoghe fatte con lo schema implicito linearizzato, si può stabilire che il sistema non lineare stia tendendo alla soluzione stazionaria. La simulazione è stata interrotta dopo un ridotto numero di passi temporali, 300, eseguiti in circa cinque ore, in quanto per arrivare ad una condizione stazionaria

6.2. Prima implementazione del sistema non lineare

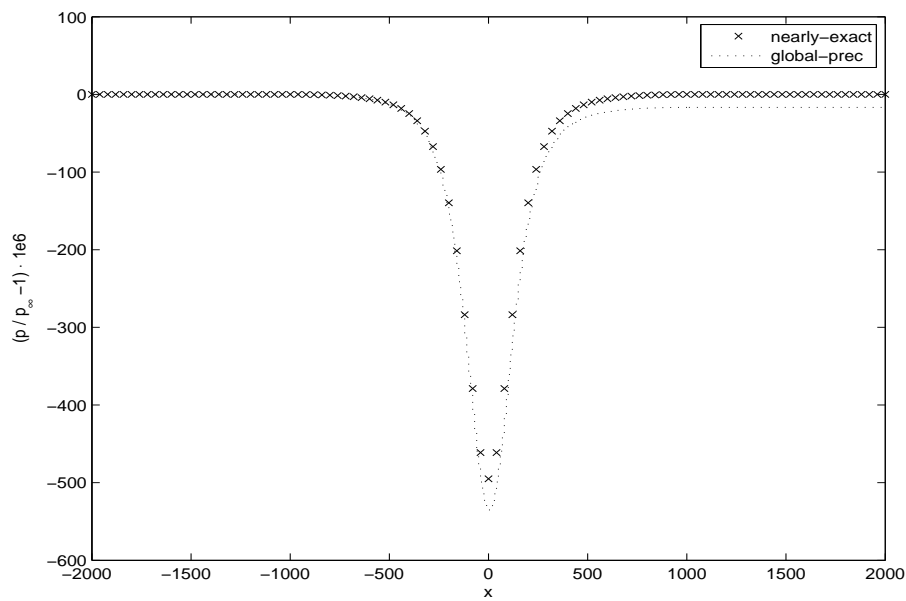


Figura 6.1: Risultati per NL1, pressione

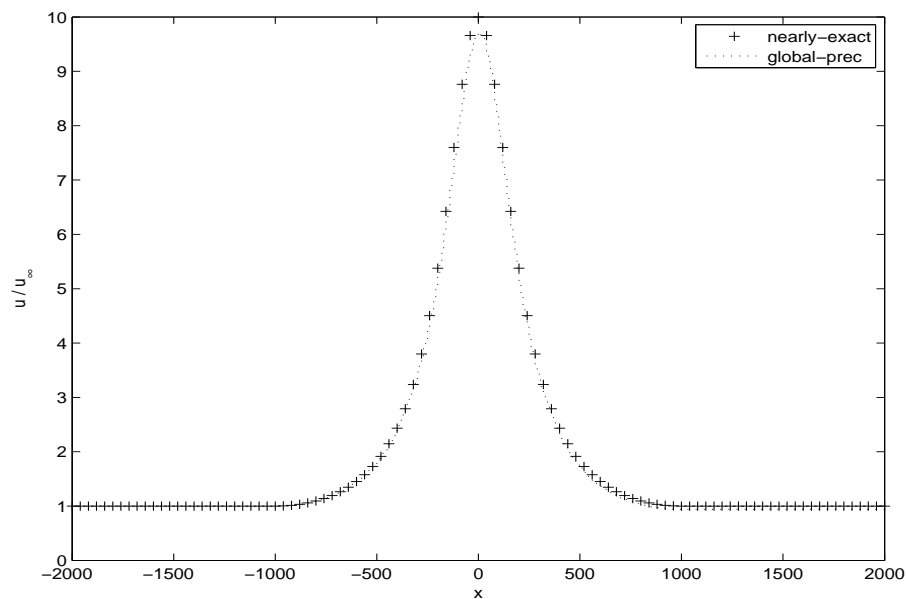


Figura 6.2: Risultati per NL1, velocità

sarebbe stato necessario arrivare a circa 5000 iterazioni. Il tempo impiegato sarebbe stato eccessivo, soprattutto considerando i problemi di convergenza dello schema in altre simulazioni, problemi che devono essere risolti per aver un confronto valido tra schema non lineare e implicito linearizzato.

Per quanto riguarda il problema di Riemann, il caso in cui si sono ottenuti i risultati migliori è mostrato in tabella 6.3 e le caratteristiche della simulazione sono mostrate in tabella 6.4.

È importante sottolineare come, nonostante il tempo finale della simulazione sia un

6.2. Prima implementazione del sistema non lineare

Problema	κ	\varkappa	γ	ρ_L	u_L	ξ_L	ρ_R	u_R	ξ_R	M_∞
NL2	10^6	1	0	1.02	10	2	1	20	4	10^{-2}

Tabella 6.3: Problemi considerati con legge di stato politropica

Δx	N Celle	Δt	t_{max}
5	800	10^{-2}	0.1

Tabella 6.4: Caratteristiche simulazione problema di Riemann

decimo rispetto a quello usato nelle simulazioni nel capitolo 5, la griglia spaziale sia cinque volte meno raffinata e il passo temporale sia il più grande, questa simulazione per arrivare a termine abbia impiegato poco più di un giorno. I risultati sono mostrati nelle figure 6.3 e 6.4. L'unica conclusione che si può trarre dalle figure è

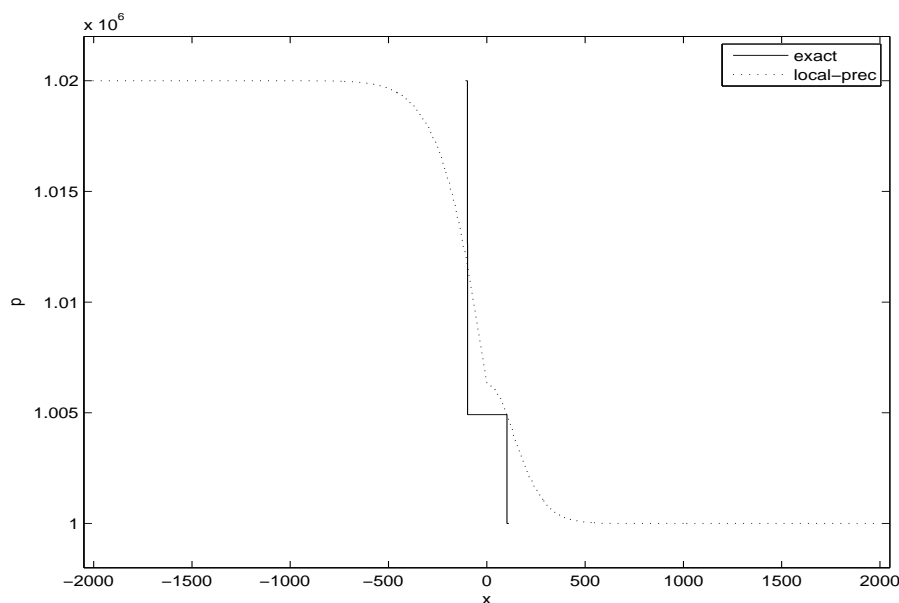


Figura 6.3: Risultati per NL2, pressione

che, nonostante i lunghi tempi di calcolo, la discretizzazione spaziale e temporale è insufficiente: osservando il grafico della pressione si può vedere come l'intervallo a valore costante intorno allo zero non sia risolto perché le discontinuità sono troppo smussate, sintomo di una griglia troppo poco raffinata.

Per entrambi i casi, moto in un ugello e problema di Riemann, è chiaro che sarebbe necessario utilizzare griglie più raffinate, i tempi necessari però a portare a termine queste simulazioni sarebbero però dell'ordine delle settimane. Anche se si volesse prendere in considerazione l'ipotesi di fare simulazioni così lunghe per delle simulazioni monodimensionali, vi sono altri due notevoli problemi nel raffinare la griglia:

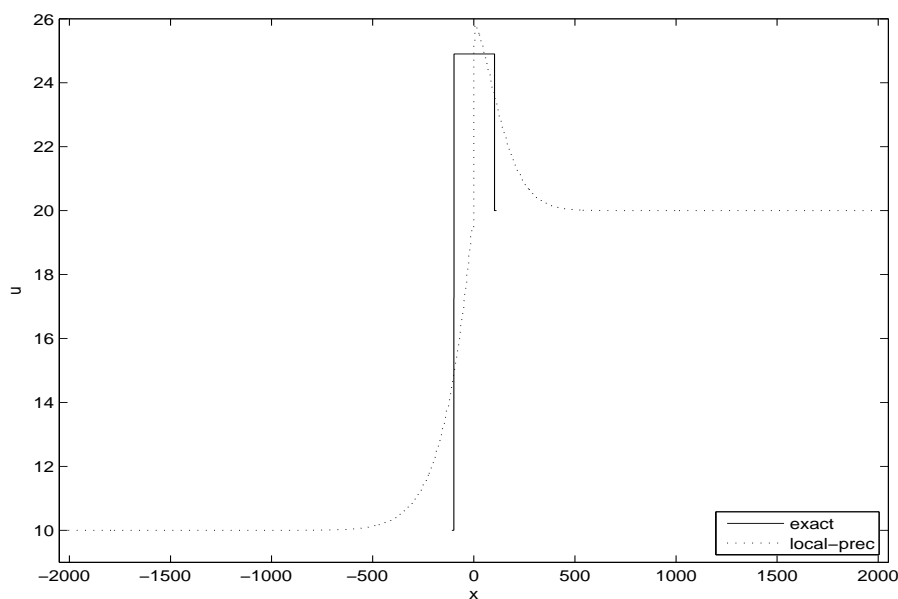


Figura 6.4: Risultati per NL2, velocità

la quantità di memoria utilizzata e le difficoltà di convergenza. Per fare una simulazione con 4000 celle, la griglia spaziale meno raffinata impiegata nelle simulazioni del capitolo 5, anche con le librerie minpack, che cercano di risparmiare memoria, sono necessari circa 2 GB di ram, è quindi impensabile di poter arrivare alla griglia più raffinata composta da 40000 celle. Oltre a questo è necessario sottolineare che all'aumentare del numero di celle si hanno sempre maggiori difficoltà di convergenza per ogni iterazione del sistema non lineare. Questo problema è probabilmente dovuto ai criteri di arresto utilizzati (equazioni 6.5 e 6.12), unitamente alla natura del problema di Riemann. Infatti dalla soluzione analitica risulta che ad ogni passo temporale solo un determinato numero di celle si modificano, mentre le altre rimangono costanti. Perciò solo alcune fra le equazioni del sistema non lineare sono diverse da zero mentre le altre hanno già la soluzione corretta: controlli come quelli nelle equazioni 6.5 e 6.12 non sono però in grado di distinguere fra una condizione in cui tante equazioni danno un piccolo errore e una in cui sono tutte corrette eccetto alcune che danno un grande errore (come la soluzione di partenza del problema di Riemann nel nostro caso), perciò, a meno che non si mettano soglie particolarmente restrittive, la soluzione iniziale può venire associata ad una soluzione corretta. Questo problema può essere risolto modificando i criteri di arresto ma, visto che questo non sarebbe sufficiente per permettere di fare simulazioni più raffinate, si è deciso di procedere in un'altra direzione.

6.3 Scelta di un nuovo metodo di soluzione di sistemi non lineari

Da quanto detto nella sezione precedente deriva che per arrivare a fare simulazioni con il sistema non lineare è necessario ridurre notevolmente sia i tempi di calcolo

6.3. Scelta di un nuovo metodo di soluzione di sistemi non lineari

che la memoria occupata. È perciò necessario agire su quelle parti dell'algoritmo che causano questi problemi. Per quanto riguarda la memoria la parte del leone è quella dello Jacobiano: se dovessimo memorizzare tanti elementi in doppia precisione quanti sono le componenti dello Jacobiano, data una griglia di 4000 celle e quindi di 12000 incognite (in ogni celle abbiamo le tre incognite del vettore di stato) avremmo 144 milioni di numeri in doppia precisione da memorizzare. Considerando che ognuno di questi occupa 8 byte di memoria sono richiesti 1100 GB di memoria! Anche nel caso che la memorizzazione dello Jacobiano sia fatta tenendo conto che è una matrice a bande (nel qual caso la memoria richiesta cresce linearmente con le dimensioni del sistema) per il sistema appena discusso sarebbero necessari 0.8 GB a cui devono essere aggiunti i vari vettori di appoggio che approssimativamente in questo caso raddoppiano la richiesta di memoria. Perciò, nella scelta di un nuovo algoritmo di soluzione di sistemi non lineari non sarà considerato accettabile nessun metodo che abbia richieste di memoria superiori al metodo di allocazione per matrici a bande ed è gradita la caratteristica di richiedere ancora meno risorse.

Come abbiamo detto è necessario anche ridurre i tempi di calcolo, nuovamente il collo di bottiglia è causato dal calcolo approssimato dello Jacobiano. Osservando infatti l'equazione 6.11 si vede come per valutare ogni colonna di \mathbf{J} sia necessario calcolare la funzione $\mathbf{F}(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{e}_j)$ perciò, anche nelle condizione migliore in cui è sufficiente una sola iterazione del metodo di Newton, per un sistema di dimensione 12000 è necessario calcolare 12000 volte la funzione \mathbf{F} . Poiché anche il tempo necessario ad ottenere \mathbf{F} cresce con le dimensioni del sistema, si capisce come con questa strategia di stima dello Jacobiano la simulazione di sistemi di grandi dimensioni richieda tempi proibitivi.

Da quanto appena detto si capisce che bisogna operare sulla prima equazione del sistema 6.2, cioè sul sistema lineare associato ad ogni iterazione del metodo di Newton, per avere un solutore efficiente.

Se si volesse risolvere questo sistema lineare in modo diretto, cioè con un metodo che fornisca la soluzione in un numero finito di passi avremmo poco margine di manovra sia per quanto riguarda i tempi di calcolo che per la memorizzazione, in quanto un metodo di questo tipo deve necessariamente calcolare o lo Jacobiano o una matrice ad esso associata ed è proprio questa operazione che è computazionalmente dispendiosa. Si è scelto di passare ad un metodo che risolva soltanto in modo approssimato il sistema lineare in 6.2, che però ci dia la possibilità di risparmiare risorse. Soluzioni di questo tipo, che approssimano soltanto il passo del metodo di Newton, sono detti metodi di Newton inesatti. Il passo $\delta \mathbf{u}^k$ è scelto in modo da verificare :

$$\|\mathbf{J}(\delta \mathbf{u}^k) \delta \mathbf{u}^k + \mathbf{F}(\delta \mathbf{u}^k)\| < \eta_k \|\mathbf{F}(\delta \mathbf{u}^k)\| \quad \eta_k \in (0, 1] \quad (6.13)$$

dove η_k , che è chiamato forzante, può essere una costante o variare tra le varie iterazioni, a seconda del particolare algoritmo scelto. La maggioranza dei metodi di Newton inesatti utilizzano algoritmi iterativi per la soluzione dei sistemi lineari, perciò si hanno globalmente due cicli di iterazioni: il primo associato al metodo di Newton che si ferma raggiunto uno dei criteri di arresto già discussi, il secondo associato alla soluzione del sistema lineare che si interrompe quando la 6.13 è verificata. Tutto ciò non esclude inoltre che a questo metodo sia associata una strategia di globalizzazione, come quelle già descritte nella sezione 6.1, perciò gli algoritmi che

rientrano sotto il nome di metodi di Newton inesatti sono una famiglia molto vasta e possono essere notevolmente articolati. All'interno di questa famiglia sembrano adatti per i nostri scopi i metodi di tipo Newton-Krylov senza Jacobiano, di cui daremo ora una descrizione.

6.4 Metodi di Newton-Krylov senza Jacobiano

Stando a quanto affermato in una pubblicazione di D.A. Knoll e D.E. Keyes [33], le origini dei metodi Newton-Krylov senza Jacobiano si possono far risalire a pubblicazioni sulla soluzione di equazioni alle derivate parziali ed equazioni differenziali ordinarie (come per esempio [39]). La motivazione principale per la nascita di questi metodi stanno nella capacità di compiere una iterazioni del metodo di Newton senza bisogno di calcolare lo Jacobiano. Questa caratteristica li rende quindi ideali anche per il nostro caso. In pratica i metodi Newton-Krylov sono dei metodi di Newton in cui la soluzione del sistema lineare è ottenuta in modo iterativo con un metodo di Krylov. Di questi algoritmi si parla in forma estesa in vari articoli, vedi [40], mentre per spiegarne il funzionamento si seguirà l'esposizione fatta da C.F. Ipsen e C.D.Meyer [41]. Sia dato il sistema lineare :

$$Ax = b \tag{6.14}$$

dove A è una generica matrice non singolare³, b è il termine noto ed x la soluzione incognita⁴. Scelta una stima iniziale della soluzione x_0 , i metodi di Krylov al passo k producono una approssimazione della soluzione x_k appartenente ad un particolare spazio di Krylov generato dal vettore x_0 , il k -esimo spazio di Krylov associato alla matrice A e al residuo iniziale c :

$$\begin{cases} x_k \in \mathcal{K}_k(A, c) \equiv \text{span}\{c, Ac, \dots, A^{k-1}c\} \\ c = b - Ax_0 \end{cases} \tag{6.15}$$

Quando $x_0 = 0$ il vettore c coincide con b . È sempre possibile ricondursi a questo caso in quanto, dato $r_0 = b - Ax_0$ possiamo risolvere il sistema $Ap = r_0$ e ottenere la soluzione come $x = x_0 + p$. Perciò al costo di sostituire b con r_0 , e x con p , possiamo sempre supporre $c \equiv b$. Il modo di determinare x_k nell'equazione 6.15 varia da metodo a metodo, non tutti gli algoritmi sono applicabili a matrici non simmetriche come il nostro caso, perciò siamo interessati a metodi di Krylov che non sfruttino proprietà di simmetria. Fra questi il più utilizzato è il GMRES (metodo dei minimi residui generalizzato) introdotto nel 1986 [42]. In generale x_k viene ottenuta minimizzando rispetto ad una norma una qualche funzione obiettivo. Ad esempio, nel metodo dei minimi residui generalizzato x_k è scelto in modo da risolvere il problema dei minimi quadrati rispetto a b nello spazio $\mathcal{K}_k(A, b)$ cioè:

$$x_k = \min_{z \in \mathcal{K}_k(A, b)} \|b - Az\|_2 \tag{6.16}$$

³In realtà, sotto opportune ipotesi, i metodi di Krylov sono applicabili anche a matrici singolari, non essendo questa condizione di interesse per il nostro lavoro, non verrà trattata. Si rimanda alla bibliografia per maggiori approfondimenti [41]

⁴Si è cambiata la simbologia in questo paragrafo per sottolineare che quanto sarà detto è valido per un generico sistema lineare, non solo per il nostro caso.

Indipendentemente dal modo in cui viene effettivamente ottenuto x_k , si può dimostrare che se il sistema ha dimensione n , allora entro e non oltre l'ennesima iterazione, un qualunque metodo di Krylov è in grado di fornire la soluzione esatta (in assenza di metodi di troncamento) al sistema 6.14.

Se fosse questo l'obiettivo però, almeno dal punto di vista del costo computazionale, i metodi di Newton-Krylov non presenterebbero particolari vantaggi: al posto di calcolare la matrice A^{-1} si dovrebbero calcolare gli n vettori $b, Ab, \dots, A^{n-1}b$, compiendo $n - 1$ prodotti tra matrice e vettore. In entrambi i casi il numero delle operazioni da compiere sarebbe dell'ordine di n^3 e quindi i tempi sono analoghi ai metodi diretti classici per la soluzione di sistemi lineari. Solitamente questi metodi vengono utilizzati come solutori approssimati: poiché $\mathcal{K}_{k_1}(A, b) \subset \mathcal{K}_{k_2}(A, b)$ per $k_1 < k_2$, il vettore x_k è una approssimazione sempre migliore della soluzione esatta. Si può perciò interrompere l'algoritmo al passo k^* , quando la soluzione approssimata verifica un opportuno criterio di arresto, ad esempio un valore massimo per la norma del residuo o il numero di iterazioni compiute. Se per $k = k^*$ non è stata raggiunta la convergenza desiderata, si ripete il procedimento partendo da $r_0 = b - Ax_{k^*}$.

Agendo in questo modo è perciò possibile ridurre notevolmente i tempi di calcolo e le esigenze di memorizzazione: se \bar{k} è la massima dimensione dello spazio di Krylov in cui si cerca la soluzione dovremo calcolare e memorizzare solo i vettori $b, Ab, \dots, A^{\bar{k}-1}b$, risparmiando $n - \bar{k}$ operazioni.

Si può notare che, in questo caso, si perde il risultato teorico di convergenza in al più n iterazioni. Nonostante ciò, in pratica si ottiene ancora la convergenza e si ha una notevole riduzione del costo computazionale (memoria e tempo di calcolo). Nel nostro caso particolare, il sistema lineare è quello della equazione 6.2 e la matrice \mathbf{J} deve essere calcolata per ogni passo del metodo di Newton. L'uso di un metodo di Krylov è di grande interesse in quanto non è necessario calcolare lo Jacobiano. Infatti, come si può intuire dalle equazioni 6.15 e 6.16, questi algoritmi richiedono solo che, dato un generico vettore \mathbf{v} si abbia un metodo che permetta di calcolare $A\mathbf{v}$. Nel nostro caso noi possiamo ottenere $\mathbf{J}\mathbf{v}$, sfruttando la derivata direzionale (derivata nel senso di Gâteaux) di \mathbf{F} in \mathbf{u} :

$$\mathbf{J}\mathbf{v} \approx \frac{\mathbf{F}(\mathbf{u} + \epsilon\mathbf{v}) - \mathbf{F}(\mathbf{u})}{\epsilon} \quad (6.17)$$

perciò per ogni iterazione del metodo di Krylov è sufficiente calcolare la funzione una sola volta, al contrario dell'equazione 6.11. Anche per la scelta del valore di ϵ vi sono varie strategie, per una loro presentazione si rimanda alla bibliografia [33]. Un algoritmo che approssimi il prodotto $\mathbf{J}\mathbf{v}$ come in 6.17 non richiede né il calcolo né la memorizzazione dello Jacobiano ma solo quello dei vettori che formano la base dello spazio di Krylov. Scegliendo quindi in modo opportuno \bar{k} , la dimensione massima dello spazio in cui si cerca la soluzione, è possibile ridurre notevolmente le richieste di tempo e di memoria rispetto ad un metodo di Newton tradizionale⁵. Per maggiori

⁵Chiaramente vi è un valore di \bar{k} ottimale in quanto cercare la soluzione in spazi di dimensione modesta può far aumentare il numero di iterazioni richieste al metodo di Newton, mentre porre requisiti severi sulla soluzione fornita dal metodo di Krylov può far aumentare il tempo di calcolo senza ridurre i passi richiesti al metodo di Newton

informazioni sui metodi di Newton-Krylov in generale o sulle loro caratteristiche di convergenza si rimanda alla bibliografia [40],[43] e [44].

6.5 Implementazione del sistema di soluzione non lineare

Per quanto detto nella sezione precedente, come secondo tentativo si è deciso di usare delle funzioni che supportassero i metodi di Newton-Krylov senza Jacobiano. Sono state selezionate due librerie fra quelle disponibili: le sundials⁶ e le PETSc⁷. Entrambe supportano molteplici varianti di questi metodi, la caratteristica per cui si differenziano risiede nelle strategie disponibili di globalizzazione: le PETSCs supportano sia la trust region che il line search, mentre le sundials solo questa seconda opzione.

Ciononostante inizialmente si era deciso di implementare le librerie sundials a causa della loro maggiore semplicità di utilizzo. Per quanto riguarda i problemi di memoria e di calcolo questa libreria ha confermato i vantaggi promessi dai metodi Newton-Krylov. Tuttavia già nelle simulazioni fatte per determinare i settaggi migliori per il nostro caso, si sono riscontrati notevoli problemi di convergenza del metodo. Queste difficoltà sono state trovate anche in situazioni in cui le librerie minpack o GSL erano riuscite a convergere. Per questo motivo si è deciso di ipotizzare che la causa fosse il diverso metodo di globalizzazione, cioè che il metodo line search fosse meno adatto dell'algoritmo trust region. Si sono allora implementate le librerie PETSc per verificare questa ipotesi e si sono ripetute le prove per calibrare i parametri liberi della libreria con esito positivo. Per questo motivo si è deciso di utilizzare per il confronto fra schema implicito linearizzato e schema completamente implicito la libreria PETSc. Il metodo di Krylov che ha fornito i migliori risultati è il GMRES e perciò tutti i confronti sono stati fatti con metodo Newton-GMRES e strategia di globalizzazione trust region.

6.6 Caratteristiche del confronto

Una volta implementato il sistema non lineare si sono decise le caratteristiche dei confronti da effettuare. I due schemi saranno valutati sia in termini di accuratezza dei risultati che in termini di tempo di calcolo richiesto. Il confronto verrà fatto sia con la legge di stato cavitante che politropica e verranno valutati i risultati sia con il problema di Riemann che con il moto in un ugello.

Lo schema completamente implicito ha evidenziato caratteristiche di convergenza che dipendono in modo marcato dal rapporto tra dimensione delle celle e passo temporale, $\frac{\Delta x}{\Delta t}$, in particolare a seconda del problema e della legge di stato si ha un valore minimo di questo rapporto oltre il quale non si arriva mai a convergenza. Se questa caratteristica sia legata a quanto è scritto in appendice A oppure sia propria del particolare risolutore impiegato è da stabilire. Le implicazioni di questa

⁶disponibili all'indirizzo <http://www.llnl.gov/casc/sundials/>

⁷disponibili all'indirizzo <http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/>

dipendenza saranno meglio illustrate discutendo i risultati delle simulazioni del moto in un ugello in sezione 6.7.

Limitatamente alle simulazioni di problemi di Riemann, si è scelto di non utilizzare il preconditionatore in quanto, come si è visto nel capitolo 5, è con questa opzione che si ottengono i risultati migliori.

6.7 Simulazioni del moto in un ugello

Il primo confronto fra lo schema implicito linearizzato e quello non linearizzato è stato fatto simulando il moto in un condotto. Stabilire dei criteri di confronto fra i due schemi in questo caso non è facile per due caratteristiche di questa problema: la prima è che si non si dispone della soluzione esatta non stazionaria, ma solo di quella stazionaria, la seconda sono i limiti legati al rapporto $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ del sistema non lineare. Il primo motivo fa sì che si possano confrontare le soluzioni ottenute solo una volta che queste siano diventate stazionarie. Già questo requisito richiede di definire quando una soluzione del codice è effettivamente stazionaria. Nel codice non linearizzato vi è la possibilità di determinare questa condizione in modo semplice: quando ad una determinata iterazione il residuo iniziale del sistema, che è ottenuto utilizzando come soluzione di tentativo $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n$, soddisfa già un criterio di arresto, la soluzione trovata dal solutore coincide con la soluzione al tempo precedente. Poichè da questa iterazione in poi il sistema non lineare non evolve più, possiamo associare questa condizione alla condizione di stazionarietà che cercavamo.

In questo modo si determina l'iterazione temporale a cui gli schemi devono essere confrontati. La limitazione del passo temporale dello schema non linearizzato non è facilmente superabile, anche perché il valore minimo di $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ non è un valore fisso ma varia a seconda che nel codice sia attivo o meno il preconditionatore. Si è perciò deciso di procedere in questo modo: per ogni schema si è determinato il massimo passo temporale consentito o, nel caso dello schema implicito linearizzato, in cui non pare esserci questo limite, ci si è fermati a $\Delta t = 10^2$. I tempi necessari alle simulazioni sono stati considerati quelli necessari con questi passi temporali a raggiungere la condizione di stazionarietà. Limitatamente alle simulazioni del moto in un ugello si è scelto di utilizzare nel confronto anche l'avanzamento temporale esplicito, in modo da evidenziare con maggiore chiarezza l'influenza sul tempo di esecuzione dello schema di avanzamento temporale. Il problema utilizzato per queste prove è mostrato in tabella 6.5: la legge di stato utilizzata è del tipo shallow water, il numero di Mach è ridotto in modo da richiedere l'utilizzo del preconditionatore: saranno confrontati i risultati degli schemi sia con questa opzione attiva che disattiva. Nelle figure 6.5 e 6.6 sono mostrati i risultati ottenuti, la discretizzazione spaziale è

Problema	κ	\varkappa	ρ_∞	u_∞	A_{min}/A_∞	M_∞
NL3	2	0.5	900	$3 \cdot 10^{-2}$	0.90	10^{-3}

Tabella 6.5: Caso per l'ugello.

6.7. Simulazioni del moto in un ugello

la stessa di tabella 6.2 mentre il tempo finale di avanzamento è scelto come detto precedentemente.

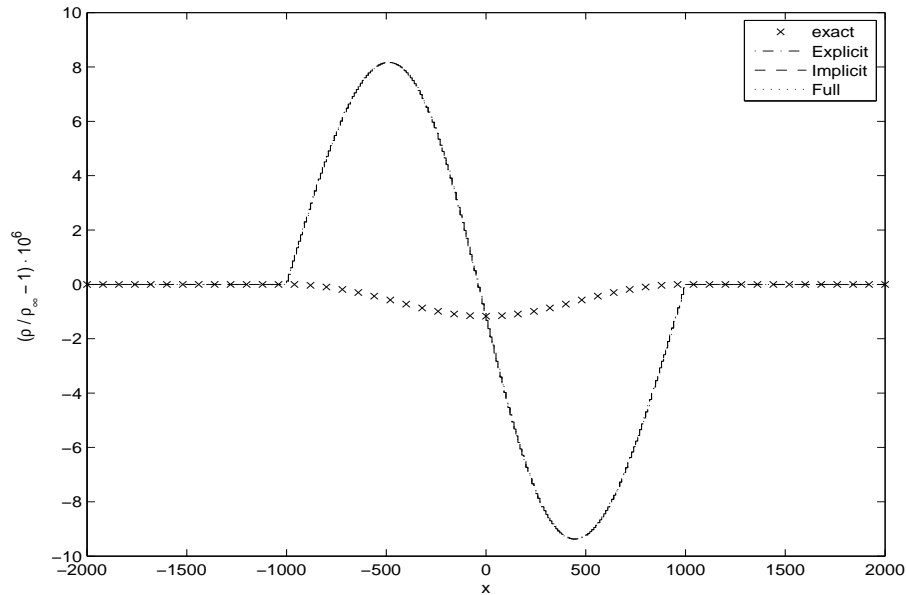


Figura 6.5: Risultati per NL3, senza preconditionamento, densità

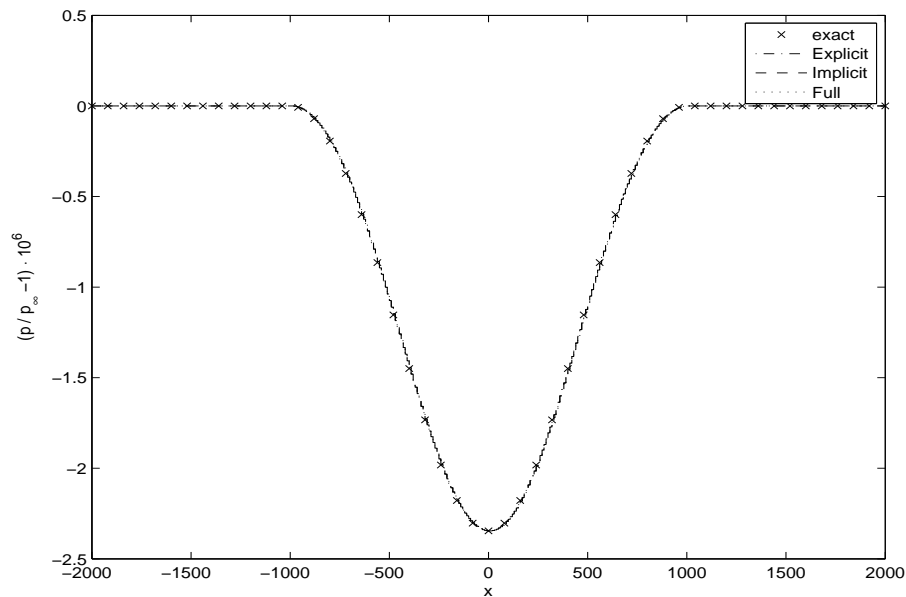


Figura 6.6: Risultati per NL3, con preconditionatore locale, pressione

Dalle figure si può osservare come in termini di precisione i tre schemi diano risultati identici sia con preconditionatore che senza. Dove invece i tre schemi si differenziano in modo marcato è nel tempo di calcolo, mostrato in tabella 6.6. In questa tabella E sta per l'avanzamento temporale esplicito, L per l'implicito linearizzato e NL per lo schema completamente implicito. Si è usato il simbolo ∞ per indicare che il passo

6.8. Problema di Riemann con legge di stato politropica

temporale può essere aumentato a piacere e per i tempi si sono considerati misure inaccurate tutte quelle inferiori al secondo, per cui si è semplicemente scritto $< 1 s$, mentre si sono indicati con m i minuti e h le ore. Questi tempi sono stati ottenuti

Precondizionatore		E	L	NL
Spento	Δt_{max}	10^{-1}	∞	10^0
	CPU time	$\approx 6 s$	$< 1 s$	$\approx 50 s$
Locale	Δt_{max}	10^{-4}	∞	10^0
	CPU time	$\approx 6 h 52 m$	$< 1 s$	$\approx 1 h 11 m$

Tabella 6.6: Tempi di calcolo necessari per il problema NL3

con un processore AMD Atholon 64 X2 5000+, con 2 GB di ram. Questo computer è un dual core, ed il programma è stato fatto girare utilizzando uno solo dei due core. Dalla tabella risulta che per quanto riguarda la linearizzazione dello schema implicito, nel caso del moto in un ugello, questo non causa mancanza di precisione dello schema e riduce notevolmente i tempi di calcolo sia rispetto al caso esplicito che all'implicito non linearizzato.

6.8 Problema di Riemann con legge di stato politropica

Rispetto al moto in un condotto la simulazione del problema di Riemann ha il vantaggio di avere soluzione analitica anche se il problema è non stazionario, questo permette di valutare le prestazioni degli schemi a parità di Δt . In queste sezione si faranno simulazioni con legge di stato politropica, successivamente si passerà a quella cavitante. Il caso scelto per le prove è quello già utilizzato per le librerie minpack e GSL, il caso NL2, mostrato in tabella 6.3. Per il confronto sono state utilizzate 9 diverse griglie, mostrate in tabella 6.7. Passando dalla griglia GR-2+1 alla GR-4-1 si passa da dover risolvere un sistema di 1200 equazioni per 100 volte ad uno di 120000 equazioni per 10000 passi temporali. Il fatto di aver potuto affrontare simulazioni di questa dimensione è una riprova dei miglioramenti ottenuti con questo solutore non lineare rispetto ai primi implementati. Nelle figure dalla 6.7 alla 6.12 sono mostrati alcuni dei risultati ottenuti.

Come si può vedere i due schemi impliciti forniscono risultati praticamente identici confermando perciò la bontà dello schema linearizzato. L'unico caso in cui i due schemi danno risultati differenti è con la griglia GR-2-1: in questo caso infatti lo schema non linearizzato ha avuto problemi di convergenza, a causa del rapporto $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ troppo basso, pari a 10, problema di cui si è discusso nella sezione 6.7. Si è comunque deciso di forzare lo schema a portare a termine la simulazione⁸, i risultati

⁸Si è ottenuto questo risultato rilassando i criteri di arresto per la soluzione, accettando, limitatamente al caso in questione un residuo pari a 10^{-2} , il minimo che ha permesso alla soluzione di arrivare a termine

Griglia	Problema	Δx	Δt
GR-2+1	NL2	10^{+1}	10^{-2}
GR-3+1			10^{-3}
GR-4+1			10^{-4}
GR-2-0		10^0	10^{-2}
GR-3-0			10^{-3}
GR-4-0			10^{-4}
GR-2-1		10^{-1}	10^{-2}
GR-3-1			10^{-3}
GR-4-1			10^{-4}

Tabella 6.7: Griglie utilizzate per il problema NL2

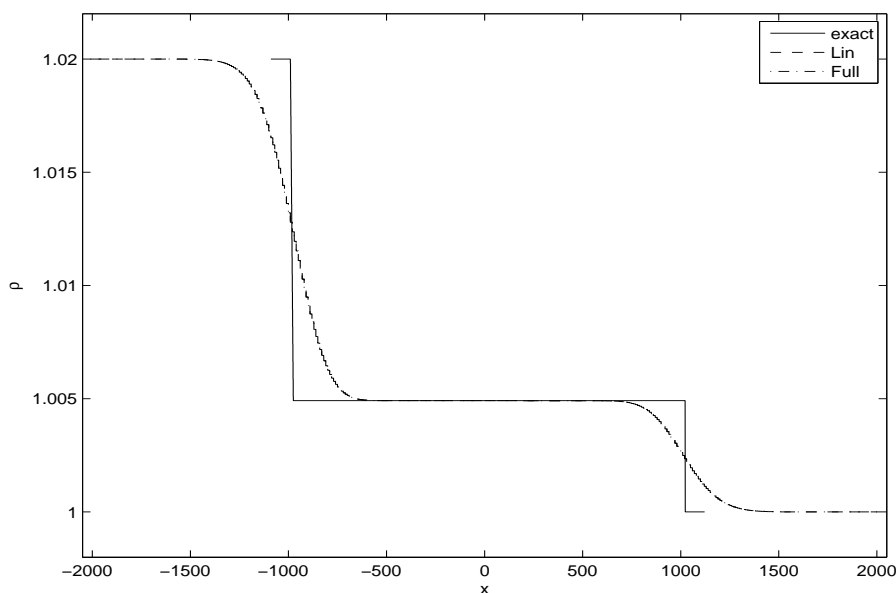


Figura 6.7: Risultati per NL2, griglia GR-2+1, densità

ottenuti sono mostrati in figura 6.13.

È interessante notare come lo schema non perda la soluzione ma “rimanga indietro” rispetto ad essa: questo risultato fa pensare che nel caso del solutore non lineare i problemi dovuti ad un basso rapporto $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ siano causati dal maggiore accoppiamento fra le equazioni del sistema che si ha in questo caso. Lo scopo di questo lavoro però non è quello di sviluppare uno schema non linearizzato perciò non si è indagato oltre su questa caratteristica.

Eccetto il caso appena menzionato, i risultati numerici non evidenziano quindi differenze degne di nota fra le due implementazioni. La caratteristica in cui i due schemi si differenziano notevolmente invece, e che rende lo schema linearizzato preferibile, è il tempo impiegato per raggiungere la soluzione. In tabella 6.8 sono mostrati i tempi di elaborazione per ogni simulazione la colonna L si riferisce allo schema linearizza-

6.8. Problema di Riemann con legge di stato politropica

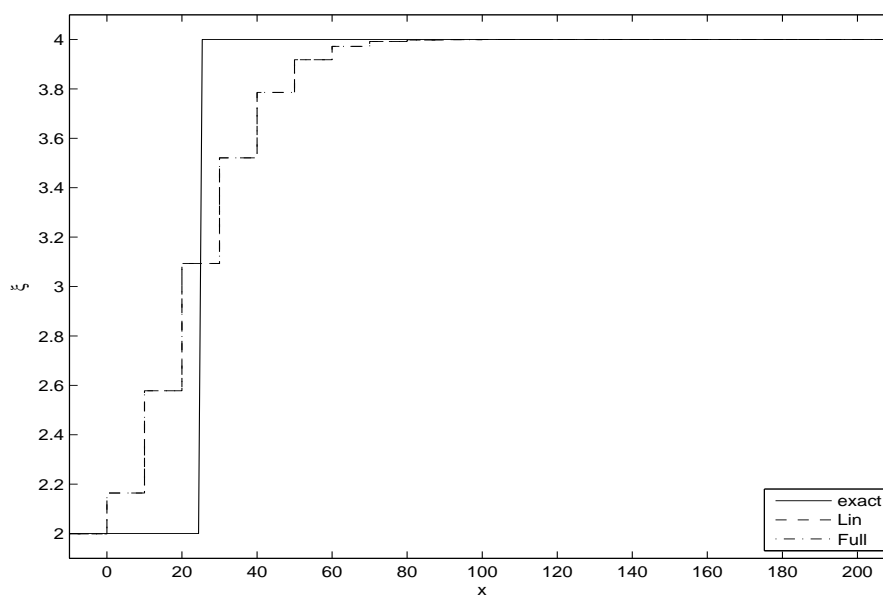


Figura 6.8: Risultati per NL2, griglia GR-4+1, scalare passivo

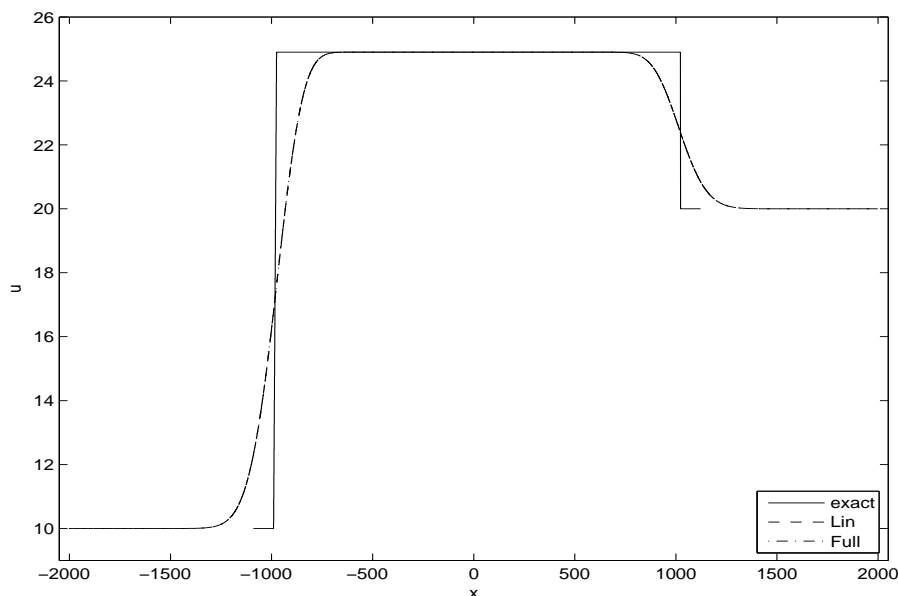


Figura 6.9: Risultati per NL2, griglia GR-2-0, velocità

to, NL per quello completamente implicito. Questi tempi sono stati ottenuti con un processore AMD Atholon 64 X2 5000+, con 2 GB di ram. Questo computer è un dual core, ed il programma è stato fatto girare utilizzando uno solo dei due core. Si può osservare come il tempo richiesto per le simulazioni dello schema linearizzato sia lineare con le dimensioni della griglia e il numero di iterazioni. Al contrario lo schema completamente linearizzato non esibisce questo comportamento ma, in proporzione il tempo di convergenza diminuisce al diminuire del passo temporale. Nuovamente questo è dovuto alle difficoltà dello schema a lavorare con grandi Δt e

6.8. Problema di Riemann con legge di stato politropica

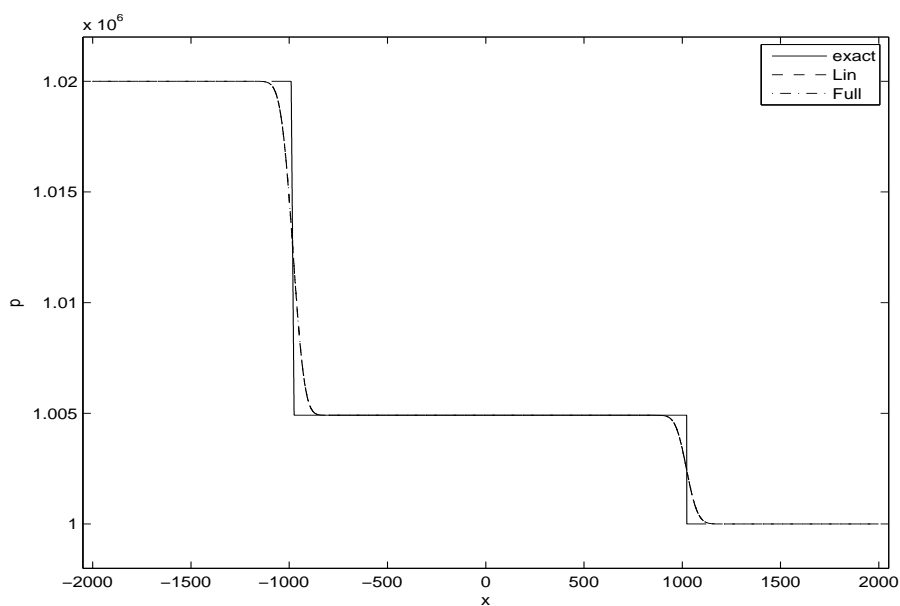


Figura 6.10: Risultati per NL2, griglia GR-3-0, pressione

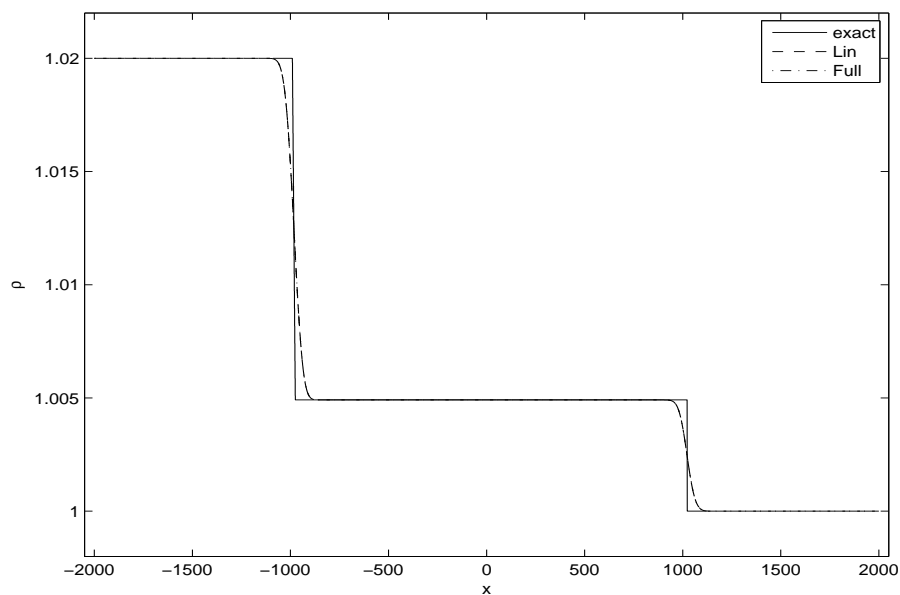


Figura 6.11: Risultati per NL2, griglia GR-3-1, densità

piccoli Δx . Indipendentemente dalla dipendenza del tempo di calcolo dalla dimensione del sistema, la tabella 6.8 mostra chiaramente come la linearizzazione abbia tempi di esecuzione inferiori anche di un ordine di grandezza rispetto al sistema non lineare. Perciò i risultati ottenuti in questa sezione e nella sezione 6.7 confermano, per la legge di stato politropica, la bontà della linearizzazione dello schema implicito: risultati analoghi allo schema non linearizzato e tempi di calcolo minori.

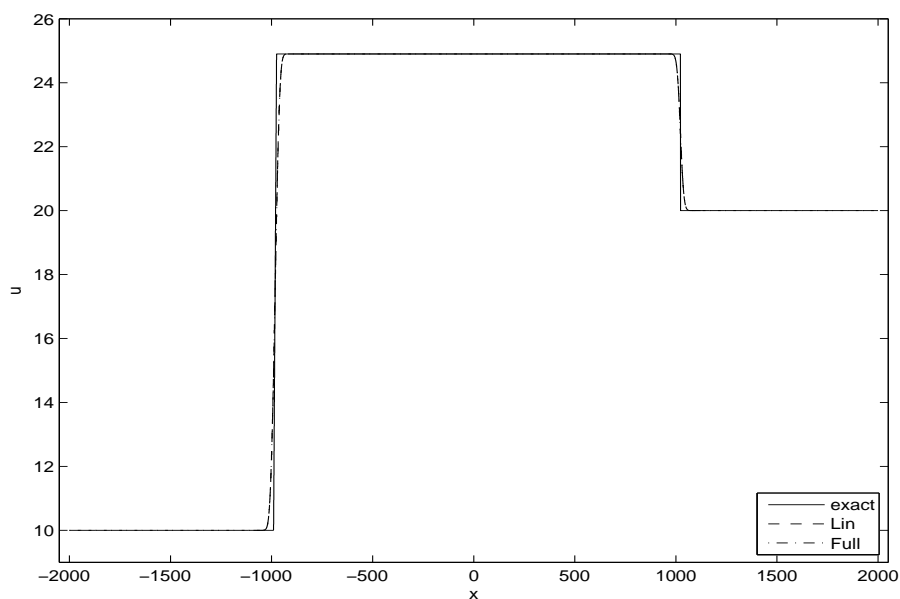


Figura 6.12: Risultati per NL2, griglia GR-4-1, velocità

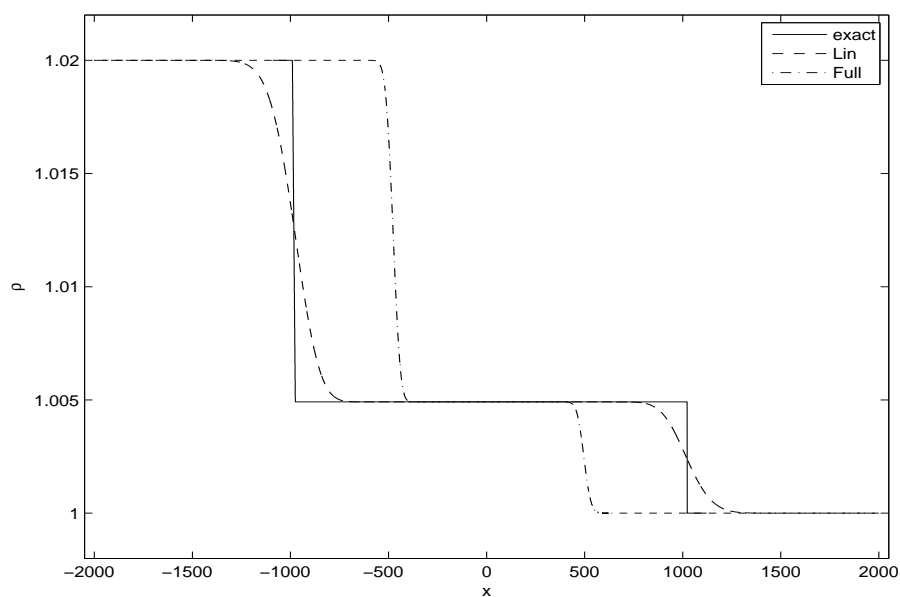


Figura 6.13: Risultati per NL2, griglia GR-2-1, densità

6.9 Problema di Riemann con legge di stato cavitante

L'ultimo gruppo di simulazioni fatto riguarda il confronto dei due schemi utilizzando come confronto la legge di stato cavitante. Il caso utilizzato per queste prove è quello denominato B1 nel capitolo 5, riportato per comodità nella tabella 6.9. In questa tabella il problema è stato rinominato NL4 sia per coerenza con i casi analizzati in questo capitolo, sia per evitare di generare confusione parlando delle prove fatte

6.9. Problema di Riemann con legge di stato cavitante

Problema	Griglia	L	NL
NL2	GR-2+1	$< 1 s$	$\approx 6 s$
	GR-3+1	$\approx 6 s$	$\approx 19 s$
	GR-4+1	$\approx 1 m$	$\approx 2 m 19 s$
	GR-2-0	$\approx 6 s$	$\approx 8 m$
	GR-3-0	$\approx 1 m$	$\approx 7 m$
	GR-4-0	$\approx 10 m$	$\approx 32 m$
	GR-2-1	$\approx 1 m$	$\approx 42 m$
	GR-3-1	$\approx 10 m$	$\approx 7 h 14 m$
	GR-4-1	$\approx 1 h 40 m$	$\approx 11 h 7 m$

Tabella 6.8: Tempi di calcolo necessari per il problema NL2

Problema	Liquid	T_L	ζ	ρ_L	u_L	ρ_R	u_R	t_{eval}
NL4	water	293.16	0.1	998	-0.1	998	0.1	1

Tabella 6.9: Dati per il problema di Riemann cavitante

con questo problema: tutte le volte che ci si riferirà al problema B1 si intende parlare delle prove fatte nel capitolo 5, quando invece ci si riferisce al caso NL4 si parla dei confronti fra schema linearizzato e non linearizzato. Sono state usate sei diverse griglie per questo caso, come mostrato in tabella 6.10. Non è stata utilizza

Griglia	Problema	Δx	Δt
GR-2+1	NL4	10^{+1}	10^{-2}
GR-3+1			10^{-3}
GR-4+1			10^{-4}
GR-3-0		10^0	10^{-3}
GR-4-0			10^{-4}
GR-5.5-0			$5 \cdot 10^{-5}$

Tabella 6.10: Griglie utilizzate per il problema NL4

la griglia GR-2-0 con il caso cavitante in quanto non è stato possibile far arrivare a convergenza la soluzione del sistema non lineare. Inoltre non si è usata la griglia GR-5.5+1 perché già i risultati ottenuti con le griglie GR-3+1 e GR-4+1 non presentano significative differenze, perciò aggiungere un griglia con un passo temporale ancora più raffinato sarebbe stato superfluo. Come mostrano le figure dalla 6.14 alla 6.20 anche in questo caso i due schemi danno risultati paragonabili. In particolare, nelle figure 6.15 e 6.18 e 6.20, che mostrano dei dettagli dell'andamento della densità e

6.9. Problema di Riemann con legge di stato cavitante

della pressione, si vede che i due schemi non si differenziano in modo apprezzabile.

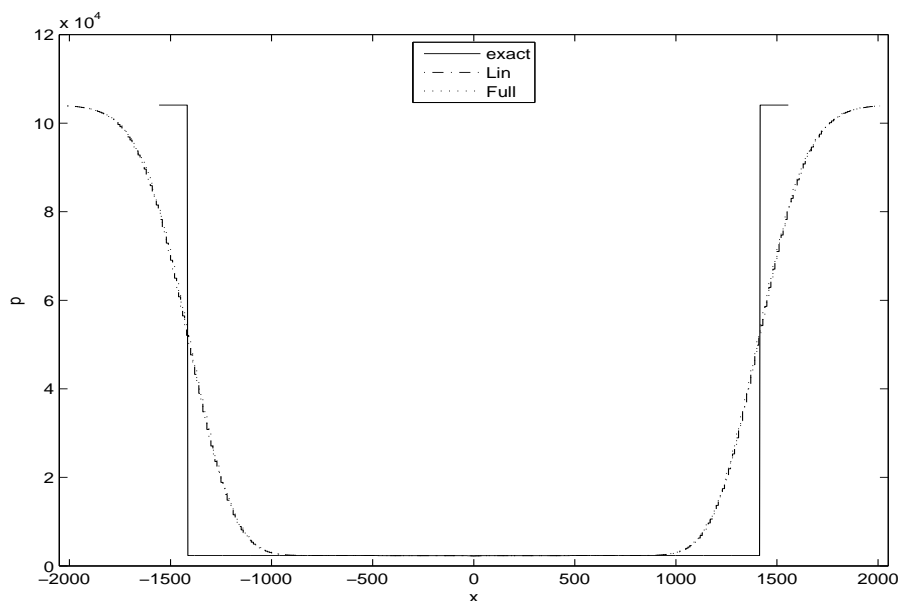


Figura 6.14: Risultati per NL4, griglia GR-2+1, pressione

Problema	Griglia	L	NL
NL4	GR-2+1	$< 1 s$	$\approx 27 s$
	GR-3+1	$\approx 6 s$	$\approx 56 s$
	GR-4+1	$\approx 54 s$	$\approx 3 m 49 s$
	GR-3-0	$\approx 1 m$	$\approx 41 m 11 s$
	GR-4-0	$\approx 10 m$	$\approx 1 h 31 m$
	GR-5.5-0	$\approx 20 m 14 s$	$\approx 2 h 8 m$

Tabella 6.11: Tempi di calcolo necessari per il problema NL4

Invece, nuovamente, la caratteristica che differenzia i due schemi è il tempo impiegato per portare a termine la simulazione, mostrato in tabella 6.11, dove la colonna indicata con L indica il sistema linearizzato e NL quello non linearizzato. I tempi impiegati sono stati ottenuti con un processore AMD Atholon 64 X2 5000+, con 2 GB di ram. Questo computer è un dual core, ed il programma è stato fatto girare utilizzando uno solo dei due core. I dati mostrati nella tabella 6.11 mostrano un andamento che conferma quello trovato con la legge di stato politropica, perciò si può concludere che anche per la legge di stato cavitante la linearizzazione dello schema permette di ridurre i tempi senza ridurre l'accuratezza della soluzione.

6.9. Problema di Riemann con legge di stato cavitante

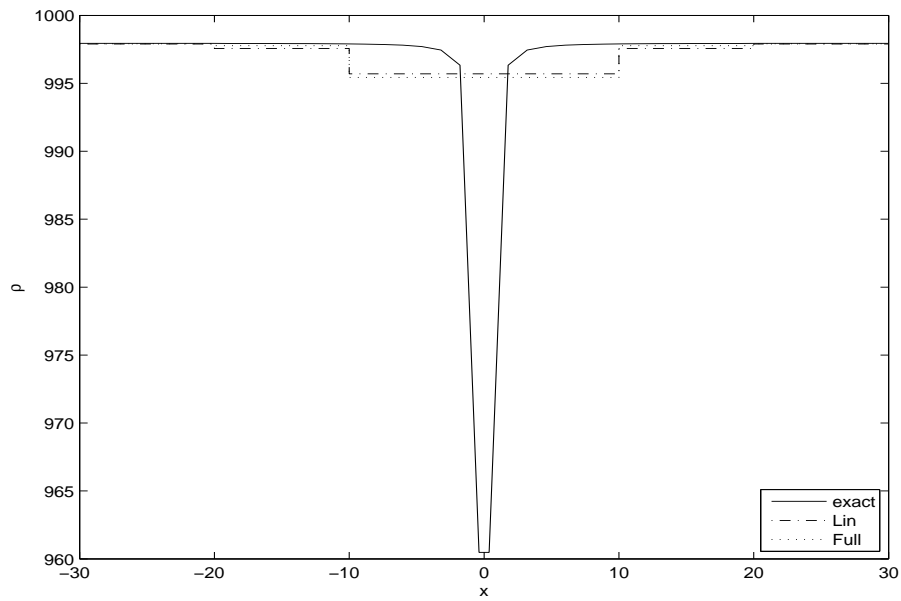


Figura 6.15: Risultati per NL4, griglia GR-2+1, dettaglio densità

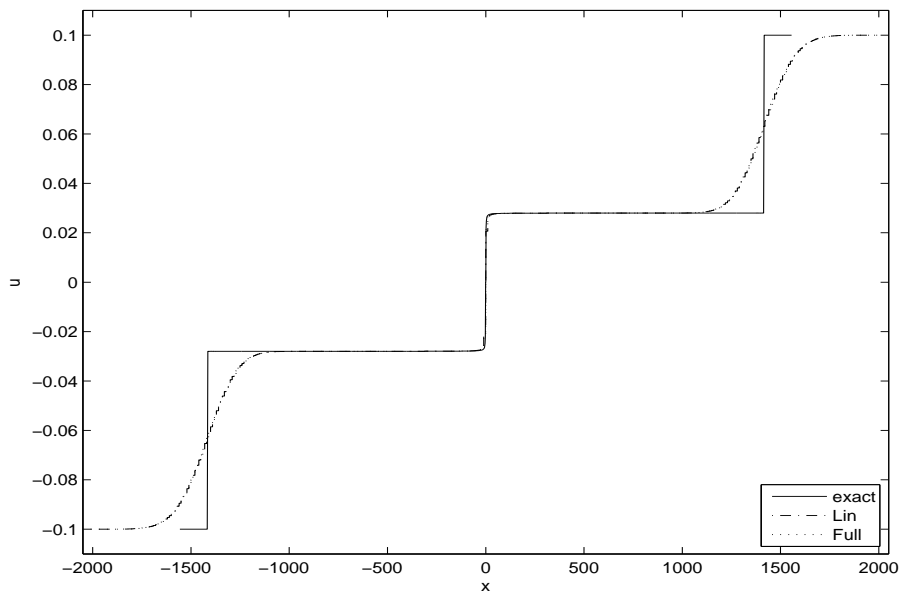


Figura 6.16: Risultati per NL4, griglia GR-3+1, velocità

6.9. Problema di Riemann con legge di stato cavitante

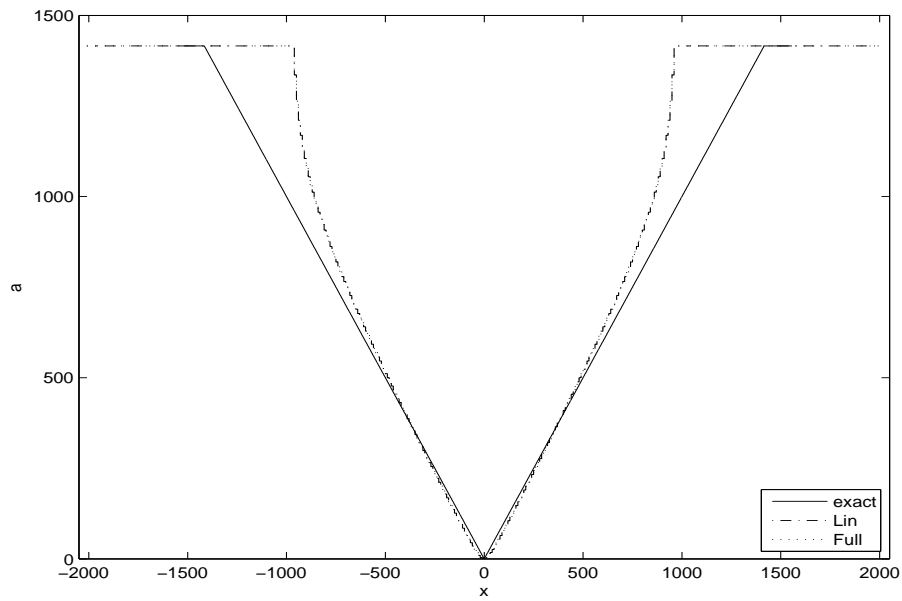


Figura 6.17: Risultati per NL4, griglia GR-4+1, velocità del suono

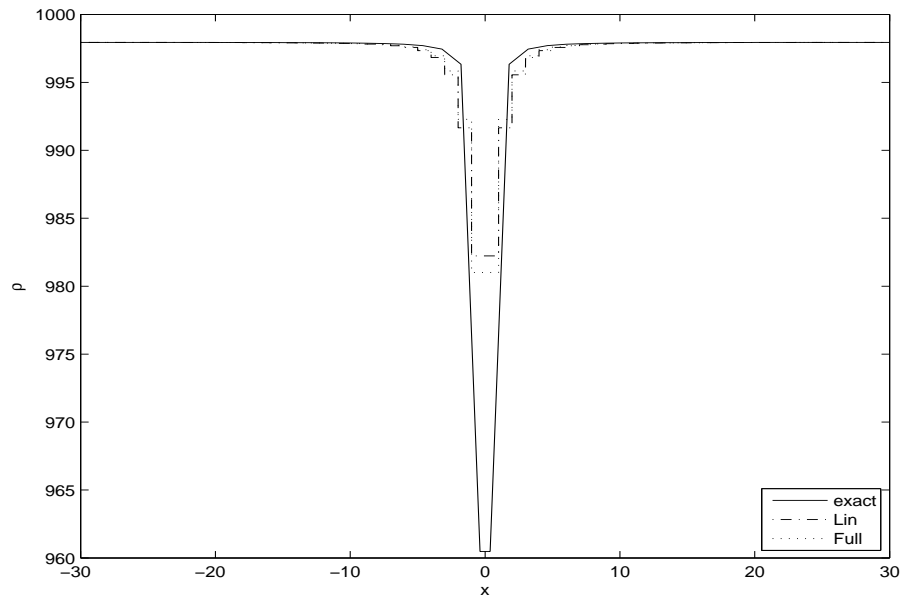


Figura 6.18: Risultati per NL4, griglia GR-3-0, dettaglio densità

6.9. Problema di Riemann con legge di stato cavitante

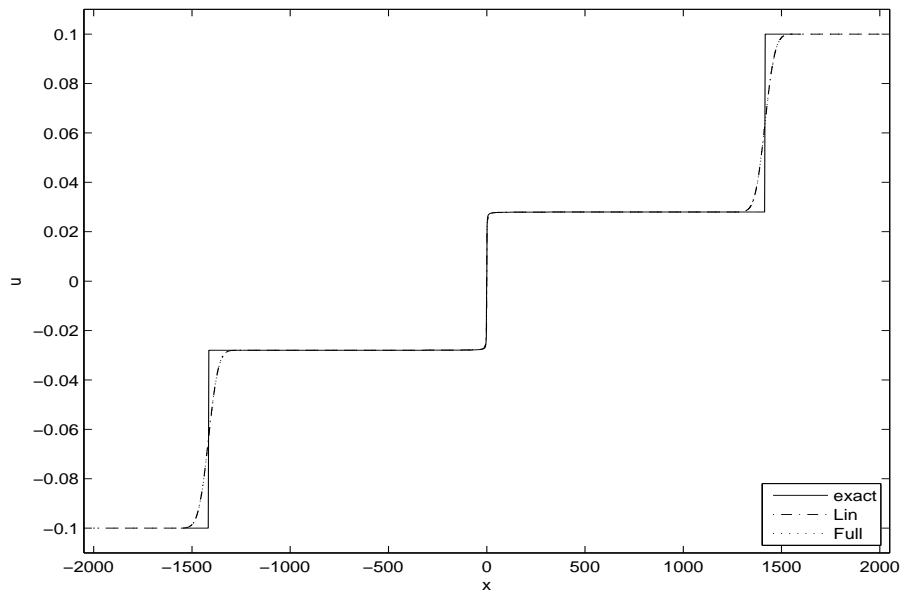


Figura 6.19: Risultati per NL4, griglia GR-4-0, velocità

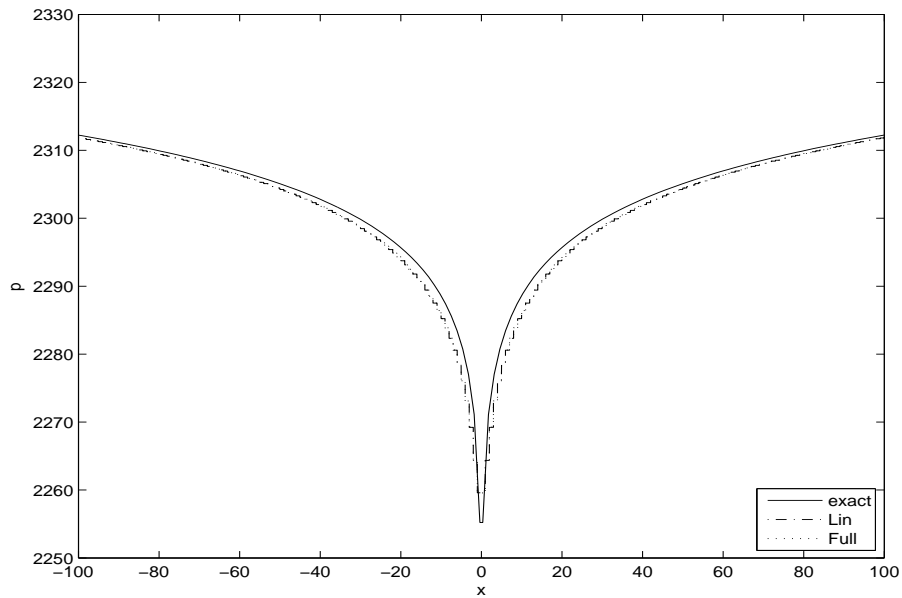


Figura 6.20: Risultati per NL4, griglia GR-5.5-0, dettaglio pressione

Capitolo 7

Risultati secondo ordine

7.1 Scelta delle simulazioni da eseguire

L'implementazione nello schema numerico del secondo ordine di precisione sia temporale che spaziale (vedi capitolo 4), è stata parte del presente lavoro di tesi. È quindi stato necessario fare delle prove per testare la qualità dei risultati ottenuti e per confrontarli con i risultati forniti dalla versione al primo ordine. Vi sono molteplici alternative per l'avanzamento temporale del secondo ordine in quanto, oltre alle già presenti possibilità di utilizzare uno schema esplicito, implicito linearizzato o completamente implicito, deve essere validata la tecnica del Defect Correction, descritta nel capitolo 4, in funzione anche del numero di iterazioni che si vogliono fare. Oltre a questo è interessante confrontare, in analogia a quanto fatto in [2], lo schema di Roe e quello di Godunov in termini di risultati e tempi di calcolo. Si sono perciò scelti tre categorie di simulazioni per poter fare tutti i confronti necessari:

- Per confrontare l'avanzamento temporale esplicito al primo e al secondo ordine, sia con flussi di Roe che di Godunov, si è scelto un problema di Riemann a numero di Mach elevato ma subsonico, discusso in sezione 7.2.
- Per confrontare i vari avanzamenti temporali impliciti, primo ordine, secondo ordine completo, linearizzato e DeC, si è scelto di simulare il moto supersonico in un ugello, trattato in sezione 7.3.
- Infine per valutare come varia la precisione del DeC al variare del numero di iterazioni e confrontare questi risultati con quelli del secondo ordine linearizzato si è scelto di utilizzare un problema di Riemann a basso numero di Mach, illustrato in sezione 7.4.

Prima di discutere nel dettaglio questi risultati è necessario fare una precisazione sulle altre opzioni del codice che non riguardano direttamente la precisione dello schema. Tutte le simulazioni sono state fatte con:

- Precondizionatore spento, nel caso dei flussi di Roe.
- Limitatore di pendenza attivo, nel caso del secondo ordine spaziale.

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

- I tempi di esecuzione delle prove sono quelli ottenuti con un computer con processore AMD Atholon 64 X2 5000+, 2 GB di ram. Questa macchina è un dual core, ed il programma è stato fatto girare utilizzando uno solo dei due core.

La scelta di non utilizzare il preconditionatore deriva dal desiderio di confrontare le caratteristiche di precisione indipendentemente da altre caratteristiche del codice, inoltre nessuno dei casi selezionati ne richiede esplicitamente l'utilizzo. La decisione di tenere il limiter attivo è dovuta alla necessità di valutare l'errore del secondo ordine, che in assenza del limitatore di pendenza sarebbe dominato dalle oscillazioni in presenza di discontinuità o rapide variazioni della derivata prima. Per quanto riguarda i gruppi di simulazioni, saranno mostrati anche dei grafici che mostrano l'errore e il suo andamento rispetto o alla dimensione delle celle o al passo temporale. Per quantificare l'errore si è deciso di utilizzare il rapporto fra la norma L^2 della differenza fra soluzione numerica ed esatta e la norma L^2 della soluzione esatta, in formule:

$$e(\psi) := \left(\frac{\int_{D_x} (\hat{\psi}_h^{num} - \hat{\psi}_h^{bench})^2 dx}{\int_{D_x} (\hat{\psi}_h^{bench})^2 dx} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.1)$$

dove D_x è il dominio computazionale mentre ψ è la variabile di cui si calcola l'errore, nel nostro caso una fra la densità, la pressione e la velocità¹. Per approssimare la formula 7.1, poichè la soluzione esatta e quella numerica sono note per punti, si è considerato la somma degli errori puntuali nei nodi della griglia di calcolo perciò si ha :

$$e(\psi) \approx \left(\frac{\sum_i (\hat{\psi}_{x_i}^{num} - \hat{\psi}_{x_i}^{bench})^2}{\sum_i (\hat{\psi}_{x_i}^{bench})^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.2)$$

dove si ha:

$$x_i \equiv x_0 + i\Delta x \quad (7.3)$$

con Δx dimensione delle celle e $\{x_i\}$ è l'insieme dei nodi della griglia spaziale. Infine, nelle tabelle che mostrano i tempi di calcolo necessari a portare a termine la soluzione, si indicheranno con s i secondi, m i minuti e h le ore impiegate.

7.2 Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

Con questo gruppo di simulazioni saranno messi a confronto il primo e il secondo ordine con avanzamento temporale esplicito. Nel primo caso il passo temporale è

¹Trattando questo lavoro di flussi barotropici, vi è una corrispondenza biunivoca fra pressione e densità perciò gli errori ad esse associati sono ricavabili uno dall'altro: per chiarezza si è però preferito mostrarli entrambi.

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

ottenuto tramite il metodo di Eulero in avanti, nel secondo caso si avanza temporalmente con il metodo di Heun. Sia il primo che il secondo ordine saranno utilizzati sia con la funzione di flusso calcolata secondo lo schema di Godunov che con lo schema di Roe. Verranno presi in considerazione due casi: il primo è esente da discontinuità, in modo da evidenziare i miglioramenti del secondo ordine rispetto al primo. Il secondo caso invece presenta delle discontinuità, in modo da poter valutare sia il funzionamento del limitatore di pendenza, sia come variano le differenze fra i due ordini in questa condizione.

7.2.1 Primo problema: 2 onde di rarefazione

Il primo caso, esente da discontinuità, è mostrato in tabella 7.1, si tratta di un problema a Mach 0.9, composto da due ampie rarefazioni, che si allontanano. Una soluzione di questo tipo è fra le più adatte ad evidenziare le caratteristiche del secondo ordine. Per questo problema sono state utilizzate 15 diverse griglie, mostrate

Problema	κ	\varkappa	γ	ρ_L	u_L	ξ_L	ρ_R	u_R	ξ_R	t_{eval}	M_∞
SO1	10^6	1	0	1.02	-900	2	1	1	900	4	0.9

Tabella 7.1: Primo problema a numero di Mach generico

in tabella 7.2. Come si può vedere si passa dalle prime griglie molto rade fino alle

Problema	Griglia	Δt	Δx	N celle	Passi temporali
SO1	GR-2+2	10^{-2}	10^{+2}	40	100
	GR-5.3+2	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{+2}	40	200
	GR-3+2	10^{-3}	10^{+2}	40	1000
	GR-3+1	10^{-3}	10^{+1}	400	1000
	GR-5.4+2	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{+2}	40	2000
	GR-5.4+1	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{+1}	400	2000
	GR-4+2	10^{-4}	10^{+2}	40	10000
	GR-4+1	10^{-4}	10^{+1}	400	10000
	GR-4-0	10^{-4}	10^{+0}	4000	10000
	GR-5.5+2	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+2}	40	20000
	GR-5.5+1	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+1}	400	20000
	GR-5.5-0	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+0}	4000	20000
	GR-5+2	10^{-5}	10^{+2}	40	100000
	GR-5+1	10^{-5}	10^{+1}	400	100000
	GR-5-0	10^{-5}	10^{+0}	4000	100000

Tabella 7.2: Griglie per SO1

ultime molto raffinate. Un sunto dei risultati dei confronti fra funzione di flusso di

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

Roe e Godunov, al primo e al secondo ordine, sono mostrati nelle figure dalla 7.1 alla 7.10. Nelle figure 7.1 e 7.2 si può vedere come, a causa del legame lineare fra pressione e densità di questo problema, i risultati di queste variabili siano identici, a parte un fattore di scala. Nella figura 7.3 è mostrato invece un esempio dei risultati che si ottengono per lo scalare passivo: per questa grandezza la soluzione è data da due tratti costanti divisi da una discontinuità e, per una soluzione del genere, i vantaggi del secondo ordine rispetto al primo sono meno accentuati. Discuteremo più in dettaglio la questione nella prossima sezione.

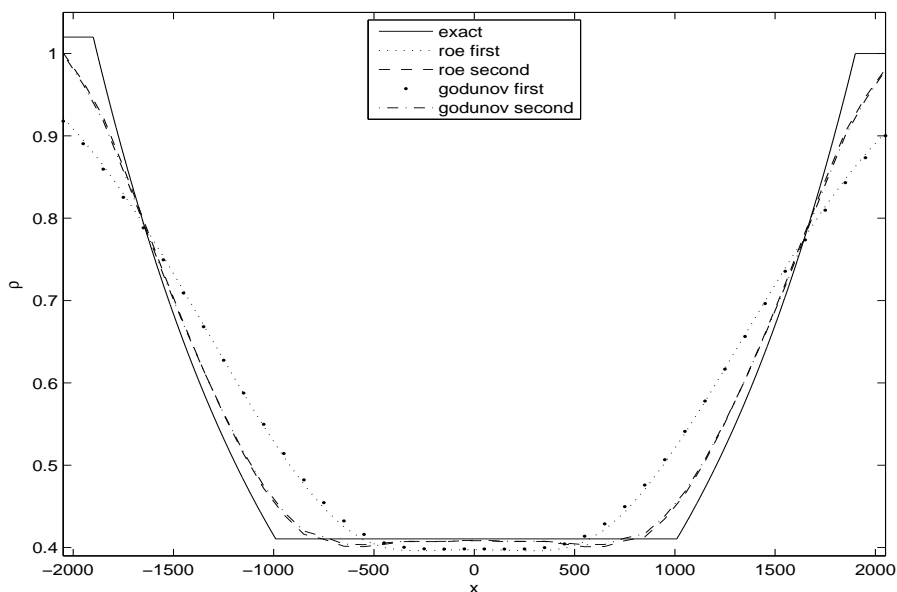


Figura 7.1: Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+2, densità

Le figure dalla 7.4 alla 7.6 mostrano l'effetto della variazioni del passo temporale sulle simulazioni: come si può vedere le immagini sono quasi identiche. Questo fatto indica che in questo caso, una volta che sia verificata la condizione di stabilità di tipo CFL, come fanno tutte le prove eseguite, l'errore è dominato dalla dimensione delle celle. Questo è confermato dalle figure 7.7, 7.8 e 7.9. dove sono mostrati i risultati che si ottengono con dimensioni via via decrescenti delle celle nel caso della velocità. Infine le ultime due figure della serie, la 7.10 e la 7.11 mostrano come variano i risultati nel caso si mantenga $\Delta t \Delta x$ costante indicando quale fra il passo temporale e spaziale è quello maggiormente responsabile dell'errore: come si può vedere, coerentemente ai risultati mostrati nelle figure precedenti, anche se il prodotto del passo temporale per le dimensioni delle celle è costante, vi è un visibile miglioramento nel caso con Δx più piccolo.

In pratica tutte le immagini mostrate confermano che non vi sono significative differenze fra la funzione di flusso di Godunov e di Roe, almeno dal punto di vista dei risultati, mentre si hanno notevoli differenze passando dal primo al secondo ordine. I tempi impiegati per il calcolo della soluzione sono mostrati in tabella 7.3, dove E-1 sta per lo schema esplicito di Roe al primo ordine, E-2 per quello al secondo ordine e G-1 e G-2 sono gli analoghi con il flusso di Godunov. Questi dati giustificano l'introduzione del flusso di Roe, in quanto i tempi impiegati per portare a termine la

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

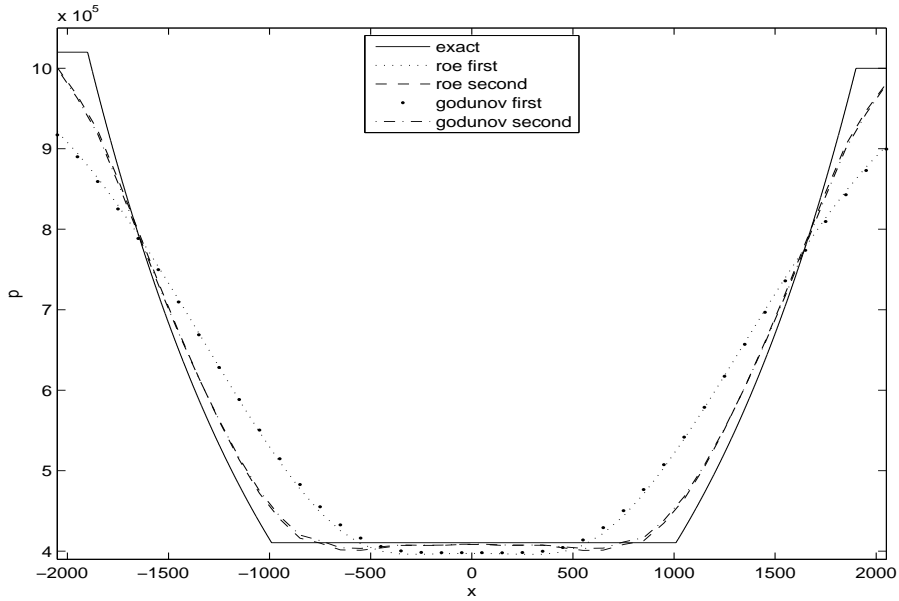


Figura 7.2: Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+2, pressione

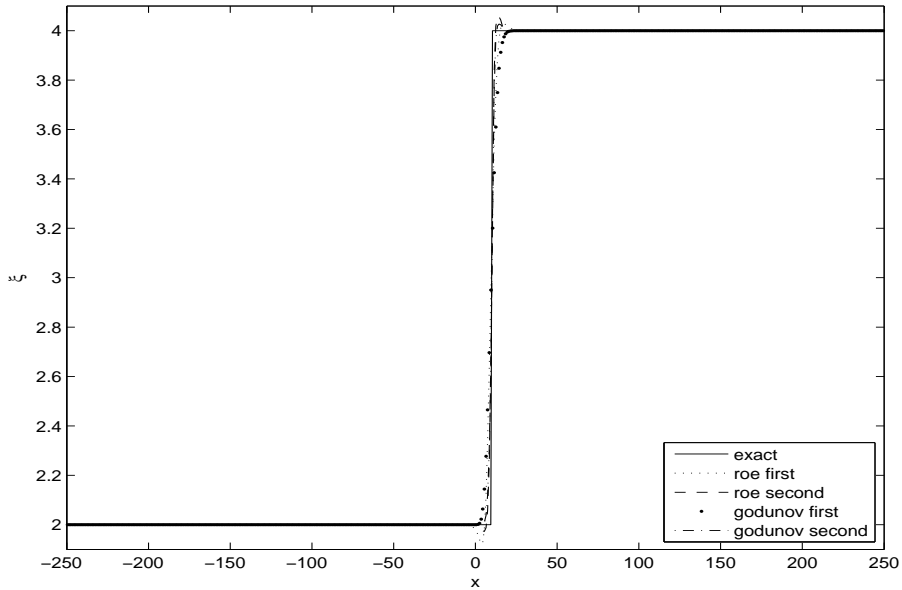


Figura 7.3: Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+0, scalare passivo

simulazione dalla funzione di flusso di Roe sono circa il 10% inferiori a quelli nel caso di Godunov. Nuovamente, si hanno differenze più marcate confrontando il primo e secondo ordine; quest'ultimo impiegata un tempo circa 3 volte superiore a quello del primo ordine.

In figura 7.12 è mostrato per i vari schemi l'andamento dell'errore per la pressione in funzione di Δx , fissato il valore di Δt mentre nelle tabelle 7.4 e 7.5 sono elencati, rispettivamente, i dati relativi alla dipendenza dell'errore dalla dimensione delle celle con rapporto costante $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ e dalla dimensione delle celle con Δt fissato. Per

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

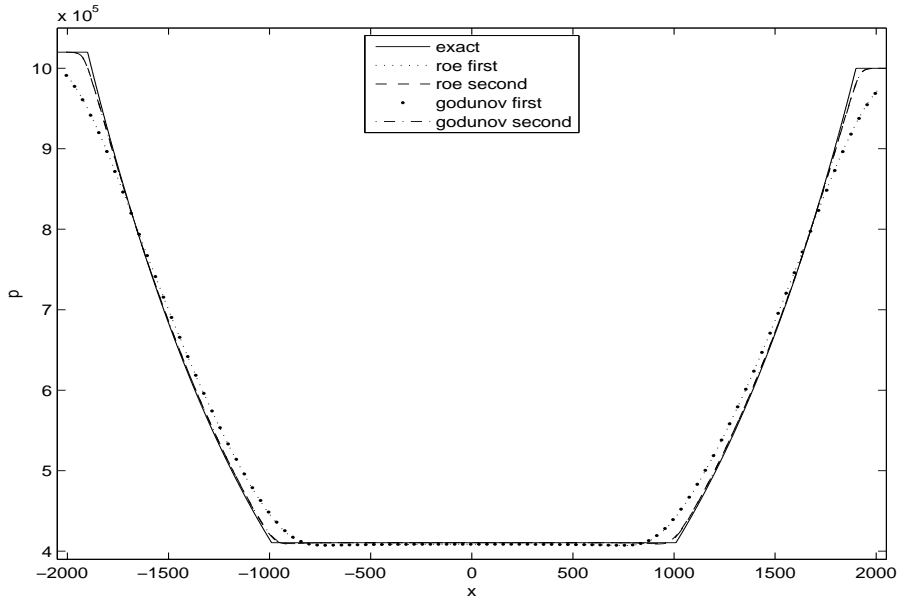


Figura 7.4: Confronto dei risultati S01, griglia GR-3+1, pressione

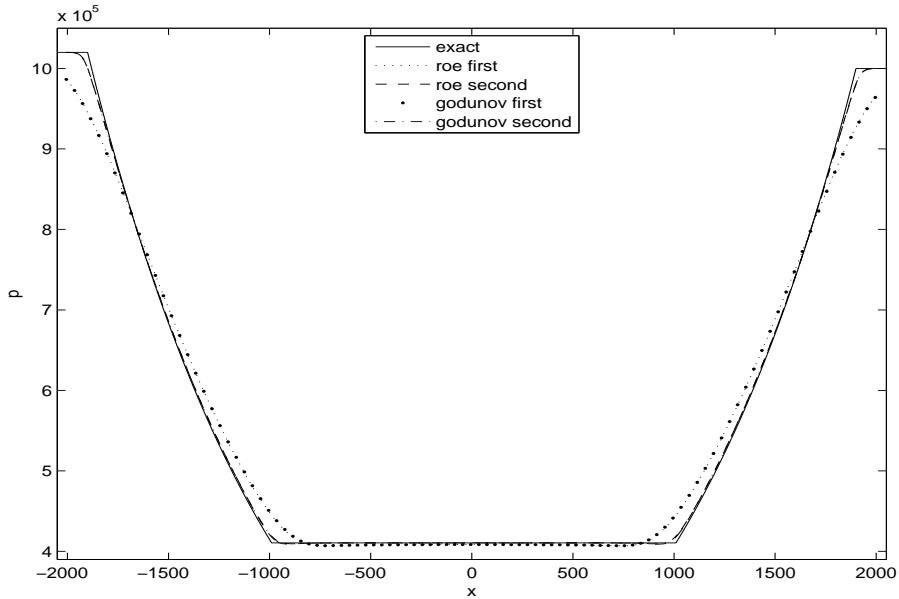


Figura 7.5: Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+1, pressione

dipendenza dell'errore si intende l'esponente η che definisce il legame di tipo legge di potenza fra l'errore e la dimensione Δ rispetto a cui si calcola, in formule cioè:

$$e(\psi) \propto \Delta^\eta \quad (7.4)$$

Poichè in un diagramma bilogarithmico la relazione 7.4 si trasforma in una retta di pendenza η , ci riferiremo ad essa anche come pendenza dell'errore. In uno schema al primo ordine si ha teoricamente η uguale a 1 mentre per η uguale 2 si ottiene uno schema di secondo ordine. I dati delle tabelle 7.4 e 7.5 mostrano invece una

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

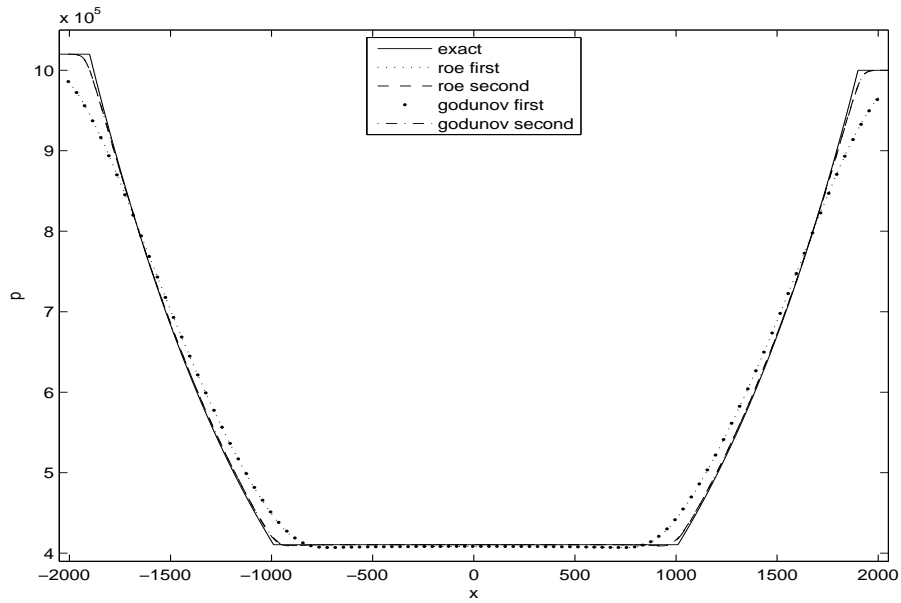


Figura 7.6: Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+1, pressione

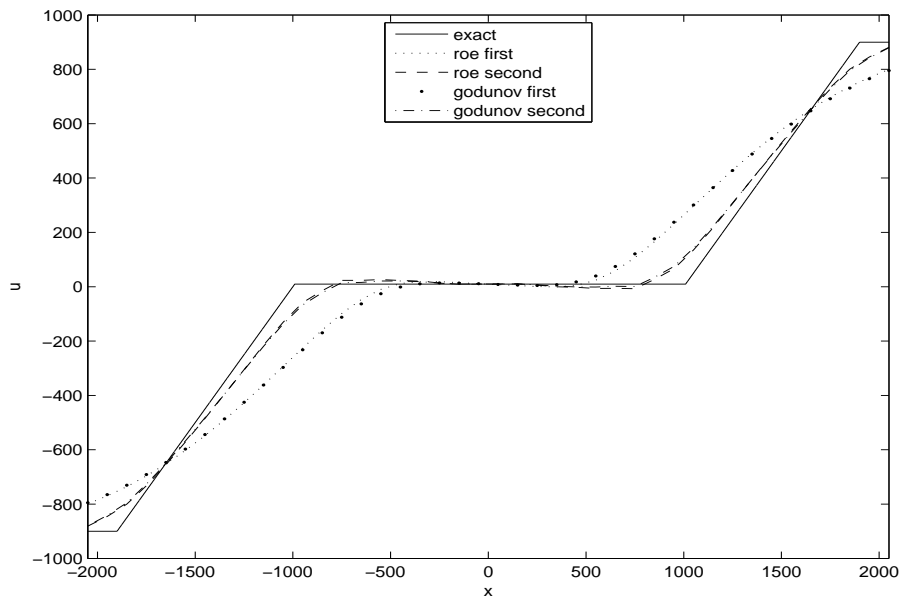


Figura 7.7: Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+2, velocità

dipendenza diversa, con η sempre minore di 1. Le cause di queste discrepanze fra pendenza teorica e ottenuta possono essere molteplici, prima fra tutte la possibilità che le griglie utilizzate non siano sufficientemente raffinate perché la relazione 7.4 sia valida. Infatti, come mostrato in figura 7.13, considerando la pendenza fra due punti adiacenti dell'immagine 7.12 si vede che questa non è costante ma sta aumentando. Quello che è importante dei dati mostrati nelle tabelle 7.4 e 7.5 non è il valore assoluto della pendenza, ma il fatto che per il secondo ordine si abbia un valore maggiore di quello del primo, di circa 1.6 volte. Questo è un risultato soddisfacente

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

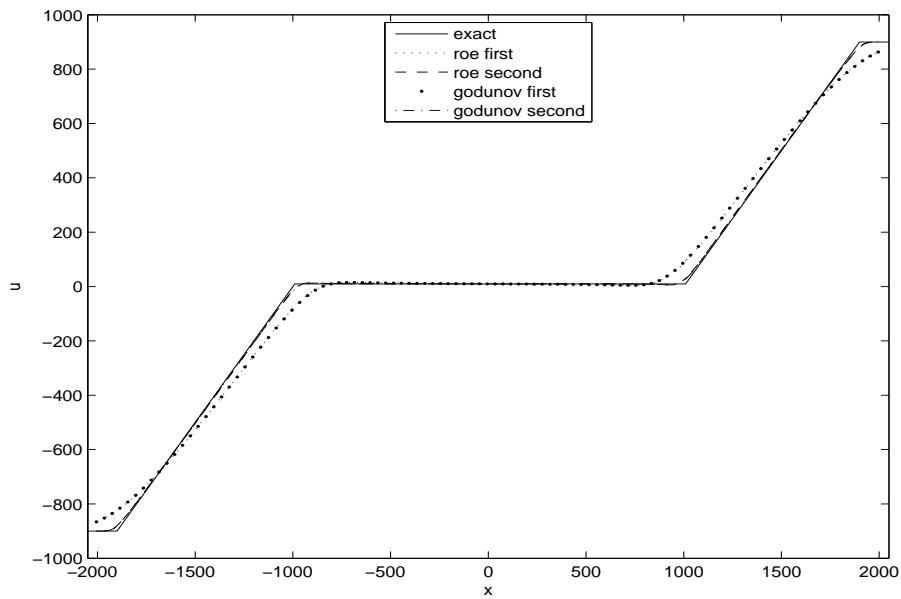


Figura 7.8: Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+1, velocità

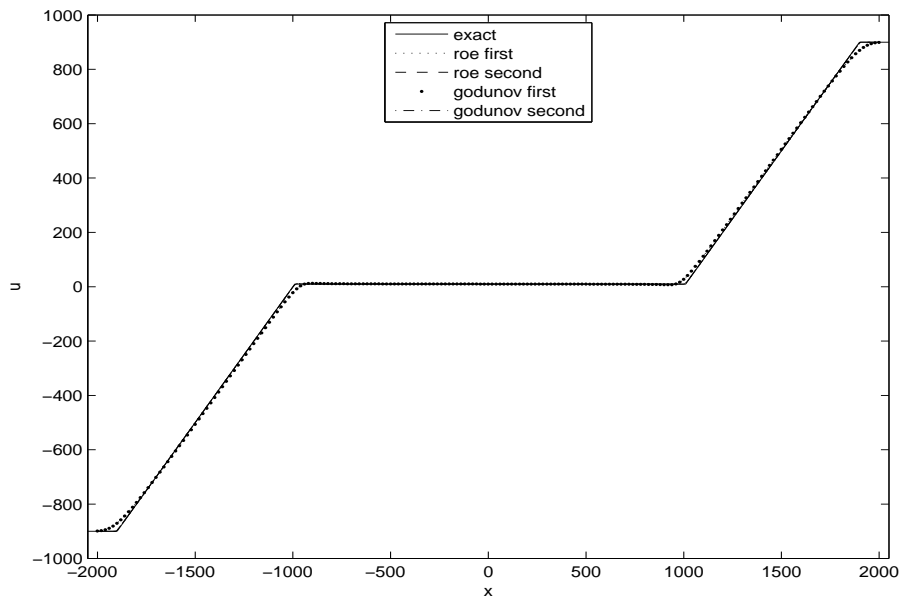


Figura 7.9: Confronto dei risultati S01, griglia GR-5-0, velocità

(l'ideale sarebbe 2), anche perchè bisogna considerare che all'estremità delle onde di rarefazione (vedi figura 7.11) la derivata della soluzione è discontinua, perciò si ha che in quei punti il limitatore di pendenza fa in modo che si ritorni ad uno schema di primo ordine.

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

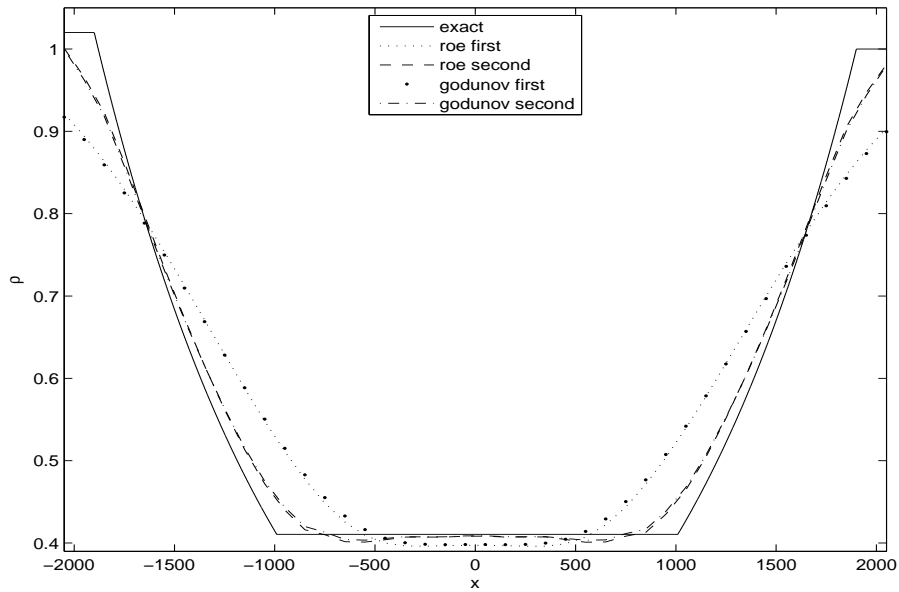


Figura 7.10: Confronto dei risultati S01, griglia GR-5+2, densità

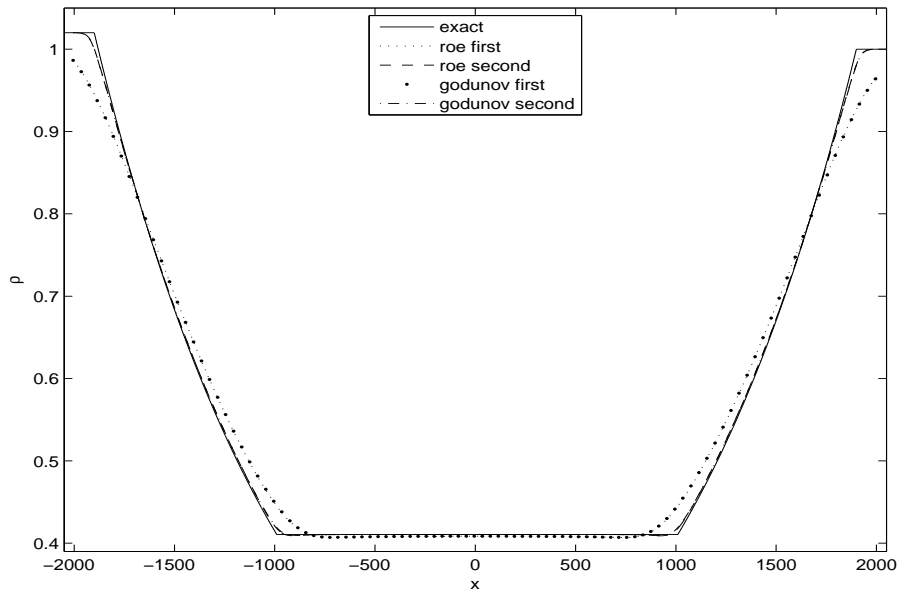


Figura 7.11: Confronto dei risultati S01, griglia GR-4+1, densità

7.2.2 Secondo problema: 2 discontinuità

Il secondo problema per questo gruppo è mostrato in tabella 7.6. Anche questo caso è a Mach 0.9 ma stavolta la soluzione è rappresentata da tre tratti continui collegati da due discontinuità che si allontanano. Una soluzione numerica che voglia ben approssimare questo andamento deve presentare quindi una rapida variazione del vettore di stato in prossimità alle discontinuità. Questo fa sì che il limitatore di pendenza agisca in modo da disattivare la ricostruzione MUSCL (vedi capitolo 4) e si ritorni quindi alla precisione di ordine uno. Un problema di questo tipo permette

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

Problema	Griglia	E-1	G-1	E-2	G-2
SO1	GR-2+2	0.2 s	0.2 s	0.3 s	0.3 s
	GR-5.3+2	0.2 s	0.3 s	0.5 s	0.2 s
	GR-3+2	0.2 s	0.7 s	1 s	0.7 s
	GR-3+1	0.2 s	2.5 s	6 s	7 s
	GR-5.4+2	1 s	0.7 s	2 s	2 s
	GR-5.4+1	4 s	4.5 s	11 s	13 s
	GR-4+2	2.21 s	3.1 s	6 s	7 s
	GR-4+1	17 s	19 s	55 s	63 s
	GR-4-0	2 m 43 s	3 m 14 s	9 m	10 m 5 s
	GR-5.5+2	4.1 s	4.2 s	12 s	14 s
	GR-5.5+1	34 s	40 s	1 m 50 s	1 m 59 s
	GR-5.5-0	5 m 24 s	6 m 20 s	17 m 41 s	20 m 30 s
	GR-5+2	18 s	22 s	61 s	66 s
	GR-5+1	2 m 48 s	3 m 16 s	9 m 27 s	10 m 25 s
	GR-5-0	28 m 3 s	31 m 18 s	1 h 33 m	1 h 38 m

Tabella 7.3: Tempi di calcolo necessari per il problema SO1

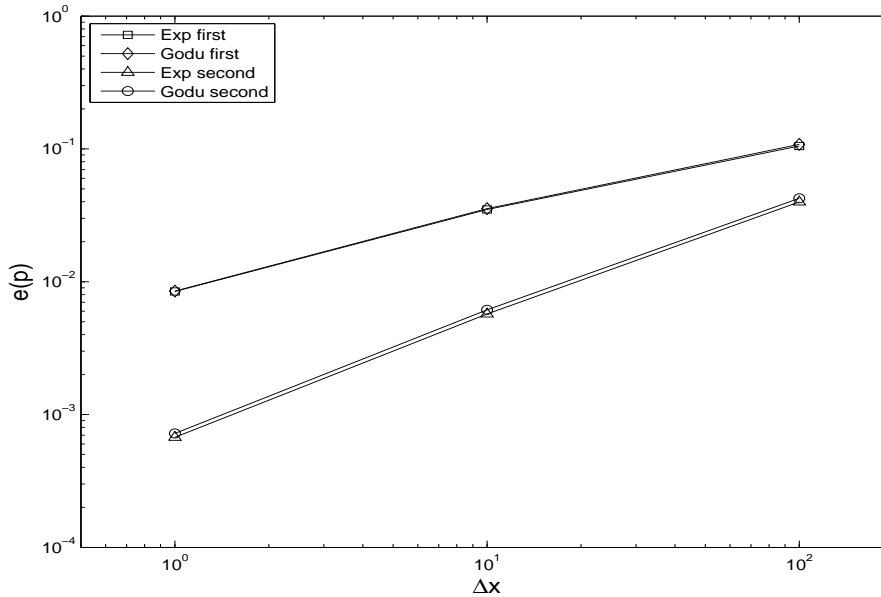


Figura 7.12: Andamento dell'errore dei risultati per SO1, $\Delta t = 10^{-4}$, pressione

quindi di valutare sia comportamento del limiter che dello schema al secondo ordine in generale. Per questo caso sono state usate le 17 griglie mostrate in tabella 7.7. Le due griglie GR-5.3+1 e GR-5.4-0 non erano presenti nel problema SO1 in quanto la condizione di stabilità di tipo CFL non era verificata in quel caso. Alcuni dei risultati dei confronti fra le quattro opzioni possibili sono mostrati nelle figure dalla 7.14 alla 7.17

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

SO1					
$\frac{\Delta x}{\Delta t}$	Errore	E-1	G-1	E-2	G-2
10^4	$e(\rho)$	$5.474 \cdot 10^{-1}$	$5.520 \cdot 10^{-1}$	$8.861 \cdot 10^{-1}$	$8.848 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.474 \cdot 10^{-1}$	$5.520 \cdot 10^{-1}$	$8.861 \cdot 10^{-1}$	$8.848 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.082 \cdot 10^{-1}$	$6.126 \cdot 10^{-1}$	$9.358 \cdot 10^{-1}$	$9.252 \cdot 10^{-1}$
10^5	$e(\rho)$	$5.379 \cdot 10^{-1}$	$5.416 \cdot 10^{-1}$	$8.835 \cdot 10^{-1}$	$8.823 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.379 \cdot 10^{-1}$	$5.416 \cdot 10^{-1}$	$8.835 \cdot 10^{-1}$	$8.823 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.013 \cdot 10^{-1}$	$6.049 \cdot 10^{-1}$	$9.351 \cdot 10^{-1}$	$9.246 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.4: Pendence per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante

SO1					
Δt	Errore	E-1	G-1	E-2	G-2
10^{-4}	$e(\rho)$	$5.639 \cdot 10^{-1}$	$5.672 \cdot 10^{-1}$	$8.855 \cdot 10^{-1}$	$8.838 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.639 \cdot 10^{-1}$	$5.672 \cdot 10^{-1}$	$8.855 \cdot 10^{-1}$	$8.838 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.268 \cdot 10^{-1}$	$6.298 \cdot 10^{-1}$	$9.350 \cdot 10^{-1}$	$9.240 \cdot 10^{-1}$
$5 \cdot 10^{-5}$	$e(\rho)$	$5.498 \cdot 10^{-1}$	$5.532 \cdot 10^{-1}$	$8.840 \cdot 10^{-1}$	$8.826 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.498 \cdot 10^{-1}$	$5.532 \cdot 10^{-1}$	$8.840 \cdot 10^{-1}$	$8.826 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.131 \cdot 10^{-1}$	$6.164 \cdot 10^{-1}$	$9.351 \cdot 10^{-1}$	$9.244 \cdot 10^{-1}$
10^{-5}	$e(\rho)$	$5.395 \cdot 10^{-1}$	$5.430 \cdot 10^{-1}$	$8.835 \cdot 10^{-1}$	$8.823 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.395 \cdot 10^{-1}$	$5.430 \cdot 10^{-1}$	$8.835 \cdot 10^{-1}$	$8.823 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.030 \cdot 10^{-1}$	$6.065 \cdot 10^{-1}$	$9.351 \cdot 10^{-1}$	$9.245 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.5: Pendence per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante

Problema	κ	\varkappa	γ	ρ_L	u_L	ξ_L	ρ_R	u_R	ξ_R	t_{eval}	M_∞
SO2	10^6	1	0	1.02	900	2	1	-900	4	1	0.9

Tabella 7.6: Secondo problema per il primo gruppo

Le figure selezionate corrispondono alle stesse griglie e variabili scelte per il problema SO1: come si può vedere, a differenza di quel caso, qui le differenze fra primo e secondo ordine sono molto minori, anche se il secondo ordine continua ad essere quello che fornisce la soluzione migliore. Il fatto che i risultati di primo e secondo ordine siano analoghi è confermato anche dai grafici dell'andamento dell'errore, figura 7.18 e dai dati nelle tabelle 7.8 e 7.9. Questi dati mostrano come la pendenza dell'errore, benché migliore per il secondo ordine, sia molto simile al primo ordine, soprattutto se confrontato con le differenze che invece si hanno nelle simulazioni del gruppo SO1. Anche in questo caso, analogamente al caso SO1, η della formula

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

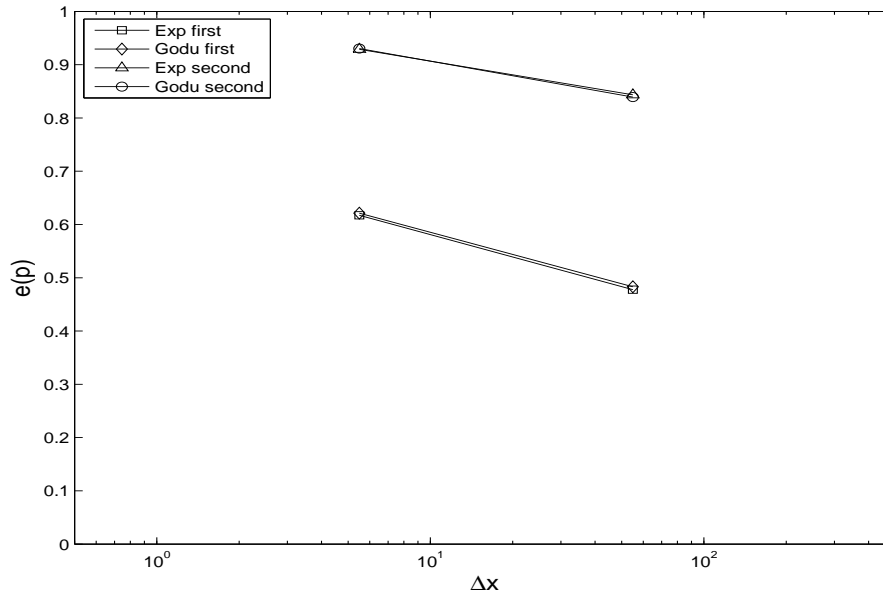


Figura 7.13: Andamento della pendenza dell'errore dei risultati per S01, $\Delta t = 10^{-4}$, pressione

Problema	Griglia	Δt	Δx	N celle	Passi temporali
SO2	GR-2+2	10^{-2}	10^{+2}	40	100
	GR-5.3+2	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{+2}	40	200
	GR-5.3+1	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{+1}	400	200
	GR-3+2	10^{-3}	10^{+2}	40	1000
	GR-3+1	10^{-3}	10^{+1}	400	1000
	GR-5.4+2	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{+2}	40	2000
	GR-5.4+1	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{+1}	400	2000
	GR-5.4-0	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{+0}	4000	2000
	GR-4+2	10^{-4}	10^{+2}	40	10000
	GR-4+1	10^{-4}	10^{+1}	400	10000
	GR-4-0	10^{-4}	10^{+0}	4000	10000
	GR-5.5+2	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+2}	40	20000
	GR-5.5+1	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+1}	400	20000
	GR-5.5-0	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{+0}	4000	20000
	GR-5+2	10^{-5}	10^{+2}	40	100000
	GR-5+1	10^{-5}	10^{+1}	400	100000
GR-5-0	10^{-5}	10^{+0}	4000	100000	

Tabella 7.7: Griglie per SO2

7.4 non è costante ma aumenta al diminuire della dimensione delle celle. Tuttavia questo aumento non è così pronunciato come nel caso SO1 e questo è dovuto alla difficoltà di risolvere con accuratezza le discontinuità. Nonostante i risultati fra i

7.2. Gruppo I : problema di Riemann a numero di Mach generico

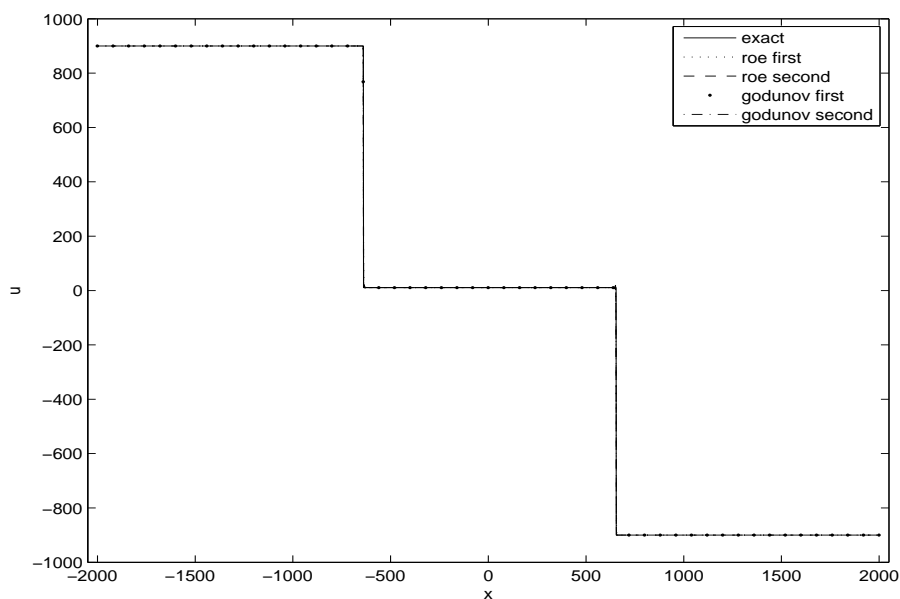


Figura 7.14: Confronto dei risultati SO2, griglia GR-5-0, velocità

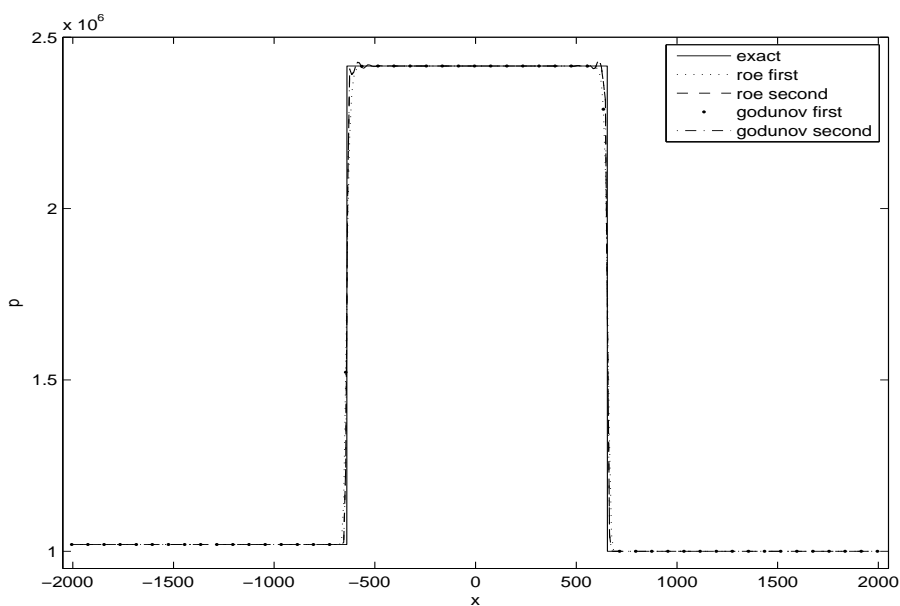


Figura 7.15: Confronto dei risultati SO2, griglia GR-4+1, pressione

due ordini, come era stato previsto, siano analoghi, questi test hanno confermato il buon funzionamento del limitatore di pendenza, infatti le oscillazioni non fisiche della soluzioni, nonostante la presenza di discontinuità impegnative, sono di ridotta entità in tutte le simulazioni e, nelle griglie più raffinate, sono difficilmente osservabili dalle figure. Per quanto riguarda i tempi CPU richiesti dalle varie simulazioni, questi sono mostrati in tabella 7.10: i valori sono sostanzialmente identici a quelli mostrati in tabella 7.3, come era ragionevole aspettarsi, visto che sono state usate le solite griglie sia spaziali che temporali.

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

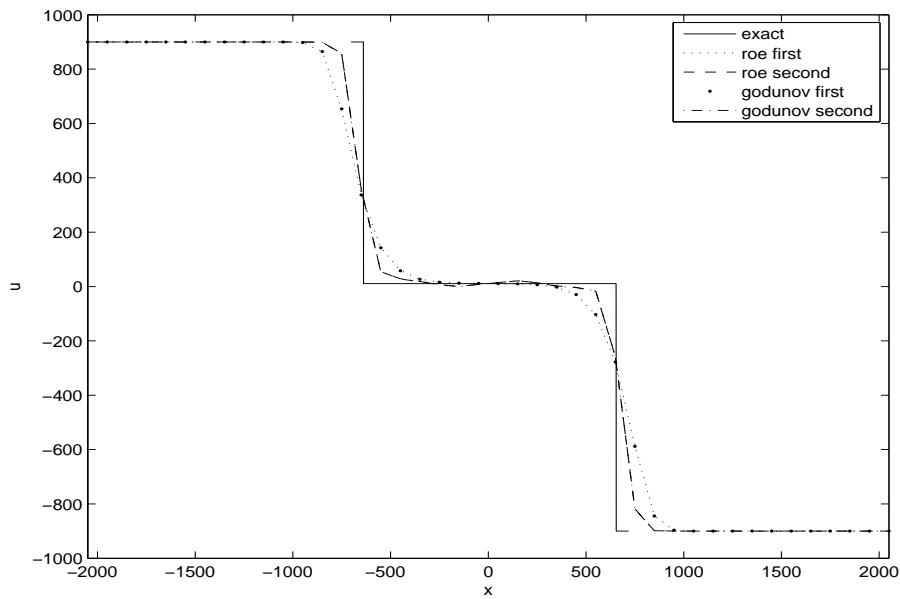


Figura 7.16: Confronto dei risultati SO2, griglia GR-3+2, velocità

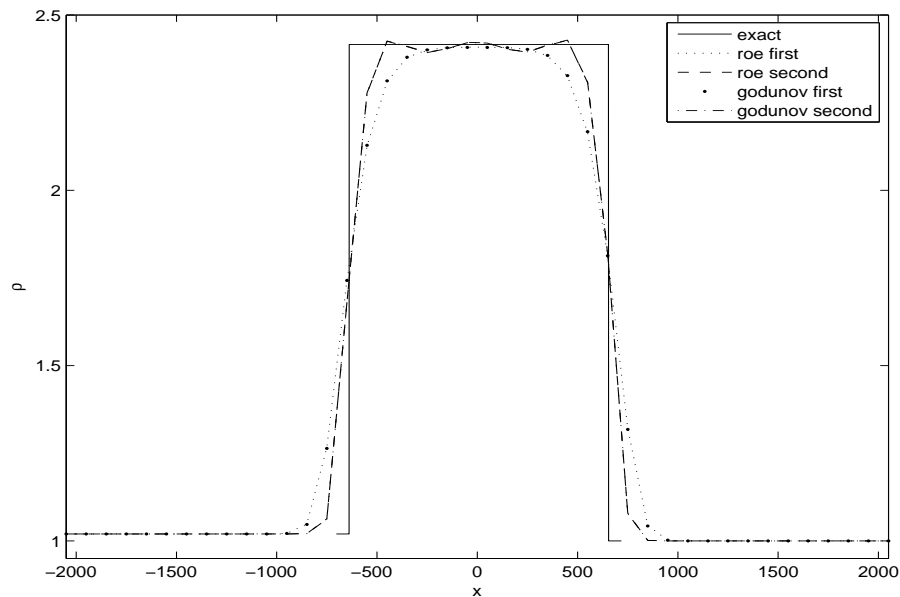


Figura 7.17: Confronto dei risultati SO2, griglia GR-2+2, densità

7.3 Gruppo II : moto supersonico in un ugello

Il secondo gruppo di simulazioni riguarda il moto supersonico in un ugello ed il problema scelto è mostrato in tabella 7.11. Nel caso analizzato il flusso parte da Mach 10 e, a causa del condotto convergente-divergente, viene rallentato fino a circa Mach 2, subendo quindi una forte compressione ed espansione.

In questo problema saranno confrontati lo schema al primo ordine spaziale con avanzamento temporale implicito linearizzato (al primo ordine), l'implicito linearizzato

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

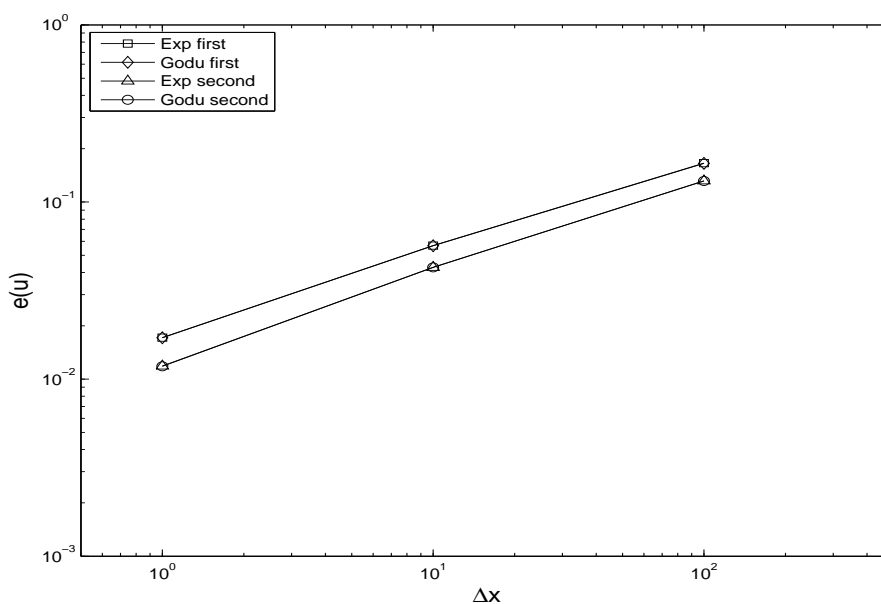


Figura 7.18: Andamento dell'errore dei risultati per SO₂, $\frac{\Delta x}{\Delta t} = 10^5$, velocità

SO2					
$\frac{\Delta x}{\Delta t}$	Errore	E-1	G-1	E-2	G-2
10^4	$e(\rho)$	$5.068 \cdot 10^{-1}$	$5.065 \cdot 10^{-1}$	$5.575 \cdot 10^{-1}$	$5.580 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.068 \cdot 10^{-1}$	$5.065 \cdot 10^{-1}$	$5.575 \cdot 10^{-1}$	$5.580 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.941 \cdot 10^{-1}$	$4.938 \cdot 10^{-1}$	$5.223 \cdot 10^{-1}$	$5.227 \cdot 10^{-1}$
10^5	$e(\rho)$	$5.043 \cdot 10^{-1}$	$5.040 \cdot 10^{-1}$	$5.579 \cdot 10^{-1}$	$5.583 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.043 \cdot 10^{-1}$	$5.040 \cdot 10^{-1}$	$5.579 \cdot 10^{-1}$	$5.583 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.926 \cdot 10^{-1}$	$4.923 \cdot 10^{-1}$	$5.226 \cdot 10^{-1}$	$5.230 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.8: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante

al secondo ordine temporale e spaziale, la tecnica del Defect Correction e lo schema completamente implicito al secondo ordine temporale e spaziale. Anticipando alcuni dei risultati che esporremo, per la tecnica del Defect Correction si sono utilizzate sia una che due iterazioni, non di più in quanto in questo caso la differenza fra i due schemi non è significativa. Inoltre per quanto riguarda lo schema completamente implicito, a causa delle limitazioni sul passo temporale che sono comparse e che verranno esposte in seguito, le simulazioni con le griglie spaziali più raffinate non sono state ottenute partendo dalla condizione iniziale uniforme, descritta nel capitolo 4. Invece come condizione di partenza si è usato il risultato ottenuto facendo evolvere lo schema linearizzato al primo ordine per alcuni passi temporali, solitamente 5, in modo da partire da una condizione più vicina a quella stazionaria, definita in modo analogo a quanto fatto nel capitolo 6. Per confrontare gli schemi, poichè alcuni permettono di aumentare il passo temporale teoricamente fino all'infinito mentre altri

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

SO2					
Δt	Errore	E-1	G-1	E-2	G-2
$5 \cdot 10^{-4}$	$e(\rho)$	$5.533 \cdot 10^{-1}$	$5.532 \cdot 10^{-1}$	$5.445 \cdot 10^{-1}$	$5.449 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.533 \cdot 10^{-1}$	$5.532 \cdot 10^{-1}$	$5.445 \cdot 10^{-1}$	$5.449 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$5.354 \cdot 10^{-1}$	$5.351 \cdot 10^{-1}$	$5.064 \cdot 10^{-1}$	$5.068 \cdot 10^{-1}$
10^{-4}	$e(\rho)$	$5.121 \cdot 10^{-1}$	$5.118 \cdot 10^{-1}$	$5.574 \cdot 10^{-1}$	$5.578 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.121 \cdot 10^{-1}$	$5.118 \cdot 10^{-1}$	$5.574 \cdot 10^{-1}$	$5.578 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.997 \cdot 10^{-1}$	$4.994 \cdot 10^{-1}$	$5.221 \cdot 10^{-1}$	$5.225 \cdot 10^{-1}$
$5 \cdot 10^{-5}$	$e(\rho)$	$5.080 \cdot 10^{-1}$	$5.077 \cdot 10^{-1}$	$5.578 \cdot 10^{-1}$	$5.582 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.080 \cdot 10^{-1}$	$5.077 \cdot 10^{-1}$	$5.578 \cdot 10^{-1}$	$5.582 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.960 \cdot 10^{-1}$	$4.957 \cdot 10^{-1}$	$5.225 \cdot 10^{-1}$	$5.229 \cdot 10^{-1}$
10^{-5}	$e(\rho)$	$5.048 \cdot 10^{-1}$	$5.045 \cdot 10^{-1}$	$5.579 \cdot 10^{-1}$	$5.583 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$5.048 \cdot 10^{-1}$	$5.045 \cdot 10^{-1}$	$5.579 \cdot 10^{-1}$	$5.583 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.931 \cdot 10^{-1}$	$4.928 \cdot 10^{-1}$	$5.226 \cdot 10^{-1}$	$5.230 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.9: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante

Problema	Griglia	E-1	G-1	E-2	G-2
SO2	GR-2+2	0.1 s	0.1 s	0.2 s	0.4 s
	GR-5.3+2	0.1 s	0.2 s	0.3 s	0.5 s
	GR-5.3+1	0.4 s	0.7 s	1 s	2 s
	GR-3+2	0.4 s	0.6 s	1 s	1 s
	GR-3+1	2 s	3 s	6 s	7 s
	GR-5.4+2	1 s	1 s	2 s	2 s
	GR-5.4+1	4 s	5 s	11 s	13 s
	GR-5.4-0	33 s	40 s	1 52 sm	2 m 1 s
	GR-4+2	2 s	3 s	6 s	7 s
	GR-4+1	16 s	21 s	54 s	62 s
	GR-4-0	2 m 50 s	3 m 59 s	8 46 sm	9 m 49 s
	GR-5.5+2	4 s	5 s	12 s	14 s
	GR-5.5+1	34 s	37 s	1 m 54 s	2 m 2 s
	GR-5.5-0	5 m 21 s	6 m 50 s	17 m 56 s	20 m 17 s
	GR-5+2	18 s	22 s	61 s	67 s
	GR-5+1	2 m 50 s	3 m 20 s	9 m 52 s	10 m 12 s
GR-5-0	26 m 35 s	33 m 20 s	1 h 33 m	1 h 38 m	

Tabella 7.10: Tempi di calcolo necessari per il problema SO2

presentano limitazioni maggiori, si valuterà come cambia l'errore al variare della griglia spaziale, indipendentemente dal passo temporale con cui si è giunti a convergenza.

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

Problema	κ	\varkappa	ρ_∞	u_∞	A_{min}/A_∞	M_∞
SO3	2	0.5	900	300	0.07	10

Tabella 7.11: Problema del moto supersonico in un l'ugello.

Nella tabella 7.12 sono mostrati i 4 differenti valori usati per le dimensioni della griglia spaziale. In questa, per ogni dimensione delle celle della griglia e per ogni schema sono indicati anche i massimi passi temporali con cui si arriva a convergenza (∞ indica ≥ 100 , massimo passo temporale su cui si sono fatte prove): la colonna FO sta per lo schema implicito linearizzato del primo ordine, SO, per quello linearizzato del secondo, DeC1 e DeC2 stanno rispettivamente per la tecnica Defect Correction con una e due iterazioni e Fu sta per lo schema non linearizzato al secondo ordine. Dalla tabella 7.12 si possono evidenziare alcune delle caratteristiche

Problema	Δx	FO	SO	DeC1	DeC2	Fu
SO3	10^{+2}	10^{-1}	10^{-0}	10^{-0}	10^{-0}	$1 \cdot 10^{-0}$
	10^{+1}	∞	∞	∞	∞	$5 \cdot 10^{-2}$
	10^{-0}	∞	∞	∞	∞	$5 \cdot 10^{-3}$
	10^{-1}	∞	∞	∞	∞	$5 \cdot 10^{-4}$

Tabella 7.12: Griglie spaziali e massimo passo temporale per SO3

delle soluzioni trovate: la prima è che, ad eccezione dello schema completamente implicito, tutti gli schemi al secondo ordine presentano le stesse limitazioni di passo temporale. Per quanto riguarda lo schema non linearizzato si può vedere come, in analogia a quanto visto nel capitolo 6, il passo temporale sia controllato dal rapporto $\frac{\Delta x}{\Delta t}$, tanto da evidenziare un limite superiore pressoché costante. La prima riga della tabella 7.12 mostra come per la convergenza, allo schema al primo ordine sia necessario un passo temporale minore di un generico secondo ordine. In realtà, anche se la simulazione arriva a convergenza, con questa griglia lo schema al primo ordine perde completamente la soluzione, come mostrato in figura 7.19 e 7.20. In queste immagini sono mostrati i risultati forniti dagli schemi del secondo ordine, completamente sovrapposti, la soluzione esatta e la soluzione del primo ordine. Come si vede, compatibilmente alla risoluzione della griglia, gli schemi con il secondo ordine riescono a seguire la soluzione mentre quello con il primo ordine la perde completamente. Questo risultato non dipende dal passo temporale, infatti anche diminuendo il Δt utilizzato, fino ad un minimo di 10^{-3} , il risultato fornito da questo schema non varia.

All'aumentare della risoluzione della griglia sia il primo che il secondo ordine si avvicinano progressivamente alla soluzione esatta come mostrato nelle figure 7.21 e 7.22. Anche se tutti gli schemi forniscono risultati corretti all'aumentare della risoluzione della griglia, in tutte le simulazioni si può osservare come nei punti dove la soluzione varia più rapidamente, cioè all'imbocco, all'uscita e nella gola del con-

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

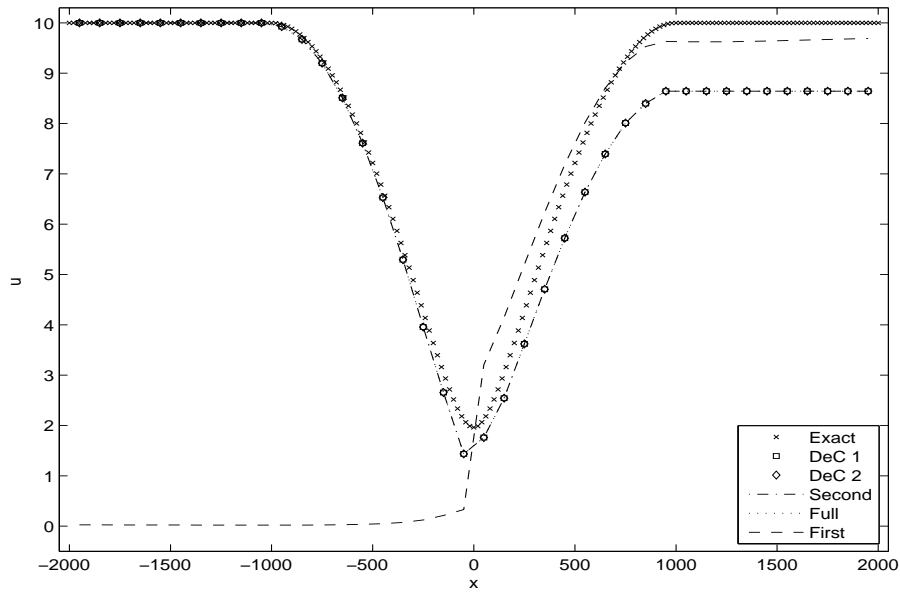


Figura 7.19: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{+2}$, numero di Mach

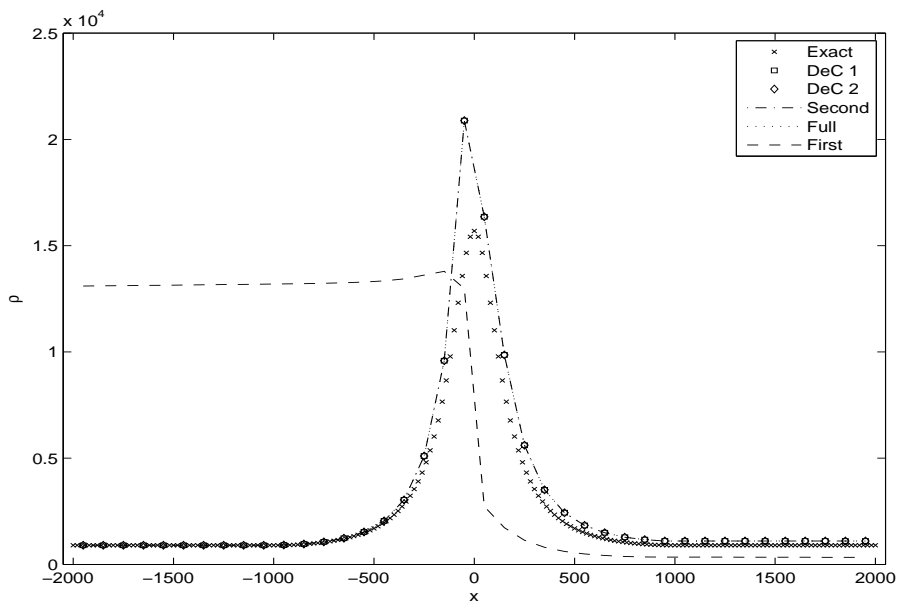


Figura 7.20: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{+2}$, densità

dotto, gli schemi al secondo ordine si adattano meglio alla soluzione, come mostrato nelle figure 7.23 e 7.24. Per questo gruppo di simulazioni utilizzare il tempo CPU per confrontare i vari schemi non è di interesse in quanto, ad eccezione dello schema completamente implicito, e dei casi con la griglia meno raffinata, la convergenza degli schemi avviene dopo circa 3 passi temporali, richiedendo un tempo paragonabile se non minore alla fase di inizializzazione del programma. Per questo motivo le misure del tempo CPU impiegato sarebbero poco significative.

È interessante studiare come varia l'errore degli schemi al variare della dimensio-

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

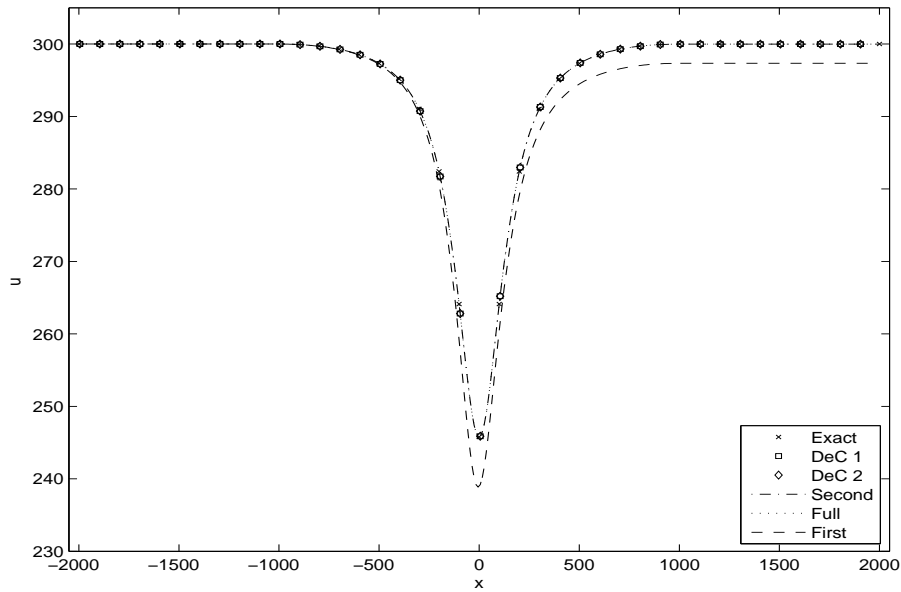


Figura 7.21: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{+1}$, velocità

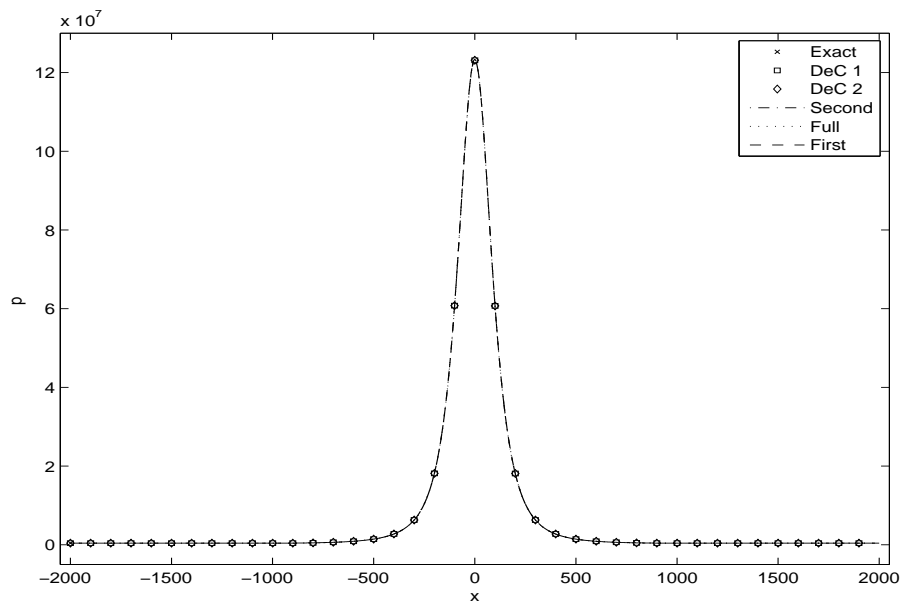


Figura 7.22: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{-1}$, pressione

ne delle celle: questa informazione è mostrata graficamente nella figura 7.25 per la densità e in 7.26 per la velocità. Come si può vedere, nuovamente, l'errore dei vari schemi al secondo ordine è indistinguibile ed è notevolmente minore di quello dello schema al primo ordine. Questi dati sono confermati dalla tabella 7.13, in cui si può vedere che la pendenza dell'errore è maggiore di 2 per il secondo ordine, con differenze nella pendenza fra i vari schemi inferiori a 10^{-4} , ed è prossima ad 1 per lo schema al primo ordine. Il fatto che sia per il primo che per il secondo ordine si abbiano pendenze maggiori del valore teorico non è una anomalia o frutto di

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

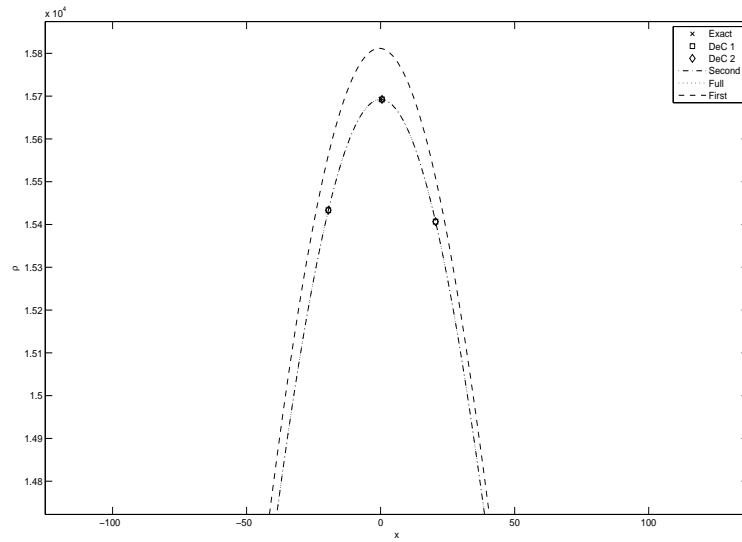


Figura 7.23: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{-0}$, dettaglio densità in gola

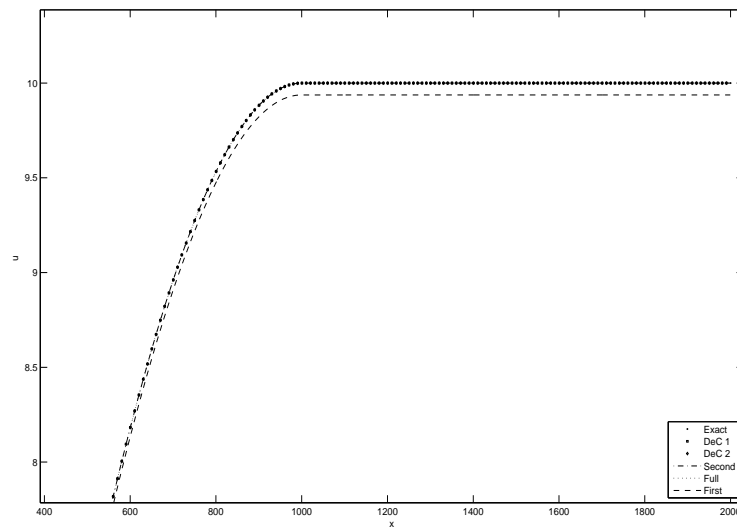


Figura 7.24: Confronto dei risultati SO3, $\Delta x = 10^{-0}$, dettaglio velocità all'uscita

Problema	Errore	FO	DeC1	DeC2	SO	Fu
SO3	$e(\rho)$	1.146731	2.246725	2.246763	2.246748	2.246765
	$e(p)$	1.079249	2.317822	2.317925	2.317904	2.317925
	$e(u)$	1.160862	2.233474	2.233490	2.233488	2.233494

Tabella 7.13: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi

7.3. Gruppo II : moto supersonico in un ugello

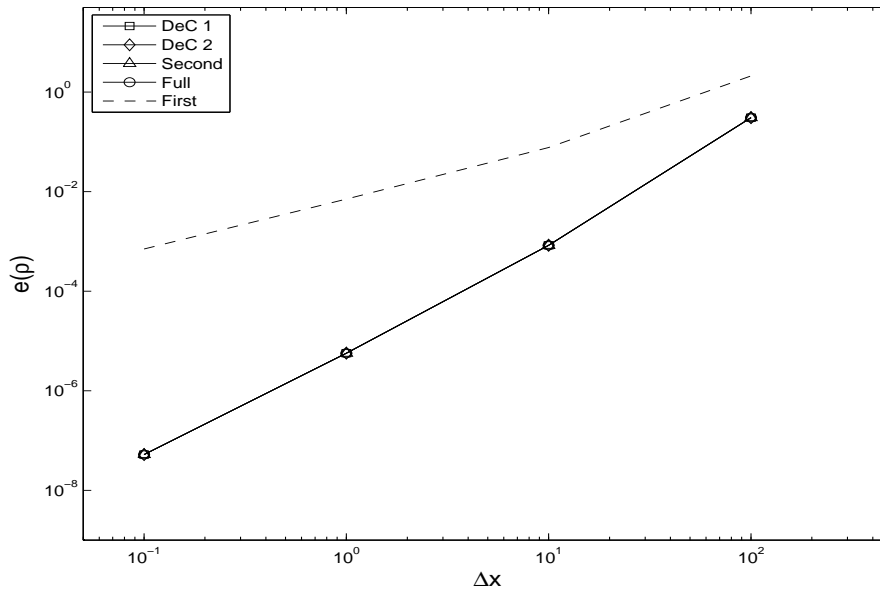


Figura 7.25: Andamento dell'errore in funzione della dimensione delle celle, densità

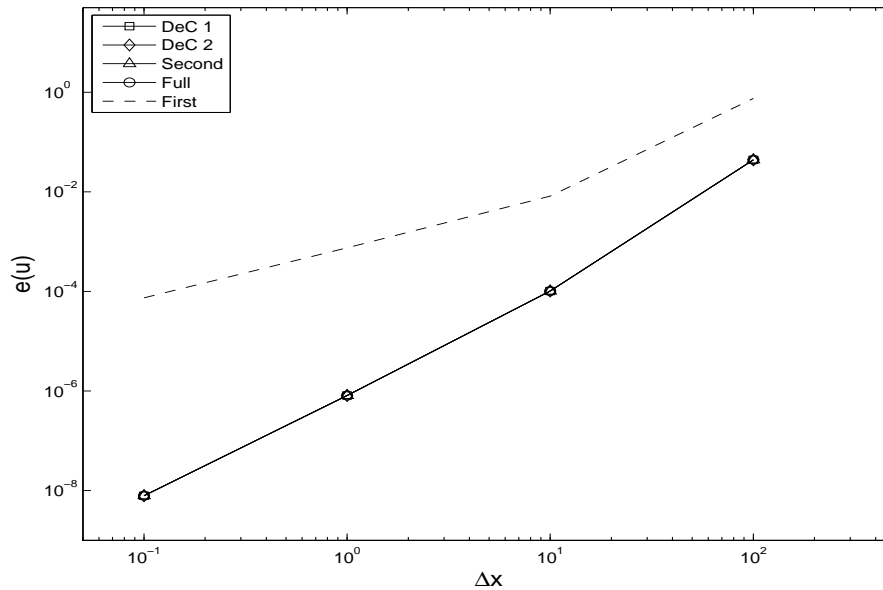


Figura 7.26: Andamento dell'errore in funzione della dimensione delle celle, velocità

qualche errore: come si può vedere in figura 7.27, dove è rappresentato la pendenza dell'errore fra due dimensioni delle celle adiacenti, per tutti gli schemi si tende verso il valore corretto di 2 per il secondo ordine e di 1 per il primo. Questi dati sono una valida conferma di entrambi gli schemi: in un problema impegnativo dal punto di vista dei cambiamenti delle variabili di stato (il Mach varia di un fattore 5), ma con soluzione continua e regolare il primo e secondo ordine hanno ottenuto la loro velocità di convergenza teorica, senza aver imposto limitazioni sul passo temporale per arrivare alla soluzione.

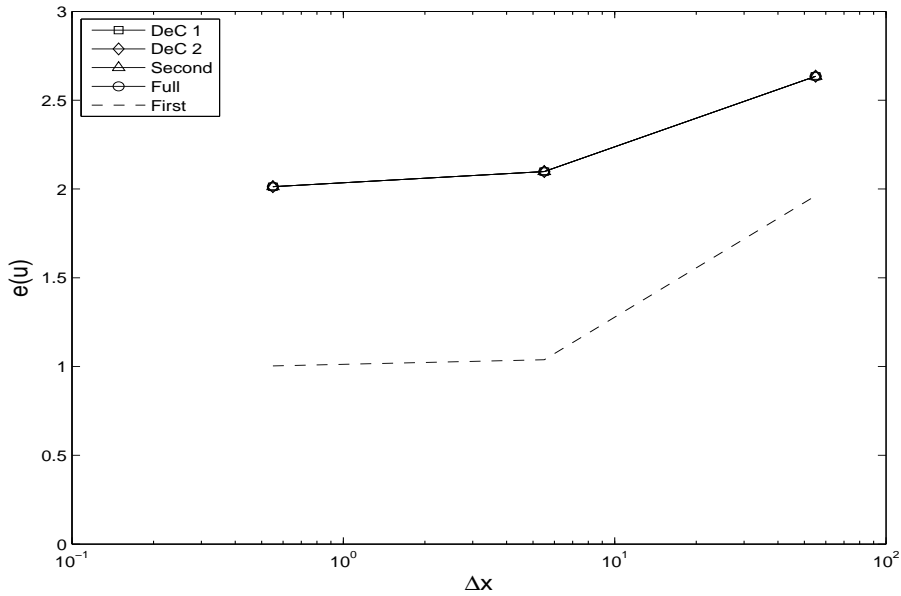


Figura 7.27: Pendenza locale dell'errore in funzione della dimensione delle celle, SO3, velocità

7.4 Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

Il terzo gruppo di simulazioni scelto è un problema di Riemann a basso numero di Mach. Con queste simulazioni si vuole sia fare un ulteriore e più approfondito confronto fra primo e secondo ordine, soprattutto per quanto riguarda la variazione dell'errore rispetto alle dimensioni delle celle della griglia, inoltre si vuole valutare quante iterazioni della tecnica DeC siano necessarie per arrivare a convergenza, cioè si vuole determinare k in modo tale che le soluzioni ottenute dopo k iterazioni e dopo $k+1$ non presentano differenze significative. Non si tratta soltanto di raggiungere la precisione del secondo ordine che, come è mostrato in [32], nel nostro caso si ottiene già dopo una iterazione, ma nello stabilire quando anche altre caratteristiche come l'ampiezza delle oscillazioni spurie, non variano più significativamente. Il motivo per cui lo studio sul funzionamento del secondo ordine è ristretto alla tecnica DeC sta nel fatto che il costo computazionale di una simulazione portata avanti con una sola iterazione DeC è minore di uno schema implicito linearizzato al secondo ordine e quello con due iterazioni DeC è analogo nel caso monodimensionale e minore nei casi con dimensioni superiori. Inoltre, come si è visto nella sezione 7.3, i vari schemi di secondo ordine, almeno per quanto riguarda il caso stazionario, sono equivalenti, è perciò legittimo valutare quale, partendo da quelli di minor costo computazionale, dia risultati migliori in un problema evolutivo.

Il problema scelto per queste simulazioni è mostrato in tabella 7.14. Questo è caratterizzato da una discontinuità e da una rarefazione che si allontanano. Si è scelto un caso di questo genere in quanto è un problema "misto", con zone continue e regolari e con discontinuità, in modo da poter analizzare il funzionamento degli schemi in una

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

situazione generale, non studiata appositamente per evidenziare una determinata caratteristica. Per questo caso sono state utilizzate 11 griglie differenti, mostrate in

Problema	κ	\varkappa	γ	ρ_L	u_L	ξ_L	ρ_R	u_R	ξ_R	M_∞
SO4	10^6	1	0	1	-90	-2	1.25	100	2	0.1

Tabella 7.14: Problema di Riemann a basso numero di Mach

tabella 7.15, ed è stato utilizzato sia lo schema implicito linearizzato al primo ordine che gli schemi al secondo ordine con la tecnica DeC, con una, due e tre iterazioni.

Problema	Griglia	Δt	Δx	N celle	Passi temporali
SO4	GR-2+5.2	10^{-2}	$5 \cdot 10^{+2}$	8	100
	GR-2+2	10^{-2}	10^{+2}	40	100
	GR-2+1	10^{-2}	10^{+1}	400	100
	GR-2+0	10^{-2}	10^{+0}	4000	100
	GR-3+2	10^{-3}	10^{+2}	40	1000
	GR-3+1	10^{-3}	10^{+1}	400	1000
	GR-3+0	10^{-3}	10^{+0}	4000	1000
	GR-4+2	10^{-4}	10^{+2}	40	10000
	GR-4+1	10^{-4}	10^{+1}	400	10000
	GR-4-0	10^{-4}	10^{+0}	4000	10000
	GR-5.5-1	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{-1}	8000	20000

Tabella 7.15: Griglie per SO4

Si possono dividere queste simulazioni in vari categorie, per mostrare l'effetto dei vari parametri: per prima cosa si può considerare l'effetto della dimensione delle celle, come mostrato nelle figure 7.28, 7.29 e 7.30 per la pressione. Come si può vedere, in queste prove il primo ordine fornisce risultati inferiori al secondo ordine, mentre il diverso numero di iterazioni DeC non pare avere effetti rilevanti sulle simulazioni. Una seconda analisi che si può fare è confrontare i risultati a parità del prodotto $\Delta x \Delta t$, cioè considerando simulazioni che richiedono approssimativamente lo stesso tempo. Nelle figure 7.31, 7.32 e 7.33, è mostrato come variano i risultati al diminuire della dimensione della cella e all'aumentare del tempo. Come si può vedere, anche se il secondo ordine ha sempre risultati migliori del primo ordine, la dipendenza dei risultati a $\Delta x \Delta t$ costante è variabile: inizialmente si ha un miglioramento dei risultati, ma all'aumentare del passo temporale diventano sempre più visibili delle oscillazioni nella soluzione, peggiorando i risultati. Questo concorda comunque sulla stima dell'errore dello schema che, abbiamo detto, è del tipo $O((\Delta t)^2, \Delta t \Delta x, (\Delta x)^2)$ perciò è ragionevole che, mantenendo costante il prodotto $\Delta t \Delta x$ si abbia una condizione minima per l'errore. Va comunque notato la possibilità di fare simulazioni a basso costo computazionale, come quella con la griglia GR-2+0 e DeC1, che danno

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

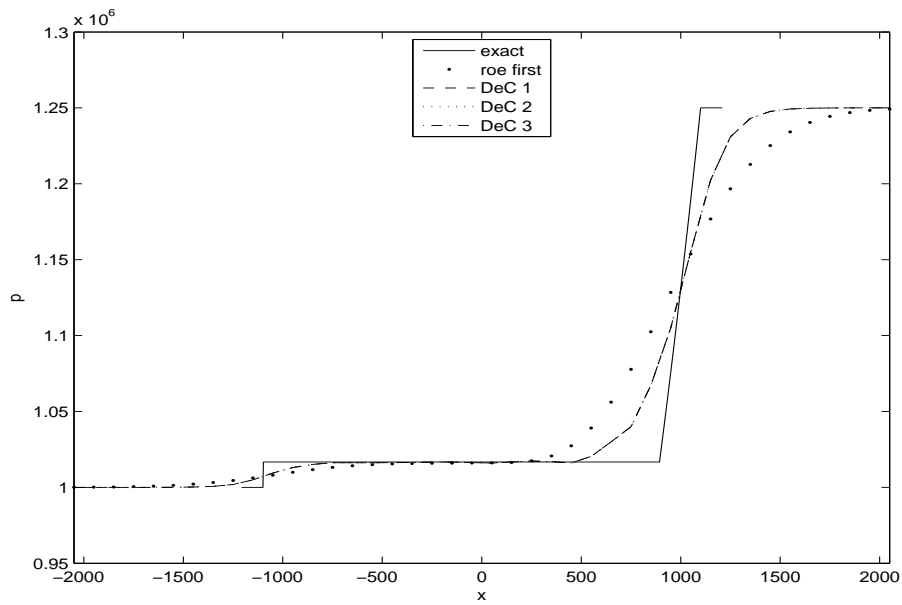


Figura 7.28: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-4+2, pressione

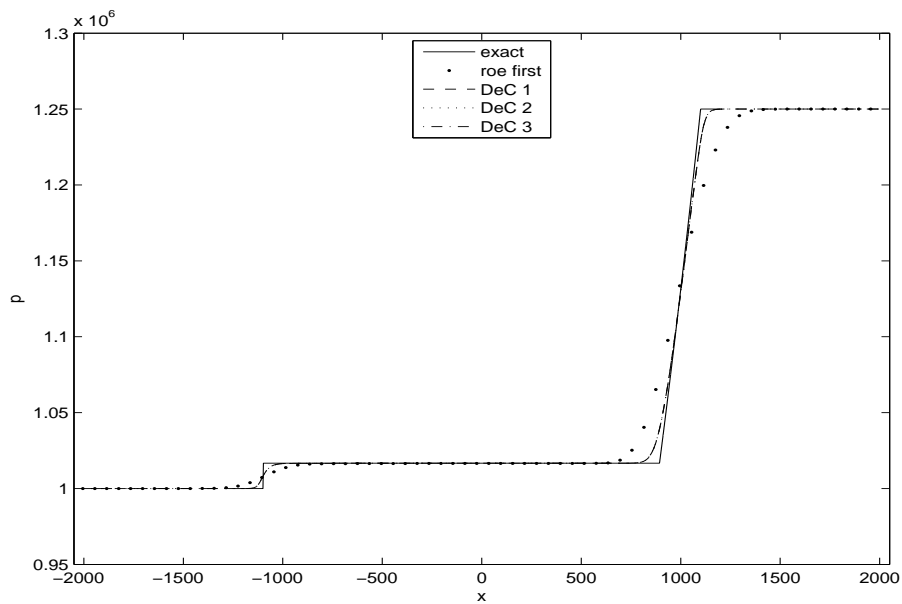


Figura 7.29: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-4+1, pressione

buoni risultati inaccessibili per uno schema esplicito, essendo in questo caso il CFL della simulazione pari a 10. Infine è importante far notare che, anche se generalmente il numero di passi DeC ha un effetto trascurabile, ci sono casi, come quello mostrato in 7.34 cui con una sola iterazione si hanno oscillazioni spurie di intensità maggiore e meno smorzate rispetto a due e tre iterazioni.

Il tempo CPU impiegato dai vari schemi per portare a termine la soluzione è mostrato in tabella 7.16, dove la colonna FO sta per lo schema al primo ordine, DeC1 per lo schema DeC con una iterazione, DeC2 per lo schema con 2 e DeC3 con 3. Come

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

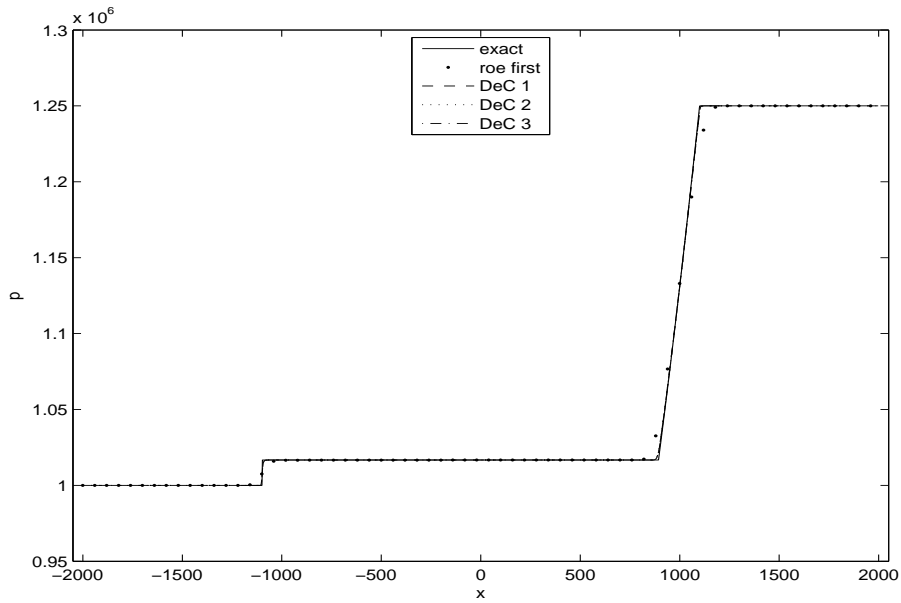


Figura 7.30: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-4+0, pressione

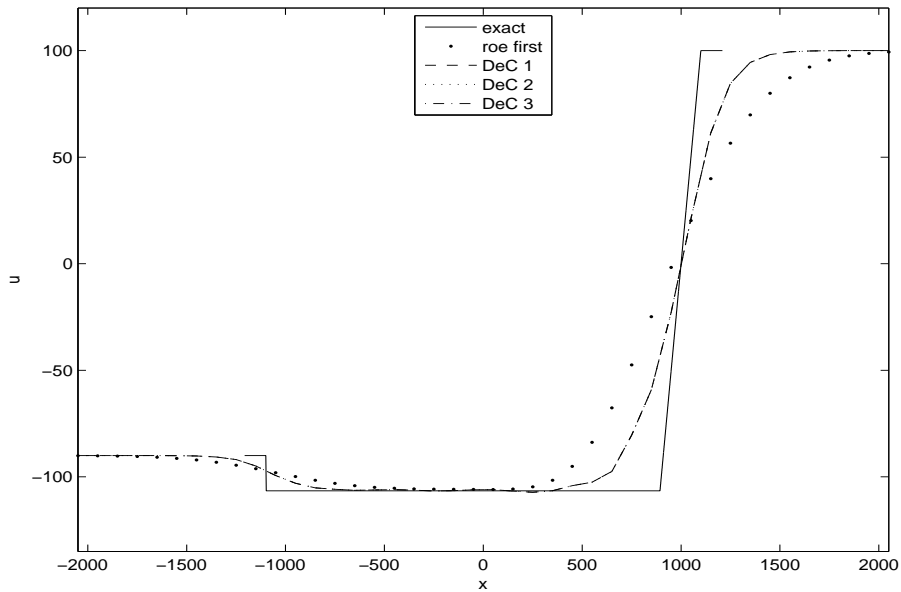


Figura 7.31: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-4+2, velocità

si può vedere dalla tabella 7.16 il tempo CPU richiesto dallo schema DeC1 è circa 1.17 volte quello richiesto dallo schema lineare, mentre aumentando il numero di iterazioni DeC le richieste aumentano in modo pressoché lineare. Questo andamento mette in risalto quanto sia importante arrestare la tecnica DeC appena i risultati abbiano ottenuto la precisione voluta o siano tali da non variare sensibilmente.

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

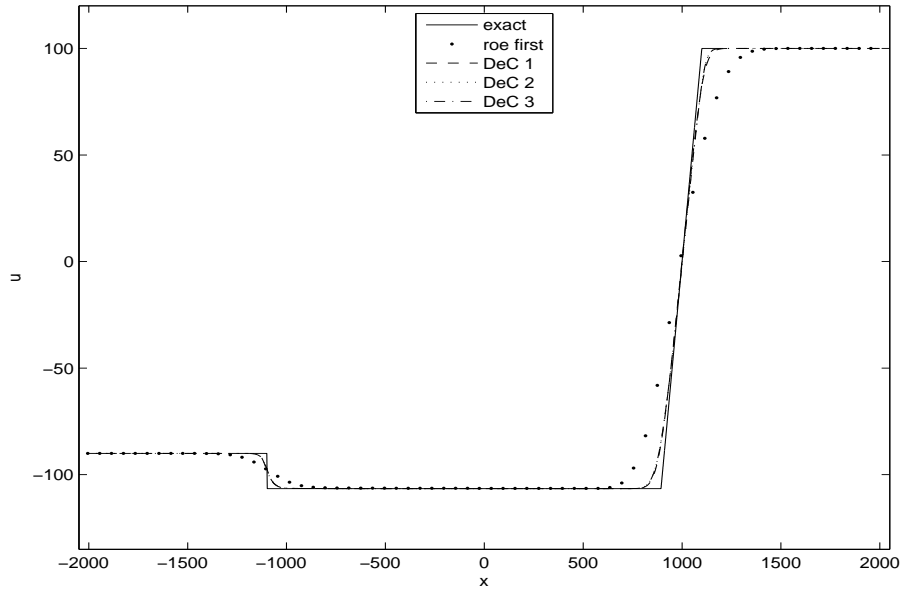


Figura 7.32: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-3+1, velocità

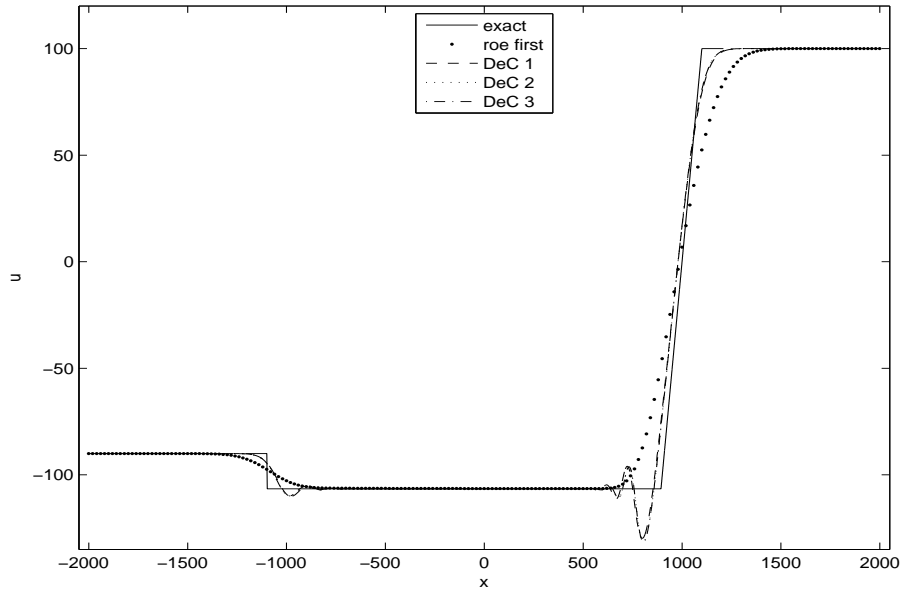


Figura 7.33: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-2+0, velocità

È interessante per questo gruppo osservare l'andamento dell'errore al variare del numero di iterazioni DeC. Lo si può studiare secondo vari criteri: sia al variare del passo temporale, tenendo fisso la dimensione della griglia spaziale, sia al contrario variando la dimensione delle celle mantenendo costante Δt . Inoltre si può anche decidere di applicare un criterio diverso, cioè tenere costante il rapporto $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ mentre variano entrambi. La scelta di tenere costante Δx e far variare Δt non mostra risultati di interesse. Come si vede dai dati in tabella 7.17 si hanno delle variazioni dell'errore molto ridotte o addirittura negative! Il motivo di questa anomalia diven-

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

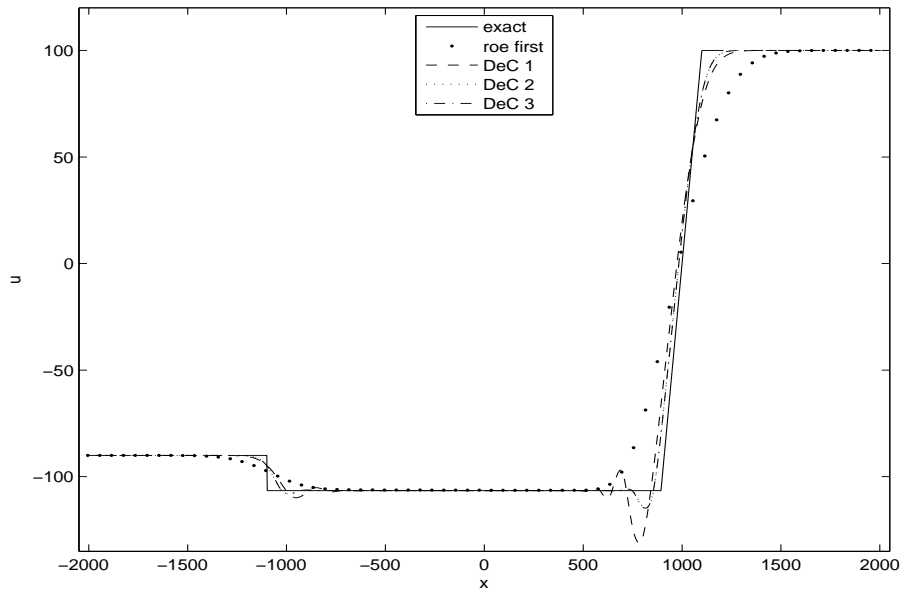


Figura 7.34: Confronto dei risultati SO4, griglia GR-2+1, velocità

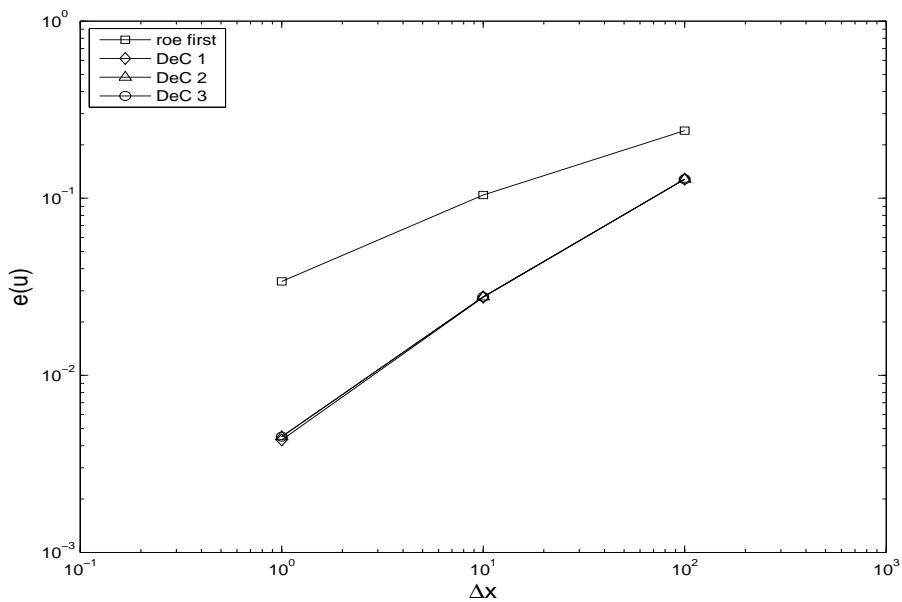


Figura 7.35: Confronto dell'errore SO4, $\Delta t = 10^{-4}$, velocità

ta subito chiaro osservando le figure 7.36 e 7.37. Come si può vedere, al diminuire del passo temporale l'errore è determinato in modo maggiore dalla discretizzazione spaziale, tanto che ad un certo punto l'errore tende a rimanere costante.

Osservando invece come varia l'errore fissato il passo temporale e variando la griglia spaziale si ottengono invece i risultati mostrati in tabella 7.18. Questi dati mostrano che la pendenza dell'errore per il secondo ordine, almeno per i Δt minori, è circa 1.7 volte più grande rispetto al primo ordine. Questo rapporto è analogo a quanto trovato per il problema SO1 ma, come è ragionevole, i valori delle pendenze sono

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

Problema	Griglia	FO	DeC1	DeC2	DeC3
SO4	GR-2+5.2	0.1 s	0.1 s	0.1 s	0.1 s
	GR-2+2	0.1 s	0.3 s	0.5 s	0.7 s
	GR-2+1	1 s	1 s	1 s	2 s
	GR-2+0	6 s	8 s	15 s	21 s
	GR-3+2	0.6 s	1 s	2 s	3 s
	GR-3+1	6 s	7 s	13 s	20 s
	GR-3+0	59 s	68 s	2 m 14 sm	3 m 21 s
	GR-4+2	6 s	8 s	15 s	22 s
	GR-4+1	57 s	68 s	2 m 12 s	3 m 15 s
	GR-4-0	9 m 19 s	10 m 55 s	22 m 48 s	32 m 51 s
	GR-5.5-1	37 m 51 s	44 m 12 s	1 h 30 m	2 h 16 m

Tabella 7.16: Tempi di calcolo necessari per il problema SO4

SO4					
Δx	Errore	FO	DeC1	DeC2	DeC3
10^2	$e(\rho)$	$7.223 \cdot 10^{-3}$	$-3.341 \cdot 10^{-3}$	$-1.137 \cdot 10^{-3}$	$-1.240 \cdot 10^{-3}$
	$e(p)$	$7.223 \cdot 10^{-3}$	$-3.341 \cdot 10^{-3}$	$-1.137 \cdot 10^{-3}$	$-1.240 \cdot 10^{-3}$
	$e(u)$	$7.355 \cdot 10^{-3}$	$-1.684 \cdot 10^{-3}$	$8.629 \cdot 10^{-5}$	$-3.176 \cdot 10^{-6}$
10^1	$e(\rho)$	$6.253 \cdot 10^{-2}$	$2.078 \cdot 10^{-1}$	$1.044 \cdot 10^{-1}$	$1.020 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$6.253 \cdot 10^{-2}$	$2.078 \cdot 10^{-1}$	$1.044 \cdot 10^{-1}$	$1.027 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$6.291 \cdot 10^{-2}$	$2.120 \cdot 10^{-1}$	$1.050 \cdot 10^{-1}$	$1.003 \cdot 10^{-1}$
10^0	$e(\rho)$	$2.528 \cdot 10^{-1}$	$5.660 \cdot 10^{-1}$	$5.530 \cdot 10^{-1}$	$5.531 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$2.528 \cdot 10^{-1}$	$5.660 \cdot 10^{-1}$	$5.530 \cdot 10^{-1}$	$5.531 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$2.536 \cdot 10^{-1}$	$5.667 \cdot 10^{-1}$	$5.512 \cdot 10^{-1}$	$5.513 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.17: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δx costante

minori rispetto ad esso in quanto la presenza della discontinuità in questo gruppo riduce la velocità di convergenza degli schemi. Analogamente agli altri problema trattati, come si può vedere dalle figure 7.38 e 7.39, oltre ad avere pendenza maggiore, anche il valore di partenza dell'errore è minore.

Infine in tabella 7.19 sono mostrati i risultati della pendenza dell'errore rispetto ad variare contemporaneo di Δx e Δt , mantenendo il loro rapporto costante: valutare l'andamento dell'errore in questo modo permette da un lato di valutare la variazione dell'errore con il passo temporale senza essere limitati dalla discretizzazione spaziale, dall'altro si può considerare come l'andamento dell'errore sotto una condizione di tipo CFL costante. Nuovamente in questo caso si vede come l'errore diminuisce più rapidamente nel secondo ordine rispetto al primo, risultato che è meglio illustrato dalla figura 7.40 dove si può anche osservare come in questo caso gli schemi

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

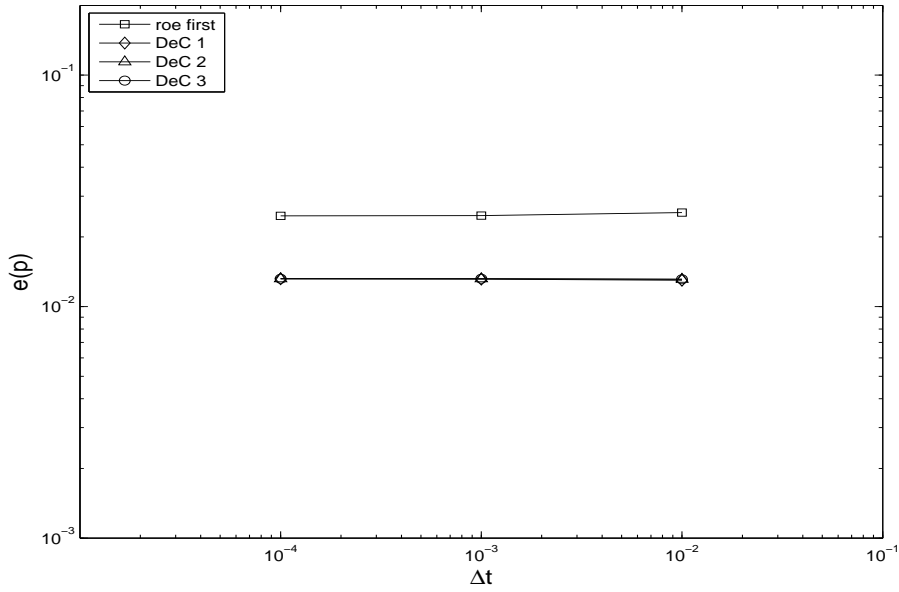


Figura 7.36: Confronto dell'errore SO4, $\Delta x = 10^{+2}$, pressione

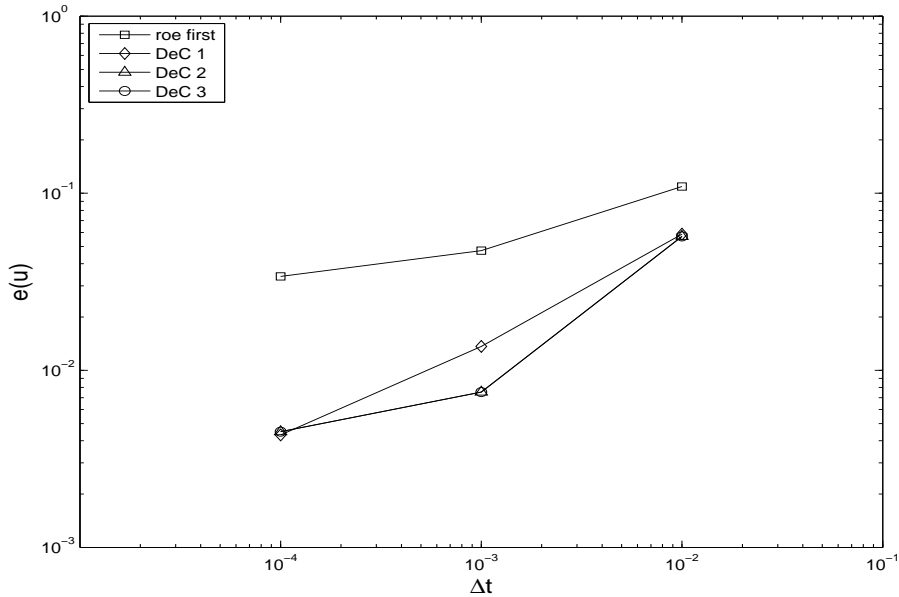


Figura 7.37: Confronto dell'errore SO4, $\Delta x = 10^{+0}$, velocità

DeC abbiano errori praticamente identici. Possiamo perciò concludere dicendo che i risultati trovati mostrano un effettivo miglioramento della precisione passando dal primo al secondo ordine: questo miglioramento è paragonabile in tutte le versioni dell'avanzamento temporale al secondo ordine, perciò è ragionevole considerare di utilizzare esclusivamente le soluzioni che permettano un risparmio di risorse computazionali. Anche se in alcune prove la tecnica DeC, utilizzata facendo una sola iterazione, ha dato risultati con un errore maggiore, rispetto alle prove con due o tre iterazioni, questo schema è quello, fra tutti gli schemi al secondo ordine, che ha

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

SO4					
Δt	Errore	FO	DeC1	DeC2	DeC3
10^{-2}	$e(\rho)$	$1.773 \cdot 10^{-1}$	$1.731 \cdot 10^{-1}$	$1.823 \cdot 10^{-1}$	$1.822 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$1.773 \cdot 10^{-1}$	$1.731 \cdot 10^{-1}$	$1.823 \cdot 10^{-1}$	$1.822 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$1.793 \cdot 10^{-1}$	$1.676 \cdot 10^{-1}$	$1.757 \cdot 10^{-1}$	$1.756 \cdot 10^{-1}$
10^{-3}	$e(\rho)$	$3.509 \cdot 10^{-1}$	$4.950 \cdot 10^{-1}$	$6.209 \cdot 10^{-1}$	$6.211 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$3.509 \cdot 10^{-1}$	$4.950 \cdot 10^{-1}$	$6.209 \cdot 10^{-1}$	$6.211 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$3.536 \cdot 10^{-1}$	$4.853 \cdot 10^{-1}$	$6.151 \cdot 10^{-1}$	$6.152 \cdot 10^{-1}$
10^{-4}	$e(\rho)$	$4.229 \cdot 10^{-1}$	$7.425 \cdot 10^{-1}$	$7.365 \cdot 10^{-1}$	$7.366 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$4.229 \cdot 10^{-1}$	$7.425 \cdot 10^{-1}$	$7.365 \cdot 10^{-1}$	$7.366 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.256 \cdot 10^{-1}$	$7.360 \cdot 10^{-1}$	$7.268 \cdot 10^{-1}$	$7.269 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.18: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a Δt costante

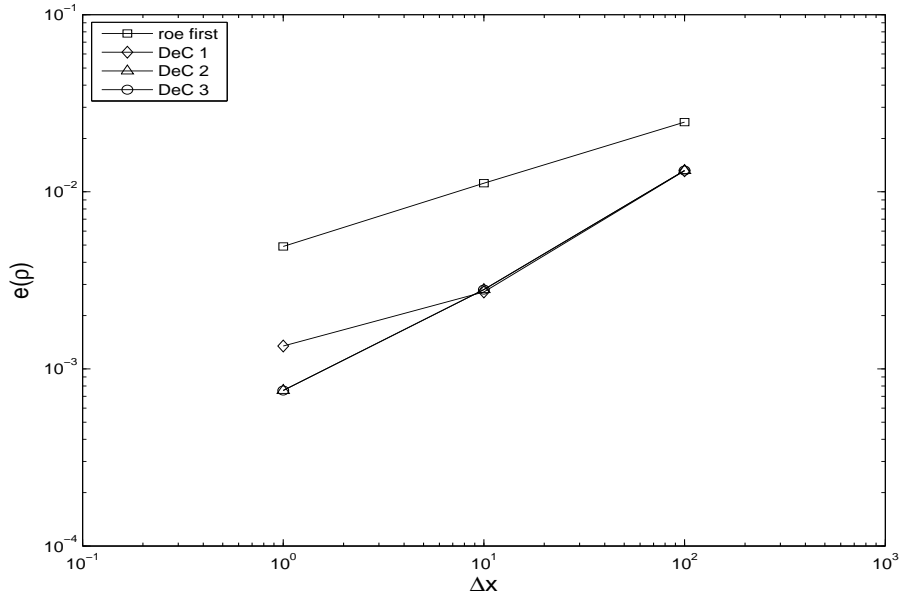


Figura 7.38: Confronto dell'errore SO4, $\Delta t = 10^{-3}$, densità

SO4					
$\frac{\Delta x}{\Delta t}$	Errore	FO	DeC1	DeC2	DeC3
10^4	$e(\rho)$	$4.263 \cdot 10^{-1}$	$7.139 \cdot 10^{-1}$	$7.098 \cdot 10^{-1}$	$7.096 \cdot 10^{-1}$
	$e(p)$	$4.263 \cdot 10^{-1}$	$7.139 \cdot 10^{-1}$	$7.098 \cdot 10^{-1}$	$7.096 \cdot 10^{-1}$
	$e(u)$	$4.285 \cdot 10^{-1}$	$7.085 \cdot 10^{-1}$	$7.016 \cdot 10^{-1}$	$7.014 \cdot 10^{-1}$

Tabella 7.19: Pendenze per le rette dell'errore di ρ , p e u per i vari schemi a $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante

7.4. Gruppo III : problema di Riemann a basso numero di Mach

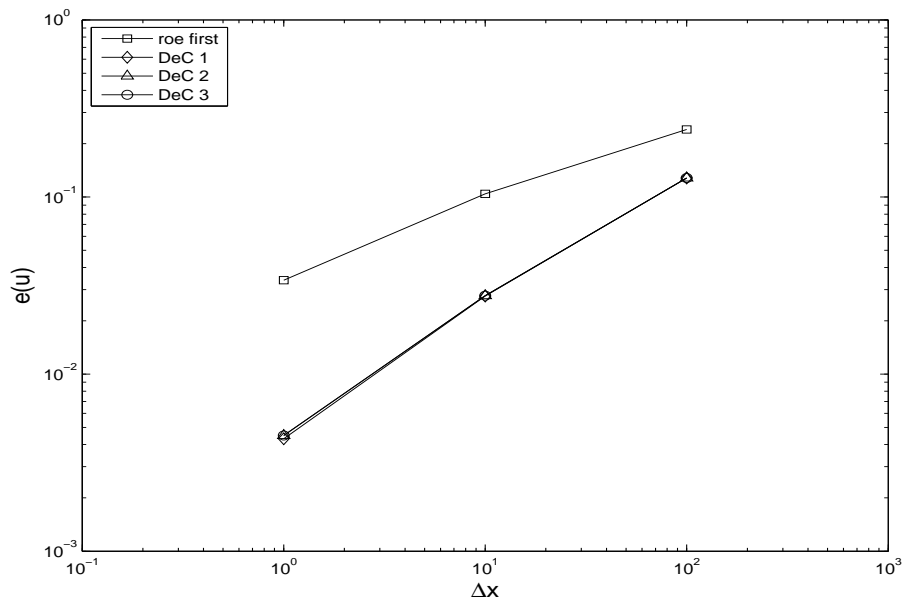


Figura 7.39: Confronto dell'errore SO4, $\Delta t = 10^{-4}$, velocità

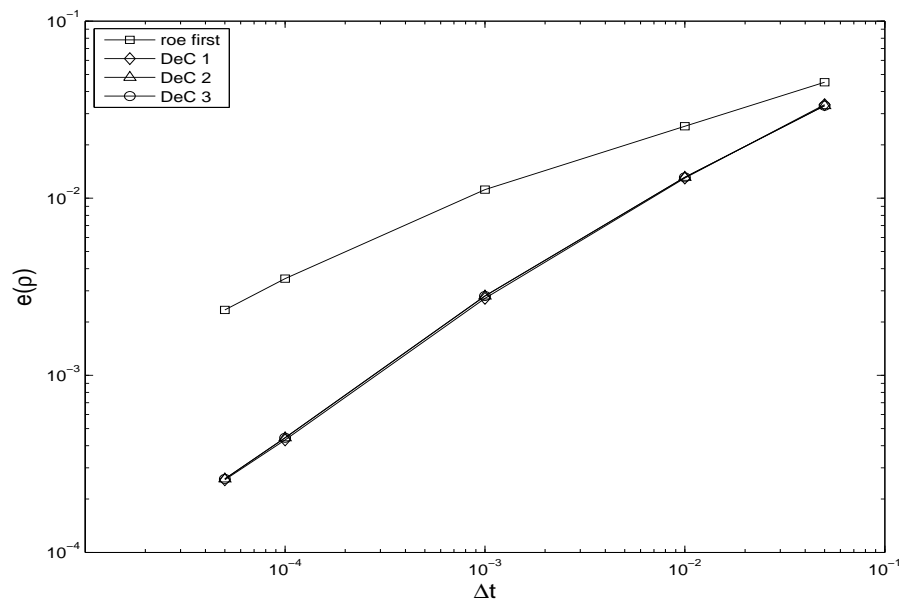


Figura 7.40: Confronto dell'errore SO4, $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ costante, densità

dimostrato il miglior rapporto precisione costo computazionale e perciò è quello che sarà ragionevolmente utilizzato lavorando su codici di dimensione superiore.

Capitolo 8

Conclusioni

Nel presente lavoro sono state discusse molteplici alternative per lo sviluppo di un codice numerico per la simulazione di flussi cavitanti tramite un modello di fluido equivalente che porta ad una legge di stato barotropica.

Si sono quindi mostrati differenti approcci per la discretizzazione di un flusso comprimibile, barotropico, monodimensionale.

Si è messo in luce come la possibilità di poter separare le fasi di discretizzazione spaziale e temporale permetta di poter combinare fra di loro tecniche basate su approcci differenti. Partendo da un metodo numerico ai volumi finiti accurato al primo ordine spaziale e temporale, con avanzamento temporale esplicito o implicito linearizzato, si è arrivati al secondo ordine di accuratezza nello spazio tramite la tecnica di ricostruzione degli stati MUSCL. I problemi generati da questa tecnica sono stati poi risolti applicando delle estensioni non lineari allo schema, i limitatori di pendenza. Per bilanciare il maggior costo computazionale del nuovo schema si è poi implementata la tecnica del “Defect Correction”, un metodo alternativo a quelli già presenti nel codice in grado di ridurre i tempi di calcolo senza ridurre l’accuratezza dello schema.

Si è inoltre implementato un avanzamento nel tempo implicito non linearizzato. Questo metodo di avanzamento nel tempo, di difficile applicazione per la sua non linearità, ha permesso di valutare le tecniche di linearizzazione impiegate nello schema e di quantificarne i pregi e i limiti.

Le nuove tecniche implementate sono state validate utilizzando la soluzione di un problema classico, il problema di Riemann e il flusso in un ugello. Durante le simulazioni sono state incontrate delle difficoltà dovute all’utilizzo della tecnica del preconditionamento, usata per non perdere accuratezza nella simulazione di flussi quasi incompressibili. È stato quindi proposto un preconditionatore variabile in funzione del numero di Mach, che permette di superare tali difficoltà.

Si sono allora svolte le prove per il metodo di avanzamento temporale implicito e per il secondo ordine. I risultati hanno mostrato come le limitazioni sul passo temporale e l’accuratezza dello schema implicito linearizzato siano analoghe allo schema implicito, confermando perciò la bontà della linearizzazione. Il secondo ordine ha confermato le sue caratteristiche di precisione superiore rispetto al primo e la tecnica del Defect Correction permette di avere questi vantaggi senza richiedere notevoli risorse computazionali in più.

Appendice A

Andamento del numero di condizionamento

Nel capitolo 5 è stato osservato come il numero di condizionamento del sistema lineare associato ad ogni avanzamento temporale del codice numerico vari in funzione del passo spaziale e temporale. In questa appendice si vuole dare una spiegazione di massima di questo andamento. Il sistema da risolvere è quello nella equazione 5.1, qui riportata per facilità di lettura:

$$\begin{cases} A\Delta W = b \\ W^{n+1} = W^n + \Delta W \end{cases}$$

La matrice A è della forma:

$$A = \frac{\Delta x}{\Delta t} \mathbf{I} + \mathbf{\Lambda} \quad (\text{A.1})$$

Dove Δx è la dimensione delle celle, Δt è il passo temporale, \mathbf{I} è la matrice identità e $\mathbf{\Lambda}$ è una matrice a bande. Chiamiamo α il rapporto tra Δx e Δt , si ha quindi:

$$\begin{cases} A = \alpha \mathbf{I} + \mathbf{\Lambda} \\ \|A\|_\infty \leq \alpha + \|\mathbf{\Lambda}\|_\infty \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Sappiamo che i termini della matrice $\mathbf{\Lambda}$ sono indipendenti da Δt , ma dipendono da Δx : le dimensioni di $\mathbf{\Lambda}$ variano al variare di Δx . Tuttavia i termini della matrice esibiscono una dipendenza debole dalla discretizzazione spaziale, in quanto, questi termini derivano dal calcolo delle matrici $(P_{ij}^n)^{-1} \cdot (P_{ij}^n \cdot (s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n))^+$ e $(P_{ij}^n)^{-1} \cdot (P_{ij}^n \cdot (s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n))^-$ definite in sezione 4.2.5. Queste matrici dipendono dai valori all'interfaccia tra due celle: nel limite in cui Δx tende a zero, i due valori all'interfaccia tendono a coincidere nelle zone continue ed ad un salto ben definito nelle discontinuità. In entrambi i casi, fissata un punto di interfaccia, si tende ad un valore costante per le matrici $(P_{ij}^n)^{-1} \cdot (P_{ij}^n \cdot (s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n))^+$ e $(P_{ij}^n)^{-1} \cdot (P_{ij}^n \cdot (s_{ij} \tilde{J}_{ij}^n))^-$. Questo significa che in prima approssimazione, poichè gli elementi della matrice $\mathbf{\Lambda}$ sono debolmente dipendenti da Δx , possiamo considerare $\|\mathbf{\Lambda}\|_\infty$ indipendente sia da Δx che Δt , cioè costante. Sotto questa ipotesi definiamo:

$$\varepsilon \triangleq \frac{\|\mathbf{\Lambda}\|_\infty}{\alpha} \quad (\text{A.3})$$

Nel caso $\varepsilon < 1$ ¹ possiamo scrivere:

$$A^{-1} = \frac{1}{\alpha} \sum_{i=0}^{\infty} -1^i \left(\frac{\mathbf{\Lambda}}{\alpha} \right)^i \quad (\text{A.4})$$

da questo deriva che

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{1}{\alpha} \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{1 - \varepsilon} \quad (\text{A.5})$$

ed infine:

$$\|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty} \leq \alpha (1 + \varepsilon) \frac{1}{\alpha} \frac{1}{1 - \varepsilon} = \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon} \quad (\text{A.6})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon} = 1 \quad (\text{A.7})$$

Poichè il numero di condizionamento non può mai essere minore di 1 si ha quindi che il limite per ε che tende a 0 è proprio 1. Inoltre visto che ε , data $\mathbf{\Lambda}$, diminuisce all'aumentare di α e che questo succede se si aumenta Δx o si diminuisce Δt , si è spiegato l'andamento del numero di condizionamento trovato nel capitolo 5.

¹Si può notare che la condizione $\varepsilon < 1$ corrisponde a $\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{\|\mathbf{\Lambda}\|_{\infty}}$, cioè è equivalente ad una condizione di tipo CFL sui passi di discretizzazione

Bibliografia

- [1] L. d'Agostino and E. Rapposelli. A modified bubbly isenthalpic model for numerical simulation of cavitating flows. *AIAA paper 2001-3402*, 2001.
- [2] E. Sinibaldi. *Implicit preconditioned numerical schemes for the simulation of three-dimensional barotropic flows*. PhD thesis, Scuola Normale Superiore di Pisa, 2006.
- [3] C. E. Brennen. *Cavitation and Bubble Dynamics*. Oxford University Press, 1995.
- [4] T. Y. Wu. Cavity and wake flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 3:243–284, 1972.
- [5] M. Ishii. *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, 1975.
- [6] Y. Delannoy and J. L. Kueny. Cavity flow predictions based on the euler equations. *ASME Cavitation and Multiphase Flow Forum*, 109:153–158, 1990.
- [7] R. K. Avva, A. K. Singhal, and D. H. Gibson. An enthalpy based model of cavitation. *ASME-FED*, 226:63–70, 1995.
- [8] A. Preston, T. Colonius, and C. E. Brennen. Toward efficient computation of heat and mass transfer effects in the continuum model for bubbly cavitating flows. In *Proc. CAV2001 - Fourth International Symposium on Cavitation*, Pasadena (California, USA), June 2001.
- [9] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons, 1985.
- [10] E. F. Toro. *Shock-capturing methods for free-surface shallow flows*. John Wiley & Sons, 2001.
- [11] L. C. Evans. *Partial differential equations*. Number 19 in Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society, 1998.
- [12] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. Springer, 1997.
- [13] P. D. Lax. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*. SIAM, 1973.

-
- [14] S. K. Godunov. A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 47:357–393, 1959.
- [15] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Matematica numerica*. Springer, 2000.
- [16] Charles Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Numerical Discretizations*, volume 1. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA, 1988.
- [17] P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43:357–372, 1981.
- [18] H. Guillard and C. Viozat. On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit. *Computers & Fluids*, 28:63–86, 1999.
- [19] E. Sinibaldi, F. Beux, and M.V. Salvetti. A preconditioned implicit roe’s scheme for barotropic flows:towards simulation of cavitation phenomena. Technical Report 4891, INRIA, July 2003.
- [20] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme V: a second-order sequel to Godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32:101–136, 1979.
- [21] Charles Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows: Computational methods for inviscid and viscous flows*, volume 2. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA, 1990.
- [22] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme IV: a new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, 23:276–299, 1977.
- [23] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme III: upstream-centered finite difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 23:263–275, 1977.
- [24] C. Debiez and A. Dervieux. Mixed-element-volume muscl methods with weak viscosity for steady and unsteady flow calculations. *Computers & Fluids*, 29:89–118, 2000.
- [25] C. Debiez. *Approximation et linéarisation d’écoulements aérodynamiques instationnaires*. PhD thesis, Université de Nice Sophia-Antipolis, 1996.
- [26] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 135:260–278, 1997.
- [27] Ami Harten and P.D. Lax. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(1):1–23, 1984.

-
- [28] van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. i. the quest of monotonicity. *Lecture Notes in Physics*, 18:163–168, 1973.
- [29] Boris J.P Book D.L. Flux-corrected transport i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics*, 135(2):172–186, 1997.
- [30] P. K. Sweby. High resolution schemes using flux-limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical. Analysis*, 21(5):995–1011, 1984.
- [31] G.D. van Albada, B. van Leer, W.W. Roberts, and Jr. A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics. *Astronomy and Astrophysics*, 108:76–84, April 1982.
- [32] Regis Martin and Herve Guillard. A second order defect correction scheme for unsteady problems. *Computers & Fluids*, 25:9–27, 1996.
- [33] D.A. Knoll and D.E. Keyes. Jacobian-free newton-krylov methods: a survey of approaches and applications. *Journal of computational physics*, 193:357–397, 2004.
- [34] R.P. Pawloski, J.P. Simonis, H.F. Walker, and J.N. Shadid. Inexact newton dogleg methods. Technical report, WPI Mathematical Sciences Department MS-5-05-36, 2005.
- [35] C.T. Kelly. *Iterative methods for linear and nonlinear equations*. SIAM, 1995.
- [36] M. J. D. Powell. *A hybrid method for nonlinear equations*, volume Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations, pages 87–114. Gordon and Breach, London, 1970.
- [37] M. J. D. Powell. A fortran subroutine for unconstrained minimization, requiring first derivatives of the objective function. Technical Report AERE-R. 6469, Mathematics Branch, A.E.R.E, Harwell, Berkshire, England, 1970.
- [38] J. E. Dennis, Jr., and R. B. Schnabel. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Series in Automatic Computation. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1983.
- [39] A.C. Hindmarsh P.N. Brown. Matrix-free methods for stiff systems of ode’s. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23:610–638, 1986.
- [40] R. Freund, G. Golub, and N. Nachtigal. Iterative solution of linear systems. In A. Iserles, editor, *Acta Numerica 1992*, pages 57–100. Cambridge University Press, 1992.
- [41] Ilse C. F. Ipsen and Carl D. Meyer. The idea behind Krylov methods. *American Mathematical Monthly*, 105(10):889–899, 1998.

- [42] Y. Saad and M. Schultz. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, 7:856–896, 1986.
- [43] Tobin A. Driscoll, Kim-Chuan Toh, and Lloyd N. Trefethen. From potential theory to matrix iterations in six steps. *SIAM Review*, 40(3):547–578, 1998.
- [44] S. L. Campbell, I. C. F. Ipsen, C. T. Kelley, and C. D. Meyer. GMRES and the minimal polynomial. *BIT Numerical Mathematics*, 36(4):664–675, 1996.