

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

MICHELE CRUDELE

tesi di laurea in Fisica

STUDIO NUMERICO DELLA DINAMICA

DI UNA BOLLA DI VAPORE

IN UN LIQUIDO

relatore: prof. Andrea Prosperetti

correlatore: prof. Guido Parravicini

matr. n° 220074

Luglio 1982

INDICE

	pag.
Introduzione	III
Cap. 1° La dinamica di una bolla di vapore in un liquido	1
Cap. 2° Il metodo OCI-CN di integrazione numerica per problemi parabolici	11
Cap. 3° Il problema parabolico con il legame al contorno tra gradiente e derivata temporale	27
Cap. 4° Il problema modello: soluzione analitica e numerica	42
Cap. 5° Il programma di calcolo per il problema modello. Confronto tra risultati analitici e numerici	52
Cap. 6° La soluzione numerica del problema della dinamica di una bolla di vapore in un liquido	72
Cap. 7° Studio numerico della crescita e del collasso di una bolla di vapore nel sodio. Il programma di calcolo per il problema della bolla	85
Conclusioni e sviluppi successivi	121
Bibliografia	123

INTRODUZIONE

Scopo del presente lavoro è lo sviluppo di un metodo numerico di alta approssimazione ed efficienza per la risoluzione di problemi parabolici per i quali ci sia al contorno un legame tra la derivata temporale e il gradiente.

Esprimendo tale classe di problemi in formule:

$$1 \left\{ \begin{array}{l} a(x, t, R, \dot{R}) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x, t, R, \dot{R}) \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad x_0 \leq x \leq x_N \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_0} = p(t, u(x_0, t), R, \dot{R}) \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_0} + q(t, u(x_0, t), R, \dot{R}) \\ u(x, 0) = f(x) \\ u(x, t) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} u_\infty \quad \frac{\partial u}{\partial x} \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0 \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0 \\ \ddot{R} = \ell(t, u(x_0, t), R, \dot{R}) \\ R(0) = R_0 \quad \dot{R}(0) = V_0 \end{array} \right.$$

La motivazione di questo lavoro è stata lo studio della dinamica di una bolla di vapore in un liquido. Le equazioni che regolano questo fenomeno, nell'approssimazione di simmetria radiale, si possono scrivere:

$$(2.1) \quad \mathcal{D} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left(\frac{2\mathcal{D}}{z} - \frac{R^2 \dot{R}}{z^2} \right) \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad R(t) \leq z < \infty$$

$$(2.2) \quad 4\pi R^2 K \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=R(t)} = \left(\frac{4}{3} \pi \mathcal{L} R^3 \frac{dp_v}{dT_s} \right) \frac{dT_s}{dt} + 4\pi \mathcal{L} R^2 \dot{R} p_v(T_s)$$

$$(2.3) \quad T(z, 0) = T_\infty \quad T(z, t) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} T_\infty$$

$$(2.4) \quad \ddot{R} = \frac{1}{R} \left[-\frac{3}{2} \dot{R}^2 + \frac{1}{f} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right) \right]$$

$$(2.5) \quad R(0) = \frac{2\sigma(T_\infty)}{p_v(T_\infty) - p_\infty} \quad V(0) = V_0$$

dove T è la temperatura del liquido, T_{∞} la temperatura (che supporremo costante) iniziale e lontano dalla bolla, R il raggio della bolla, T_s la temperatura alla superficie della bolla, D la diffusività termica del liquido, k la conducibilità termica del liquido, L il calore latente, ρ la densità del liquido, p_{∞} la pressione (costante) del liquido, $\sigma(T)$ la tensione superficiale alla temperatura T , $\rho_v(T)$ e $p_v(T)$ rispettivamente la densità e la pressione di vapore alla temperatura T .

La 2.1 è l'equazione dell'energia nel liquido, la 2.2 è quella dell'energia all'interfaccia bolla-liquido, la 2.4 deriva da quelle di continuità e di conservazione della quantità di moto.

L'interesse pratico di questo tipo di problemi concerne fenomeni di ebollizione che hanno assunto particolare importanza negli impianti di generazione di energia, in particolare nei reattori nucleari.

Le equazioni 2 sono state modificate effettuando la trasformazione $h = 1/3 (r^3/R^3 - 1)$. Tale coordinata lagrangiana ha un duplice vantaggio. Da un lato essa fissa a zero la superficie mobile della bolla ($h=0$ se $r=R(t)$) e dall'altro rende possibile l'integrazione con un reticolo spaziale che, nella variabile h , resta inalterato nel tempo,

mentre nella variabile r originaria si estende all'aumentare del raggio. Questa seconda caratteristica assume particolare importanza perché la crosta sferica intorno alla bolla in cui gli effetti termici sono rilevanti si allarga col tempo.

Il metodo di integrazione adoperato è di tipo compatto e implicito. La caratteristica principale è l'uso di una approssimazione dell'intero operatore parabolico $a \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b \frac{\partial}{\partial x}$ invece che di approssimazioni diverse per i singoli termini. L'alta velocità è raggiunta con l'uso di matrici tridiagonali che danno luogo a sistemi risolvibili molto rapidamente.

Il metodo è stato accoppiato all'integrazione temporale del tipo Crank-Nicolson, che è del 2° ordine.

Per verificare l'attendibilità del metodo numerico di integrazione, si è cercato un problema avente la struttura 1, di cui fosse possibile determinare la soluzione analiticamente mediante trasformate integrali. Il confronto fra risultanti analitici e numerici si è rivelato estremamente positivo, confermando l'elevata precisione (del 4° ordine nella parte spaziale) e velocità del metodo.

L'applicazione di tale metodo numerico alla dinamica di alcune bolle ha mostrato alcune instabilità nell'integra-

zione temporale, che sono state eliminate rendendo tale integrazione implicita.

I risultati del caso della crescita di una bolla nel sodio surriscaldato concordano perfettamente con precedenti soluzioni approssimate di altri autori nei campi di validità di queste ultime. E' stato possibile anche studiare per la prima volta casi di collasso di bolle, che sono spunto di interessanti considerazioni su fenomeni di oscillazione.

In definitiva si può dire che lo scopo iniziale che ci eravamo proposti è stato pienamente raggiunto.

Il lavoro tuttavia prosegue in due direzioni. Da un lato si sta cercando di affinare ulteriormente il metodo numerico e dall'altro esso viene applicato ad altri casi concreti quali la dinamica della bolla in campi di pressione variabile e in campi di temperatura iniziale non uniforme.

CAPITOLO 1°

La dinamica di una bolla di vapore in un liquido1. Generalità sulla dinamica delle bolle

Premettiamo un'importante distinzione tra due categorie di bolle in un liquido: le bolle di gas e quelle di vapore. Nelle prime si considera che la cavità sia riempita essenzialmente di gas e che sia trascurabile la presenza di vapore del liquido. Le bolle di gas sono familiari a chiunque, essendo presenti nelle bevande gasate; la loro importanza si estende ai processi di degasamento di liquidi ed esse vengono usate anche nei reattori chimici per favorire reazioni gas-liquido. Le bolle di vapore sono invece costituite prevalentemente di vapore del liquido. Queste ultime possono a loro volta suddividersi in due classi: bolle di cavitazione e bolle di vapore propriamente dette. Questa ultima distinzione è basata sull'importanza che hanno gli effetti di scambio termico nelle bolle. In una bolla di cavitazione la dinamica è regolata soprattutto dall'inerzia del liquido, mentre in una bolla di vapore gli effetti termici sono dominanti. Ciò che determina la differenziazione è sostanzialmente la densità del vapore, come si può chiarire col seguente esempio.

Supponiamo che una bolla cresca nell'acqua fino a un raggio R in un tempo t . L'energia termica necessaria per riempire la bolla di vapore in equilibrio termodinamico con l'acqua è $\frac{4}{3}\pi R^3 L \rho_v^e(T)$, dove L è il calore latente di evaporazione e $\rho_v^e(T)$ è la densità di vapore di equilibrio alla temperatura T dell'acqua. Questa energia è fornita dalla diminuzione di temperatura ΔT del liquido intorno alla bolla in uno strato di spessore \sqrt{Dt} (come si vede che accade in generale nei fenomeni di termoconduzione - cfr [8]), dove $D = \frac{k}{\rho_l c}$ è la diffusività termica, ρ_l la densità del liquido e c il calore specifico. Il calore fornito nel tempo t è quindi $(4\pi R^2 k \nabla T) t$; approssimando il gradiente $\nabla T = \frac{\Delta T}{\sqrt{Dt}}$ si ottiene $4\pi R^2 \sqrt{Dt} \rho_l c \Delta T$. Uguagliando le due quantità otteniamo una diminuzione di temperatura ΔT . Per l'acqua a 15°C con $R=0.1$ cm., $t=10^{-3}$ sec., $\rho_v^e=1.3 \cdot 10^{-5}$ g/cm³ si trova $\Delta T \simeq 0.2^\circ\text{C}$ che causa una diminuzione di pressione di vapore di circa l'1%, che è trascurabile. La crescita sarà quindi limitata essenzialmente da fattori inerziali e parleremo quindi di bolla di cavitazione.

Se l'acqua è vicina a 100°C , la densità di vapore di equilibrio è circa 46 volte più grande di quella a 15°C , per cui $\Delta T \simeq 13^\circ\text{C}$, con una corrispondente diminuzione della pressione di vapore di circa il 50%. Chiaramente in questo caso

la dinamica della bolla è fortemente influenzata dal trasporto di calore verso la sua superficie ed essa cresce più lentamente. In questo caso parliamo di bolla di vapore propriamente detta.

Le bolle di cavitazione si formano di solito in condutture e macchinari idraulici quando l'elevata velocità locale causa un abbassamento della pressione sotto quella a cui il liquido bolle. Sono ben noti i danni da usura e corrosione che esse producono al momento del collasso sulle pareti.

Le bolle di vapore sono presenti in tutti i fenomeni di ebollizione. La loro importanza è relativa soprattutto alla funzione che svolgono nei liquidi di raffreddamento (un esempio è il sodio, del quale ci occuperemo in seguito, che viene utilizzato come refrigerante nei reattori nucleari veloci). Il calore sottratto per convezione dal liquido alla superficie solida che si vuole raffreddare, provoca un abbassamento di temperatura della superficie stessa che è minore di quello che si avrebbe se questo calore contribuisse a far crescere bolle di vapore. Infatti il calore necessario per l'evaporazione di un liquido è molto elevato e la crescita di una bolla di vapore abbassa notevolmente la temperatura della superficie.

Volutamente non abbiamo accennato al problema assai complesso, e ancora praticamente irrisolto, della nascita di una bolla in un liquido. L'ipotesi più accreditata è che le impurità presenti nel liquido agiscano da nuclei di formazione delle bolle stesse.

In ogni caso, come vedremo nel cap. 7°, le condizioni iniziali della bolla hanno un effetto praticamente nullo ai fini dell'evoluzione della bolla stessa, per cui non è necessario conoscere il meccanismo che porta alla sua formazione per studiarne la dinamica. In pratica, nella trattazione che segue, partiremo sempre da una bolla già formata e imporremo ad essa delle condizioni iniziali opportune.

2. La dinamica di una bolla di vapore in un liquido

Equazioni meccaniche

Consideriamo un liquido esteso indefinitamente e a riposo e una cavità riempita di vapore al suo interno. Supponiamo che il liquido sia incomprimibile e che la viscosità sia trascurabile. Possiamo allora scrivere l'equazione di Eulero [8]

$$(2.1) \quad \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} = - \frac{1}{\rho} \nabla p$$

dove \underline{v} è la velocità del liquido, p la pressione e ρ la densità.

Poiché, nelle ipotesi fatte, la bolla è lontana da superfici solide e da altre bolle, vale l'approssimazione di simmetria radiale. In coordinate sferiche la 2.1 diventa:

$$(2.2) \quad \frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}$$

La velocità v_r può essere determinata in modo semplice applicando il principio di conservazione della massa. Presa una sfera di raggio r concentrica con la bolla (di raggio R), la massa di liquido spostata dall'espansione della bolla stessa in un intervallo di tempo dt , sarà:

$$(2.3) \quad \int 4 \pi R^2 \dot{R} dt$$

Ma questa quantità deve essere uguale a quella che attraversa la superficie della sfera di raggio r , che risulta:

$$(2.4) \quad \rho 4\pi r^2 v_r dt$$

Dall'uguaglianza di 2.3 e 2.4 risulta

$$(2.5) \quad v_r = \frac{R^2}{r^2} \dot{R}$$

Naturalmente questo è anche il risultato che si ottiene dall'equazione di continuità per liquidi incomprimibili

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 .$$

Sostituendo la 2.5 nella 2.2, otteniamo

$$(2.6) \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{R^2 \dot{R}}{r^2} \right) + \frac{R^2 \dot{R}}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{R^2 \dot{R}}{r^2} \right) \right) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}$$

da cui

$$(2.7) \quad \frac{2R\ddot{R}}{r^2} + \frac{R^2\ddot{R}}{r^2} + \frac{R^2\dot{R}}{r^2} \left(-2 \frac{R^2\dot{R}}{r^3} \right) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}$$

Integrando la 2.7 tra r e ∞ , otteniamo

$$(2.8) \quad \frac{2R\dot{R}}{r} + \frac{R^2\ddot{R}}{r} - \frac{R^4\dot{R}^2}{2r^4} = - \frac{1}{\rho} (p_\infty - p)$$

che per $r=R(t)$ vale

$$(2.9) \quad R\ddot{R} + \frac{3}{2} \dot{R}^2 = - \frac{1}{\rho} (p_\infty - p_R)$$

Scriviamo ora la formula di Laplace

$$(2.10) \quad p_i - p_R = \frac{2\sigma}{R}$$

dove p_i è la pressione interna alla bolla, p_R la pressione del liquido alla superficie della bolla, σ è la tensione

superficiale e dove abbiamo trascurato il termine a destra $-\frac{4\mu}{R}\dot{R}$ perché piccolo (nel caso del sodio la viscosità dinamica $\mu = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ mentre la tensione superficiale $\sigma \simeq 10^2 \text{ dyn} \cdot \text{cm}^{-1}$, per cui, a parità di raggio, il termine di viscosità risulta apprezzabile per velocità superiori a $10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ che vengono raggiunte solamente nelle fasi finali di collasso, quando anche l'approssimazione sferica perde la sua validità) (°)

Con la 2.10, la 2.9 diventa

$$(2.11) \quad R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 = \frac{1}{\rho} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right)$$

che è l'equazione "dinamica" della bolla di vapore, dove abbiamo indicato p_i con $p_v(T_s)$ per sottolineare la sua dipendenza dalla temperatura superficiale della bolla, e abbiamo anche scritto σ come funzione della temperatura superficiale (nonostante sia praticamente costante).

All'equazione 2.11 andrà quindi accoppiata la soluzione della equazione dell'energia che ricaviamo nel paragrafo seguente.

(°) La relazione 2.10 si ricava da quella generale

$$p_1 - p_2 = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)$$
 dove p_1 e p_2 sono le pressioni alle superfici a contatto di raggio di curvatura rispettivamente R_1 e R_2 . Per superfici sferiche di raggio R a contatto, risulta la 2.10. (cfr par. 60 [8])

Dalla 2.11 possiamo definire un raggio di equilibrio (che risulta instabile) per la bolla

$$(2.12) \quad R_0 = \frac{2\sigma(T_s)}{p_v(T_s) - p_\infty}$$

3. La dinamica di una bolla di vapore in un liquido

Equazioni di scambio termico

Scriviamo il primo principio della termodinamica per un volume generico V nello spazio occupato da un liquido incomprimibile

$$(3.1) \quad d\mathcal{E} = \delta Q$$

dove δQ è la quantità di calore acquisita dal volume V in un tempo dt , $d\mathcal{E}$ è la corrispondente variazione di energia contenuta in V e il termine di lavoro $p dV$ è stato omissso a causa dell'incomprimibilità del liquido.

Risulta che

$$(3.2) \quad \frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathcal{E} dV + \int_S \rho \mathcal{E} \underline{v} \cdot \underline{n} dS$$

dove ρ è la densità del liquido, \mathcal{E} la densità di energia per unità di massa, \underline{v} la velocità del fluido, \underline{n} la normale uscente dalla superficie S che racchiude il volume V .

Il secondo termine a destra è il contributo del flusso totale di energia dovuto allo spostamento di fluido attraver-

so la superficie S (convezione).

D'altra parte risulta che

$$(3.3) \quad \delta Q = \left(- \int_S \underline{q} \cdot \underline{n} \, ds \right) dt$$

cioè uguale al flusso totale di calore trasportato per conduzione attraverso S nel tempo dt ; il segno meno è dovuto al fatto che ad un aumento di energia corrisponde un flusso di calore entrante (cioè di segno opposto a \underline{n}).

Riscrivendo la 3.1 otteniamo

$$(3.4) \quad \frac{d}{dt} \int_V \varepsilon \rho \, dV + \int_S \rho \varepsilon \underline{v} \cdot \underline{n} \, ds = - \int_S \underline{q} \cdot \underline{n} \, ds$$

Per il teorema della divergenza, poiché ρ è costante, si ha

$$(3.5) \quad \rho \frac{d}{dt} \int_V \varepsilon \, dV + \rho \int_V \underline{\nabla} \cdot (\varepsilon \underline{v}) \, dV = - \int_V \underline{\nabla} \cdot \underline{q} \, dV$$

da cui, derivando sotto il segno di integrale, otteniamo

$$(3.6) \quad \int_V \left[\rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\varepsilon \underline{v}) \right) + \underline{\nabla} \cdot \underline{q} \right] dV = 0$$

e quindi

$$(3.7) \quad \int_V \left[\rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \varepsilon \underline{\nabla} \cdot \underline{v} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \varepsilon \right) + \underline{\nabla} \cdot \underline{q} \right] dV = 0$$

Il termine sotto il segno di integrale deve perciò essere

identicamente nullo. Poiché $\underline{q} = -k \underline{\nabla} T$, $d\varepsilon = c dT$,

$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0$, dove k è la conducibilità termica del

liquido che supporremo costante, il che è una buona appros-

simazione per intervalli di temperatura non troppo grandi, e c è il calore specifico, dalla 3.7 deriva che

$$(3.8) \quad \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c \underline{v} \cdot \underline{\nabla} T - k \nabla^2 T = 0$$

e definendo $D = k/\rho c$ (diffusività termica del liquido)

risulta

$$(3.9) \quad D \nabla^2 T - \underline{v} \cdot \underline{\nabla} T = \frac{\partial T}{\partial t}$$

In coordinate sferiche per la bolla a simmetria radiale, otteniamo dalla 3.9

$$(3.10) \quad \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) - v_r \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Sostituendo nella 3.10 il valore di v_r calcolato nel paragrafo 2 (2.5) otteniamo l'equazione dell'energia:

$$(3.11) \quad \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{R^2 \dot{R}}{r^2} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Alla 3.11 va aggiunta una relazione che tenga conto della variazione della quantità di vapore all'interno della bolla. Deve risultare che il flusso di calore attraverso la superficie uguaglia il prodotto fra calore latente e velocità di produzione di vapore. Essendo $\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_v(T_s)$ la massa di vapore nella bolla, poiché ρ_v dipende solo da T_s lungo la linea di saturazione, risulta

$$(3.12) \quad 4 \pi R^2 k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R(t)} = L \frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_v(T_s) \right)$$

Ovviamente $T_s(t) \equiv T(R(t), t)$.

Nel considerare questo scambio termico alla superficie della bolla abbiamo trascurato la conduzione di calore da parte del vapore, essendo piccolo il coefficiente di conducibilità termica del vapore, e l'energia dissipata per viscosità, avendo assunto quest'ultima trascurabile (cfr par.2).

Sviluppando il secondo termine della 3.12 otteniamo

$$(3.13) \quad 4\pi R^2 k \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=R(t)} = \frac{4\pi L}{3} \left(3R^2 \dot{R} p_v(T_s) + R^3 \frac{d p_v}{d T_s} \frac{d T_s}{d t} \right)$$

da cui la relazione tra gradiente e derivata temporale di cui faremo uso nella trattazione della soluzione numerica del problema della dinamica della bolla.

4. La dinamica di una bolla di vapore in un liquido

Considerando i risultati dei par. 2 e 3, possiamo scrivere il problema della dinamica di una bolla di vapore in un liquido nella sua formulazione completa:

$$(4.1a) \quad \frac{D}{dt} \left(z^2 \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{R^2 \dot{R}}{z^2} \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad R(t) \leq z < \infty$$

$$(4.1b) \quad 4\pi R^2 k \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=R(t)} = \frac{4\pi L}{3} \left(3R^2 \dot{R} p_v(T_s) + R^3 \frac{d p_v}{d T_s} \frac{d T_s}{d t} \right)$$

$$(4.1c) \quad T(z, 0) = T_\infty \quad T(z, t) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} T_\infty$$

$$(4.1d) \quad R \ddot{R} + \frac{3}{2} \dot{R} = \frac{1}{\rho} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right)$$

$$(4.1e) \quad R(0) = \frac{2\sigma(T_\infty)}{p_v(T_\infty) - p_\infty} \quad \dot{R}(0) = V_0$$

Sono necessarie due precisazioni. La prima riguarda il valore di p_{∞} , cioè la pressione del liquido a grande distanza dalla bolla. Nella formulazione 4.1 non abbiamo indicato esplicitamente una sua dipendenza dal tempo e infatti la supporremo costante nell'integrazione numerica.

Tuttavia il problema 4.1 è generalizzabile a campi di pressione variabile del liquido e, come vedremo, anche la formulazione numerica è estendibile.

La seconda precisazione riguarda il valore di V_0 .

Bisogna innanzitutto distinguere il caso di crescita dal caso di collasso della bolla. Per studiare un caso di crescita è essenziale, se si vuole partire dal raggio di equilibrio $R(0)$ dato dalla 4.1e, imporre una velocità iniziale diversa da zero, altrimenti il sistema resta in equilibrio. Un'alternativa, che è quella da noi adoperata nei calcoli effettuati, è partire con un raggio lievemente maggiore di quello di equilibrio (ad es: 1%) e con velocità nulla; ciò equivale a imporre alla bolla una accelerazione diversa da zero, come si ricava dalla 4.1d.

Per il caso di collasso la velocità iniziale può essere nulla perché si parte sempre da una situazione non di equilibrio, essendo la pressione del liquido p_{∞} , maggiore di quella di vapore alla temperatura del liquido $p_v(T)$.

CAPITOLO 2°

Il metodo OCI-CN di integrazione numerica per problemi
parabolici

1. Il metodo OCI-CN

La sigla OCI-CN significa Operator Compact Implicit Crank-Nicolson. Essa indica un metodo numerico, elaborato recentemente, per la risoluzione di equazioni differenziali alle derivate parziali, applicato in particolare a equazioni paraboliche.

La sigla OCI si riferisce alla discretizzazione spaziale, mentre CN si riferisce a quella temporale.

Al fine di meglio comprendere le caratteristiche di tale metodo, riteniamo opportuno prima esaminare in dettaglio alcuni metodi classici di risoluzione approssimata di equazioni paraboliche.

2. Alcuni metodi numerici classici per problemi parabolici

Supponiamo per semplicità di avere un problema del tipo:

$$(2.1a) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad x_0 \leq x \leq x_N$$

$$(2.1b) \quad u(x_0, t) = f_1(t) \quad u(x_N, t) = f_2(t)$$

$$(2.1c) \quad u(x, 0) = g(x)$$

Scritto in forma discretizzata il problema 2.1 diventa:

$$(2.2 a) \quad u_{xx_j}^m + u_{x_j}^m = u_{t_j}^m \quad x_j = jh + x_0 \quad j=0,1,\dots,N$$

$$(2.2 b) \quad u_0^m = f_1(t_m) \quad u_N^m = f_2(t_m) \quad t_m = m \Delta t \quad m=0,1,2,\dots$$

$$(2.2 c) \quad u_j^0 = g(x_j)$$

dove h è il passo di discretizzazione spaziale e Δt quello temporale e dove si sono usate le notazioni abbreviate:

$$u_j^m \equiv u(x_j, t_m) \quad u_{x_j}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j, t=t_m} \quad u_{xx_j}^m \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j, t=t_m} \quad u_{t_j}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_j, t=t_m}$$

L'approccio più semplice per risolvere il problema 2.2

è quello di scrivere per ciascuno dei termini della 2.2a

una espressione approssimante. Se ci si accontenta del

secondo ordine nell'approssimazione spaziale e del primo

in quella temporale, si possono usare le seguenti formule:

$$(2.3 a) \quad u_{x_j}^m = \frac{u_{j+1}^m - u_{j-1}^m}{2h} + O(h^2)$$

$$(2.3 b) \quad u_{xx_j}^m = \frac{u_{j+1}^m - 2u_j^m + u_{j-1}^m}{h^2} + O(h^2)$$

$$(2.3 c) \quad u_{t_j}^m = \frac{u_j^{m+1} - u_j^m}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

Sostituendo le relazioni 2.3 nella 2.2a, si ottiene una

espressione esplicita per u_j^{m+1} :

$$(2.4) \quad u_j^{m+1} = u_j^m \left(1 - 2 \frac{\Delta t}{h^2}\right) + \frac{\Delta t}{h^2} \left(u_{j+1}^m \left(1 + \frac{h}{2}\right) + u_{j-1}^m \left(1 - \frac{h}{2}\right) \right) + O(h^2, \Delta t)$$

dove j varia da 1 a $N-1$, perché i valori di u_0 e u_N sono

noti ad ogni istante di tempo dalle 2.2b.

Partendo dalla u_j^0 , nota dalla 2.2c, tramite la 2.4 si

può ricavare u_j^1 e così via per il numero di passi temporali

desiderato.

Se si desidera un'approssimazione spaziale di ordine più elevato, è necessario usare al posto delle 2.3 altre formule con più punti; ad esempio:

$$(2.5a) \quad u_{xj} = \frac{u_{j-2} + 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}}{12h} + O(h^4)$$

$$(2.5b) \quad u_{xxj} = \frac{-u_{j-2} + 16u_{j-1} - 30u_j + 16u_{j+1} - u_{j+2}}{12h^2} + O(h^4)$$

Le 2.5 tuttavia presentano alcuni inconvenienti. Poiché j varia sempre tra 1 e $N-1$, i valori di u_{j-2} e u_{j+2} quando j assume proprio i valori 1 e $N-1$, vengono a cadere al di fuori del contorno del campo di integrazione. E' necessario perciò introdurre dei punti "fittizi", per esempio estrapolando la soluzione con formule dello stesso ordine del metodo usato (nel caso specifico del 4° ordine).

Esaminando invece una integrazione temporale di più alto ordine, passiamo a illustrare uno schema implicito di integrazione.

Se indichiamo con $L(u)_j$ l'approssimazione discreta dell'intero operatore parabolico, cioè del membro a sinistra della 2.2a, un metodo di integrazione temporale del 2° ordine è quello di Crank-Nicolson, espresso da:

$$(2.6) \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{L(u)_j^{n+1} + L(u)_j^n}{2h^2}$$

per cui il sistema 2.7b si può scrivere nella forma

$$(2.9) \quad \underline{M} \underline{u} = \underline{b}$$

Facciamo notare come il sistema 2.8 sia perfettamente risolubile quando si abbiano le condizioni 2.2b, cioè si conoscano i valori al contorno.

Riassumendo, la procedura di integrazione è la seguente: partendo da $n=0$, per cui il vettore \underline{b} è completamente determinato dalle 2.2b e 2.2c, si risolve il sistema tridiagonale 2.8 ottenendo u_j^1 . Ora il vettore \underline{b} è noto per $n=1$ e il sistema 2.8 può generare u_j^2 . Si può in questo modo procedere per il numero di passi temporali voluto.

Il pregio fondamentale dei metodi di tipo implicito è il fatto che la soluzione al tempo t_n dipende dalle condizioni al contorno al tempo t_n , oltre che dalla soluzione al tempo precedente t_{n-1} . Ciò non accade nei metodi espliciti; infatti, come si vede nella 2.4, la soluzione al tempo t_n dipende solamente dalla soluzione al tempo precedente t_{n-1} .

La maggiore complessità di calcolo (risolvere un sistema $N \times N$ è in generale più oneroso che calcolare N espressioni) è solamente apparente: infatti la struttura tridiagonale del sistema 2.8 permette la sua risoluzione con solamente $5N$ operazioni, dove N è l'ordine della matrice (cfr [2]), mentre i metodi di risoluzione per sistemi a struttura generica richiedono N^3 operazioni. Ovviamente un sistema tri-

diagonale ha bisogno di sole $5N$ locazioni di memoria in un elaboratore, contro le $N^2 + 2N$ di un sistema generico (cfr [2]).

Per questi motivi i metodi impliciti sono largamente usati e recentemente se ne sono sviluppati alcuni con un alto ordine di approssimazione. Nel paragrafo seguente illustreremo il metodo più recente e più accurato per problemi parabolici.

3. Il metodo OCI-CN

Il metodo OCI-CN è stato elaborato nel 1978 [1], sulla base di precedenti studi su metodi di alta approssimazione per equazioni differenziali alle derivate parziali [6].

Per illustrare in dettaglio il suo funzionamento, ci riferiremo a un problema parabolico di Dirichlet:

$$(3.1a) \quad L(u) \equiv a(x,t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad x_0 \leq x \leq x_N$$

$$(3.1b) \quad u(x_0, t) = f_1(t) \quad u(x_N, t) = f_2(t) \quad t \geq 0$$

$$(3.1c) \quad u(x, 0) = g(x)$$

Separiamo la trattazione dell'integrazione spaziale da quella temporale sottolineando che i pregi del metodo OCI-CN si riferiscono essenzialmente alla discretizzazione spaziale.

Scritto in forma discretizzata, il problema 3.1 diventa:

$$(3.2a) \quad L(u)_j^m \equiv a_j^m u_{xx_j}^m + b_j^m u_{x_j}^m = u_{t_j}^m \quad x_j = x_0 + jh \quad j=0,1,\dots,N$$

$$(3.2b) \quad u_0^m = f_1(t_m) \quad u_N^m = f_2(t_m) \quad t_m = m\Delta t \quad m=0,1,2,\dots$$

$$(3.2c) \quad u_j^e = g(x_j)$$

dove si sono usate le notazioni abbreviate $u_j^m \equiv u(x_j, t_m)$

$$a_j^m \equiv a(x_j, t_m) \quad b_j^m \equiv b(x_j, t_m) \quad u_{x_j}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j, t=t_m} \quad u_{xx_j}^m \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j, t=t_m} \quad u_{t_j}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_j, t=t_m}$$

• dove h è il passo di discretizzazione spaziale, che sup-

porremo costante, e Δt quello temporale, che, come vedremo, potrà essere variabile.

Data l'impossibilità di ottenere approssimazioni più alte del 2° ordine utilizzando solamente tre punti (cfr 2.3) del reticolo spaziale, per poter arrivare al 4° ordine senza usare le 2.5 (che coinvolgono cinque punti), occorre cercare una relazione che coinvolga anche i valori delle derivate nei punti adiacenti. In pratica si cercano i coefficienti che soddisfano queste condizioni:

$$(3.3a) \quad \frac{1}{h} (\alpha u_{j+1} + \beta u_j + \gamma u_{j-1}) = \delta u_{x_{j+1}} + \varepsilon u_{x_j} + \eta u_{x_{j-1}} + O(h^4)$$

$$(3.3b) \quad \frac{1}{h^2} (\alpha^* u_{j+1} + \beta^* u_j + \gamma^* u_{j-1}) = \delta^* u_{xx_{j+1}} + \varepsilon^* u_{xx_j} + \eta^* u_{xx_{j-1}} + O(h^4)$$

Operando con il consueto sviluppo in serie di Taylor, si giunge a determinare tali coefficienti in modo che le 3.3 diventano:

$$(3.4a) \quad \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{h} = \frac{u_{x_{j+1}} + 4u_{x_j} + u_{x_{j-1}}}{3} + O(h^4)$$

$$(3.4b) \quad \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = \frac{u_{xx_{j+1}} + 10u_{xx_j} + u_{xx_{j-1}}}{12} + O(h^4)$$

Ricavando u_{x_j} e u_{xx_j} dalle 3.4 e sostituendoli nella 3.2a, è evidente che non è possibile ottenere un'espressione di $L(u)_j$ che contenga solamente le u_j , perché si sono introdotte anche le derivate nei punti adiacenti ($j-1$ e $j+1$). Non si può perciò arrivare, come si è fatto nella 2.7, a un sistema tridiagonale simile al 2.8, che contenga solamente le u_j , quando si accoppia questa discretizzazione spaziale a quella temporale di Crank-Nicolson.

Indipendentemente però dall'integrazione temporale, dalla sostituzione delle 3.4 nel primo membro della 3.2, non è mai possibile ottenere un sistema tridiagonale nelle sole u_j . Tra l'altro si pone il problema che le 3.4 non si possono scrivere per $j=0$ e per $j=N$. Per questo motivo, se è possibile sviluppare un sistema tridiagonale a blocchi 3×3 , come si può vedere in [1], per risolvere il sistema formato dalle 3.4 e dalla 3.2, è sempre necessario conoscere i valori al contorno delle due derivate spaziali. In [6] viene tuttavia proposta una formula aggiuntiva alle 3.4, che applicata ai nodi 1 e N dà:

$$(3.5a) \quad -u_1 - 4u_2 + 5u_3 = h \left(\frac{4u_{x_2} + 2u_{x_3}}{h} \right) + O(h^3)$$

$$(3.5b) \quad -u_{N-2} - 4u_{N-1} + 5u_N = h \left(\frac{4u_{x_{N-1}} + 2u_{x_N}}{h} \right) + O(h^3)$$

Come si può vedere essa risulta del 3° ordine e, nonostante

che l'autore di [6] sostenga che essa è compatibile con le 3.4, lascia incerti sulla sua effettiva applicazione. Non ci soffermiamo su questo argomento rimandando ai due articoli [1] e [6], dato che il metodo OCI-CN supera queste difficoltà brillantemente.

Le relazioni 3.4 sono sempre alla base del metodo OCI-CN, ma l'idea fondamentale è che, invece di cercare due approssimazioni distinte per le singole derivate spaziali, è possibile discretizzare "in toto" l'operatore $L(u)_j$, cercando i coefficienti che soddisfino questa relazione:

$$(3.6) \quad \frac{z_j^+ u_{j+1} + z_j^0 u_j + z_j^- u_{j-1}}{h^2} = q_j^+ L(u)_{j+1} + q_j^0 L(u)_j + q_j^- L(u)_{j-1} + \mathcal{O}(h^4)$$

La struttura della 3.6 è identica a quella delle 3.4, con la differenza essa le sintetizza in una sola formula. Tenendo presente la definizione di $L(u)_j$, attraverso lo sviluppo in serie di Taylor si giunge a determinare le seguenti espressioni (per i calcoli sviluppati cfr [1]).

$$(3.7) \quad \begin{aligned} q_j^+ &= 6a_j a_{j-1} + h(5a_{j-1} b_j - 2a_j b_{j-1}) - h^2 b_j b_{j-1} \\ q_j^0 &= 4[15a_{j+1} a_{j-1} - 4h(a_{j+1} b_{j-1} - b_{j+1} a_{j-1}) - h^2 b_{j+1} b_{j-1}] \\ q_j^- &= 6a_j a_{j+1} - h(5a_{j+1} b_j - 2a_j b_{j+1}) - h^2 b_j b_{j+1} \\ z_j^+ &= \frac{1}{2} [q_j^+ (2a_{j+1} + 3h b_{j+1}) + q_j^0 (2a_j + h b_j) + q_j^- (2a_{j-1} - h b_{j-1})] \\ z_j^0 &= \frac{1}{2} [q_j^+ (2a_{j+1} + h b_{j+1}) + q_j^0 (2a_j - h b_j) + q_j^- (2a_{j-1} - 3h b_{j-1})] \\ z_j^- &= -(z_j^+ + z_j^0) \end{aligned}$$

con j che varia tra 1 e $N-1$.

Se indichiamo con Q ed R gli operatori così definiti (omettendo per semplicità l'indice j)

$$(3.8) \quad \begin{aligned} Q u_j &= q_j^+ u_{j+1} + q_j^0 u_j + q_j^- u_{j-1} \\ R u_j &= z_j^+ u_{j+1} + z_j^0 u_j + z_j^- u_{j-1} \end{aligned}$$

si può riscrivere la 3.6 simbolicamente nella forma:

$$(3.9) \quad \frac{Q^{-1} R}{h^2} u_j = L(u)_j + O(h^4)$$

Abbiamo così ottenuto una discretizzazione di $L(u)_j$ che dia origine a un sistema tridiagonale che contenga solamente le u_j . Come vedremo nel seguito, la tridiagonalità della 3.9 è determinata dalla conoscenza dei valori u_0 e u_N .

Unendo a questa discretizzazione spaziale l'integrazione di Crank-Nicolson, possiamo riscrivere la 2.6

$$(3.10) \quad \frac{L(u)_j^{n+1} + L(u)_j^n}{2h^2} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

e, sostituendo in essa la 3.9 otteniamo

$$(3.11) \quad \frac{(Q^{n+1})^{-1} R^{n+1} u_j^{n+1} + (Q^n)^{-1} R^n u_j^n}{2h^2} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

Raccogliendo u_j^{n+1} abbiamo

$$(3.12) \quad [I - \lambda (Q^{n+1})^{-1} R^{n+1}] u_j^{n+1} = [I + \lambda (Q^n)^{-1} R^n] u_j^n \equiv G_j^n$$

per cui il sistema 3.16 si può scrivere nella forma:

$$(3.18) \quad \hat{Q} \underline{G} = \underline{v}$$

E' possibile invece ricavare una relazione di ricorrenza per G_j^m , che oltre a risolvere il problema della determinazione di G_0^m e G_N^m , risparmia la soluzione di un sistema tridiagonale.

Per maggiore generalità ricaviamo tale relazione di ricorrenza per un passo temporale variabile. Indichiamo quindi con λ_m il valore di λ relativo al passo temporale Δt_m al tempo t_m (analogamente a λ_{m+1}).

Riscrivendo la 3.12 con λ_m otteniamo

$$(3.19) \quad [I - \lambda_m (Q^{n+1})^{-1} R^{n+1}] u_j^{n+1} = [I + \lambda_m (Q^n)^{-1} R^n] u_j^n \equiv G_j^n$$

Scrivendo nella 3.19 $n-1$ al posto di n e considerandone solo il membro a sinistra otteniamo

$$(3.20) \quad [I - \lambda_{n-1} (Q^n)^{-1} R^n] u_j^n = G_j^{n-1}$$

Prendendo invece il membro a destra della 3.19 abbiamo

$$(3.21) \quad [I + \lambda_n (Q^n)^{-1} R^n] u_j^n = G_j^n$$

Moltiplicando entrambi i membri della 3.20 per $\frac{\lambda_n}{\lambda_{n+1}}$ e sommando termine a termine con la 3.21 otteniamo

$$(3.22) \quad \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} u_j^n + u_j^n = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} G_j^{n-1} + G_j^n$$

cioè

$$(3.23) \quad G_j^n = \frac{\lambda_{n-1} + \lambda_n}{\lambda_{n-1}} u_j^n - \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} G_j^{n-1}$$

che è la relazione di ricorrenza cercata.

Per $\lambda_n = \lambda_{n-1}$ si ha la forma particolarmente semplice:

$$(3.24) \quad G_j^n = 2u_j^n - G_j^{n-1}$$

Il valore di G_j^0 necessario per l'avvio del procedimento è fornito, tramite la 3.19, da

$$(3.25) \quad G_j^0 = u_j^0 + \lambda_0 (Q^0)^{-1} R^0 u_j^0$$

Ma, per le 3.9 e 3.2b abbiamo

$$(3.26) \quad \frac{(Q^0)^{-1} R^0 u_j^0}{h^2} = L(u)_j^0 = a_j^0 u_{xx_j}^0 + b_j^0 u_{x_j}^0 = a(x_j, 0) \frac{d^2 f_1}{dx^2} \Big|_{x=x_j} + b(x_j, 0) \frac{df_1}{dx} \Big|_{x=x_j}$$

da cui risulta

$$(3.27) \quad G_j^0 = u_j^0 + \frac{\Delta t}{2} \left(a(x_j, 0) \frac{d^2 f_1}{dx^2} \Big|_{x=x_j} + b(x_j, 0) \frac{df_1}{dx} \Big|_{x=x_j} \right)$$

Riassumendo, la procedura di integrazione secondo lo schema OCI-CN è la seguente: note u_j^0 e f_1 si calcola G_j^0 , tramite la 3.27. Dato che il problema 3.2 è in forma di Dirichlet, si conoscono u_0^1 e u_N^1 , e quindi si può risolvere il sistema 3.15, ottenendo i valori di u_j^1 . Si calcola il nuovo valore di G_j^1 con la formula di ricorrenza 3.22 e si

risolve nuovamente il sistema 3.15, ottenendo i valori di u_j^2 . Si continua il procedimento per il numero di passi temporali voluto.

Esaminiamo ora alcune questioni riguardanti la stabilità del metodo OCI-CN. Abbiamo usato nella 3.9 il simbolo Q^{-1} . Si può dimostrare che la matrice Q è invertibile, nel caso in cui i coefficienti dell'equazione parabolica 3.1a siano costanti, quando è soddisfatta questa condizione (cfr [1]):

$$(3.28) \quad R_c \leq \sqrt{12}$$

dove R_c è il numero di Reynolds definito in questo modo:

$$(3.29) \quad R_c = \frac{hb}{a}$$

Questa è l'unica limitazione conosciuta per l'applicabilità della discretizzazione spaziale OCI. Infatti anche la analisi della stabilità spaziale porta allo stesso risultato espresso dalla 3.28. La stabilità temporale è incondizionata, sempre che sia garantita la 3.28. Per i dettagli e le dimostrazioni si veda [1].

Volendo riassumere i vantaggi del metodo di integrazione OCI-CN si possono usare tre parole: rapidità, precisione e completezza. La rapidità di calcolo è dovuta alla struttura tridiagonale del sistema risolvante, la precisione, al fatto che risulta del secondo ordine nel tempo e del

quarto nello spazio, la completezza, al fatto che non sono necessari né punti fittizi, come nei metodi classici di alta approssimazione illustrati nel par.2, né condizioni speciali al contorno o relazioni approssimate di ordine più basso, sempre al contorno, come le 3.5a.

Aggiungiamo infine che è possibile sviluppare le 3.7 per un passo spaziale h variabile; il metodo OCI-CN conserva la sua struttura e validità, anche se risulta essere del terzo ordine nell'approssimazione spaziale (cfr [1]). E' inoltre possibile estendere il metodo OCI-CN a condizioni al contorno più generali di quelle di Dirichlet: in particolare in [1] si troveranno sviluppate le formule per il caso di condizione al contorno del tipo:

$$(3.30) \quad \alpha u_{x_i} + \beta u_i = \gamma \quad i=0 \quad i=N$$

L'ordine di approssimazione spaziale resta invariato al 4° ordine.

CAPITOLO 3°

Il problema parabolico con il legame al contorno tra
gradiente e derivata temporale

1. Il problema in generale

La classe di problemi che intendiamo trattare in questo capitolo è quella descritta dalle seguenti equazioni:

$$(1.1a) \quad a(x, t, R, \dot{R}) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x, t, R, \dot{R}) \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad x_0 \leq x$$

$$(1.1b) \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_0} = p(t, u(x_0, t), R, \dot{R}) \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_0} + q(t, u(x_0, t), R, \dot{R})$$

$$(1.1c) \quad u(x, 0) = f(x)$$

$$(1.1d) \quad u(x, t) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} u_\infty \quad \frac{\partial u}{\partial x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$$

$$(1.1e) \quad \ddot{R} = \ell(t, u(x_0, t), R, \dot{R})$$

$$(1.1f) \quad R(0) = R_0 \quad \dot{R}(0) = V_0$$

A queste equazioni va aggiunta, se $p(0) \neq 0$, la condizione di "coerenza", che si deduce dalle 1.1a, 1.1b, 1.1c, per $t=0$ e $x=0$

$$(1.1g) \quad a(x_0, 0, R_0, V_0) \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x=x_0} = \left(\frac{1}{p(0, f(x_0), R_0, V_0)} - b(x_0, 0, R_0, V_0) \right) \frac{df}{dx} \Big|_{x=x_0} + \frac{q(0, f(x_0), R_0, V_0)}{p(0, f(x_0), R_0, V_0)}$$

Se invece $p(0) = 0$, la 1.1f si riduce a

$$(1.1h) \quad \frac{df}{dx} \Big|_{x=x_0} = q(0, f(x_0), R_0, V_0)$$

2. La soluzione numerica

L'applicazione del metodo OCI-CN, illustrato nel cap. 2°, al problema 1.1, presenta due difficoltà: la prima è data dalla non formulazione del problema parabolico in forma di Dirichlet (manca la condizione al contorno a sinistra e il dominio non è finito); la seconda è dovuta all'accoppiamento dell'equazione parabolica con un'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine.

Occupiamoci della prima difficoltà. La non finitezza del dominio può essere risolta imponendo che i valori che la u e le sue derivate spaziali assumono all'infinito, siano raggiunti in un certo valore X_N opportunamente scelto.

Riscrivendo il problema 1.1 in forma discretizzata, imponiamo anche questo "troncamento" della soluzione

$$(2.1a) \quad a_j^n u_{xxj}^n + b_j^n u_{xj}^n = u_{tj}^n \quad x_j = x_0 + h j \quad h = 0, 1, \dots, N$$

$$(2.1b) \quad u_{x_0}^n = p^n u_{t_0}^n + q^n \quad t_n = n \Delta t \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$(2.1c) \quad u_j^0 = f(x_j)$$

$$(2.1d) \quad u_N^n = u_\infty \quad u_{x_N}^n = 0 \quad u_{xx_N}^n = 0$$

$$(2.1e) \quad \dot{R}_n = L(t_n, u_0^n, R_n, \dot{R}_n)$$

$$(2.1f) \quad R_0 = R_0 \quad \dot{R}_0 = V_0$$

$$(2.1g) \quad a_0^0 \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x=x_0} = \left(\frac{1}{p^n} - b_j^n \right) \frac{df}{dx} \Big|_{x=x_0} + \frac{q^n}{p^n} \quad (\text{se } p^0 \neq 0)$$

$$(2.1h) \quad \frac{df}{dx} \Big|_{x=x_0} = q^n \quad (\text{se } p^0 = 0)$$

dove con usuale notazione: $R_m = R(t_m)$ $\dot{R}_m = \dot{R}(t_m) = V_m$ $q^m = q(t_m, u_0^m, R_m, \dot{R}_m)$
 $u_j^m = u(x_j, t_m)$ $u_{x_j}^m = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j, t=t_m}$ $u_{xx_j}^m = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j, t=t_m}$ $u_{t_j}^m = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_j, t=t_m}$
 $a_j^m = a(x_j, t_m, R_m, \dot{R}_m)$ $b_j^m = b(x_j, t_m, R_m, \dot{R}_m)$ $p^m = p(t_m, u_0^m, R_m, \dot{R}_m)$
 e h è il passo spaziale di discretizzazione e Δt quello temporale.

Posto che

$$(2.2) \quad \frac{du}{dt} \Big|_{x=x_0} = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_0} \approx u_{t_0}^m$$

perché x non dipende dal tempo, possiamo leggere la 2.1b come un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo, di incognita u_0^m , cioè:

$$(2.3) \quad u_{t_0}^m = \frac{u_{x_0}^m - q^m}{p^m}$$

e si può pensare di integrarla con un metodo tipo Runge-Kutta (cfr [4]), per ottenere il valore cercato u_0^{m+1} . Questo approccio, di per sé corretto, non è realizzabile nel caso limite $p^m \approx 0$. Effettivamente in questo caso la 2.1b si ridurrebbe alla forma

$$(2.4) \quad u_{x_0}^m = q^m$$

per cui si potrebbe applicare l'estensione del metodo OCI-CN di cui abbiamo accennato alla fine del cap. 2°. Tuttavia, per maggiore generalità e per evitare amplificazioni dell'errore nel caso in cui $p^m \ll 1$, abbiamo preferito seguire un'altra procedura per calcolare il valore

della u al contorno sinistro.

3. La determinazione del valore della u al contorno sinistro

La procedura che illustreremo sfrutta il fatto che la 2.1a per un valore fissato di j , può essere vista come un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo, grazie alla relazione 2.2.

Procedendo con ordine, effettuiamo una serie di sostituzioni nelle formule 2.1.

Scrivendo la 2.1a per $j=0$, abbiamo una espressione di $u_{t_0}^m$. Sostituendo questa espressione nella 2.1b otteniamo:

$$(3.1) \quad u_{x_0}^m = p^m [a_0^m u_{xx_0}^m + b_0^m u_{x_0}^m] + q^m$$

che scriveremo in forma compatta:

$$(3.2) \quad u_{x_0}^m = K + E u_{xx_0}^m$$

dove

$$(3.3) \quad K \equiv \frac{q^m}{1 - p^m b_0^m}$$

$$E \equiv p^m a_0^m$$

Introduciamo a questo punto due relazioni approssimate al 4° ordine, calcolate mediante lo sviluppo in serie di Taylor. Esse sono di validità generale, indipendentemente

dalla struttura del problema 2.1.

Con le notazioni usuali, risulta

$$(3.5) \quad u_{x_0} = \frac{1}{29} \left(\frac{48}{h} (u_1 - u_0) - 20 u_{x_1} + u_{x_2} - 6 h u_{xx_0} \right) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$(3.6) \quad u_{xx_0} = \frac{1}{h} \left(-\frac{23}{2h} u_0 + \frac{8}{h} u_1 + \frac{7}{2h} u_2 - 8 u_{x_1} - u_{x_2} - 6 u_{x_0} \right) + \mathcal{O}(h^4)$$

In forma compatta scriveremo:

$$(3.5a) \quad u_{x_0} = S - \frac{6h}{29} u_{xx_0}$$

$$(3.6a) \quad u_{xx_0} = Z - \frac{6}{h} u_{x_0}$$

Non si può eliminare u_{xx_0} dalle due (3.5 e 3.6) perché altrimenti si ritorna la 3.12 che è l'inciso al 4° ord.

è vero? Non si può eliminare u_{x_0} perché si non si ha una relaz. al 3° ordine

dove

$$(3.7) \quad S \equiv \frac{1}{29} \left(\frac{48}{h} (u_1 - u_0) - 20 u_{x_1} + u_{x_2} \right)$$

$$(3.8) \quad Z \equiv \frac{1}{h} \left(-\frac{23}{2h} u_0 + \frac{8}{h} u_1 + \frac{7}{2h} u_2 - 8 u_{x_1} - u_{x_2} \right)$$

Eliminando ora u_{xx_0} dalla 3.5a e dalla 3.2 otteniamo:

$$(3.9) \quad u_{x_0} = \frac{S + \frac{6}{29} \frac{h}{E} K}{1 + \frac{6}{29} \frac{h}{E}} + \mathcal{O}(h^4)$$

Analogamente, eliminando u_{x_0} dalla 3.6a e dalla 3.2 otteniamo:

$$(3.10) \quad u_{xx_0} = \frac{Z - \frac{6}{h} K}{1 + \frac{6E}{h}} + \mathcal{O}(h^4)$$

La 3.9 stabilisce quindi una relazione al 4° ordine tra

u_{x_0} e $u_{x_1}, u_{x_2}, u_0, u_1$, valida ovviamente solamente per

problemi del tipo 2.1. Dal metodo OCI-CN conosciamo un'altra

relazione tra i gradienti e la u , sempre al 4° ordine,

$$\underline{d} = \begin{bmatrix} \left(3 + \frac{29}{2} \frac{E}{h}\right) u_2 - \frac{8E}{h} u_1 - u_0 \left(3 + \frac{13}{2} \frac{E}{h}\right) - hK \\ u_3 - u_1 \\ \vdots \\ u_{j+1} - u_{j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1} - u_{N-3} \\ u_N - u_{N-2} \end{bmatrix}$$

È perciò possibile, conoscendo il valore di u su tutto il campo di integrazione spaziale, calcolare il gradiente di u in ogni punto interno al dominio. Ovviamente, una volta risolto il sistema 3.14, tramite la 3.9 è possibile calcolare anche il valore di u_{x_0} e, tramite la 3.10, il valore di u_{xx_0} . Sostituendo nella 2.1a le 3.9 e 3.10, otteniamo che (l'indice n è la dipendenza temporale in S, Z, E, K)

$$(3.15) \quad u_{t_0}^n = a_0^n \left[\frac{Z_n - \frac{6}{h} K_n}{1 + \frac{6E_n}{h}} \right] + b_0^n \left[\frac{S_n + \frac{6}{29} \frac{h}{E_n} K_n}{1 + \frac{6}{29} \frac{h}{E_n}} \right]$$

che più genericamente si può scrivere, tenendo sempre presente la 2.2,

$$(3.16) \quad u_{t_0}^n = F(x_0, t_n, R_n, \dot{R}_n, u_0, u_1, u_2, u_{x_1}, u_{x_2})$$

La 3.16 è quindi un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo. Integrandola, ad esempio con un metodo tipo

Runge-Kutta, noto il membro a destra al tempo t_n , si può ottenere il valore di U_0^{n+1} . In effetti la 3.16 dipende anche da R e \dot{R} , quindi è legata alla 2.1e. Il problema del calcolo della condizione al contorno a sinistra si collega a questo punto con quello dell'integrazione della 2.1e.

4. L'integrazione temporale

Con le considerazioni fatte nel par. 3, il problema

2.1 è trasformato nel seguente problema:

$$(4.1a) \quad a_j^n u_{xx_j}^n + b_j^n u_{x_j}^n = u_{t_j}^n$$

$$(4.1b) \quad u_{t_0}^n = F(x_0, t_n, R_n, \dot{R}_n, u_0^n, u_1^n, u_2^n, u_{x_1}^n, u_{x_2}^n)$$

$$(4.1c) \quad \dot{R}_n = \mathcal{L}(t_n, u_0^n, R_n, \dot{R}_n)$$

$$(4.1d) \quad u_{t_0}^n = u_{t_0}^0 \quad R_0 = R_0 \quad \dot{R}_0 = V_0 \quad u_j^0 = f(x_j)$$

Con la semplice trasformazione di variabile $V = \dot{R}$, le

4.1b e 4.1c formano un sistema di tre equazioni differenziali ordinarie del primo ordine nel tempo:

$$(4.2a) \quad u_{t_0}^n = F(x_0, t_n, R_n, V_n, u_0^n, u_1^n, u_2^n, u_{x_1}^n, u_{x_2}^n)$$

$$(4.2b) \quad \dot{R}_n = V_n$$

$$(4.2c) \quad \dot{V}_n = \mathcal{L}(t_n, u_0^n, R_n, V_n)$$

$$(4.2d) \quad R_0 = R_0 \quad \dot{R}_0 = V_0 \quad u_j^0 = f(x_j)$$

Dovendo l'integrazione temporale di questo sistema essere consistente con l'integrazione temporale della equazione

parabolica 4.1a, effettuata col metodo OCI-CN, è necessario trattare le 4.2 con un metodo del 2° ordine nel tempo.

Riportiamo di seguito la formula di Heun, che è del tipo Runge-Kutta del 2° ordine.

Data una generica equazione differenziale:

$$(4.3a) \quad \frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

la formula di Heun è la seguente:

$$(4.3b) \quad y^{n+1} = y^n + \frac{\Delta t}{2} \left(f(t_n, y^n) + f(t_n + \Delta t, y^n + \Delta t f(t_n, y^n)) \right) + O(\Delta t^3)$$

dove l'indice n è la dipendenza temporale ($y^n \equiv y(t_n)$).

L'estensione a un sistema di equazioni e a un numero maggiore di variabili è immediata.

Nell'applicazione al caso delle 4.2 risulta:

$$(4.4a) \quad u_0^{n+1} = u_0^n + \frac{\Delta t}{2} \left[F(x_0, t_n, R_n, V_n, u_0^n, u_1^n, u_2^n, u_{x_1}^n, u_{x_2}^n) + F(x_0, t_n + \Delta t, R_n + \Delta t V_n, V_n + \Delta t \dot{V}_n, u_0^n + \Delta t u_{t_0}^n, u_1^n + \Delta t u_{t_1}^n, u_2^n + \Delta t u_{t_2}^n, u_{x_1}^n + \Delta t u_{x_1}^n, u_{x_2}^n + \Delta t u_{x_2}^n) \right]$$

$$(4.4b) \quad R_{n+1} = R_n + \frac{\Delta t}{2} (V_n + V_n + \Delta t \dot{V}_n)$$

$$(4.4c) \quad V_{n+1} = V_n + \frac{\Delta t}{2} \left(l(t_n, u_0^n, R_n, V_n) + l(t_n + \Delta t, u_0^n + \Delta t u_{t_0}^n, R_n + \Delta t V_n, V_n + \Delta t \dot{V}_n) \right)$$

Con le 4.4 lo schema di integrazione del problema 2.1 è completo, perché, una volta ottenuto il valore di u_0^{n+1}

si può risolvere l'equazione 2.1a al tempo t_{n+1} (essendo noti ormai anche R_{n+1} e V_{n+1}), col metodo OCI-CN.

Resta da specificare come calcolare alcune delle derivate temporali che appaiono nelle 4.4. Per chiarire questo punto esaminiamo passo per passo l'integrazione del problema 2.1, a partire dall'istante iniziale.

Per $t=0$ sono noti u_0^o, u_1^o, u_2^o dalla 2.1c, $u_{x_1}^o, u_{x_2}^o$ dalla derivazione spaziale della 2.1c stessa, e R_0, V_0 dalle 2.1f. $u_{t_0}^o, u_{t_1}^o, u_{t_2}^o$ si possono ricavare dopo aver derivato spazialmente entrambi i termini della 2.1a; tenendo presente la 2.2, la derivata della 2.1a risulta:

$$(4.5) \quad a_{x_j}^o u_{xx_j}^o + a_j^o u_{xxx_j}^o + b_{x_j}^o u_{x_j}^o + b_j^o u_{xx_j}^o = u_{tx_j}^o$$

$$\text{dove} \quad a_{x_j}^o \equiv \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x=x_j, t=0}$$

$$b_{x_j}^o \equiv \frac{\partial b}{\partial x} \Big|_{x=x_j, t=0}$$

La $u_{xxx_j}^o$ si ottiene derivando tre volte la 2.1c.

A questo punto si può risolvere il sistema 4.4 con $n=0$ e determinare u_0^1, R_1, V_1 cioè i valori al tempo Δt .

Ottenuti questi ultimi e nota la condizione al contorno a destra dalla prima delle 2.1d, si può risolvere la 2.1a col metodo OCI-CN, come è stato descritto nel cap. 2°.

Possiamo notare che l'applicazione del metodo OCI-CN, o meglio della formula 3.13 del cap. 2°, richiede il calcolo preventivo di G_j^o ; è però possibile anche per il problema 2.1 utilizzare la formula 3.27 del cap. 2°, dato che al

tempo $t=0$ tutte le variabili contenute nell'equazione 2.1a sono assegnate.

Calcolata, risolvendo il sistema 3.18 del cap.2°, la soluzione u_j^1 su tutto il campo di integrazione, possiamo ottenere i corrispondenti valori del gradiente $u_{x_j}^1$, tramite il sistema 3.14.

Possiamo ora procedere a integrare per un altro passo il sistema 4.2 per determinare u_j^2, V_j .

Sono necessari però, per applicare le 4.4 con $n=1$, alcuni valori non ancora calcolati:

$u_{t_0}^1$ si può ricavare dalla 4.2a (essendo noti $u_0^1, u_1^1, u_2^1, u_{x_1}^1, u_{x_2}^1, R_1, V_1$)

\dot{V}_1 si può ricavare dalla 4.2c (essendo noti u_0^1, R_1, V_1)

Per calcolare invece $u_{t_1}^1$ e $u_{t_2}^1$ è necessario prima calcolare la derivata seconda su tutto il dominio di integrazione.

Poiché è nota la $u_{xx_0}^1$ dalla 3.10 e la $u_{xx_N}^1$ dalla terza delle 2.1d, si può risolvere il sistema tridiagonale che risulta dalla relazione 3.4b del cap.2°, che qui riportiamo:

$$(4.6) \quad u_{xx_{j+1}} + 10 u_{xx_j} + u_{xx_{j-1}} = \frac{12}{h^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + O(h^4)$$

Per esteso risulta:

$$(4.7) \quad H \underline{u_{xx}} = \underline{w}$$

prossimazione del 1° ordine. La maniera più semplice è scrivere:

$$(4.9) \quad u_{tx_1}^1 = \frac{u_{x_1}^1 - u_{x_1}^0}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

essendo noti sia $u_{x_1}^1$ che $u_{x_1}^0$.

Analogamente possiamo fare per $u_{tx_2}^1$.

E' possibile ora calcolare dalle 4.4 i valori di u_0^2, R_2, V_2 e risolvere di conseguenza la 2.1a al tempo $t = 2 \cdot \Delta t$ col metodo OCI-CN.

Questa procedura si può ripetere per i passi successivi. Come abbiamo visto nel par.3 del cap. 2°, è possibile variare il passo di integrazione temporale con il metodo OCI-CN. L'integrazione temporale delle 2.1b e 2.1e, con lo schema finora esposto, non crea nessuna difficoltà alla variazione del passo temporale.

Per quanto riguarda la stabilità di questo schema di integrazione, un'analisi a priori non è facilmente realizzabile. Mentre la parte temporale dell'equazione parabolica è integrata dal metodo OCI-CN in modo incondizionatamente stabile, non altrettanto si può dire per l'integrazione delle 2.1b e 2.1e. Il difetto fondamentale di ogni metodo Runge-Kutta, che è una classe di metodi "ad un solo passo" e "espliciti", è la propagazione dell'errore di tron-

camento locale che, tranne casi particolari porta rapidamente all'instabilità, a meno di usare passi di integrazione molto piccoli (e variarlo con criteri opportuni durante il calcolo). 4

In definitiva l'applicazione della procedura di integrazione che abbiamo esposto richiede una particolare cautela.

Nelle prove da noi effettuate con un problema modello, come riferiamo nel cap. 4°, l'integrazione è stabile anche fino a 1000 passi temporali, posto che il rapporto tra il passo temporale e il quadrato di quello spaziale sia un numero inferiore all'unità.

Per il problema della bolla, invece, dopo pochi passi si manifesta una forte instabilità. Come si vedrà in dettaglio nel cap. 5°, la terapia di questa instabilità è stata una parziale implicitizzazione dello schema di integrazione. Un'alternativa che elimini l'instabilità potrebbe essere l'applicazione di qualche metodo predictor-corrector ("a più passi") che, essendo iterativo, risulta autocorrettivo. Poiché per innescare un procedimento predictor-corrector è necessario aver calcolato con un altro metodo alcuni passi iniziali (uno o più, a seconda dell'ordine di approssimazione del predictor-corrector), in generale si

potrà sempre usare a questo scopo la formula di Heun che abbiamo esposto.

CAPITOLO 4°

Il problema modello: soluzione analitica e numerica1. Il problema modello

Al fine di sperimentare l'efficacia dello schema di integrazione per problemi parabolici con il legame al contorno tra gradiente e derivata temporale, illustrato nel cap. 3°, abbiamo costruito un modello matematico di cui fosse possibile determinare in modo semplice la soluzione analitica, per poter confrontare con essa la soluzione numerica.

Il problema modello è descritto dalle seguenti equazioni:

$$(1.1a) \quad D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad x \geq 0$$

$$(1.1b) \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \eta \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=0}$$

$$(1.1c) \quad u(x, 0) = e^{-Bx}$$

$$(1.1d) \quad u(x, t) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \quad \frac{\partial u}{\partial x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$$

Dalle 1.1a e 1.1b, per $t=0$ e $x=0$, discende la condizione di "coerenza":

$$(1.2a) \quad D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=0, t=0} = \eta \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0, t=0}$$

che, per la 1.1c, diventa:

$$(1.2b) \quad D B^2 = -\eta B$$

cioè

$$(1.2c) \quad \eta = -DB$$

Per semplicità conserveremo la formulazione delle 1.1, riservandoci di imporre la relazione 1.2c quando sia opportuno.

La struttura del problema 1.1 è simile a quella del problema 1.1 del cap. 3°, anche se molto semplificata. In particolare in questo problema modello manca un'equazione corrispondente alla 1.1e del cap. 3°. La validità di questo modello come test di funzionamento dello schema di integrazione proposto nel cap. 3° resta però invariata. Infatti ciò che caratterizza il metodo da noi proposto è soprattutto il modo di utilizzare l'informazione proveniente dalla 1.1b del cap. 3, corrispondente alla 1.1b di questo capitolo. L'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine 1.1e del cap. 3° viene infatti risolta con la formula di Heun senza alcuna modifica, per cui non è essenziale provare che essa venga integrata correttamente, potendo esser certi che valgono i criteri di stabilità propri dei metodi Runge-Kutta (di cui Heun fa parte).

In particolare con questo problema modello si sperimenta la validità delle due relazioni 3.5 e 3.6 del cap. 3° tra il gradiente e la derivata seconda.

2. La soluzione analitica del problema modello

Per determinare la soluzione del problema 1.1 si fa uso del metodo della trasformata di Laplace.

Definita la trasformata di Laplace di una funzione $u(x,t)$:

$$(2.1) \quad \tilde{u}(s,x) = \int_0^{\infty} e^{-st} u(x,t) dt$$

essa gode delle proprietà

$$(2.2a) \quad \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \right) = s\tilde{u} - u(x,0)$$

$$(2.2b) \quad \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right) = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}$$

$$(2.2c) \quad u \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$$

Trasformando entrambi i termini della 1.1a otteniamo:

$$(2.3) \quad D \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \right) = \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \right)$$

da cui, per le 2.2 e la 1.1c risulta

$$(2.4) \quad \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \tilde{u} = -\frac{1}{D} e^{-Bx}$$

La soluzione della 2.4, che è un'equazione differenziale lineare non omogenea del secondo ordine in \tilde{u} , è del tipo:

$$(2.5) \quad \tilde{u}(s,x) = \alpha(s) e^{\sqrt{\frac{1}{D}}x} + \beta(s) e^{-\sqrt{\frac{1}{D}}x} + \gamma(s) e^{-Bx}$$

dove i primi due addendi sono l'integrale generale della equazione omogenea e il terzo è un integrale particolare.

Per la prima delle 1.1d e la 2.2c si ha che $\tilde{u} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$, quindi se vogliamo che valga la 2.5, il coefficiente $\alpha(s)$

déve essere nullo. Il coefficiente γ si calcola sostituendo l'integrale particolare nella equazione 2.4. Si ha:

$$(2.6) \quad B^2 \gamma e^{-Bx} - \frac{1}{D} \gamma e^{-Bx} = -\frac{1}{D} e^{-Bx}$$

da cui risulta:

$$(2.7) \quad \gamma = \frac{1}{1-DB^2}$$

Per calcolare il coefficiente β , si utilizza la 1.1b

trasformandone entrambi i termini. Si ottiene che

$$(2.8a) \quad \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right)_{x=0} = \frac{1}{\eta} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \right)_{x=0}$$

e per le 2.2

$$(2.8b) \quad \left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{1}{\eta} \left(\partial \tilde{u} - e^{-Bx} \right)_{x=0} \quad \text{da cui}$$

$$(2.8c) \quad \left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{1}{\eta} \left(\partial \tilde{u} \Big|_{x=0} - 1 \right)$$

Sostituendo nella 2.8c la 2.5, si può determinare β

$$(2.9a) \quad \frac{1}{\eta} \left(\partial \left(\beta + \frac{1}{1-DB^2} \right) - 1 \right) = \left(-\sqrt{\frac{1}{D}} \beta - \frac{\beta}{1-DB^2} \right) \quad \text{da cui}$$

$$(2.9b) \quad \beta = \frac{-B(1+DB)}{(1-DB^2) \left(1 + \sqrt{\frac{1}{D}} \right)}$$

Poiché per la 1.2c $\eta = -BD$, risulta che $\beta = 0$

La 2.5 diventa perciò

$$(2.10) \quad \tilde{u}(\partial, x) = \frac{1}{1-DB^2} e^{-Bx}$$

L'antitrasformata della 2.10, come si deduce dalle tavole delle trasformate inverse di Laplace [5] è

$$(2.11) \quad u(x, t) = e^{-Bx + B^2 D t}$$

3. La soluzione numerica del problema modello

Al fine di applicare al problema 1.1 la procedura di integrazione descritta nel cap. 3° è necessario modificare la 1.1d per poter integrare la 1.1a su un dominio finito.

Imponiamo, come già visto nel cap. 3°:

$$(3.1) \quad u(x_N, t) = 0 \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_N} = 0 \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_N} = 0$$

dove x_N è l'estremo superiore di integrazione spaziale.

Supporremo che i passi di discretizzazione spaziale e temporale siano costanti, per cui il problema 1.1 si può scrivere in forma discretizzata:

$$(3.2a) \quad \Delta u_{xx_i}^m = u_{t_i}^m \quad x_i = h i \quad i = 0, 1, \dots, N$$

$$(3.2b) \quad u_{x_0}^m = \frac{1}{\tau} u_{t_0}^m \quad t_n = n \Delta t \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$(3.2c) \quad u_i^0 = e^{-B x_i}$$

$$(3.2d) \quad u_N^m = 0 \quad u_{x_N}^m = 0 \quad u_{xx_N}^m = 0$$

dove, come di consueto, si è indicato:

$$u_i^m \equiv u(x_i, t_m) \quad u_{x_i}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_i, t=t_m} \quad u_{xx_i}^m \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i, t=t_m} \quad u_{t_i}^m \equiv \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_i, t=t_m} = \frac{du}{dt} \Big|_{x=x_i, t=t_m}$$

Il problema 3.2 si presenta nella forma del problema 2.1 del cap. 3°, anche se notevolmente semplificato.

Il problema fondamentale della assenza della condizione al contorno a sinistra è presente anche in questo problema.

Possiamo quindi seguire la stessa procedura indicata nel

par. 3 del cap. 3°.

La 3.2 del cap. 3° in questo caso, come si ricava dalle 3.2a e 3.2b, diventa:

$$(3.3a) \quad u_{x_0} = \frac{D}{\eta} u_{xx_0}$$

che, per analogia col cap. 3°, scriveremo

$$(3.3b) \quad u_{x_0} = E u_{xx_0}$$

$$\text{dove} \quad E = \frac{D}{\eta} = -\frac{1}{B}$$

Riportando la 3.6 del cap. 3°,

$$(3.4a) \quad u_{xx_0} = \frac{1}{h} \left(-\frac{23}{2h} u_0 + \frac{8}{h} u_1 + \frac{7}{2h} u_2 - 8u_{x_1} - u_{x_2} - 6u_{x_0} \right) + O(h^4)$$

che si può scrivere in forma abbreviata

$$(3.4b) \quad u_{xx_0} = Z - \frac{6}{h} u_{x_0}$$

$$\text{dove} \quad Z = \frac{1}{h} \left(-\frac{23}{2h} u_0 + \frac{8}{h} u_1 + \frac{7}{2h} u_2 - 8u_{x_1} - u_{x_2} \right)$$

Eliminando u_{x_0} dalle 3.3b e 3.4b otteniamo

$$(3.5) \quad u_{xx_0} = \frac{Z}{1 + \frac{6E}{h}}$$

Sostituendo la 3.5 nella 3.2a otteniamo, per $x=0$

$$(3.6) \quad u_{t_0}^m = \frac{D Z_m}{1 + \frac{6E}{h}}$$

dove Z_m indica Z al tempo t_m .

La 3.6 è un'equazione differenziale ordinaria del primo ordine nel tempo, e può essere risolta con la formula di Heun (4.3 del cap. 3°) in modo da ottenere il valore di u_0^{n+1} ,

noti i valori necessari al tempo t_m .

Esplicitando \tilde{z}^n e scrivendo la formula di Heun per la 3.6 otteniamo

$$\begin{aligned}
 u_0^{n+1} = & u_0^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{D}{\left(1 + \frac{6E}{h}\right) h^2} \left[-\frac{23}{2} u_0^n + 8 u_1^n + \frac{7}{2} u_2^n - 8h u_{x_1}^n - h u_{x_2}^n \right. \\
 (3.7) \quad & \left. -\frac{23}{2} (u_0^n + \Delta t u_{t_0}^n) + 8 (u_1^n + \Delta t u_{t_1}^n) + \frac{7}{2} (u_2^n + \Delta t u_{t_2}^n) \right. \\
 & \left. - 8h (u_{x_1}^n + \Delta t u_{x_{t_1}}^n) - h (u_{x_2}^n + \Delta t u_{x_{t_2}}^n) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

Esaminiamo una per una le variabili presenti nel secondo membro della 3.7.

u_0^n, u_1^n e u_2^n sono ovviamente note, perché si suppone già risolta al tempo t_m l'equazione 3.2a (al tempo t_0 la soluzione è nota per la 3.2c).

Per il calcolo di $u_{x_1}^n$ e $u_{x_2}^n$ valgono le considerazioni fatte nel cap. 3° (par. 3), che qui ripetiamo.

Riportiamo la 3.5 del cap. 3°:

$$(3.8) \quad u_{x_0} = \frac{1}{29} \left(\frac{48}{h} (u_1 - u_0) - 20u_{x_1} + u_{x_2} - 6h u_{xx_0} \right) + \mathcal{O}(h^4)$$

Eliminando u_{xx_0} dalla 3.8 e dalla 3.3b otteniamo

$$(3.9) \quad u_{x_0} = \frac{\frac{1}{29} \left(\frac{48}{h} (u_1 - u_0) - 20u_{x_1} + u_{x_2} \right)}{1 + \frac{6h}{29E}} + \mathcal{O}(h^4)$$

La 3.9 è una relazione tra u_{x_0} , u_{x_1} e u_{x_2} e può quindi essere accoppiata alla 3.12 del cap. 3° per eliminare u_{x_0} .

Riportando la 3.12 del cap. 3°

$$(3.10) \quad u_{x_2} + 4u_{x_1} + u_{x_0} = \frac{3}{h} (u_2 - u_0) + \mathcal{O}(h^4)$$

e sostituendo la 3.9 nella 3.10 otteniamo

$$(3.11) \quad u_{x_2}(h+5E) + u_{x_1}(4h+16E) = u_2\left(3 + \frac{29E}{2h}\right) - \frac{8E}{h}u_1 - u_0\left(3 + \frac{13E}{2h}\right) + \mathcal{O}(h^4)$$

La 3.11 accoppiata alle 3.11 del cap. 3° che sono

$$(3.12) \quad u_{x_{j+1}} + 4u_{x_j} + u_{x_{j-1}} = \frac{3}{h} (u_{j+1} - u_{j-1}) + \mathcal{O}(h^4)$$

per j che varia da 1 a $N-1$, forma un sistema tridiagonale che ha la struttura rappresentata nelle 3.14 del cap. 3°, dove $K=0$ e $u_N=0$.

Risolto questo sistema, si conoscono i due valori cercati

$$u_{x_1}^m \text{ e } u_{x_2}^m .$$

Per determinare $u_{t_0}^m$ si può utilizzare la 3.6, conoscendo oramai $u_{x_1}^m$ e $u_{x_2}^m$.

Per determinare invece $u_{t_1}^m$ e $u_{t_2}^m$, è necessario previamente calcolare le derivate spaziali seconde su tutto il dominio al tempo t_m . Con ragionamenti analoghi a quelli per il calcolo del gradiente e come illustrato nel caso generale nel par. 4 del cap. 3°, sfruttando il valore noto di $u_{x_{x_0}}^m$ (calcolato dalla 3.5, conoscendo $u_{x_1}^m$ e $u_{x_2}^m$), si ottiene il sistema tridiagonale 4.7 del cap. 3°.

Risolto il sistema, con i valori risultanti $u_{xx_1}^n$ e $u_{xx_2}^n$,
tramite la 3.2a, è possibile ricavare $u_{t_1}^n$ e $u_{t_2}^n$ in que-
sto modo

$$(3.12a) \quad u_{t_1}^n = \mathcal{D} u_{xx_1}^n$$

$$(3.12b) \quad u_{t_2}^n = \mathcal{D} u_{xx_2}^n$$

Restano ancora ignoti nella 3.7 $u_{tx_1}^n$ e $u_{tx_2}^n$.

Essi possono essere calcolati con un'approssimazione del
1° ordine, perché nella formula di Heun (che ha errore
 $\mathcal{O}(\Delta t^3)$) sono moltiplicati per $(\Delta t)^2$. Possiamo perciò usare
queste relazioni

$$(3.14a) \quad u_{tx_1}^n = \frac{u_{x_1}^n - u_{x_1}^{n-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$(3.14b) \quad u_{tx_2}^n = \frac{u_{x_2}^n - u_{x_2}^{n-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Al tempo t_0 ovviamente non si possono calcolare le 3.14.
Tuttavia la 3.2a, opportunamente manipolata può fornirci
i valori $u_{tx_1}^0$ e $u_{tx_2}^0$ cercati.

Derivando rispetto a x la 3.2a otteniamo

$$(3.15) \quad \mathcal{D} u_{xxx_j}^n = u_{tx_j}^n$$

che nei casi $j=1$ e $j=2$, per $n=0$ diventa

$$(3.16) \quad \mathcal{D} u_{xxx_1}^0 = u_{tx_1}^0 \quad \mathcal{D} u_{xxx_2}^0 = u_{tx_2}^0$$

Ma u_{xxx_j} è nota per ogni j , perché può essere ricavata de-
rivando tre volte rispetto a x la 3.2c. Risulta quindi

$$(3.17a) \quad u_{tx_1}^0 = \mathcal{D}(-B^3 e^{-Bx_1})$$

$$(3.17b) \quad u_{tx_2}^0 = \mathcal{D}(-B^3 e^{-Bx_2})$$

Abbiamo visto, in conclusione, come sia possibile applicare successivamente la 3.7 a partire da $n=0$ fermo restando che dopo aver calcolato il generico u_o^{n+1} , si risolva la equazione 3.2a col metodo OCI-CN esattamente come descritto nel cap. 2° , per ottenere la soluzione u^{n+1} su tutto il dominio.

CAPITOLO 5°

Il programma di calcolo per il problema modello. Confronto
tra risultati analitici e numerici

1. Il programma di calcolo per il problema modello

L'applicazione concreta dello schema di integrazione per il problema modello, descritto nel par. 3 del cap.4°, è stata da noi effettuata scrivendo un programma di calcolo in linguaggio Fortran IV ed eseguendolo sull'elaboratore elettronico Univac 1100/80 del CILEA.

Descriveremo ora per sommi capi tale programma di calcolo, soffermandoci sugli aspetti più significativi.

Rimandiamo ai commenti del programma principale (MAIN) per quanto riguarda il significato delle variabili.

Esaminiamo innanzitutto il MAIN. La prima operazione è la chiamata del sottoprogramma LEGGI, che fornisce, mettendoli in area di "common", i dati di ingresso. Segue il calcolo dei passi temporali e spaziali, sulla base del numero di punti dell'asse spaziale e dell'asse temporale e dei valori massimi di integrazione spaziale e temporale. Segue la chiamata di STAMPA, che produce il tabulato con i dati iniziali. Le condizioni iniziali, cioè la "tempera-

tura" (così viene chiamata nel programma la 3.2b del cap. 4° dato che la 1.1a del cap.4° è un'equazione del calore unidimensionale) al tempo $t=0$, vengono assegnate nell'istruzione 54 in base alla 3.2c del cap. 4°. Le condizioni al contorno 3.2d vengono successivamente assegnate, assegnando al vettore UX anche i valori desunti dalla derivazione della 3.2c. I valori UX1P e UX2P sono posti a zero per comodità, anche se verranno utilizzati solo in SISTRE.

La stampa della soluzione al tempo $t=0$ è preceduta da un opportuno trasferimento di variabile (perché $UT\emptyset$ non è in common e non potrebbe essere trasferita a STAMPA).

La chiamata di GZERO calcola il valore di G_j^0 , desunto dalla 3.27 del cap. 2°. La successiva chiamata del sottoprogramma SISTRE produce in uscita il valore della "temperatura alla superficie" (cioè 3.7 del cap. 4°), al tempo $T=DT$.

Dalla istruzione 89 alla 127 c'è il ciclo fondamentale di calcolo della soluzione. Avendo ottenuto con la 86 (da SISTRE) il valore di u_j^1 , si può risolvere l'equazione 3.2a con il sottoprogramma CALORE, che così fornisce la temperatura su tutto il dominio al tempo $T=DT$. Segue, con la chiamata di TGRAD, il calcolo del gradiente alla superficie, cioè 3.9 del cap.4°. Prima di stampare il risultato di queste due elaborazioni (CALORE e TGRAD) si procede a

Riportando la 3.12 del cap. 3°

$$(3.10) \quad u_{x_2} + 4u_{x_1} + u_{x_0} = \frac{3}{h} (u_2 - u_0) + \mathcal{O}(h^4)$$

e sostituendo la 3.9 nella 3.10 otteniamo

$$(3.11) \quad u_{x_2} (h+5E) + u_{x_1} (4h+16E) = u_2 \left(3 + \frac{29E}{2h}\right) - \frac{8E}{h} u_1 - u_0 \left(3 + \frac{13E}{2h}\right) + \mathcal{O}(h^4)$$

La 3.11 accoppiata alle 3.11 del cap. 3° che sono

$$(3.12) \quad u_{x_{j+1}} + 4u_{x_j} + u_{x_{j-1}} = \frac{3}{h} (u_{j+1} - u_{j-1}) + \mathcal{O}(h^4)$$

per j che varia da 1 a $N-1$, forma un sistema tridiagonale che ha la struttura rappresentata nelle 3.14 del cap. 3°, dove $K=0$ e $u_N=0$.

Risolto questo sistema, si conoscono i due valori cercati

$$u_{x_1}^m \text{ e } u_{x_2}^m .$$

Per determinare $u_{t_0}^m$ si può utilizzare la 3.6, conoscendo oramai $u_{x_1}^m$ e $u_{x_2}^m$.

Per determinare invece $u_{t_1}^m$ e $u_{t_2}^m$, è necessario previamente calcolare le derivate spaziali seconde su tutto il dominio al tempo t_m . Con ragionamenti analoghi a quelli per il calcolo del gradiente e come illustrato nel caso generale nel par. 4 del cap. 3°, sfruttando il valore noto di $u_{xx_0}^m$ (calcolato dalla 3.5, conoscendo $u_{x_1}^m$ e $u_{x_2}^m$), si ottiene il sistema tridiagonale 4.7 del cap. 3°.

Risolto il sistema, con i valori risultanti $u_{xx_1}^n$ e $u_{xx_2}^n$, tramite la 3.2a, è possibile ricavare $u_{t_1}^m$ e $u_{t_2}^m$ in questo modo

$$(3.12a) \quad u_{t_1}^m = D u_{xx_1}^m$$

$$(3.12b) \quad u_{t_2}^m = D u_{xx_2}^m$$

Restano ancora ignoti nella 3.7 $u_{t_{x_1}}^m$ e $u_{t_{x_2}}^m$.

Essi possono essere calcolati con un'approssimazione del 1° ordine, perché nella formula di Heun (che ha errore $\mathcal{O}(\Delta t^3)$) sono moltiplicati per $(\Delta t)^2$. Possiamo perciò usare queste relazioni

$$(3.14a) \quad u_{t_{x_1}}^m = \frac{u_{x_1}^m - u_{x_1}^{m-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$(3.14b) \quad u_{t_{x_2}}^m = \frac{u_{x_2}^m - u_{x_2}^{m-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Al tempo t_0 ovviamente non si possono calcolare le 3.14. Tuttavia la 3.2a, opportunamente manipolata può fornirci i valori $u_{t_{x_1}}^0$ e $u_{t_{x_2}}^0$ cercati.

Derivando rispetto a x la 3.2a otteniamo

$$(3.15) \quad D u_{xxx_j}^m = u_{t_{x_j}}^m$$

che nei casi $j=1$ e $j=2$, per $n=0$ diventa

$$(3.16) \quad D u_{xxx_1}^0 = u_{t_{x_1}}^0 \quad D u_{xxx_2}^0 = u_{t_{x_2}}^0$$

Ma u_{xxx_j} è nota per ogni j , perché può essere ricavata derivando tre volte rispetto a x la 3.2c. Risulta quindi

$$(3.17a) \quad u_{t_{x_1}}^0 = D(-B^3 e^{-Bx_1})$$

$$(3.17b) \quad u_{t_{x_2}}^0 = D(-B^3 e^{-Bx_2})$$

Abbiamo visto, in conclusione, come sia possibile applicare successivamente la 3.7 a partire da $n=0$ fermo restando che dopo aver calcolato il generico u_o^{n+1} , si risolva la equazione 3.2a col metodo OCI-CN esattamente come descritto nel cap. 2°, per ottenere la soluzione u^{n+1} su tutto il dominio.

CAPITOLO 5°

Il programma di calcolo per il problema modello. Confronto
tra risultati analitici e numerici

1. Il programma di calcolo per il problema modello

L'applicazione concreta dello schema di integrazione per il problema modello, descritto nel par. 3 del cap.4°, è stata da noi effettuata scrivendo un programma di calcolo in linguaggio Fortran IV ed eseguendolo sull'elaboratore elettronico Univac 1100/80 del CILEA.

Descriveremo ora per sommi capi tale programma di calcolo, soffermandoci sugli aspetti più significativi.

Rimandiamo ai commenti del programma principale (MAIN) per quanto riguarda il significato delle variabili.

Esaminiamo innanzitutto il MAIN. La prima operazione è la chiamata del sottoprogramma LEGGI, che fornisce, mettendoli in area di "common", i dati di ingresso. Segue il calcolo dei passi temporali e spaziali, sulla base del numero di punti dell'asse spaziale e dell'asse temporale e dei valori massimi di integrazione spaziale e temporale. Segue la chiamata di STAMPA, che produce il tabulato con i dati iniziali. Le condizioni iniziali, cioè la "tempera-

tura" (così viene chiamata nel programma la 3.2b del cap. 4° dato che la 1.1a del cap.4° è un'equazione del calore unidimensionale) al tempo $t=0$, vengono assegnate nell'istruzione 54 in base alla 3.2c del cap. 4°. Le condizioni al contorno 3.2d vengono successivamente assegnate, assegnando al vettore UX anche i valori desunti dalla derivazione della 3.2c. I valori UX1P e UX2P sono posti a zero per comodità, anche se verranno utilizzati solo in SISTRE.

La stampa della soluzione al tempo $t=0$ è preceduta da un opportuno trasferimento di variabile (perché $UT\emptyset$ non è in common e non potrebbe essere trasferita a STAMPA).

La chiamata di GZERO calcola il valore di G_j^0 , desunto dalla 3.27 del cap. 2°. La successiva chiamata del sottoprogramma SISTRE produce in uscita il valore della "temperatura alla superficie" (cioè 3.7 del cap. 4°), al tempo $T=DT$.

Dalla istruzione 89 alla 127 c'è il ciclo fondamentale di calcolo della soluzione. Avendo ottenuto con la 86 (da SISTRE) il valore di u_j^1 , si può risolvere l'equazione 3.2a con il sottoprogramma CALORE, che così fornisce la temperatura su tutto il dominio al tempo $T=DT$. Segue, con la chiamata di TGRAD, il calcolo del gradiente alla superficie, cioè 3.9 del cap.4°. Prima di stampare il risultato di queste due elaborazioni (CALORE e TGRAD) si procede a

calcolare, mediante il sottoprogramma SOLMOD, la temperatura superficiale e il gradiente superficiale analitici, per poter stampare anche gli errori relativi definiti così

$$EU\phi VER = \frac{U_0 \text{ approx} - U_0 \text{ vera}}{U_0 \text{ vera}}$$

$$EGR = \frac{U_{x_0} \text{ approx} - U_{x_0} \text{ vera}}{U_{x_0} \text{ vera}}$$

Ogni 20 passi temporali vengono stampati solamente alcuni valori calcolati. Per determinati valori di NT viene prodotta una stampa completa della temperatura su tutto il dominio, attraverso un'opportuna chiamata del sottoprogramma STAMPA.

Segue il calcolo, tramite la formula ricorsiva 3.24 del cap. 2°, del vettore G.

A questo punto è possibile calcolare il valore della temperatura superficiale al tempo $T=2xDT$, chiamando SISTRE.

Il ciclo ritorna al punto iniziale e calcola con CALORE la temperatura su tutto il dominio al tempo $T=2xDT$ e così via fino a che il numero dei passi temporali non raggiunga il valore massimo KT.

Esaminiamo ora il sottoprogramma LEGGI. Esso è strutturato per poter far funzionare il programma da terminale conversazionale, per cui prima della lettura dei dati di ingresso, chiede, stampando una frase opportuna, il valore da inserire. Il formato di lettura è libero. Facciamo notare che ZDAT,

cioè η nella relazione tra gradiente e derivata temporale, è in realtà vincolata dalla 1.2c del cap. 4° ai valori di BDAT e DDAT, per cui la sua lettura potrebbe essere sostituita da un assegnamento diretto.

Seguendo l'ordine di chiamata nel MAIN, esaminiamo il programma di STAMPA. A seconda del parametro IST, esso produce un tabulato diverso; facciamo solamente notare che da esso viene chiamato SOLMOD, al fine di calcolare e stampare gli errori relativi della soluzione, definiti come sopra.

Il sottoprogramma SOLMOD calcola, a richiesta, la soluzione analitica del problema o le sue due derivate spaziali o la derivata temporale. Nel programma qui mostrato non vengono mai utilizzate le formule della derivata seconda e di quella temporale che sono però servite in fase di messa a punto.

GZERO è il sottoprogramma che calcola il vettore G al tempo $T=0$. La sua struttura è semplicissima.

SISTRE è il sottoprogramma che realizza l'integrazione temporale di Heun, data dalla 3.7 del cap. 4°. Da esso parte la chiamata di DERSEC che calcola la derivata seconda su tutto il dominio di integrazione, secondo le formule del par. 4 del cap. 3°. Unica cosa degna di segnalazione in SISTRE è il salvataggio dei valori UX(1) e UX(2) che servono per poter applicare le 3.14 del cap. 4°.

Il sottoprogramma CALORE è invece adibito alla risoluzione dell'equazione parabolica, una volta che siano note le condizioni al contorno. Da esso vengono chiamati QR e SOLTRI. Essenzialmente CALORE risolve il sistema 3.15 del cap. 2°. QR calcola i coefficienti 3.7 del cap. 2°, mentre SOLTRI risolve il sistema tridiagonale risultante. L'algoritmo adoperato in SOLTRI è uno classico preso dalla letteratura [2], che risolve sistemi di ordine da 2×2 a $NFIT \times NFIT$. Poiché in tutti i sottoprogrammi abbiamo imposto come massima dimensione dei vettori 1010, SOLTRI può in concreto risolvere sistemi fino a 1010×1010 . Chiaramente nel sottoprogramma QR devono essere calcolati i valori dei coefficienti dell'equazione parabolica, il che è stato realizzato, per esigenze di flessibilità del programma, con due sottoprogrammi ALFA e BETA che danno il valore rispettivamente dei coefficienti delle derivate seconda e prima. In questo caso ALFA produce il valore costante DDAT e BETA il valore ϕ .

Il sottoprogramma TGRAD è analogo a DERSEC, calcolando però la derivata prima su tutto il campo di integrazione senza conoscere il gradiente al contorno sinistro. In pratica applica le formule 3.11 e 3.12 del cap. 4°.

Alleghiamo qui di seguito i tabulati del MAIN e di tutti i sottoprogrammi che compongono il programma.

```

1 C MAIN PER IL PROBLEMA MODELLO
2 C
3 C *****LEGENDA*****
4 C DH = PASSO DI DISCRETIZZAZIONE SPAZIALE * OUTPUT
5 C DT= PASSO DI DISCRETIZZAZIONE TEMPORALE * OUTPUT
6 C KH = N. PUNTI DELL'ASSE SPAZIALE (H=0 EQUIVALE A KH=1) * INPUT
7 C KT = N. PUNTI DELL'ASSE TEMPORALE (T=0 EQUIVALE A KT=1) * INPUT
8 C SH = MASSIMO VALORE DI H (SOSTITUISCE H=INFINITO) *INPUT
9 C ST = MASSIMO VALORE DI T * INPUT
10 C NT = LIVELLO DI TEMPO (DA 1 A KT) T=0 EQUIVALE A NT=1 *
11 C BDAT = COSTANTE DI SMORZAMENTO DELLA CONDIZIONE INIZIALE * INPUT
12 C TSDAT = TEMPERATURA INIZIALE SU TUTTO LO SPAZIO E TEMPERATURA
13 C ALL'INFINITO A QUALSIASI TEMPO * INPUT
14 C ZDAT = COSTANTE NELLA RELAZIONE TRA GRADIENTE E DERIVATA
15 C TEMPORALE ALLA SUPERFICIE * INPUT
16 C DDAT = COSTANTE DI DIFFUSIVITA' * INPUT
17 C UO = TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE (H=0, T=QUALSIASI) * OUTPUT
18 C UCONT = TEMPERATURA ALL'INFINITO (IN H=SH).
19 C * INPUT DA PROGRAMMA
20 C UT = TEMPERATURA (SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DEL CALORE) SU TUTTO LO
21 C SPAZIO ESCLUSI GLI ESTREMI (H=0 E H=SH). VETTORE DI DIM=KH-2
22 C UTO = TEMPERATURA SU TUTTO LO SPAZIO (ECCEPTE CHE ALL'INFINITO -CIOE
23 C DOVE VIENE ASSUNTO IL VALORE DI UCONT) AL TEMPO T=0.
24 C VETTORE DI DIM KH-1 * INPUT DA PROGRAMMA
25 C GRT = GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE (E' NOTO SOLAMENTE
26 C QUELLO AL TEMPO T=0) * OUTPUT
27 C
28 C COMMON/PARAM/BDAT, TSDAT, ZDAT, DDAT, KH, KT, SH, ST, RINZ, VINZ
29 C COMMON/CALCOL/DH, DT, KH1, KH2, KH3, NT
30 C COMMON/STAMP/GRT, R, V, UT, UO, UCONT
31 C COMMON/DERIV/UX, UX1P, UX2P
32 C COMMON/TEMPER/UPRO, UPR1, UPR2, UPR3
33 C PARAMETER NNN=1010
34 C DIMENSION UTO(NNN), G(NNN), UT(NNN), UX(NNN)
35 C LETTURA DATI
36 C CALL LEGGI
37 C CALCOLO DI ALCUNI PARAMETRI
38 C KH1=KH-1
39 C KH2=KH-2
40 C KH3=KH-3
41 C KT4=KT-4
42 C DH=SH/(KH-1)
43 C DT=ST/(KT-1)
44 C RLAMDA=DT*0.5/(DH*DH)
45 C CALL STAMPA(1)
46 C CALL STAMPA(3)
47 C
48 C
49 C ASSEGNAMENTO DEI VALORI NOTI
50 C
51 C CONDIZIONI INIZIALI
52 C DO 1 I=1, KH1
53 C DHI=(I-1)*DH
54 C UTO(I)=EXP(-BDAT*DHI)
55 C CONTINUE
56 C CONDIZIONI AL CONTORNO
57 C UCONT=0
58 C
59 C ASSEGNAMENTO DEL VALORE NOTO DEL GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA
60 C SUPERFICIE AL TEMPO T=0
61 C GRT=-BDAT
62 C UX(1)=-BDAT*EXP(-BDAT*DH)
63 C UX(2)=-BDAT*EXP(-BDAT*2*DH)
64 C

```

```

65      UX1P=0
66      UX2P=0
67      NT=1
68
69      C ASSEGNAMENTO DI UTO AL VETTORE UT E ALLA VARIABILE UO
70      C PER POTER UTILIZZARE IL SOTTOPROGRAMMA DI STAMPA
71          UO=UTO(1)
72          DO 22 I=1,KH2
73              I1=I+1
74              UT(I)=UTO(I1)
75      22 CONTINUE
76      C STAMPA DEL VALORE DEL GRADIENTE DELLA TEMPERATURA E DELLA
77      C TEMPERATURA AL TEMPO T=0 (NT=1)
78          CALL STAMPA(2)
79      C CALCOLO DI G AL LIVELLO ZERO
80          CALL GZERO(G,UTO,UCONT,RLAMDA)
81      C
82      C SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DIFFERENZIALE CHE LEGA IL GRADIENTE
83      C ALLA DERIVATA TEMPORALE DELLA TEMPERATURA AL TEMPO T=0. IL
84      C RISULTATO DELLA ELABORAZIONE E' LA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE
85      C AL LIVELLO NT=2 (T=DT)
86          CALL SISTRE(UTO(1),UO,UCONT,GRT,G,RINZ,R,VINZ,V,UT)
87      C CICLO FONDAMENTALE DI CALCOLO DELLA SOLUZIONE DAL PRIMO LIVELLO
88      C
89          DO 5 NT=2,KT
90              T=(NT-1)*DT
91              CALL CALORE(RLAMDA,UT,UO,UCONT,G,R)
92      C CALCOLO DEL GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA
93      C SUPERFICIE AL LIVELLO NT
94          CALL TGRAD(GRT,UT,UO,UCONT,G,R,V)
95      C STAMPA DEL GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA
96      C SUPERFICIE E DELLA TEMPERATURA SU TUTTO LO
97      C SPAZIO, AL LIVELLO NT
98          IF(NT.EQ.102.OR.NT.EQ.12)WRITE(6,13)
99      13  FORMAT(///,' TEMPO          TEMPER. SUPERFICIE',
100      *      ' ERR. REL. TEMP. SUP.  GRAD. TEMP. SUP.  ',
101      *      ' ERR. REL. GRAD.  PASSO TEMPORALE N. ')
102          CALL SOLMOD(GRTVER,0,(NT-1)*DT,2)
103          CALL SOLMOD(UOVER,0,(NT-1)*DT,1)
104          IF(GRTVER.NE.0)EGR=(GRT-GRTVER)/GRTVER
105          IF(UOVER.NE.0)EUOVER=(UO-UOVER)/UOVER
106          IF(GRTVER.EQ.0)EGR=0
107          IF(UOVER.EQ.0)EUOVER=0
108          IF(MOD(NT,20).EQ.0)
109      *      WRITE(6,26)T,UO,EUOVER,GRT,EGR,NT
110      26  FORMAT(' T=',E10.4,' UO=',E14.8,' EUOVER=',E8.2,
111      *      ' GRT=',E14.8,' EGR=',E8.2,' NT=',I5)
112          IF(NT.LT.3.OR.NT.EQ.101.OR.NT.GT.KT4.OR.NT.EQ.11)
113      *      CALL STAMPA(2)
114      C CALCOLO DEL NUOVO VETTORE G CON FORMULA DI RICORSIONE
115          G(1)=2*UO-G(1)
116          DO 6 I=1,KH2
117              I1=I+1
118              G(I1)=2*UT(I)-G(I1)
119      6  CONTINUE
120          G(KH)=2*UCONT-G(KH)
121      C SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DIFFERENZIALE CHE LEGA IL
122      C GRADIENTE ALLA DERIVATA TEMPORALE DELLA TEMPERATURA
123      C AL LIVELLO NT. IL RISULTATO DELLA ELABORAZIONE E' LA
124      C TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE AL TEMPO SUCCESSIVO
125          CALL SISTRE(UO,UON,UCONT,GRT,G,R,ROUT,V,VOUT,UT)
126          UO=UON
127      5  CONTINUE
128          STOP
129          END

```

```

1          SUBROUTINE LEGGI
2          C  VERSIONE PER IL PROBLEMA MODELLO
3          C
4          C  QUESTO SOTTOPROGRAMMA LEGGE TUTTI I DATI E I PARAMETRI NECESSARI
5          C  METTENDOLI IN AREA DI COMMON
6          C
7          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
8          COMMON/BOLLA/ELLE,KAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
9          C
10         888  WRITE(6,1)
11             1  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI KH')
12             READ(5,2) KH
13             2  FORMAT( )
14             WRITE(6,3)
15             3  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI KT')
16             READ(5,2) KT
17             WRITE(6,4)
18             4  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI SH')
19             READ(5,2) SH
20             WRITE(6,5)
21             5  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI ST')
22             READ(5,2) ST
23             IF(KH.LE.0.OR.KT.LE.0.OR.SH.LE.0.OR.ST.LE.0)GOTO 99
24             WRITE(6,6)
25             6  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI BDAT')
26             READ(5,2) BDAT
27             WRITE(6,7)
28             7  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI DDAT')
29             READ(5,2) DDAT
30             WRITE(6,8)
31             8  FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI ZDAT')
32             READ(5,2) ZDAT
33             GO TO 55
34             99  WRITE(6,100)
35             100 FORMAT(' UNO DEI SEGUENTI DATI: KH,KT,SH,ST,RISULTA'
36             *      ' NEGATIVO O NULLO')
37             GO TO 888
38             55  RETURN
39             END

```

```

1          SUBROUTINE SOLMOD (SU,X,T,IDER)
2          C  QUESTO SOTTOPROGRAMMA CALCOLA IL VALORE DELLA SOLUZIONE ANALITICA
3          C  E DELLE SUE DERIVATE PER IL PROBLEMA MODELLO, NEL NODO (X,T)
4          C  IDER = 1 CALCOLA LA SOLUZIONE
5          C  IDER = 2 CALCOLA LA DERIVATA PRIMA SPAZIALE
6          C  IDER = 3 CALCOLA LA DERIVATA SECONDA SPAZIALE
7          C  IDER = 4 CALCOLA LA DERIVATA PRIMA TEMPORALE
8          C
9          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
10         COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
11         GO TO (1,2,3,4),IDER
12         1  SU=EXP(-BDAT*X+BDAT*BDAT*DDAT*T)
13             RETURN
14         2  SU=-BDAT*EXP(-BDAT*X+BDAT*BDAT*DDAT*T)
15             RETURN
16         3  SU=BDAT*BDAT*EXP(-BDAT*X+BDAT*BDAT*DDAT*T)
17             RETURN
18         4  SU=BDAT*BDAT*DDAT*EXP(-BDAT*X+BDAT*BDAT*DDAT*T)
19             RETURN
20         END

```

SUBROUTINE STAMPA (IST)

60.

```

1
2
3 C
4 C QUESTO SOTTOPROGRAMMA MANDA IN STAMPA DATI E RISULTATI
5 C IN DIPENDENZA DAL VALORE DI IST
6 C IST = 1 STAMPA I DATI DI INGRESSO
7 C IST = 2 STAMPA LA SOLUZIONE DEL PROBLEMA
8 C IST = 3 STAMPA I DATI DEL PROBLEMA MODELLO
9 C
10 PARAMETER NN=1010
11 COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
12 COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIY,P8,SIGMA
13 COMMON/STAMP/GRT,R,V,UT,UO,UCONT
14 COMMON/DENS/ROV,DROV
15 DIMENSION UT(NN)
16 COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
17 GO TO(1,2,3,4,5),IST
18 1 WRITE(6,11) KH,KT,SH,ST,DH,DT
19 11 FORMAT(1H1,' DATI DI INGRESSO',//,' KH = ',I8,
20 * ' (N. PUNTI DELL ASSE SPAZIALE)',//,' KT = ',I8,
21 * ' (N. PUNTI DELL ASSE TEMPORALE)',//,' SH = ',E14.8,
22 * ' (ESTREMO SUPERIORE SPAZIALE)',//,' ST = ',E14.8,
23 * ' (ESTREMO SUPERIORE TEMPORALE)',///,' PARAMETRI CALCOLATI',//,
24 * ' DH = ',E14.8,' (PASSO DI DISCRETIZZAZIONE SPAZIALE)'
25 * ',//,' DT = ',E14.8,' (PASSO DI DISCRETIZZAZIONE ',
26 * ' TEMPORALE)',//)
27 RETURN
28 2 CONTINUE
29 T=(NT-1)*DT
30 CALL SOLMOD(GRTV,0,T,2)
31 IF (GRTV.EQ.0)ERGRT=0
32 IF (GRTV.NE.0)ERGRT=(GRT-GRTV)/GRTV
33 WRITE(6,12) T,GRT,ERGRT
34 12 FORMAT(1H1,40X,' T = ',E14.8,///,10X,
35 * ' GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE',
36 * E14.8,' ERRORE RELATIVO',E8.2,///,3(' H ' ,
37 * ' SOLUZIONE ER.REL.'))
38 HO=0
39 H1=DH
40 H2=2*DH
41 CALL SOLMOD(VUO,0,T,1)
42 CALL SOLMOD(VU1,H1,T,1)
43 CALL SOLMOD(VU2,H2,T,1)
44 IF(VUO.NE.0)EUO=(UO-VUO)/VUO
45 IF(VU1.NE.0)EU1=(UT(1)-VU1)/VU1
46 IF(VU2.NE.0)EU2=(UT(2)-VU2)/VU2
47 IF(VUO.EQ.0)EUO=0
48 IF(VU1.EQ.0)EU1=0
49 IF(VU2.EQ.0)EU2=0
50 WRITE(6,42)HO,UO,EUO,H1,UT(1),EU1,H2,UT(2),EU2
51 42 FORMAT(3(2X,E12.6,2X,E14.8,E8.2))
52 DO 22 I=3,KH2,3
53 IF(I.GT.10.AND.MOD(I,15).NE.0)GOTO 22
54 I1=I+1
55 I2=I+2
56 H=I*DH
57 H1=I1*DH
58 H2=I2*DH
59 CALL SOLMOD(VUO,H,T,1)
60 CALL SOLMOD(VU1,H1,T,1)
61 CALL SOLMOD(VU2,H2,T,1)
62 IF(VUO.NE.0)EUO=(UT(I)-VUO)/VUO
63 IF(VU1.NE.0)EU1=(UT(I1)-VU1)/VU1
64 IF(VU2.NE.0)EU2=(UT(I2)-VU2)/VU2
65 IF(VUO.EQ.0)EUO=0

```

```

65      IF<VU1.EQ.0>EU1=0
66      IF<VU2.EQ.0>EU2=0
67      EU3=0
68      KH2MI=KH2-I+1
69      IF<KH2MI.GT.3>GOTO 52
70      GOTO (200,201,202),KH2MI
71      200      WRITE(6,2000)H,UT(I),EU0,H1,UCONT,EU1
72      2000      FORMAT(2(2X,E12.6,2X,E14.8,E8.2))
73      GOTO 22
74      201      WRITE(6,32)H,UT(I),EU0,H1,UT(I1),EU1,H2,UCONT,EU3
75      GOTO 22
76      202      WRITE(6,2020)H,UT(I),EU0,H1,UT(I1),EU1,H2,UT(I2),EU2,SH,UCON
77      2020      FORMAT(3(2X,E12.6,2X,E14.8,E8.2),/,2X,E12.6,2X,E14.8,E8.2)
78      GOTO 22
79      52      WRITE(6,32)H,UT(I),EU0,H1,UT(I1),EU1,H2,UT(I2),EU2
80      32      FORMAT(3(2X,E12.6,2X,E14.8,E8.2))
81      22      CONTINUE
82      RETURN
83      3      WRITE(6,13)BDAT,ZDAT,DDAT
84      13      FORMAT (/, ' DATI DEL PROBLEMA MODELLO', //, ' BDAT = ', E14.8
85      *          ' (COSTANTE DI SMORZAMENTO NEL PROBLEMA MODELLO)',
86      *          '/', ' ZDAT = ', E14.8, ' (LAMBDA NEL PROBLEMA MODELLO)',
87      *          '/', ' DDAT = 'E14.8,' (DIFFUSIVITA)')
88      RETURN
89      4      CONTINUE
90      5      CONTINUE
91      RETURN
92      END

```

```

1          SUBROUTINE GZERO(G,UTO,UCONT,RLAMDA)
2  C  VERSIONE PER IL PROBLEMA MODELLO
3  C  CALCOLO DEL VALORE DI G AL LIVELLO ZERO
4          COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
5          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
6          DIMENSION G(KH),UTO(KH)
7          DO 1 I=1,KH1
8             X=(I-1)*DH
9             G(I)=UTO(I)+RLAMDA*DH*DH*BDAT*BDAT*DDAT*EXP(-BDAT*X)
10         1  CONTINUE
11             G(KH)=UCONT+RLAMDA*BDAT*BDAT*DDAT*DH*DH*EXP(-BDAT*SH)
12         RETURN
13         END

```

```

1          SUBROUTINE ALFA(DIH,R,AV)
2  C  CALCOLA IL COEFFICIENTE DELLA DERIVATA SECONDA NELLA EQUAZIONE
3  C  DEL CALORE PER IL PROBLEMA MODELLO
4          COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
5          AV=DDAT
6          RETURN
7          END

```

```

1          SUBROUTINE BETA(DIH,R,BV)
2  C  CALCOLA IL COEFFICIENTE DELLA DERIVATA PRIMA NELLA EQUAZIONE
3  C  DEL CALORE PER IL PROBLEMA MODELLO
4          BV=0
5          RETURN
6          END

```

```

1          SUBROUTINE SISTRE(UIN,UOUT,UCONT,GRTIN,G,RIN,ROUT,VIN,VOUT,UT)
2  C  VERSIONE PER IL PROBLEMA MODELLO
3  C  SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DIFFERENZIALE CHE LEGA IL GRADIENTE ALLA
4  C  DERIVATA TEMPORALE SULLA SUPERFICIE DELLA LASTRA
5  C  VIENE UTILIZZATA LA FORMULA DI HEUN DEL SECONDO ORDINE
6  C
7          COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
8          COMMON/DERIV/UX,UX1P,UX2P
9          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
10         PARAMETER NN=1010
11         DIMENSION G(KH),UX(NN),UT(KH2)
12             UXT1=(UX(1)-UX1P)/DT
13             UXT2=(UX(2)-UX2P)/DT
14             IF(NT.EQ.1)UXT1=-BDAT**3.*DDAT*EXP(-BDAT*DH)
15             IF(NT.EQ.1)UXT2=-BDAT**3.*DDAT*EXP(-BDAT*DH*2)
16             UXX0=ZDAT/DDAT*GRTIN
17             CALL DERSEC(UXX0,UXX1,UXX2)
18             IF(NT.EQ.1)UXX1=BDAT**2.*EXP(-BDAT*DH)
19             IF(NT.EQ.1)UXX2=BDAT**2.*EXP(-BDAT*DH*2.)
20             RK1=DDAT/DH**2./(1-6./BDAT/DH)*(-11.5*UIN+8.*UT(1)+
21 *           3.5*UT(2)-8.*DH*UX(1)-DH*UX(2))
22             RK2=DDAT/DH**2./(1-6./BDAT/DH)*(-11.5*(UIN+DT
23 *           *RK1)+8.*(UT(1)+DT*DDAT*UXX1)+3.5*(UT(2)+DT*DDAT
24 *           *UXX2)-8.*DH*(UX(1)+DT*UXT1)-DH*(UX(2)+DT*UXT2))
25             UOUT=UIN+DT*0.5*(RK1+RK2)
26             UX1P=UX(1)
27             UX2P=UX(2)
28         99  RETURN
29         END

```

```

1          SUBROUTINE CALORE(RLAM,UT,UO,UKH,G,RIN)
2      C   VERSIONE PER EQUAZIONE DEL CALORE SENZA VELOCITA'
3      C
4      C   RISOLVE L'EQUAZIONE DEL CALORE CON CONDIZIONI DI DIRICHLET
5      C   AL LIVELLO DI TEMPO NT
6      C
7          COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
8          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
9          PARAMETER NN=1010
10         DIMENSION G(KH),UT(KH2),QP(NN),QO(NN),QM(NN),C(NN),UMM(NN)
11         *          RP(NN),RO(NN),RM(NN),UMP(NN),UMO(NN),UNOTO(NN)
12      C
13      C   CALCOLO DEGLI OPERATORI TRIDIAGONALI Q ED R AL LIVELLO NT
14      C   CALL QR(RIN,QP,QO,QM,RP,RO,RM)
15      C
16         C(1)=(QM(1)-RLAM*RM(1))*UO
17         DO 1 I=2,KH3
18             C(I)=0
19         1   CONTINUE
20         C(KH2)=(QP(KH2)-RLAM*RP(KH2))*UKH
21      C
22      C   CALCOLO DELLA MATRICE E DEL VETTORE TERMINE NOTO DEL SISTEMA
23      C   TRIDIAGONALE DI INCOGNITA UT AL LIVELLO NT.
24      C   VENGONO GENERATI I VALORI DI UMM(1) E UMP(KH2) ANCHE SE NON
25      C   VERRANNO MAI UTILIZZATI
26         DO 2 I=1,KH2
27             I1=I+1
28             I2=I+2
29             UMP(I)=QP(I)-RLAM*RP(I)
30             UMO(I)=QO(I)-RLAM*RO(I)
31             UMM(I)=QM(I)-RLAM*RM(I)
32             UNOTO(I)=QM(I)*G(I)+QO(I)*G(I1)+QP(I)*G(I2)-C(I)
33         2   CONTINUE
34      C
35      C   SOLUZIONE DEL SISTEMA DI INCOGNITA UT
36      C   CALL SOLTRI(UMO,UMM,UMP,UNOTO,KH2,UT)
37      C   RETURN
38      C   END

```

```

1          SUBROUTINE QR(R,QP,QO,QM,RP,RO,RM)
2  C  VERSIONE PER EQUAZIONE DEL CALORE SENZA VELOCITA'
3  C  CALCOLO DEI DUE OPERATORI TRIDIAGONALI Q E R
4  C
5          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
6          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
7          DIMENSION QP(KH2),QO(KH2),QM(KH2),RP(KH2),RO(KH2),RM(KH2)
8          DO 2 I=1,KH2
9              DI=I*DH
10             CALL ALFA(DI,R,AI)
11             DI1=(I+1)*DH
12             CALL ALFA(DI1,R,AI1)
13             DIM1=(I-1)*DH
14             CALL ALFA(DIM1,R,AI1)
15             CALL BETA(DI,R,BI)
16             CALL BETA(DI1,R,BI1)
17             CALL BETA(DIM1,R,BI1)
18             QP(I)=6*AI*AI1+DH*(5*AI1*BI-2*AI*BIM1)-DH*DH*BI*BIM1
19             QO(I)=60*AI1*AI1-16*DH*(AI1*BIM1-BI1*AI1)-
20             * 4*DH*DH*BI1*BIM1
21             QM(I)=6*AI*AI1-DH*(5*AI1*BI-2*AI*BI1)-DH*DH*BI*BI1
22             RP(I)=QP(I)*(AI1+.5*DH*BI1)+QO(I)*(AI+.5*DH*BI)+
23             *  QM(I)*(AI1-.5*DH*BI1)
24             RM(I)=QP(I)*(AI1+.5*DH*BI1)+QO(I)*(AI-.5*DH*BI)+
25             *  QM(I)*(AI1-1.5*DH*BI1)
26             RO(I)=- (RP(I)+RM(I))
27 2          CONTINUE
28          RETURN
29          END

```

```

1          SUBROUTINE DERSEC(UXX0,UXX1,UXX2)
2  C  VERSIONE PER IL PROBLEMA MODELLO
3  C  QUESTO SOTTOPROGRAMMA CALCOLA IL CAMPO DELLE DERIVATE SECONDE
4  C  E PRODUCE IN USCITA LE DERIVATE SECONDE NEL SECONDO E TERZO
5  C  NODO. IL VALORE DELLA DERIVATA SECONDA NEL PRIMO NODO E' DATO
6  C  IN INGRESSO.
7          PARAMETER NN=1010
8          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
9          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
10         COMMON/STAMP/GRT,R,V,UT,UO,UCONT
11         DIMENSION UXX(NN),UTRXM(NN),UTRXO(NN),UTRXP(NN),UN(NN),UT(NN)
12  C
13         DO 1 I=2,KH3
14             I1=I+1
15             I11=I-1
16             UTRXO(I)=10.*DH*DH
17             UTRXM(I)=DH*DH
18             UTRXP(I)=DH*DH
19             UN(I)=12*UT(I1)-24*UT(I)+12*UT(I11)
20 1         CONTINUE
21             UTRXM(1)=0
22             UTRXO(1)=10*DH*DH
23             UTRXP(1)=DH*DH
24             UTRXO(KH2)=10*DH*DH
25             UTRXM(KH2)=DH*DH
26             UTRXP(KH2)=0
27             UN(1)=12*UO-24*UT(1)+12*UT(2)-DH*DH*UXX0
28             UN(KH2)=12*UCONT-24*UT(KH2)+12*UT(KH3)
29             CALL SOLTRI(UTRXO,UTRXM,UTRXP,UN,KH2,UXX)
30             UXX1=UXX(1)
31             UXX2=UXX(2)
32             RETURN
33             END

```

```

1          SUBROUTINE TGRAD(GRT,UT,UO,UTKH,G,RIN,VIN)
2          C  VERSIONE PER IL PROBLEMA MODELLO
3          C  QUESTO SOTTOPROGRAMMA CALCOLA IL VALORE DEL GRADIENTE DELLA
4          C  TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE DELLA LASTRA, PER IL PROBLEMA MODELLO
5          C  AL LIVELLO NT
6          C  DO = DIAGONALE PRINCIPALE
7          C  DM = DIAGONALE INFERIORE
8          C  DP = DIAGONALE SUPERIORE
9          C  TER= VETTORE DEI TERMINI NOTI
10         PARAMETER NN=1010
11         COMMON/PARAM/BDAT, T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
12         COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT
13         COMMON/DERIV/UX,UX1P,UX2P
14         DIMENSION G(KH),UT(KH2),UX(NN),DO(NN),DM(NN),DP(NN),
15         *          TER(NN)
16         DO(1)=.96*DH*DDAT+.24*DH*DH*ZDAT
17         DP(1)=.30*DH*DDAT+.06*DH*DH*ZDAT
18         TER(1)=UT(2)*(.87*DDAT+.18*DH*ZDAT)-UT(1)*.48*DDAT-
19         *          UO*(.39*DDAT+.18*DH*ZDAT)
20         DO 1 I=2,KH3
21             I1=I+1
22             IM1=I-1
23             DO(I)=4*DH/3
24             DP(I)=DH/3
25             DM(I)=DH/3
26             TER(I)=UT(I1)-UT(IM1)
27         1    CONTINUE
28             DM(KH2)=DH/3
29             DO(KH2)=4*DH/3
30             TER(KH2)=UTKH-UT(KH3)
31             CALL SOLTRI(DO,DM,DP,TER,KH2,UX)
32             GRT=(DDAT/(DH*(29*DDAT+6*DH*ZDAT)))*((-20*DH*UX(1)+
33         *          DH*UX(2))-48*(UO-UT(1)))
34             RETURN
35             END

```

```

1          SUBROUTINE SOLTRI(MA,MB,MC,F,N,X)
2          C
3          C QUESTO SOTTOPROGRAMMA RISOLVE UN SISTEMA LINEARE LA CUI MATRICE
4          C HA STRUTTURA TRIDIAGONALE
5          C
6          C          *** LEGENDA ***
7          C MA = DIAGONALE PRINCIPALE DELLA MATRICE * INPUT
8          C MB = DIAGONALE INFERIORE DELLA MATRICE * INPUT
9          C MC = DIAGONALE SUPERIORE DELLA MATRICE * INPUT
10         C F = TERMINI NOTI * INPUT
11         C N = N. DI ELEMENTI DEL SISTEMA * INPUT
12         C X = SOLUZIONE DEL SISTEMA * OUTPUT
13         C
14         C PER COMODITA' MB E MC HANNO N ELEMENTI ANCHE SE NE SONO
15         C UTILIZZATI (N-1), RISPETTIVAMENTE DA 2 A N E DA 1 A (N-1).
16         C
17         C          PARAMETER NFIT=1010
18         C          REAL MA(N),MB(N),MC(N),F(N),X(N),A(NFIT),GA(NFIT),G(NFIT)
19         C          N1=N-1
20         C          N1B=N-1
21         C          IF(N.EQ.2)N1B=2
22         C
23         C IL METODO DI CALCOLO DELLA SOLUZIONE E' QUELLO CLASSICO
24         C DELLA LETTERATURA, BASATO SULLA FATTORIZZAZIONE IN DUE
25         C MATRICI BIDIAGONALI, UN A INFERIORE E UNA SUPERIORE
26         C
27         C FATTORIZZAZIONE
28         C          A(1)=MA(1)
29         C          IF(A(1).EQ.0) GO TO 666
30         C          GA(1)=MC(1)/A(1)
31         C          DO 1 I=2,N1B
32         C             I1=I - 1
33         C             A(I)= MA(I) - MB(I) * GA(I1)
34         C             IF(A(I).EQ.0) GO TO 666
35         C             GA(I) = MC(I)/A(I)
36         C          1 CONTINUE
37         C          A(N) = MA(N)-MB(N)*GA(N1)
38         C          IF(A(N).EQ.0) GO TO 666
39         C
40         C SOLUZIONE
41         C
42         C          G(1) = F(1)/A(1)
43         C          DO 2 IK =2,N
44         C             IK1=IK - 1
45         C             G(IK)= (F(IK)-MB(IK)*G(IK1))/A(IK)
46         C          2 CONTINUE
47         C          X(N)=G(N)
48         C          DO 3 IL=1,N1
49         C             LI=N-IL
50         C             LI1=LI+1
51         C             X(LI)=G(LI)-GA(LI)*X(LI1)
52         C          3 CONTINUE
53         C
54         C          RETURN
55         C
56         C          666 WRITE(6,5) (A(L),L=1,N)
57         C          5  FORMAT(' ANNULLAMENTO DI UN VALORE DI A, FATTORIZZAZIONE
58         C          *IMPOSSIBILE',/,100(10E10.4,/) )
59         C          RETURN
60         C          END

```

2. Confronto tra risultati analitici e numerici

Le prove numeriche da noi effettuate per la risoluzione del problema modello col programma di calcolo del par. 1 sono riassunte nella tab. 1, allegata qui di seguito.

Il significato dei simboli lì riportati è il seguente:

B è il valore che appare nella 1.1c del cap. 4°, D è quello della 1.1a del cap. 3°, DH è il passo di integrazione spaziale, DT il passo di integrazione temporale,

$$\lambda = \frac{DT}{2(DH)^2} \quad (\text{come nel par. 3 del cap. 2°}), \quad \varepsilon_i^m \text{ è}$$

l'errore relativo definito in questo modo $\varepsilon_i^m = \frac{u_i^m \text{ approx} - u_i^m \text{ vero}}{u_i^m \text{ vero}}$

mentre $\varepsilon_{x_0}^m$ è il corrispondente errore relativo del gradiente

superficiale, cioè $\varepsilon_{x_0}^m = \frac{u_{x_0}^m \text{ approx} - u_{x_0}^m \text{ vero}}{u_{x_0}^m \text{ vero}}$

In tutti i casi abbiamo usato un reticolo spaziale di integrazione composto da 101 nodi, il che significa che l'estremo superiore di integrazione è 10, quando $DH = 10^{-1}$, mentre vale 1 quando $DH = 10^{-2}$. Il numero di passi temporali e l'estremo superiore di integrazione variano a seconda del valore di DT che si è voluto ottenere. Nella tabella 1 figurano solamente casi con 100 o 1000 passi temporali. Dall'esame della tabella 1 si può immediatamente verificare (casi 1, 4, 5) come un elevato valore di λ causi una precoce instabilità. Se ne può dedurre che il valore

di λ deve essere inferiore all'unità. Analoga conclusione può essere dedotta per altra via notando che il metodo OCI-CN è del secondo ordine nel tempo e del quarto nello spazio, per cui affinché l'errore si propaghi, nella parte spaziale e in quella temporale, approssimativamente nello stesso modo, il passo temporale deve essere circa due ordini di grandezza più piccolo di quello spaziale. I casi 3, 7, 9, 11 ne sono una conferma. Il caso 6 da un certo punto di vista è un'eccezione: il suo valore di λ è 5, e la differenza di ordine di grandezza dei passi spaziale e temporale è 1. Tuttavia l'errore al 100° passo (cioè per $T = 0.1$) è identico a quello ottenuto con un passo temporale di un ordine di grandezza più piccolo, al 1000° passo (cioè sempre per $T = 0.1$).

Non basta però fare considerazioni sul rapporto fra i passi temporali per essere sicuri della stabilità dell'integrazione. È necessario tener conto anche dei parametri B e D. Nel caso 8 essi valgono 5 e i passi di integrazione sono $DH = 10^{-1}$ e $DT = 10^{-2}$. Nonostante che λ sia minore di 1, l'errore della soluzione è grande sin dal primo passo. Il motivo è che con un gradiente così elevato alla superficie il passo spaziale è troppo piccolo per un'integrazione spaziale accurata. Controprova è il caso 10, dove gli stessi

valori DH e DT del caso 8 danno un andamento dell'errore estremamente positivo. Ciò perché in questo caso 10 il gradiente (che, ricordiamo, è $-B e^{-Bx+B^2Dt}$) è piccolo.

Nel caso 8, gli elevati valori di B e D provocano un aumento eccessivo del valore della soluzione che supera, prima di raggiungere il 100° passo, la precisione di macchina (risulta infatti, per $T = 1$ e $H = 0$, $u = e^{125}$).

Dal confronto degli ϵ^{100} del caso 10 e degli ϵ^{4000} del caso 11, cioè per entrambi a $T = 1$, sembra che non si ottenga un vantaggio dalla riduzione del passo temporale e spaziale, conservando lo stesso valore di λ . Lo stesso avviene confrontando i casi 2 e 7. Bisognerà valutare, in altre applicazioni di questo schema di integrazione, l'opportunità di ridurre il passo temporale e aumentare perciò il numero di passi per raggiungere lo stesso tempo T, perché non è detto che ciò risulti conveniente, non solo ai fini del tempo di calcolo ma anche della precisione.

La più importante deduzione che si può fare leggendo la tabella 1 deriva dal confronto tra gli ϵ_{10}^n e gli ϵ_0^n .

La loro sostanziale uguaglianza, o la predominanza alternata (ma sempre con differenze di un solo ordine di grandezza), dimostra che lo schema di integrazione temporale della relazione tra gradiente e derivata temporale alla superficie,

cioè il calcolo del valore u_0 , è effettuato con lo stesso ordine di approssimazione di u_{10} . Ma quest'ultimo, essendo un punto interno al dominio, non risente molto delle condizioni al contorno, per cui si può ragionevolmente stimare che la propagazione del suo errore relativo ξ_{10} sia dovuta essenzialmente all'integrazione temporale propria del metodo OCI-CN, cioè al Crank-Nicolson, che è una approssimazione del secondo ordine.

Abbiamo così mostrato, come era negli intenti di questo problema modello, come l'accoppiamento dei due metodi di integrazione temporale (Crank-Nicolson e Heun applicato alla 3.6 del cap. 4°) sia consistente.

Per quanto riguarda la velocità di calcolo, con il programma descritto nel par. 1, con un reticolo spaziale di 101 nodi, vengono computati circa 55 passi temporali ogni secondo di CPU. Poiché la maggior parte del tempo di calcolo è spesa nella risoluzione dei sistemi tridiagonali e dato che il numero di operazioni necessarie per risolvere uno di questi sistemi è una funzione lineare del numero di incognite (cioè del numero di nodi), possiamo ricavare per questo problema modello, il tempo di esecuzione per nodo e per passo temporale, che risulta $1.8 \cdot 10^{-4}$ sec.

caso	B	D	DH	DT	λ	ϵ_0^1	ϵ_{10}^1	$\epsilon_{x_0}^1$	ϵ_0^{10}	$\epsilon_{x_0}^{10}$	ϵ_0^{100}	ϵ_{10}^{100}	$\epsilon_{x_0}^{100}$	ϵ_0^{1000}	ϵ_{10}^{1000}	$\epsilon_{x_0}^{1000}$
1.	1	1	10^{-1}	10^{-1}	5	$-2 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$9 \cdot 10^{-3}$	10^9	10^5	10^9	-	-	-
2.	1	1	10^{-1}	10^{-2}	.5	$-2 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$9 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	-	-	-
3.	1	1	10^{-1}	10^{-3}	.05	\emptyset	$-2 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$-6 \cdot 10^{-7}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-3 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	-	-	-
4.	1	1	10^{-2}	10^{-1}	500	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-1}$	10^8	10^7	10^{32}	10^{29}	10^{29}	-	-	-
5.	1	1	10^{-2}	10^{-2}	50	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$-9 \cdot 10^{-2}$	10^{32}	10^{32}	10^{33}	-	-	-
6.	1	1	10^{-2}	10^{-3}	5	\emptyset	$-1 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$-1 \cdot 10^{-1}$	1	-	-	-
7.	1	1	10^{-2}	10^{-4}	.5	\emptyset	$-3 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$-7 \cdot 10^{-7}$	$-5 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$-1 \cdot 10^{-1}$	1
8.	5	5	10^{-1}	10^{-2}	.5	-1	.1	-2	-5	-3	valori di u troppo elevati.	valori di u troppo elevati.	-	-	-	-
9.	5	5	10^{-2}	10^{-4}	.5	$-3 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-3}$
10.	0.1	0.1	10^{-1}	10^{-2}	.5	\emptyset	$-8 \cdot 10^{-8}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-6 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-4}$	-	-	-
11.	0.1	0.1	10^{-2}	10^{-4}	.5	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-2}$

$$\epsilon_i^n \equiv \frac{u(x_i, t_n)_{approx} - u(x_i, t_n)_{vero}}{u(x_i, t_n)_{vero}}$$

$$\epsilon_{x_0}^n \equiv \frac{\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{t=t_n, x=x_0} (approx) - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{t=t_n, x=x_0} (vero)}{\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{t=t_n, x=x_0} (vero)}$$

CAPITOLO 6°

La soluzione numerica del problema della dinamica di una
bolla di vapore in un liquido

1. La trasformazione di coordinate

Riportiamo per comodità dal par. 4 del cap. 1° le equazioni che regolano la dinamica di una bolla di vapore:

$$(1.1a) \quad \frac{D}{dt} \frac{\partial}{\partial z} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{R^2 \dot{R}}{r^2} \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad R(t) \leq z < \infty$$

$$(1.1b) \quad 4\pi R^2 K \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=R(t)} = \frac{4}{3} \pi L \left(3R^2 \dot{R} p_v(T_s) + R^3 \frac{d p_v}{d T_s} \frac{d T_s}{d t} \right)$$

$$(1.1c) \quad T(z, 0) = T_\infty \quad T(z, t) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} T_\infty$$

$$(1.1d) \quad R \ddot{R} + \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \frac{1}{f} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right)$$

$$(1.1e) \quad R(0) = \frac{2\sigma(T_\infty)}{p_v(T_\infty) - p_\infty} \quad V(0) = V_0$$

Ai fini del calcolo numerico abbiamo proceduto a una opportuna trasformazione di variabile che riunisse questi due vantaggi: fissare a zero la superficie mobile della bolla, in modo da integrare su un reticolo spaziale "fermo"; ampliare il campo di integrazione all'aumentare del raggio della bolla. Una trasformazione che riunisce queste due caratteristiche è la seguente:

$$(1.2) \quad z = \frac{1}{3} \left(\frac{z^3}{R^3} - 1 \right) \quad t' = t$$

Le equazioni 1.1 diventano così

$$(1.3a) \quad \frac{D}{R^2} (1+3z)^{4/3} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left(3\dot{R}z + \frac{4D}{R} (1+3z)^{4/3} \right) \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial t'} \quad z \geq 0$$

$$(1.3b) \quad \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{LR}{k} \left(p_v(T_s) \dot{R} + \frac{R}{3} \frac{dp_v}{dT_s} \frac{dT_s}{dt'} \right)$$

$$(1.3c) \quad T(z, 0) = T_\infty \quad T(z, t) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} T_\infty$$

$$(1.3d) \quad \ddot{R} = \frac{1}{R} \left[-\frac{3}{2} \dot{R} + \frac{1}{\rho} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right) \right]$$

$$(1.3e) \quad R(0) = \frac{2\sigma(T_\infty)}{p_v(T_\infty) - p_\infty} \quad \dot{R}(0) = V_0$$

Ovviamente, per il calcolo numerico, sostituiamo nella

seconda delle 1.3c un estremo di integrazione finito, per cui

$$(1.3f) \quad T(z_N, t) = T_\infty \quad 0 \leq z \leq z_N$$

Ai fini di considerazioni successive è importante notare

questa proprietà della trasformazione 1.2:

$$(1.4a) \quad \frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + v_z \frac{\partial T}{\partial z}$$

dove v_z è la velocità del liquido. Prendendo il suo valore

ricavato nella 2.5 del cap. 1°, otteniamo

$$(1.4b) \quad \frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{R^2}{z^2} \frac{dR}{dt} \frac{\partial T}{\partial z}$$

e, operando la trasformazione di variabile 1.2, risulta

$$(1.4c) \quad \frac{dT}{dt'} = \frac{\partial T}{\partial t'} + \frac{\partial z}{\partial t'} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{R^2}{z^2} \frac{dR}{dt'} \frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z}$$

da cui per $r = R(t)$, cioè $z = 0$, risulta

$$(1.4d) \quad \frac{dT}{dt'} \Big|_{z=0} = \left[\frac{\partial T}{\partial t'} - \frac{z^2 dR}{R^3 dt'} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{R^2}{z^2} \frac{dR}{dt'} \frac{z^2}{R^3} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_{z=0} = \frac{\partial T}{\partial t'} \Big|_{z=0}$$

Un'altra possibile trasformazione di variabile può essere:

$$(1.5) \quad \gamma = \frac{1}{3} (r^3 - R^3) \quad \theta = t$$

che trasforma la 1.1a in

$$(1.6) \quad D(3\gamma + R^3)^{\frac{4}{3}} \frac{\partial T}{\partial \gamma^2} + 4D(3\gamma + R^3)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial T}{\partial \gamma} = \frac{\partial T}{\partial \theta} \quad \gamma \geq 0$$

che, rispetto alla 1.3a, ha il pregio di non contenere la velocità.

Entrambe le trasformazioni 1.2 e 1.5 fissano a zero la superficie mobile della bolla. Per quanto riguarda l'ampliamento del campo di integrazione si comportano però in modo sostanzialmente diverso. Per un γ fissato, il corrispondente valore di r aumenta all'aumentare del raggio in modo che la differenza $r^3 - R^3$ resta costante, cioè il volume di crosta sferica intorno alla bolla resta immutato, il che vuol dire che la differenza $r - R$ diminuisce all'aumentare di R . Ma, come abbiamo accennato nel par. 1 del cap. 1°, la zona di liquido intorno alla bolla in cui gli effetti termici sono rilevanti ha uno spessore che è circa \sqrt{Dt} , che evidentemente aumenta col tempo. A seconda del variare di R , se si prende la trasformazione 1.5, ci sarà un momento in cui la differenza $r - R$ corrispondente al massimo valore di γ , sarà più piccola di \sqrt{Dt} , rendendo così inefficace l'integrazione spaziale (perché si ignorerebbe una regione in cui gli effetti termici hanno ancora rilevanza).

Questa eventualità può invece essere evitata con la trasformazione 1.2. Infatti da essa deduciamo che

$$(1.7) \quad 3zR^3 = z^3 - R^3 = (z-R)(z^2 + zR + R^2)$$

Possiamo scrivere approssimativamente per $z \approx R$

$$(1.8) \quad z - R = zR$$

cioè otteniamo che per z fissato lo spessore della crosta sferica intorno alla bolla cresce all'aumentare di R . Poiché è possibile ricavare dalle condizioni iniziali di 1.2 il rapporto approssimativamente costante nel tempo \sqrt{Dt}/R (cfr eq. 15 di [3]), per l'integrazione numerica basterà porre come estremo superiore di integrazione un valore di z maggiore di tale rapporto, per essere sicuri che la zona in cui gli effetti termici sono rilevanti rimanga sempre all'interno del campo di integrazione.

Possiamo ora scrivere in forma discretizzata il problema 1.3

$$(1.9a) \quad \frac{D}{R^2} (1 + 3z_i)^{3/2} T_{2z_i}^n + \left(3\dot{R}z_i + \frac{4D}{R} (1 + 3z_i)^{3/2} \right) T_{z_i}^n = T_{t_i}^n$$

$$(1.9b) \quad T_{z_0}^n = \frac{\lambda R}{K} \left(p_v(T_0) \dot{R} + \frac{R}{3} \frac{dp_v}{dT_0} T_{t_0} \right) \quad \left[\begin{array}{l} z_i = i h \\ i = 0, 1, \dots, N \end{array} \right]$$

$$(1.9c) \quad T_i^0 = T_\infty \quad T_N^n = T_\infty \quad \left[\begin{array}{l} t_m = m \Delta t \\ m = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right]$$

$$(1.9d) \quad \ddot{R} = \frac{1}{R} \left[-\frac{3}{2} \dot{R} + \frac{1}{f} \left(p_v(T_0) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_0)}{R} \right) \right]$$

$$(1.9e) \quad R_0 = \frac{2\sigma(T_\infty)}{p_v(T_\infty) - p_\infty} \quad \dot{R}_0 = V_0$$

dove h è il passo di integrazione spaziale, Δt quello temporale (abbiamo indicato per semplicità t invece di t'), e

$$T_j^n \equiv T(z_j, t_n) \quad T_{z_j}^n \equiv \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=z_j, t=t_n} \quad T_{zz_j}^n \equiv \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \Big|_{z=z_j, t=t_n} \quad T_{t_j}^n \equiv \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{z=z_j, t=t_n} \quad T_0 \equiv T_S$$

Per semplicità abbiamo anche ommesso gli indici di dipendenza temporale in R , \dot{R} , \ddot{R} .

L'integrazione numerica del problema 1.9 segue quella indicata per il caso generale nel cap. 3°. Seguendo le stesse notazioni di K , E , S , Z , la 3.2 del cap. 3° diventa:

$$(1.10) \quad T_{z_0} = K + E T_{zz_0} = CV + E T_{zz_0}$$

dove

$$C = \frac{L p_r R}{k} \left(\frac{1}{1 - \frac{4}{3} \frac{LD}{k} \frac{d p_r}{d T_0}} \right) \quad E = \frac{LD}{3k} \frac{d p_r}{d T_0} \left(\frac{1}{1 - \frac{4}{3} \frac{LD}{k} \frac{d p_r}{d T_0}} \right)$$

La 3.9' del cap. 3° in questo caso è quindi

$$(1.11) \quad T_{z_0} = \frac{S + \frac{6}{29} \frac{h}{E} CV}{1 + \frac{6}{29} \frac{h}{E}} + \mathcal{O}(h^4)$$

mentre la 3.10 diventa

$$(1.12) \quad T_{zz_0} = \frac{Z - \frac{6}{h} CV}{1 + \frac{6E}{h}} + \mathcal{O}(h^4)$$

L'equivalente della 3.15 del cap. 3° sarà

$$(1.13a) \quad T_{t_0} = \frac{D}{R^2} \left[\frac{Z - \frac{6}{h} CV}{1 + \frac{6E}{h}} + 4 \frac{S + \frac{6}{29} \frac{h}{E} CV}{1 + \frac{6}{29} \frac{h}{E}} \right]$$

che, raccogliendo i termini comuni a S e a Z , diventa

$$(1.13b) \quad T_{t_0} = \alpha \left[\beta T_0 + \gamma T_1 + \epsilon T_2 + \omega T_{z_1} + \left\{ T_{z_2} + \pi CV \right\} \right]$$

dove

$$\alpha = \frac{D}{R^2 \mu \eta} \quad \mu = \left(1 + \frac{6E}{h}\right) \quad \eta = \left(1 + \frac{6}{29} \frac{h}{E}\right)$$

$$\beta = -\frac{23}{2} \frac{\eta}{h^2} - \frac{192}{29} \frac{\mu}{h} \quad \gamma = \frac{8}{h^2} \eta + \frac{192}{29} \frac{\mu}{h}$$

$$\varepsilon = \frac{7}{2} \frac{\eta}{h^2} \quad \omega = -\frac{8}{h} \eta - \frac{80}{29} \mu$$

$$\xi = -\frac{\eta}{h} + \frac{4}{29} \mu \quad \pi = -\frac{6}{h} - \frac{36}{29E} + \frac{24h}{29E} + \frac{164}{29}$$

Tutti questi coefficienti dipendono da E, che è funzione di $\frac{d\rho_r}{dt_0}$, quindi del tempo. Tuttavia per semplificare i conti, dato che $\frac{d\rho_r}{dt_0}$ è in generale costante per Δt piccoli, supporremo E costante su un passo temporale. Gli unici coefficienti che dipenderanno dal tempo saranno perciò α e C, che dipendono dal raggio.

Seguendo la procedura indicata nel cap. 3^o, le 4.2 di quel capitolo si possono scrivere in questo caso

$$(1.14 a) \quad T_{t_0}^m = \alpha(R_n) [\beta T_0^m + \gamma T_1^m + \varepsilon T_2^m + \omega T_{21}^m + \xi T_{22}^m + \pi C(R_n) V_m]$$

$$(1.14 b) \quad \dot{R}_m = V_m$$

$$(1.14 c) \quad \dot{V}_m = \frac{1}{R_m} \left[-\frac{3}{2} V_m^2 - \frac{1}{f} (p_r(T_0^m) - p_{\infty} - \frac{2\sigma(T_0^m)}{R_m}) \right]$$

$$(1.14 d) \quad R_0 = \frac{2\sigma(T_0)}{p_r(T_0) - p_{\infty}} \quad V_0 = V_0$$

La formula di Heun applicata al sistema 1.14 dà, tenendo

presente che $\dot{\alpha}(R_n) = -2 \frac{V_n}{R_n} \alpha(R_n)$

e scrivendo $\alpha_n \equiv \alpha(R_n)$, $C_n \equiv C(R_n)$ $\dot{C}_n \equiv \frac{dC}{dt} \Big|_{t=t_n}$

$$\begin{aligned}
 (1.15a) \quad T_0^{n+1} = & T_0^n + \frac{\Delta t}{2} \alpha_n \left[\beta T_0^n + \gamma T_1^n + \varepsilon T_2^n + \omega T_{z_1}^n + \right. \\
 & + \zeta T_{z_2}^n + \pi C_n V_n + \beta \left(T_0^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_0}^n \right) + \\
 & + \gamma \left(T_1^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_1}^n \right) + \varepsilon \left(T_2^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_2}^n \right) + \\
 & + \omega \left(T_{z_1}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{z_{t_1}}^n \right) + \\
 & + \zeta \left(T_{z_2}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{z_{t_2}}^n \right) + \\
 & \left. + \pi \left(C_n V_n \left(1 - \frac{2V}{R} \right) + \Delta t \left(\dot{C}_n V_n + C_n \dot{V}_n \right) \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$(1.15b) \quad R_{n+1} = R_n + \frac{\Delta t}{2} \left(V_n + (V_n + \Delta t \dot{V}_n) \right)$$

$$\begin{aligned}
 (1.15c) \quad V_{n+1} = & V_n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ \frac{1}{R_n} \left[-\frac{3}{2} V_n^2 + \frac{1}{f} \left(p_r(T_0^n) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_0^n)}{R_n} \right) \right] + \right. \\
 & + \frac{1}{R_n + \Delta t \dot{R}_n} \left[-\frac{3}{2} (V_n + \Delta t \dot{V}_n)^2 + \frac{1}{f} \left(p_r(T_0^n + \Delta t T_{t_0}^n) - \right. \right. \\
 & \left. \left. - p_\infty - \frac{2\sigma(T_0^n + \Delta t T_{t_0}^n)}{R_n} \right) \right] \left. \right\}
 \end{aligned}$$

che è l'equivalente delle 4.4 del cap. 3°.

Supponiamo che al tempo $t = t_n$ siano noti la temperatura e il gradiente su tutto il dominio di integrazione, oltre al raggio e alla velocità. In particolare saranno noti

$$T_0^n, T_1^n, T_2^n, T_{z_1}^n, T_{z_2}^n, C_n, V_n, R_n$$

Le altre variabili presenti nelle 1.15 si possono ricavare come nel caso generale del cap. 3°

$T_{t_0}^m$ si può ricavare dalla 1.14a stessa al tempo t_n .

\dot{V}_m si può ricavare dalla 1.14c stessa al tempo t_n .

$\dot{C}_m = \frac{dC_m}{dt} \dot{R}_m = \frac{C V}{R}$ (nell'ipotesi fatta di sola dipendenza da R).

$T_{t_1}^m$ e $T_{t_2}^m$ si possono ricavare dall'equazione 1.3a (sempre tenendo presente la 1.4d) che, ad esempio per $T_{t_1}^m$ (ma il ragionamento è identico per $T_{t_2}^m$), si può così riscrivere:

$$(1.16) \quad T_{t_1}^m = \frac{D}{R^2} (1 + 3z_1)^{\frac{4}{3}} T_{z_1}^m + \left(\frac{3V_m z_1}{R_m} + \frac{4D}{R_m} (1 + 3z_1)^{\frac{1}{3}} \right) T_{z_1}^m$$

$T_{z_1}^m$ è già noto. $T_{z_2}^m$ si può ottenere risolvendo, come già visto per il caso generale, il sistema tridiagonale 4.7 del cap.3°. Per risolvere questo sistema sono tuttavia necessari i valori $T_{z_0}^m$ e $T_{z_N}^m$. $T_{z_N}^m$ si può, senza fare nessuna ipotesi restrittiva, porre a zero, dato che per la 1.3f la temperatura lontano dalla bolla resta costante. $T_{z_0}^m$ è noto dalla 1.12.

$T_{t_1}^m$ e $T_{t_2}^m$ possono essere calcolati con una formula di questo tipo:

$$(1.17) \quad T_{t_1}^m = \frac{T_{z_1}^m - T_{z_1}^{m-1}}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

Ricordiamo che è sufficiente un'approssimazione del 1° ordine perché nella formula di Heun $T_{t_1}^m$ è moltiplicato per $(\Delta t)^2$ e quindi l'errore totale resta di ordine $O(\Delta t^3)$, come appunto quello della formula di Heun.

La applicazione della procedura di integrazione temporale descritta dalle 1.15 ha però mostrato una precoce instabilità, costringendoci ad adoperare un metodo alternativo. La soluzione adottata è stata la trasformazione della integrazione esplicita in una forma parzialmente implicita.

2. Il metodo parzialmente implicito di integrazione temporale

Interrompiamo la trattazione del problema della bolla per descrivere in generale la formula parzialmente implicita di integrazione temporale del 2° ordine che useremo in seguito.

Supponiamo di avere un'equazione differenziale del tipo

$$(2.1) \quad \frac{dy}{dt} = f(y(t), z_1(t), \dots, z_i(t)) + g(u_1(t), \dots, u_j(t))$$

Dimostriamo che si può scrivere

$$(2.2) \quad Y^{n+1} = Y^n + \Delta t \left[\frac{f(Y^{n+1}, z_1^{n+1}, \dots, z_i^{n+1}) + f(Y^n, z_1^n, \dots, z_i^n)}{2} + g\left(u_1^n + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_1^n, \dots, u_j^n + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_j^n\right) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

Infatti, sviluppando il secondo membro in serie di Taylor

intorno al tempo t_n , otteniamo

$$(2.3) \quad Y^{n+1} = Y^n + \Delta t \left[\frac{f(Y^n + \Delta t \dot{Y}^n, z_1^n + \Delta t \dot{z}_1^n, \dots, z_i^n + \Delta t \dot{z}_i^n) + f(Y^n, z_1^n, \dots, z_i^n)}{2} + g(u_1^n, \dots, u_j^n) + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_1^n \frac{\partial g}{\partial u_1^n} + \dots + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_j^n \frac{\partial g}{\partial u_j^n} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

da cui

$$(2.4) \quad y^{n+1} = y^n + \Delta t \left[\frac{f(y^n, z_1^n, \dots, z_i^n) + \Delta t \dot{y}^n \frac{\partial f}{\partial y^n} + \Delta t \dot{z}_1^n \frac{\partial f}{\partial z_1^n} + \dots + \Delta t \dot{z}_i^n \frac{\partial f}{\partial z_i^n} + f(y^n, z_1^n, \dots, z_i^n)}{2} + \frac{g(u_1^n, \dots, u_j^n) + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_1^n \frac{\partial g}{\partial u_1^n} + \dots + \frac{\Delta t}{2} \dot{u}_j^n \frac{\partial g}{\partial u_j^n}}{2} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

Ma

$$(2.5) \quad y^{n+1} = y^n + \Delta t \dot{y}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{y}^n + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

Dalla 2.1 deriva che

$$(2.6) \quad \ddot{y}^n = \dot{y}^n \frac{\partial f}{\partial y^n} + \dot{z}_1^n \frac{\partial f}{\partial z_1^n} + \dots + \dot{z}_i^n \frac{\partial f}{\partial z_i^n} + \dot{u}_1^n \frac{\partial g}{\partial u_1^n} + \dots + \dot{u}_j^n \frac{\partial g}{\partial u_j^n}$$

e quindi sostituendo la 2.6 nella 2.5 otteniamo

$$(2.7) \quad y^{n+1} = y^n + \Delta t \left(f(y^n, z_1^n, \dots, z_i^n) \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left[\dot{y}^n \frac{\partial f}{\partial y^n} + \dot{z}_1^n \frac{\partial f}{\partial z_1^n} + \dots + \dot{z}_i^n \frac{\partial f}{\partial z_i^n} + \dot{u}_1^n \frac{\partial g}{\partial u_1^n} + \dots + \dot{u}_j^n \frac{\partial g}{\partial u_j^n} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

che, come si vede immediatamente, coincide con la 2.4.

La formula 2.2 è implicita (o "chiusa") rispetto alla $y(t)$ e alle $z(t)$, mentre è esplicita rispetto alle $g(t)$.

Poiché abbiamo supposto nel par. 1 che i coefficienti della 1.13b non dipendono dal tempo, eccetto α e C , possiamo scrivere la formula 2.2 in questo modo:

$$\begin{aligned}
 (2.8) \quad T_0^{n+1} = & T_0^n + \Delta t \left[\beta \frac{\alpha_{n+1} T_0^{n+1} + \alpha_n T_0^n}{2} + \right. \\
 & + \gamma \frac{\alpha_{n+1} T_1^{n+1} + \alpha_n T_1^n}{2} + \varepsilon \frac{\alpha_{n+1} T_2^{n+1} + \alpha_n T_2^n}{2} + \\
 & + \alpha_n \left(w \left(T_{z_1}^n \left(1 - 2 \frac{V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_{z_1}}^n \right) + \right. \\
 & + \left. \left\{ \left(T_{z_2}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_{z_2}}^n \right) + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \pi \left(C_n V_n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t (C_n \dot{V}_n + \dot{C}_n V_n) \right) \right\} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

Esplicitando T_0^{n+1} otteniamo

$$\begin{aligned}
 (2.9) \quad T_0^{n+1} = & \frac{1}{1 - \alpha_{n+1} \beta \frac{\Delta t}{2}} \left[T_0^n \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \alpha_n \beta \right) + \frac{\Delta t}{2} \left[\gamma (\alpha_{n+1} T_1^{n+1} + \alpha_n T_1^n) + \right. \right. \\
 & + \varepsilon (\alpha_{n+1} T_2^{n+1} + \alpha_n T_2^n) \left. \right] + \Delta t \alpha_n \left[w \left(T_{z_1}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \right. \right. \\
 & + \left. \Delta t T_{t_{z_1}}^n \right) + \left\{ \left(T_{z_2}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t T_{t_{z_2}}^n \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \pi \left(C_n V_n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \Delta t (C_n \dot{V}_n + \dot{C}_n V_n) \right) \right\} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

Come si può notare, la 2.9 non fornisce una espressione

di T_0^{n+1} perché al secondo membro compaiono anche

T_1^{n+1} e T_2^{n+1} che non sono noti (dato che per determinarli è necessaria la conoscenza di T_0^{n+1} per risolvere l'equazione 1.9a col metodo OCI-CN).

Avremmo potuto applicare la 2.2 in modo diverso considerando solamente T_0 implicito. In questo modo, data la linearità

della 1.14a avremmo potuto esplicitare T_0^{n+1} e ottenere lo scopo desiderato.

Per eliminare però completamente l'instabilità è sempre preferibile rendere implicito tutto ciò che è possibile per cui la 2.9 è sicuramente preferibile. Il problema del calcolo di T_1^{n+1} e T_2^{n+1} viene brillantemente risolto notando che la prima delle equazioni 3.15 del cap. 2°, che servono a risolvere l'equazione parabolica, è una relazione tra T_0^{n+1} , T_1^{n+1} e T_2^{n+1} così fatta:

$$(2.10) \quad (q_1^0 - \lambda z_1^0) T_1^{n+1} + (q_1^+ - \lambda z_1^+) T_2^{n+1} = q_1^- G_0^n + q_1^0 G_1^n + q_1^+ G_2^n - (q_1^- - \lambda z_1^-) T_0^{n+1}$$

Possiamo eliminare dalle 2.9 e 2.10 il valore T_0^{n+1}

ottenendo (omettendo sempre la dipendenza temporale di q e r):

$$(2.11) \quad T_1^{n+1} \left(p^0 + p^- \alpha_{n+1} \gamma \nu \frac{\Delta t}{2} \right) + T_2^{n+1} \left(p^+ + p^- \alpha_{n+1} \epsilon \nu \frac{\Delta t}{2} \right) =$$

$$= q_1^- G_0^n + q_1^0 G_1^n + q_1^+ G_2^n - p^- \nu \left[T_0^n \left(1 + \alpha_n \beta \frac{\Delta t}{2} \right) + \right.$$

$$+ \Delta t \alpha_n \left(\frac{\gamma}{2} T_1^n + \frac{\epsilon}{2} T_2^n + \omega \left(T_{z_1}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \frac{\Delta t}{2} T_{z_1}^n \right) + \right.$$

$$\left. \left. + \left(T_{z_2}^n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \frac{\Delta t}{2} T_{z_2}^n \right) + \pi \left(C_n V_n \left(1 - \frac{2V_n}{R_n} \right) + \frac{\Delta t}{2} (C_n V_n + C_n \dot{V}_n) \right) \right] \right]$$

dove $\nu \equiv 1 / 1 - \alpha_n \beta \frac{\Delta t}{2}$

$$p^0 \equiv (q_1^0 - \lambda z_1^0) \quad p^+ \equiv (q_1^+ - \lambda z_1^+) \quad p^- \equiv (q_1^- - \lambda z_1^-)$$

La 2.11 accoppiata alle 3.15 del cap. 2°, scritte per j che varia da 2 a $N-1$, forma un sistema tridiagonale di incognite T_i^{n+1} con $i = 1, N-1$. Risolto il sistema si

può anche calcolare T_0 dalla 2.9.

Con questo metodo abbiamo aggirato l'ostacolo della determinazione previa di T_0^{n+1} per poter risolvere l'equazione parabolica col metodo OCI-CN, ottenendo fra l'altro un legame più stretto fra l'integrazione temporale e il metodo OCI-CN stesso. Il vantaggio rispetto alla formulazione esplicita, con la formula di Heun, è anche un risparmio del calcolo delle derivate seconde su tutto il dominio di integrazione. Dato che la maggior parte del tempo di computazione è dovuta alla soluzione dei sistemi tridimensionali, l'aver ridotto da tre (soluzione, gradiente e derivate seconde) a due (soluzione e gradiente) questi sistemi comporta una riduzione del tempo di circa il 30%.

I valori $T_{zt_1}^m, T_{zt_2}^m, \dot{V}_m, \dot{C}_m$ presenti nel secondo membro della 2.11 si calcolano come descritto nel par. 1, dove facciamo notare che al tempo $t=0$, $T_{zt_1}^0$ e $T_{zt_2}^0$ sono entrambi nulli, perché la temperatura è costante dappertutto (cfr 4.5 del cap. 2°), per la 1.9c.

Per quanto riguarda l'integrazione delle 1.14b e 1.14c applichiamo ancora la formula di Heun, per cui la soluzione del problema 1.9 è data in definitiva dal sistema formato dalle 1.15b, 1.15c, 2.11, e dalle 3.15 del cap. 2° (per j che varia da 2 a $N-1$).

CAPITOLO 7°

Studio numerico della crescita e del collasso di una bolla
di vapore nel sodio. Il programma di calcolo per il problema
della bolla

1. La crescita di una bolla di vapore nel sodio
surriscaldato

Le equazioni 4.1 del cap. 1°, che regolano la dinamica di una bolla di vapore in un liquido, possono essere risolte partendo da condizioni iniziali che determinino un aumento del raggio della bolla. Nell'applicazione numerica che segue ci siamo riferiti al sodio, data la sua importanza come liquido refrigerante nei reattori nucleari veloci, e potendo confrontare i nostri risultati con quelli ottenuti precedentemente da altri autori con metodi meno raffinati.

Se imponiamo alla bolla queste condizioni iniziali, raggio di equilibrio (come definito in 4.1e del cap. 1°), velocità iniziale nulla, temperatura del sodio superiore a quella di ebollizione corrispondente alla pressione del sodio stesso, il sistema rimane in equilibrio, anche se instabile.

Per far evolvere la bolla è necessaria una perturbazione.

che numericamente può essere espressa da una velocità iniziale non nulla oppure da un raggio lievemente maggiore di quello di equilibrio (il che corrisponde a un'accelerazione diversa da zero). Nei nostri calcoli abbiamo optato per la seconda soluzione, partendo sempre da un raggio maggiore dell'1% di quello d'equilibrio.

Come già accennavamo nel cap. 1°, le condizioni iniziali non rivestono una importanza determinante ai fini della dinamica successiva della bolla. Il confronto tra i nostri e i calcoli di precedenti autori [9], mostra infatti un pieno accordo eccetto che nella fase iniziale, dove le diverse condizioni iniziali hanno un'effettiva influenza.

Una volta perturbata, la bolla comincia a crescere. La velocità di crescita, inizialmente limitata dalla tensione superficiale, aumenta fino a quando le dimensioni del raggio fanno perdere importanza alla tensione superficiale stessa. Segue una fase a velocità costante, in cui la crescita è dominata dall'inerzia del liquido. Questa fase è però presente solamente se il surriscaldamento è elevato (vedi in fig. 1, la bolla n. 7, per cui il surriscaldamento è 4.66 °K e, al confronto, la bolla n. 4, per cui il surriscaldamento è 22.1 °K). Dopo una fase intermedia, in cui sia l'inerzia del liquido che gli effetti termici

influenzano la crescita, si raggiunge un regime asintotico dominato dal trasporto di energia alla superficie della bolla, in cui la velocità diminuisce approssimativamente proporzionalmente a $(Dt)^{-\frac{1}{2}}$. Bisogna notare che questa fase asintotica non viene raggiunta nel caso di surriscaldamento molto elevato; ciò è dovuto al fatto che nel tempo necessario per raggiungere questa fase, il raggio è cresciuto a tal punto da perdere significato pratico.

Per ulteriori considerazioni generali sull'andamento delle velocità nei vari tipi di bolle di vapore (comprese quelle di cavitazione di cui accennavamo nel cap. 1°) rimandiamo a [3] e [7].

Procediamo ora a un commento dei risultati numerici qui di seguito illustrati in tab. 2 e nelle figg. 1,2,3,4. Il riferimento "bolla n.4" e "bolla n.7" è relativo alla numerazione presente in [3].

Esaminiamo i diversi grafici allegati; i cerchietti, con la curvatura li congiunge, sono i risultati del nostro programma di calcolo. Le crocette sono i risultati degli autori di [9]; questi dati sono stati ricavati da copie dei grafici originali di questi autori, per cui è possibile che vi siano deviazioni rispetto ai valori originali.

Sofferamoci sulla fig. 1, relativa alle velocità.

Per la bolla n.4, quella con un maggiore surriscaldamento, l'accordo tra i valori nostri e quelli degli autori di [9] è ottimo a partire da $t = 2 \cdot 10^{-5}$ sec.; prima di questo istante, a causa delle diverse condizioni iniziali imposte al problema i valori si discostano molto l'uno dall'altro. Non sono indicati in figura perché non significativi.

Per la bolla n.7, quella con un surriscaldamento molto piccolo, l'accordo è meno soddisfacente. Il motivo è da ricercarsi nella differenza tra la temperatura iniziale assegnata nei nostri calcoli e quella degli autori di [9].

Come si può osservare dalla fig. 4, il valore di T_{∞} degli autori di [9] si discosta dal nostro di quasi 0.3 °K. E' chiaro che essendoci un maggiore surriscaldamento anche la velocità sarà maggiore, come infatti risulta dalla fig. 1.

Questa differenza iniziale di temperatura è dovuta agli arrotondamenti numerici effettuati per ottenere un raggio di equilibrio iniziale di 10^{-3} cm. Per un caso come questo, dove il surriscaldamento è piccolo, bastano frazioni di grado per alterare l'andamento della bolla. Dalla fig. 2 che riguarda i raggi delle bolle, si verifica quanto detto per la bolla n.7. Contrariamente a quanto accade per la bolla n.4, piccole differenze nelle condizioni iniziali hanno una influenza relativamente grande nella bolla n.7.

Per quanto riguarda i dati sul numero di passi temporali di integrazione effettuati e sul tempo impiegato nel calcolo, dobbiamo premettere alcune considerazioni.

L'integrazione temporale è stata effettuata con un passo variabile e la condizione per il raddoppio del passo era, per entrambe le bolle, regolata dai valori DIFPER e VRDT nel programma. DIFPER è la differenza fra il valore attuale di temperatura superficiale e quello precedente, diviso per il valore attuale. VRDT è il rapporto tra velocità e raggio allo stesso istante, moltiplicato per il passo temporale. Quando entrambi questi valori, in modulo, erano minori di 10^{-3} , il passo temporale veniva raddoppiato. Il valore 10^{-3} è stato deciso su base empirica, avendo verificato che valori più piccoli allungavano di molto il tempo di esecuzione (perché il passo temporale non raddoppiava molte volte) e che valori più grandi causavano grosse deviazioni dai risultati previsti. Partendo con un passo temporale di 10^{-7} sec. la bolla n.4 è arrivata a 10^{-2} sec effettuando 3862 passi e raggiungendo un passo temporale finale di $.256 \cdot 10^{-4}$ sec. Il tempo impiegato per questa esecuzione è stato 170 sec. di CPU, cioè circa 23 passi al secondo. Considerato che il numero di nodi spaziali era 101, si può dedurre un tempo di calcolo per nodo e per passo di circa

$4.4 \cdot 10^{-4}$ sec.

La bolla n.7 è invece arrivata a 10^{-2} sec. effettuando 2725 passi temporali, partendo con un passo di 10^{-7} sec, e finendo con $.256 \cdot 10^{-4}$ sec.; il tutto in 120 secondi di CPU. Poiché anche in questo caso erano 101 i nodi spaziali, risulta un tempo di calcolo per nodo spaziale e passo temporale di circa $4.4 \cdot 10^{-4}$ sec, che concorda perfettamente col valore della della bolla n.4.

Una menzione speciale merita la questione del dimensionamento del dominio di integrazione e del passo spaziale. Come abbiamo già detto nel cap. 6°, la trasformazione di variabile effettuata per adattare il problema 1.1 alla soluzione numerica, ha la particolarità di far ampliare il campo di integrazione all'aumentare del raggio, nella variabile originaria r , pur tenendo z fissa. E' necessario quindi dimensionare z in modo che il suo massimo valore sia, come visto nel par.1 del cap. 6°, maggiore del $\sqrt{\Delta t}/R$ caratteristico della bolla in questione. Da [3] riportiamo i valori di $\sqrt{\Delta t}/R$: per la bolla 4, $\sqrt{\Delta t}/R = 5.54 \cdot 10^{-2}$ per la bolla 7, $\sqrt{\Delta t}/R = 1.36$. Facciamo notare come per la bolla n. 7 il rapporto $\sqrt{\Delta t}/R$ sia maggiore di 1, cioè lo strato in cui gli effetti termici sono rilevanti cresce più rapidamente del raggio. In questo caso la trasformatio-

ne da noi proposta risulta particolarmente utile.

Per fissare l'estremo superiore di integrazione non è sufficiente limitarsi alle considerazioni appena fatte. Poiché è essenziale limitare il numero di nodi spaziali per non appesantire troppo il tempo di calcolo, va stabilito anche un opportuno passo di integrazione spaziale Δz .

Dalla relazione $z = \frac{1}{3} \left(\frac{z^3}{R^3} - 1 \right)$ deduciamo che

$$\Delta z = \frac{z^2}{R^3} \Delta z \quad \text{da cui, per } z \simeq R, \text{ risulta}$$

$$\Delta z = \frac{\Delta z}{R}. \text{ Ovviamente dovremo scegliere un } \Delta z \text{ tale che}$$

$$\Delta z \text{ sia minore dello strato "termico" } \sqrt{\Delta t}, \text{ in modo}$$

che sia possibile calcolare il gradiente di temperatura, che è apprezzabilmente diverso da zero solamente nello strato "termico", con sufficiente accuratezza. Se $\Delta z \leq \frac{\sqrt{\Delta t}}{10}$ questa condizione è soddisfatta.

Consideriamo i casi concreti delle bolle n.4 e 7. Per la

n. 4, abbiamo visto che $\frac{\sqrt{\Delta t}}{R} = 5.54 \cdot 10^{-2}$, quindi il massimo

valore di z dovrà essere $> \sqrt{\Delta t}/R$. Volendo limitarci

a 101 nodi spaziali, risulta che $\Delta z = \frac{z_{max}}{100}$. Se poniamo

$\Delta z = 2 \cdot 10^{-2}$ tutte le condizioni previste sono soddisfatte.

Il massimo valore di z è 0.2, cioè 3.6 volte più grande

di $\sqrt{\Delta t}/R$ il che significa, per la 1.8 del cap. 6°, che

il valore massimo di r è lontano dalla bolla 3.6 volte lo

spessore dello strato "termico" $\sqrt{\Delta t}$.

Δz è quindi circa 28 volte più piccolo di \sqrt{DE}/R , il che vuol dire (dato che $\Delta z = \frac{\Delta z}{R}$) che Δz è 28 volte più piccolo di \sqrt{DE} , come desiderato.

Per la bolla n.7 $\sqrt{DE}/R = 1.36$. Quindi, ponendo $\Delta z = 0.1$ e sempre 101 nodi spaziali, risulta che il valore massimo di r è lontano dalla bolla 7.35 volte lo spessore dello strato \sqrt{DE} , e Δz è 13.6 volte più piccolo dello strato \sqrt{DE} .

BOLLA n° 4			BOLLA n° 7			
TEMPERATURA	VELOCITÀ	RAGGIO	TEMPERATURA	VELOCITÀ	RAGGIO	τ
1176.7	0.307	$0.995 \cdot 10^{-3}$	1394.86	0.254	$0.102 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-7}$
1176.7	0.611	0.995	1394.86	0.502	0.102	2.
1176.7	$0.155 \cdot 10^1$	0.996	1394.86	$0.122 \cdot 10^1$	0.102	5.
1176.7	0.324	0.997	1394.85	0.234	0.102	$1 \cdot 10^{-6}$
1176.7	0.759	$0.100 \cdot 10^{-2}$	1394.83	0.434	0.103	2.
1176.68	$0.457 \cdot 10^2$	0.107	1394.76	$0.115 \cdot 10^2$	0.105	5.
1176.57	$0.281 \cdot 10^3$	0.184	1394.44	0.412	0.117	$1 \cdot 10^{-5}$
1176.00	0.404	0.553	1392.99	$0.118 \cdot 10^3$	0.203	2.
1174.18	0.416	$0.180 \cdot 10^{-1}$	1391.27	$0.975 \cdot 10^2$	0.544	5.
1172.05	0.403	0.385	1390.80	0.661	0.940	$1 \cdot 10^{-4}$
1169.51	0.380	0.777	1390.59	0.452	$0.148 \cdot 10^{-1}$	2.
1165.63	0.336	0.185	1390.44	0.277	0.251	5.
1162.49	0.294	0.341	1390.38	0.194	0.366	$1 \cdot 10^{-3}$
1159.48	0.245	0.609	1390.34	0.137	0.527	2.
1156.32	0.174	$0.122 \cdot 10^1$	1390.30	$0.868 \cdot 10^1$	0.845	5.
1155.02	0.123	0.194	1390.29	0.616	0.120	$1 \cdot 10^{-2}$
$T_{\infty} = 1176.7$ ($^{\circ}\text{K}$) $p_{\infty} = 1$ (atm) $R_0 = 10^{-3}$ (cm) $T_b = 1154.6$ ($^{\circ}\text{K}$)			$T_{\infty} = 1394.86$ ($^{\circ}\text{K}$) $p_{\infty} = 6$ (atm) $R_0 = 10^{-3}$ (cm) $T_b = 1390.2$ ($^{\circ}\text{K}$)			

T_{∞} = temperatura iniziale del sodio e temperatura lontano dalla bolla

p_{∞} = pressione del sodio

T_b = temperatura di ebollizione del sodio a pressione p_{∞}

R_0 = raggio iniziale della bolla

fig. 1

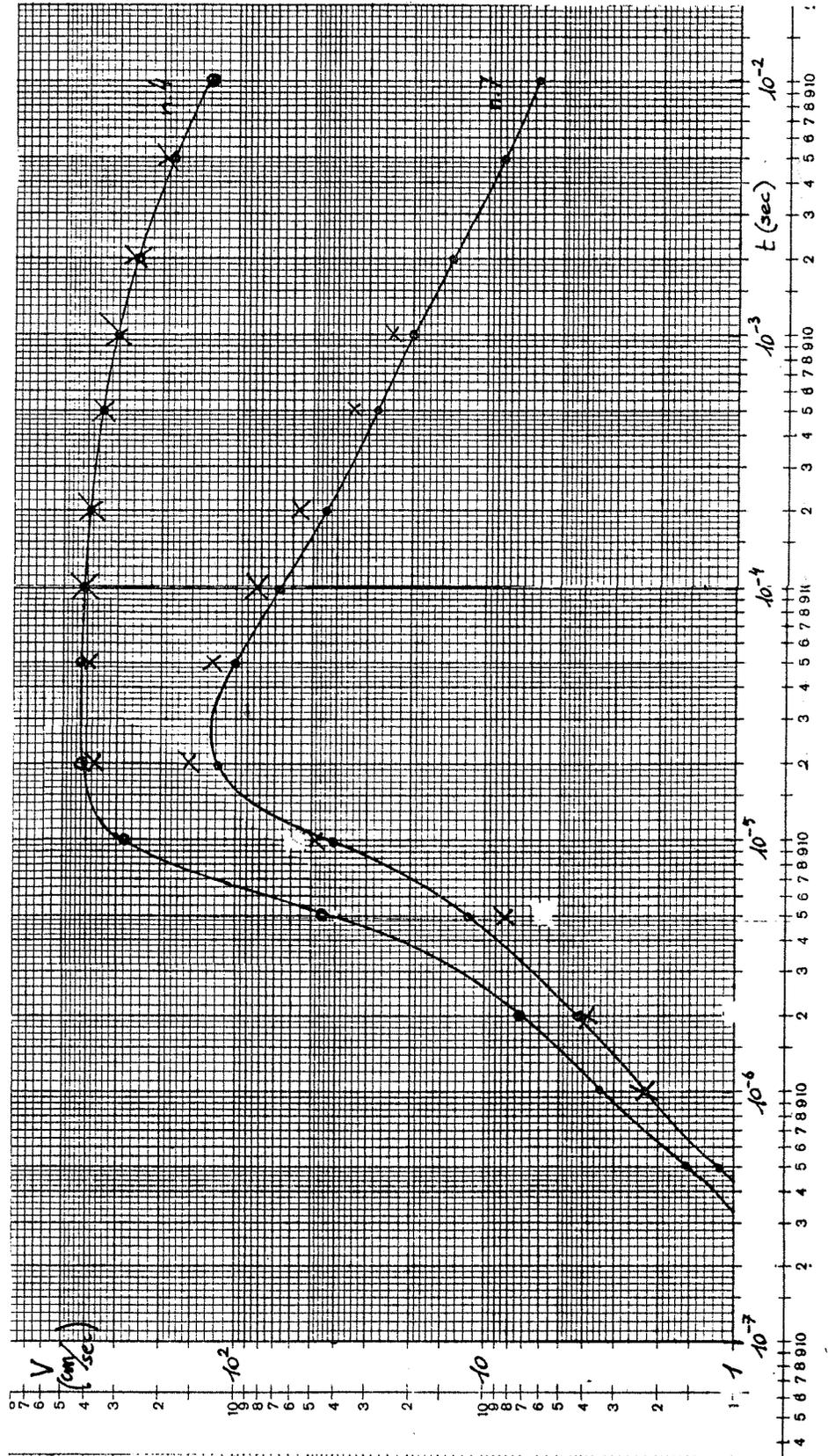


fig. 2

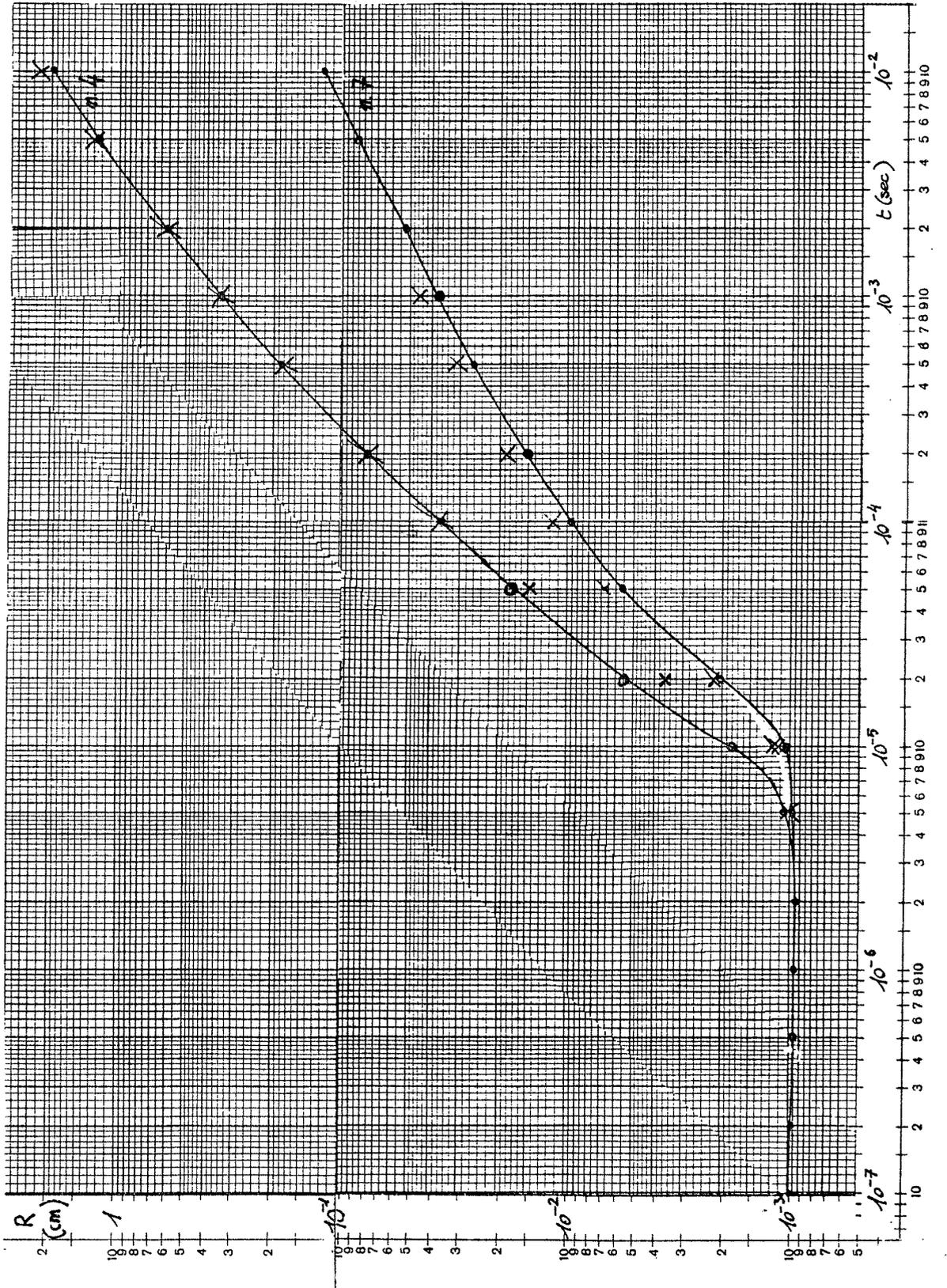


fig. 3

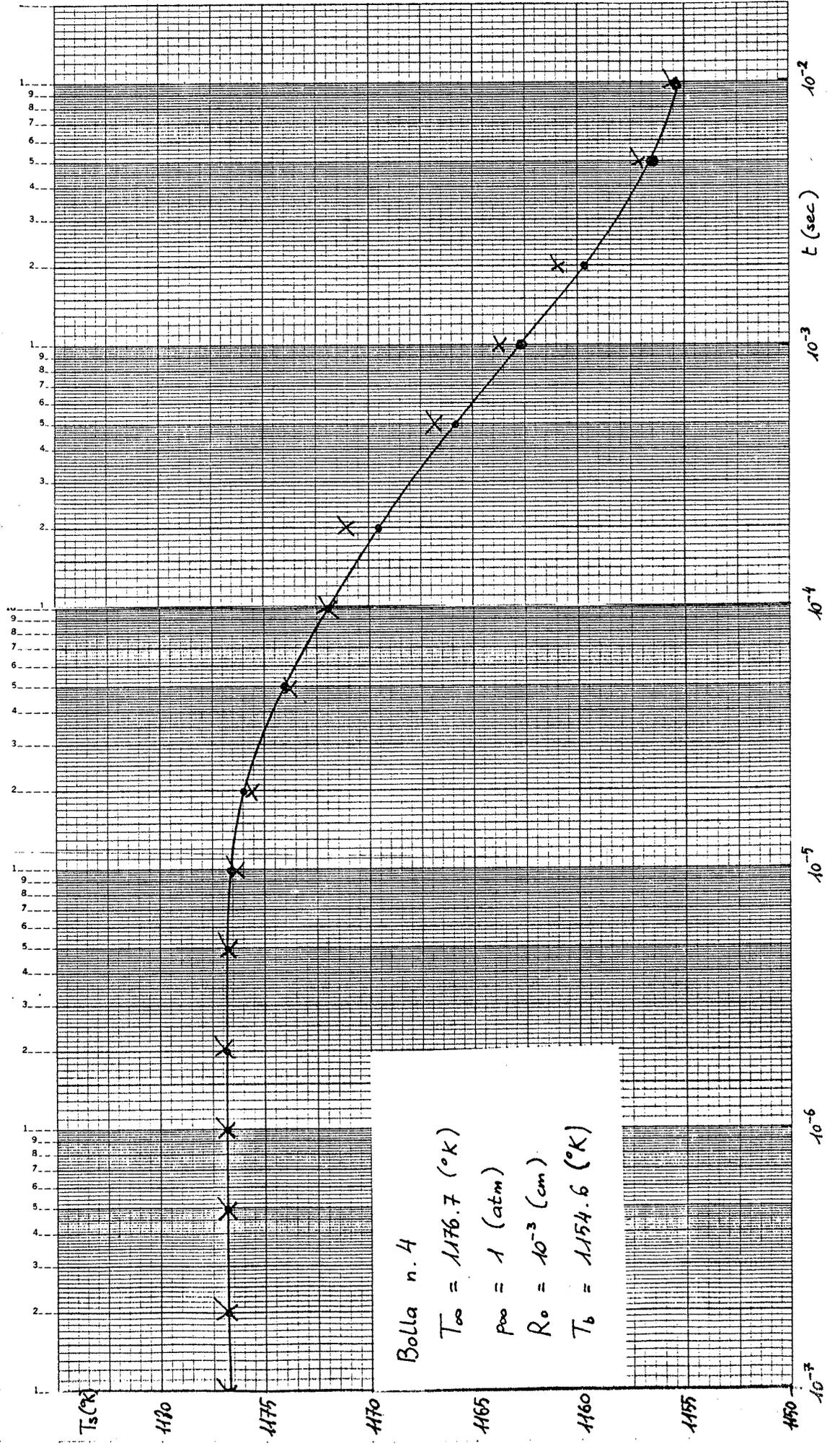
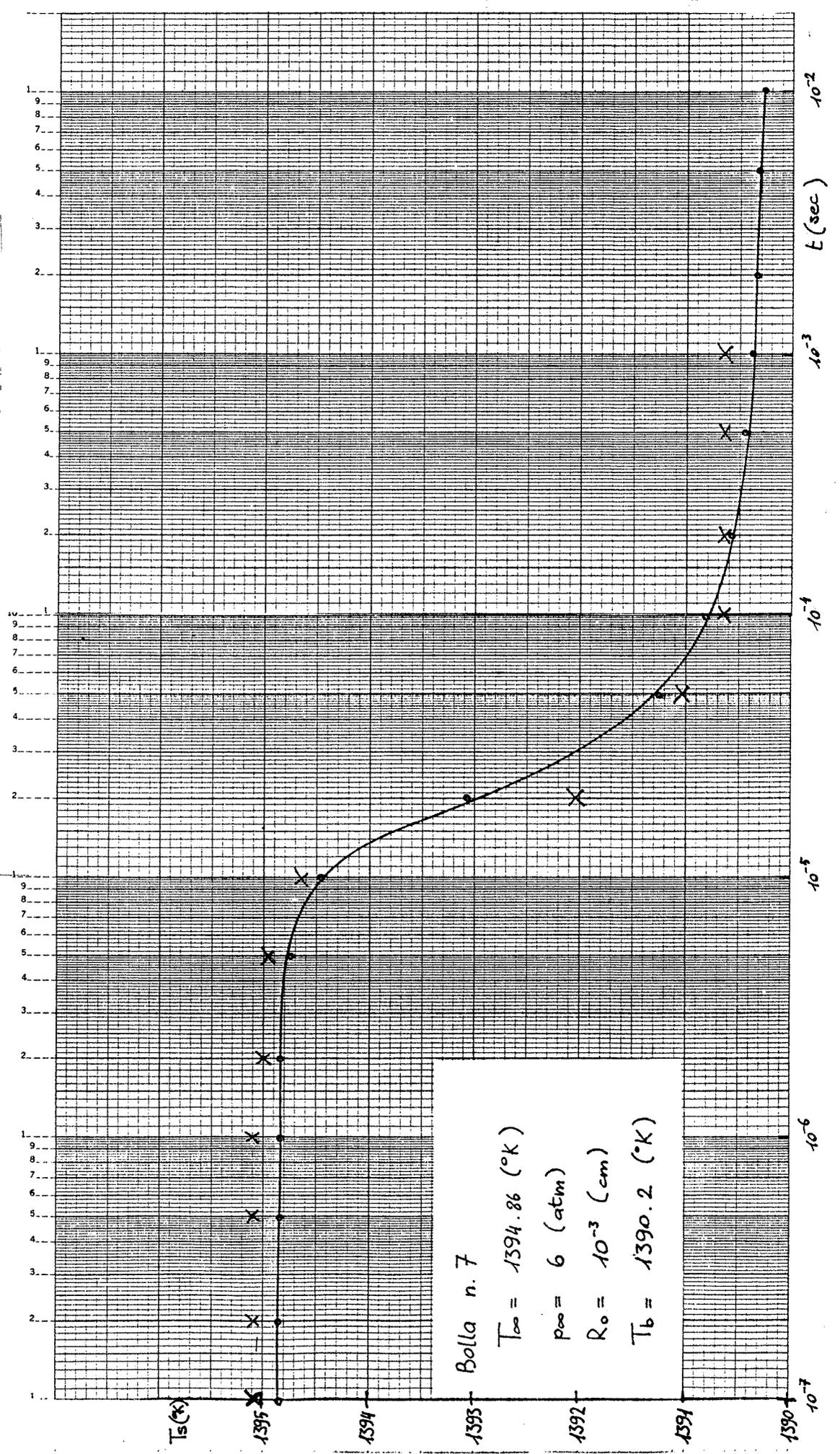


fig.4



2. Il collasso di una bolla di vapore nel sodio

Le equazioni 4.1 del cap. 1°, che regolano la dinamica di una bolla di vapore in un liquido, possono essere risolte con il programma di calcolo da noi realizzato anche per studiare il caso del collasso.

Le condizioni iniziali affinché ci sia il collasso sono: raggio della bolla, velocità di collasso (che porremo però sempre inizialmente nulla), temperatura del liquido e pressione del liquido. Ovviamente la temperatura del liquido dovrà essere più bassa del punto di ebollizione corrispondente alla pressione del liquido stesso. In altre parole si tratta di liquido non bollente.

Per un qualsiasi raggio iniziale il sistema non è mai in equilibrio, perché la pressione del liquido è maggiore della pressione di vapore (calcolata alla temperatura superficiale della bolla, inferiore al punto di ebollizione) e la bolla tende a comprimersi.

Riportiamo l'equazione dinamica 2.11 del cap. 1°

$$(2.1) \quad \dot{V} = \frac{1}{R} \left(-\frac{3}{2} V^2 + \frac{1}{\rho} \left(p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R} \right) \right)$$

e facciamo alcune considerazioni sull'andamento della velocità in fase di collasso.

Per una velocità iniziale nulla e, come abbiamo visto,

$p_\infty > p_v(T_s)$, risulta $\dot{V} < 0$, cioè la velocità diminui-

sce, essendo negativa, e V^2 aumenta, contribuendo a rendere sempre più grande in modulo il valore di V negativo. Contemporaneamente però, dall'equazione dell'energia 3.12 del cap. 1° si ricava che la T_s aumenta (come d'altronde si intuisce) al diminuire del raggio della bolla, a causa della condensazione del vapore. Di conseguenza $p_v(T_s)$ aumenta. A questo punto si danno due possibilità. O l'aumento di T_s è sufficiente a portare il termine $p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R}$ a valori positivi prima che la velocità sia troppo grande, e quindi a dominare la 5.1, rendendo $\dot{V} > 0$, oppure, se la bolla collassa molto rapidamente, accade che \dot{V} resta sempre negativo.

Sperimentalmente è stato osservato da altri autori (cfr "vapor bubble collapse" in [7]) che in acqua si è verificata la prima possibilità, a tal punto che la velocità ha addirittura raggiunto valori positivi, facendo, per breve tempo, crescere la bolla. Effettivamente la crescita dura poco tempo perché la temperatura superficiale, diminuendo, porta nuovamente a valori negativi il termine $p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R}$. Segue una fase ulteriore di collasso che può essere seguita da un'altra momentanea oscillazione del raggio, fino a che, per valori molto piccoli del raggio la bolla perde la sua simmetria sferica.

Esaminiamo ora i risultati della nostra elaborazione per il collasso di una bolla nel sodio. Le condizioni iniziali che abbiamo imposto nei tre casi A, B e C sono $T_w = 1345.9$ (corrispondente a una pressione di 4.5 atm., per l'ebollizione)

raggio iniziale = 10^{-2} cm.

passo iniziale di integrazione temporale = 10^{-6} sec.

passo spaziale di integrazione = 10^{-1} (sempre secondo la trasformazione 1.2 del cap. 6°)

numero di nodi spaziali = 101, cioè l'estremo superiore di integrazione è 10

parametro di variazione del passo temporale = 10^{-2} (dove il passo viene dimezzato quando $\frac{V}{R} \Delta t > 10^{-2}$)

Tutti e tre i casi sono stati fermati quando la bolla ha raggiunto un raggio di 10^{-3} cm (cioè 1/10 di quello iniziale).

Per la bolla A $p_\infty = 5$ atm, per la B $p_\infty = 4.75$ atm, per la C $p_\infty = 4.6$ atm. Come si può notare dalla tab. 3 e

dalla fig. 5, nelle bolle A e B la velocità aumenta in modulo dapprima lentamente e poi molto rapidamente, perché il valore $p_v(T_s) - p_\infty - \frac{2\sigma(T_s)}{R}$ diventa positivo quando ormai la velocità è troppo elevata, per cui il termine dominante

nella 2.1 è $-\frac{3}{2} V^2$.

Nel caso C invece, poiché $p_v(T_s) - p_\infty = 0.1 \text{ atm}$, la temperatura superficiale fa in tempo a salire sufficientemente per far aumentare $p_v(T_s)$ a valori superiori a $p_\infty + \frac{2\sigma}{R}$ per cui c'è una fase, dopo circa $2 \cdot 10^{-5}$ sec., in cui la velocità diminuisce in modulo, cioè la bolla rallenta. Questa fase dura solamente $22 \cdot 10^{-5}$ sec, perché, data la diminuzione di T_s , la velocità torna ad essere negativa e il collasso assume un andamento simile a quello delle bolle A e B.

Per quanto riguarda il tempo che ogni bolla impiega per raggiungere un raggio che è $1/10$ del suo valore iniziale, si verifica che esso è tanto minore quanto più grande è il divario di pressione tra liquido e vapore. La bolla A ha richiesto 330 passi temporali per arrivare al valore finale del raggio, e il passo di integrazione temporale si è dimezzato più volte fino a raggiungere $.4883 \cdot 10^{-9}$ sec. La bolla B ha anch'essa richiesto 330 passi con un passo finale di $.9766 \cdot 10^{-9}$ sec. La bolla C ha invece richiesto 367 passi temporali con un passo finale di $.7812 \cdot 10^{-8}$ sec.

La mancata osservazione delle oscillazioni del raggio della bolla può essere dovuta al fatto che il sodio, rispetto all'acqua, ha un coefficiente di diffusività ele-

vato che porta a un rapido trasferimento dell'aumento di temperatura dalla superficie a tutto il liquido. Sarà interessante studiare nell'immediato futuro il collasso di bolle di vapore in acqua, per confrontare i risultati con quelli sperimentali.

BOLLA A

BOLLA B

$p_{\infty} = 5 \text{ atm. } T_b = 1360.8 \text{ }^{\circ}\text{K}$				$p_{\infty} = 4.75 \text{ atm. } T_b = 1352.1 \text{ }^{\circ}\text{K}$			
t	ΔT_s	R	V	t	ΔT_s	R	V
$1 \cdot 10^6$.28	$.996 \cdot 10^{-2}$	$-.77 \cdot 10^2$	$1.1 \cdot 10^6$.15	$.998 \cdot 10^{-2}$	$-.40 \cdot 10^2$
2.	.86	.98.	$-.15 \cdot 10^3$	2.	.44	.99.	-.78.
3.	1.84	.97.	-.23.	3.	.88	.98.	$-.12 \cdot 10^3$
4.	2.99	.94.	-.31.	4.	1.49	.97.	-.15.
5.	4.34	.90.	-.40.	5.	2.09	.95.	-.19.
6.	5.93	.86.	-.49.	6.	2.80	.93.	-.23.
7.	7.85	.80.	-.60.	7.	3.56	.91.	-.27.
8.	10.26	.74.	-.73.	8.	4.39	.88.	-.31.
9.	13.37	.66.	-.91.	9.	5.29	.84.	-.35.
$1 \cdot 10^5$	17.88	.55.	$-.12 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^5$	6.31	.81.	-.39.
1.05.	21.17	.49.	-.14.	12.	8.62	.72.	-.48.
1.10.	26.06	.41.	-.18	14.	11.56	.61.	-.59.
1.15.	35.44	.30.	-.28	1.6.	15.67	.48.	-.77.
1.17.	43.58	.23.	-.40	17.	18.78	.39.	-.94.
1.18.	52.30	.18.	-.57	18.	24.00	.29.	$-.13 \cdot 10^4$
1.19.	78.10	.10.	$-.14 \cdot 10^5$	1.85.	29.68	.21.	-.19
				1.88	45.10	.1	-.52
$T_{\infty} = 1345.9 \text{ }^{\circ}\text{K}$				$p_v(T_{\infty}) = 4.5 \text{ atm}$		$R_0 = 10^{-2} \text{ cm}$	

p_{∞} = pressione del sodio

T_b = temperatura di ebollizione corrispondente a p_{∞}

T_{∞} = temperatura iniziale del sodio e lontano dalla bolla

$p_v(T_{\infty})$ = pressione di vapore corrispondente a T_{∞}

$\Delta T_s = T_s - T_{\infty}$, cioè aumento di temperatura alla superficie della bolla

R_0 = raggio iniziale della bolla

BOLLA C

$p_{\infty} = 4.6 \text{ atm}$		$T_b = 1349.2 \text{ }^{\circ}\text{K}$	
t	ΔT_s	R	V
$1 \cdot 10^{-6}$.06	$.999 \cdot 10^{-2}$	$-.17 \cdot 10^2$
2.	.19	.997.	-.34.
3.	.39	.99.	-.51.
4.	.62	.99.	-.67.
5.	.87	.98.	-.82.
6.	1.15	.97.	-.97.
7.	1.45	.96.	$-.11 \cdot 10^3$
8.	1.79	.95.	-.12.
9.	2.10	.93.	-.14.
$1 \cdot 10^{-5}$	2.42	.92.	-.15.
1.5.	4.07	.84.	-.19.
2.	5.53	.73.	-.21.
2.5.	6.43	.63.	-.19.
2.8.	6.57	.58.	-.16.
3.	6.48	.55.	-.14.
3.5.	5.80	.49.	$-.84 \cdot 10^2$
4.	4.97	.46.	-.53.
4.2.	4.72	.45.	-.50.
4.5.	4.49	.44.	-.55.
4.8.	4.43	.42.	-.67.
5.0.	4.47	.40.	-.78.
5.5.	4.82	.36.	$-.11 \cdot 10^3$
6.0.	5.46	.29.	-.16.
6.5.	6.74	.19.	-.27.
6.73.	9.22	.1.	-.67.
$T_{\infty} = 1345.9$		$p_v(T_{\infty}) = 4.5 \text{ atm}$	$R_0 = 10^{-2} \text{ cm}$

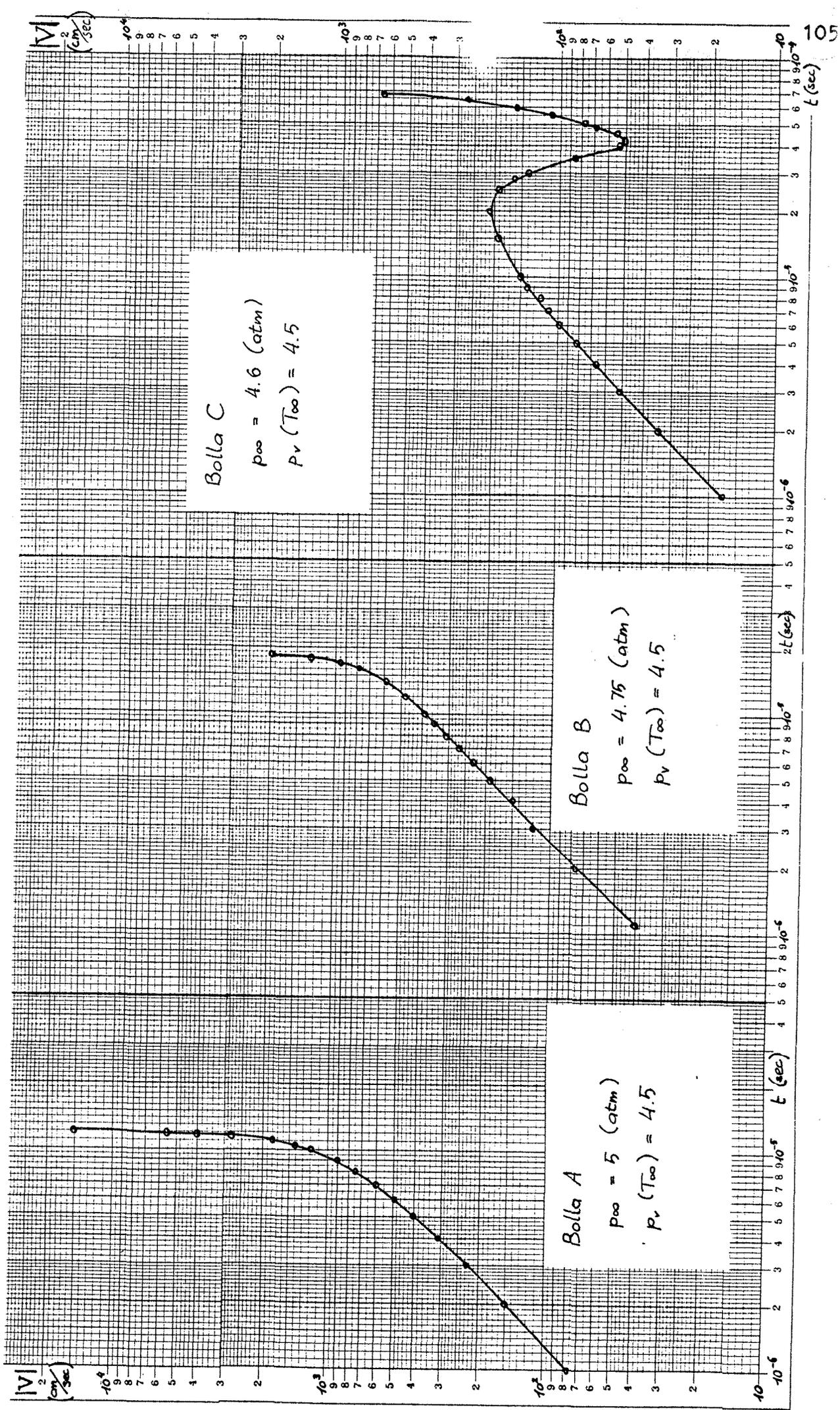


fig. 5

3. Il programma di calcolo per il problema della bolla

Per la soluzione numerica delle equazioni di cui al par. 2 del cap. 6° ci siamo avvalsi di un programma di calcolo molto simile a quello descritto nel par. 1 del cap. 5°, per il problema modello.

Evidenzieremo qui solamente le differenze fondamentali fra questi due programmi.

Rimandiamo al tabulato del MAIN per quanto riguarda il significato delle variabili.

A parte la lettura dei dati di ingresso, che varia a seconda che si studi la crescita o il collasso, una notevole importanza assume il sottoprogramma FISICA. Tramite esso vengono calcolati i parametri fisici del problema, attraverso espressioni tratte dall'appendice di [9].

Le elenchiamo qui di seguito, per sodio con $1000^{\circ}\text{K} \leq T \leq 1600^{\circ}\text{K}$

$$k = .2482 - 1.16 \cdot 10^{-4} T \quad (\text{cal/cm s } ^{\circ}\text{K})$$

$$\rho = 1.0086 - 2.134 \cdot 10^{-4} T - 1.75 \cdot 10^{-8} T^2 \quad (\text{g/cm}^3)$$

$$C_p = .38966 - 1.9917 \cdot 10^{-4} T + 1.105 \cdot 10^{-7} T^2 \quad (\text{cal/g } ^{\circ}\text{K})$$

$$D = k / \rho C_p \quad (\text{cm}^2/\text{s})$$

$$\sigma = 229.3 - 0.1 T \quad (\text{dyn/cm})$$

$$P_v = \frac{10^{6.354 - (5567/T)}}{9.8692 \cdot 10^{-7} \sqrt{T}} \quad (\text{dyn/cm}^2)$$

$$\rho_v = \frac{22.98977 \cdot P_v}{8.314 \cdot 10^7 T} \quad (\text{g/cm}^3)$$

$$A' = 309.7198 - 1653.496 \cdot 10^{-6} T^2 + 2149.768 \cdot 10^{-9} T^3 - 810.084 \cdot 10^{-12} T^4$$

$$B' = -1.157965 + 3306.992 \cdot 10^{-6} T - 3224.652 \cdot 10^{-9} T^2 + 1080.112 \cdot 10^{-12} T$$

$$L = \frac{(A' + B'T)K}{p_v} \quad (\text{cal/g})$$

dove è stato calcolato p_v dall'equazione di stato dei gas

$$p = n R_g T = \frac{p_v}{M} R_g T$$

dove M è il peso molecolare del sodio e R_g la costante

universale dei gas. Tutti questi parametri sono calcolati a T&DA:

Il sottoprogramma FISICA calcola anche il raggio di equilibrio, se si sta studiando la crescita della bolla, e converte la pressione, che è un dato di ingresso, dalle atmosfere a dyn/cm^2 . Segue nel MAIN l'assegnamento di un raggio iniziale maggiore dell'1% di quello d'equilibrio (se si studia la crescita). Viene poi chiamato il sottoprogramma DENSIT. Bisogna notare che, al fine di aumentare la precisione dei calcoli, la temperatura iniziale viene posta a zero nel MAIN per cui, ogni volta che si calcolano parametri fisici, va aggiunto al valore attuale della temperatura il valore iniziale, per ottenere la temperatura effettiva attuale. Questo accade nel sottoprogramma DENSIT che, oltre a calcolare $p_v(T_s)$, $\beta_v(T_s)$, $\sigma(T_s)$, come in FISICA, calcola

anche $\frac{d p_v}{d T_s}$, in questo modo:

$$\frac{d p_v}{d T_s} = \frac{d}{d T} \left(\frac{p_v \cdot M}{R_G \cdot T} \right) \Big|_{T_s} = -p_v \frac{M}{R_G} \frac{1}{T^2} + \frac{M}{R_G T} \left[\frac{L_G \cdot 10^{-5} \cdot 5567 \cdot 10^{6.354 - (5567/T)}}{T^2} \cdot 9.8692 \cdot 10^{-7} \sqrt{T} - 10^{6.354 - (5567/T)} \cdot 9.8692 \cdot 10^{-7} \frac{1}{2\sqrt{T}} \right] \frac{1}{(9.8692 \cdot 10^{-7})^2 T}$$

In DENSIT vengono anche calcolati alcuni parametri di diverso uso in altri sottoprogrammi.

L'unica altra grossa differenza tra questo MAIN e quello del problema modello, a parte le modalità di stampa, è l'assenza in questo programma per la bolla di un sottoprogramma di integrazione temporale. Infatti, poiché il metodo implicito descritto nel par. 2 del cap. 6° collega la soluzione dell'equazione parabolica con le equazioni differenziali ordinarie, è sufficiente un solo sottoprogramma CALORE che risolve appunto col metodo OCI-CN l'equazione 1.9a del cap. 6°, senza conoscere esplicitamente il valore della temperatura alla superficie della bolla, ma eliminando, come abbiamo visto nel cap. 6°, la temperatura superficiale dalla prima delle equazioni risolventi 3.15 del cap. 2°. Un'altra particolarità è l'assenza di un sottoprogramma per il calcolo delle derivate seconde, che, come abbiamo visto nel cap. 6°, con questo schema di soluzione parzialmente implicito, non servono. Ricordiamo infine che nella stampa i valori delle temperature tabulati vanno aggiunti col proprio segno alla temperatura iniziale per ottenere i valori effettivi.

```

1 C MAIN PER IL PROBLEMA BOLLA
2 C
3 C USARE CON IL CAMPO DI TEMPERATURA INIZIALE COSTANTE
4 C E CON L'INTEGRAZIONE TEMPORALE IMPLICITA AL SECONDO ORDINE
5 C
6 C *****LEGENDA*****
7 C DH = PASSO DI DISCRETIZZAZIONE SPAZIALE * OUTPUT
8 C DTZERO = PASSO DI DISCRETIZZAZIONE TEMPORALE INIZIALE * INPUT
9 C DT = PASSO DI DISCRETIZZAZIONE TEMPORALE * OUTPUT
0 C KH = N. PUNTI DELL'ASSE SPAZIALE (H=0 EQUIVALE A KH=1) * INPUT
1 C KT = N. PUNTI DELL'ASSE TEMPORALE (T=0 EQUIVALE A KT=1) * INPUT
2 C SH = MASSIMO VALORE DI H (SOSTITUISCE H=INFINITO) * INPUT
3 C ST = MASSIMO VALORE DI T * INPUT
4 C NT = LIVELLO DI TEMPO (DA 1 A KT) T=0 EQUIVALE A NT=1 *
5 C T8DAT = TEMPERATURA INIZIALE SU TUTTO LO SPAZIO E TEMPERATURA
6 C ALL'INFINITO A QUALSIASI TEMPO * INPUT
7 C DDAT = COSTANTE DI DIFFUSIVITA' * INPUT
8 C UO = TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE (H=0, T=QUALSIASI) * OUTPUT
9 C UCONT = TEMPERATURA ALL'INFINITO (IN H=SH). * INPUT DA PROGRAMMA
0 C UT = TEMPERATURA(SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DEL CALORE) SU TUTTO LO
1 C SPAZIO ESCLUSI GLI ESTREMI (H=0 E H=SH). VETTORE DI DIM=KH-2
2 C UTO = TEMPERATURA SU TUTTO LO SPAZIO (ECCEPTE CHE ALL'INFINITO -CIOE'
3 C H=SH- DOVE VIENE ASSUNTO IL VALORE DI UCONT) AL TEMPO T=0.
4 C VETTORE DI DIM KH-1 * INPUT DA PROGRAMMA
5 C GRT = GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE (E' NOTO SOLAMENTE
6 C QUELLO AL TEMPO T=0) * OUTPUT
7 C RINZ = RAGGIO INIZIALE DELLA BOLLA * INPUT
8 C VINZ = VELOCITA' INIZIALE DI CRESCITA DEL RAGGIO
9 C DELLA BOLLA * INPUT
0 C R = RAGGIO DELLA BOLLA * OUTPUT
1 C V = VELOCITA' DI CRESCITA DEL RAGGIO DELLA BOLLA (DERIVATA
2 C TEMPORALE DI R) * OUTPUT
3 C ROV = DENSITA' DI VAPORE * INPUT DA SOTTOPROGRAMMA
4 C DROV = DERIVATA DI ROV RISPETTO ALLA TEMPERATURA
5 C SUPERFICIALE * INPUT DA SOTTOPROGRAMMA
6 C ELLE = CALORE LATENTE * INPUT
7 C TKAPPA = CONDUTTIVITA' TERMICA DEL LIQUIDO * INPUT
8 C ROL = DENSITA' DEL LIQUIDO * INPUT
9 C TVAR = PARAMETRO PER LA VARIAZIONE DEL PASSO TEMPORALE * INPUT
0 C ZDAT = PARAMETRO. SE SI STUDIA IL COLLASSO VALE 1. * INPUT
1 C BDAT = PARAMETRO PER FERMARE IL COLLASSO. RAPPORTO TRA
2 C RAGGIO INIZIALE E RAGGIO FINALE * INPUT
3 C
4 C COMMON/PARAM/BDAT, T8DAT, ZDAT, DDAT, KH, KT, SH, ST, RINZ, VINZ
5 C COMMON/TIMVAR/TVAR
6 C COMMON/COF/CC, EE
7 C COMMON/MISTE/UXP1, UXP2
8 C COMMON/BOLLA/ELLE, TKAPPA, ROL, PIY, P8, SIGMA
9 C COMMON/CALCOL/DH, DT, KH1, KH2, KH3, NT, T
0 C COMMON/STAMP/GRT, R, V, UT, UO, UCONT
1 C COMMON/DENS/ROV, DROV
2 C COMMON/ZERO/DTZERO
3 C COMMON/DERIV/UX
4 C PARAMETER NNN=1010
5 C DIMENSION UTO(NNN), G(NNN), UT(NNN), UX(NNN)
6 C DIMENSION TST(8), TST2(8), TST5(8)
7 C
8 C LETTURA DATI
9 C CALL LEGGI
0 C
1 C AZZERAMENTO DELLA TEMPERATURA INIZIALE PER MOTIVI DI
2 C PRECISIONE DEL CALCOLO
3 C T8=0
4 C
5 C CALCOLO DI ALCUNI PARAMETRI
6 C CALL FISICA

```

```

IF(ZDAT.NE.1.)R=RINZ*1.01
IF(ZDAT.EQ.1.)R=RINZ
V=VINZ
RFIN=RINZ/BDAT
CALL DENSIT(T8,R)
KH1=KH-1
KH2=KH-2
KH3=KH-3
DH=SH/(KH-1)
DT=DTZERO
RLAMDA=DT*0.5/(DH*DH)
CALL STAMPA(1)
CALL STAMPA(4)

```

```

C
C
C CONDIZIONI INIZIALI
  DO 1 I=1,KH1
    UTO(I)=T8
  CONTINUE
1
C CONDIZIONI AL CONTORNO
  UCONT=T8
C
  GRT=0
C
  NT=1
C
C ASSEGNAZIONE DI UTO AL VETTORE UT E ALLA VARIABILE UO
C PER POTER UTILIZZARE IL SOTTOPROGRAMMA DI STAMPA
  UO=UTO(1)
  DIFPER=1000.
  DO 22 I=1,KH2
    I1=I+1
    UT(I)=UTO(I1)
  CONTINUE
22
C CALCOLO DI G AL LIVELLO ZERO
  CALL GZERO(G,UTO,UCONT,R,V)
C
C
  UXP1=0
  UXP2=0
  UX(1)=0
  UX(2)=0
C CICLO FONDAMENTALE DI CALCOLO DELLA SOLUZIONE DAL PRIMO LIVELLO
C IN POI
C
  DO 5 NT=2,KT
    DTP=DT
    IF(ZDAT.NE.1..AND.
      * DIFPER.LT.TVAR.AND.VRDT.LT.TVAR)DT=DT*2.
      IF(ZDAT.EQ.1..AND.VRDT.GT.TVAR)DT=DT/2.
    UOP=UO
    RLAMDA=DT*.5/DH**2.
    T=T+DT
C RISOLVE L'EQUAZIONE DEL CALORE AL LIVELLO NT CALCOLANDO
C ANCHE LA TEMPERATURA SUPERFICIALE, IL RAGGIO E LA VELOCITA'
C UO,R,V IN ENTRATA SONO I VALORI AL LIVELLO NT-1
  CALL CALORE(RLAMDA,UT,UO,UCONT,G,R,V)
C UO,R,V IN USCITA SONO I VALORI AL LIVELLO NT
  CALL DENSIT(UO,R)
  UXP1=UX(1)
C CALCOLO DEL GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA
C SUPERFICIE AL LIVELLO NT
  CALL TGRAD(GRT,UT,UO,UCONT,G,R,V)
  IF(ZDAT.EQ.1.)GOTO 19
  DO 7 II=1,8
    TST(II)=ABS(T-10*(-II*1.0))

```

```

131          TST2(II)=ABS(T-2.*10**(-II*1.0))
132          TST5(II)=ABS(T-5.*10**(-II*1.0))
133          IF(TST(II).LT.DT.OR.TST2(II).LT.DT.OR.
134             * TST5(II).LT.DT)
135             * WRITE(6,33)T,UO,R,V,GRT,DT,NT
136          7 CONTINUE
137          19 IF(ZDAT.EQ.1.)
138             * WRITE(6,33)T,UO,R,V,GRT,DT,NT
139             IF(ZDAT.EQ.1..AND.MOD(NT,25).EQ.0)CALL STAMPA(5)
140             KT4=KT-4
141             IF(NT.LT.4.OR.NT.EQ.101.OR.NT.GT.KT4.OR.NT.EQ.1001)
142             * CALL STAMPA(5)
143          C CALCOLO DEL NUOVO VETTORE G CON FORMULA DI RICORSIONE
144             G(I)=((DTP+DT)*UO-DT*G(1))/DTP
145             DO 6 I=1,KH2
146                 I1=I+1
147                 G(I1)=((DTP+DT)*UT(I)-DT*G(I1))/DTP
148          6 CONTINUE
149             G(KH)=((DTP+DT)*UCONT-DT*G(KH))/DTP
150             IF(UO.NE.0)DIFPER=ABS((UO-UOP)/UO)
151             VRDT=ABS(V/R*DT)
152             IF(UO.EQ.0)DIFPER=1000.
153             IF(T.GT.ST)GOTO 122
154             IF(ZDAT.EQ.1..AND.R.LT.RFIN)GOTO 122
155          5 CONTINUE
156             GO TO 111
157             122 WRITE(6,33)T,UO,R,V,GRT,DT,NT
158             33 FORMAT(' T=',E10.4,' UO=',E14.8,' R=',E14.8,' V=',
159             * E14.8,' GRT=',E14.8,' DT=',E10.4,' NT=',I5)
160             CALL STAMPA(5)
161          111 STOP
162          END

```

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57

```

SUBROUTINE LEGGI
C
C QUESTO SOTTOPROGRAMMA LEGGE TUTTI I DATI E I PARAMETRI NECESSARI
C METTENDOLI IN AREA DI COMMON
C
COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
COMMON/BOLLA/ELLE,KAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
COMMON/ZERO/DTZERO
COMMON/TIMVAR/TVAR
C
888 WRITE(6,1)
1 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI KH')
15 READ(5,2) KH
16 2 FORMAT( )
17 WRITE(6,3)
18 3 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI KT')
19 READ(5,2) KT
20 WRITE(6,4)
21 4 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI SH')
22 READ(5,2) SH
23 WRITE(6,5)
24 5 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI ST')
25 READ(5,2) ST
26 IF(KH.LE.0.OR.KT.LE.0.OR.SH.LE.0.OR.ST.LE.0)GOTO 99
27 WRITE(6,6)
28 6 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI P8 IN ATMOSFERE')
29 READ(5,2) P8
30 WRITE(6,9)
31 9 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI T8DAT IN GRADI KELVIN')
32 READ(5,2) T8DAT
33 WRITE(6,11)
34 11 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI VINZ IN CM/SEC')
35 READ(5,2) VINZ
36 WRITE(6,12)
37 12 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI DTZERO')
38 READ(5,2)DTZERO
39 WRITE(6,70)
40 70 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI TVAR')
41 READ(5,2)TVAR
42 WRITE(6,71)
43 71 FORMAT(' PER IL COLLASSO SCRIVI 1')
44 READ(5,2)ZDAT
45 IF(ZDAT.EQ.1.)WRITE(6,72)
46 72 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI RINZ')
47 IF(ZDAT.EQ.1.)READ(5,2)RINZ
48 IF(ZDAT.EQ.1.)WRITE(6,73)
49 73 FORMAT(' SCRIVI IL VALORE DI BDAT')
50 IF(ZDAT.EQ.1.)READ(5,2)BDAT
51 GO TO 55
52 99 WRITE(6,100)
53 100 FORMAT(' UNO DEI SEGUENTI DATI: KH,KT,SH,ST,RISULTA
54 * NEGATIVO O NULLO')
55 GO TO 888
56 55 RETURN
57 END

```

```

C
C QUESTO SOTTOPROGRAMMA MANDA IN STAMPA DATI E RISULTATI
C IN DIPENDENZA DAL VALORE DI IST
C IST = 1   STAMPA I DATI DI INGRESSO
C IST = 4   STAMPA I DATI DEL PROBLEMA BOLLA
C IST = 5   STAMPA LA SOLUZIONE DEL PROBLEMA BOLLA
C
  PARAMETER NN=1010
  COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
  COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
  COMMON/TIMVAR/TVAR
  COMMON/STAMP/GRT,R,V,UT,UO,UCONT
  COMMON/DENS/ROV,DROV
  COMMON/ZERO/DTZERO
  DIMENSION UT(NN)
  COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
  GO TO(1,2,3,4,5),IST
1  WRITE(6,11) KH,KT,SH,ST,DH,DT
11  FORMAT(1H1,' DATI DI INGRESSO',///,' KH = ',I8,
  *      '(N. PUNTI DELL ASSE SPAZIALE)',//,' KT = ',I8,
  *      '(N. PUNTI DELL ASSE TEMPORALE)',//,' SH = ',E14.8,
  *      '(ESTREMO SUPERIORE SPAZIALE)',//,' ST = ',E14.8,
  *      '(ESTREMO SUPERIORE TEMPORALE)',///,' PARAMETRI CALCOLATI',///,
  *      ' DH = ',E14.8,' (PASSO DI DISCRETIZZAZIONE SPAZIALE)'
  *      ',//,' DT = ',E14.8,' (PASSO DI DISCRETIZZAZIONE ',
  *      ' TEMPORALE)',//)
  RETURN
4  IF(ZDAT.EQ.1.)WRITE(6,492)
492  FORMAT(///,' ****STUDIO DEL COLLASSO****',//)
  WRITE(6,14) TSDAT,DDAT,RINZ,VINZ,ELLE,TKAPPA,ROL,P8,SIGMA
14  FORMAT(/,' DATI DEL PROBLEMA BOLLA',//,' TSDAT = ',E14.8,
  *      '(TEMPERATURA INIZIALE AL CONTORNO)',//,' DDAT = ',
  *      E14.8,' (DIFFUSIVITA)',//,' RINZ = ',E14.8,' (RAGGIO INIZIALE)',
  *      ',//,' VINZ = ',E14.8,' (VELOCITA INIZIALE DI CRESCITA'
  *      ' DELLA BOLLA)',//,' ELLE = ',E14.8,' (CALORE LATENTE)'
  *      ',//,' TKAPPA = ',E14.8,' (CONDUTTIVITA TERMICA DEL',
  *      ' LIQUIDO)',//,' ROL = ',E14.8,' (DENSITA DEL LIQUIDO)',
  *      ',//,' P8 = ',E14.8,' (PRESSIONE INIZIALE E ALL INFINITO)',//,
  *      ' SIGMA = ',E14.8,' (TENSIONE SUPERFICIALE TRA LIQUIDO ',
  *      ' E VAPORE)')
  WRITE(6,124)DTZERO
124  FORMAT(' DTZERO = ',E14.8,' (PASSO TEMPORALE INIZIALE)')
  WRITE(6,296)TVAR
296  FORMAT(' TVAR = ',E14.8,' (PARAMETRO PER LA VARIAZIONE '
  *      ' DEL PASSO TEMPORALE)')
  RETURN
5  WRITE(6,51)T,GRT
51  FORMAT(1H1,40X,'T= ',E14.8,///,10X,
  *      'GRADIENTE DELLA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE',E14.8,///)
  WRITE(6,511) R,V,ROV,DROV,PIV
511  FORMAT(/,' RAGGIO DELLA BOLLA ',E14.8,///,
  *      ' VELOCITA DI CRESCITA DELLA BOLLA ',E14.8,
  *      ',//,' DENSITA DI VAPORE',E14.8,///,' DERIVATA ',
  *      ' DELLA DENSITA DI VAPORE RISPETTO ALLA TEMPERATURA',
  *      ' ALLA SUPERFICIE',E14.8,///,' PRESSIONE DI VAPORE',
  *      E14.8,///,3('      H      SOLUZIONE '),//)
  HO=0
  H1=DH
  H2=2*DH
  WRITE(6,1520)HO,UO,H1,UT(1),H2,UT(2)
1520  FORMAT(3(2X,E10.4,2X,E14.8))
  DO 53 I=3,KH2,3
  IF(I.GT.10.AND.I.LT.KH3.AND.MOD(I,48).NE.0)

```

```

65          *          GO TO 53
66          I1=I+1
67          I2=I+2
68          H=I*DH
69          H1=I1*DH
70          H2=I2*DH
71          KH2MI=KH2-I+1
72          IF(KH2MI.GT.3)GOTO 520
73          GOTO (500,501,502),KH2MI
74          500        WRITE(6,5000)H,UT(I),H1,UCONT
75          5000        FORMAT(2(2X,E10.4,2X,E14.8))
76          GOTO 53
77          501        WRITE(6,5010)H,UT(I),H1,UT(I1),H2,UCONT
78          5010        FORMAT(3(2X,E10.4,2X,E14.8))
79          GOTO 53
80          502        WRITE(6,5020)H,UT(I),H1,UT(I1),H2,UT(I2),SH,UCONT
81          5020        FORMAT(3(2X,E10.4,2X,E14.8),/,2X,E10.4,2X,E14.8)
82          GOTO 53
83          520        WRITE(6,5010)H,UT(I),H1,UT(I1),H2,UT(I2)
84          53          CONTINUE
85          2          CONTINUE
86          3          CONTINUE
87          RETURN
88          END

```

```

1          SUBROUTINE FISICA
2          C  CALCOLA I VALORI DELLE COSTANTI FISICHE PER IL SODIO, IN
3          C  DIPENDENZA DALLA TEMPERATURA ALL'INFINITO T8DAT
4          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
5          COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
6          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
7          COMMON/DENS/ROV,DROV
8          TKAPPA=(0.2482-1.16E-4*T8DAT)*4.1868E7
9          ROL=1.0086-2.134E-4*T8DAT-1.75E-8*T8DAT**2.
10         CP=(0.38966-1.9917E-4*T8DAT+1.105E-7*T8DAT**2.)*4.1868E7
11         DDAT=TKAPPA/(ROL*CP)
12         SIGMA=229.3-T8DAT*0.1
13         P8=1.01325E+6*P8
14         PIV= 10**((6.354-5567./T8DAT)/(9.8692E-7*SQRT(T8DAT)))
15         IF(ZDAT.NE.1.)RINZ=2*SIGMA/(PIV-P8)
16         ROV=PIV*22.98977/(8.314E7*T8DAT)
17         APRIMO=309.7198-1653.496E-6*T8DAT**2.+2149.768E-9*
18         *          T8DAT**3.-810.084E-12*T8DAT**4.
19         BPRIMO=-1.157965+3306.992E-6*T8DAT-3224.652E-9*
20         *          T8DAT**2+1080.112E-12*T8DAT**3.
21         ELLE=(APRIMO+BPRIMO*T8DAT)*TKAPPA/ROV
22         RETURN
23         END

```

```

1          SUBROUTINE DENSIT(U00,RIN)
2          COMMON/DENS/ROV,DROV
3          COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
4          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
5          COMMON/COF/CC,EE
6          UD=U00+T8DAT
7          APIV=10**((6.354-5567./UD))
8          BPIV=9.8692E-7*SQRT(UD)
9          PIV=APIV/BPIV
10         ROV=PIV*22.98977/(8.314E7*UD)
11         DROV=22.98977/(8.314E7*UD**2.)*(-PIV+(2.30258509*
12         *          5567.*APIV*BPIV/UD**2.-APIV*9.8692E-7*.5/SQRT(UD)))/
13         *          9.7401109E-13)
14         SIGMA=229.3-0.1*UD
15         EMME=1-4./3.*ELLE*DDAT*DROV/TKAPPA
16         CC=ELLE*ROV/EMME*RIN/TKAPPA
17         EE=ELLE*DDAT*DROV/(EMME*3.*TKAPPA)
18         RETURN
19         END

```

```

1          SUBROUTINE GZERO(G,UTO,UCONT,R,V)
2          C  CALCOLO DEL VALORE DI G AL TEMPO T=0
3          C
4          C  USARE CON IL CAMPO DI TEMPERATURA INIZIALE COSTANTE
5          COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
6          COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
7          DIMENSION G(KH),UTO(KH)
8          DO 1 I=1,KH1
9          G(I)=UTO
10         1  CONTINUE
11         G(KH)=UCONT
12         RETURN
13         END

```

```

1      SUBROUTINE CALORE(RLAM,UT,UO,UKH,G,RIN,VIN)
2      C  RISOLVE L'EQUAZIONE DEL CALORE SENZA CONOSCERE
3      C  ESPPLICITAMENTE LA TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE
4      C  UTILIZZANDO UNA RELAZIONE APPROSSIMATA AL SECONDO
5      C  ORDINE TRA ESSA E ALTRE QUANTITA' NOTE
6      C  UO = TEMPERATURA SUPERFICIALE AL TEMPO PRECEDENTE
7      C
8      COMMON/PARAM/BDAT,T8DAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
9      COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
10     COMMON/COF/CC,EE
11     COMMON/DERIV/UX
12     COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
13     COMMON/MISTE/UXP1,UXP2
14     PARAMETER NN=1010
15     DIMENSION G(KH),UT(KH2),QP(NN),QO(NN),QM(NN),C(NN),UMM(NN),
16     *      RP(NN),RO(NN),RM(NN),UMP(NN),UMO(NN),UNOTO(NN),UX(NN)
17     C
18     CPUNTO=VIN/RIN*CC
19     ET=1+6.*DH/29/EE
20     CMU=1+6*EE/DH
21     ALF=DDAT/RIN**2./CMU/ET
22     BET=-11.5*ET/DH**2.-192.*CMU/29./DH
23     GAM=8.*ET/DH**2.+192.*CMU/29./DH
24     EPS=3.5*ET/DH**2.
25     OME=-8.*ET/DH-80.*CMU/29.
26     CSI=-ET/DH+4.*CMU/29.
27     PIG=-6./DH-36./29./EE+24*DH/29./EE+144./29.
28     TPUNTO=ALF*(BET*UO+GAM*UT(1)+EPS*UT(2)+OME*UX(1)
29     *      +CSI*UX(2)+PIG*CC*VIN)
30     UOO=UO+DT*TPUNTO+T8DAT
31     PIVP=10**((6.354-5567./UOO)/9.8692E-7/SQRT(UOO)
32     SIGMAP=229.3-.1*UOO
33     VPUNTO=(-1.5*VIN**2.+(PIV-P8-2*SIGMA/RIN)/ROL)/RIN
34     UXT1=(UX(1)-UXP1)/DT
35     UXT2=(UX(2)-UXP2)/DT
36     YOUT=VIN+DT/2.*(VPUNTO+(-1.5*(VIN+DT*VPUNTO)**2.
37     *      +(PIVP-P8-2.*SIGMAP/(RIN+DT*VIN))/ROL)/
38     *      (RIN+DT*VIN))
39     ROUT=RIN+DT/2.*(2.*VIN+DT*VPUNTO)
40     ALF2=DDAT/ROUT**2./CMU/ET
41     CNI=1./(1-ALF2*BET*DT*.5)
42     C  CALCOLO DEGLI OPERATORI TRIDIAGONALI Q ED R AL LIVELLO NT
43     CALL QR(ROUT,QP,QO,QM,RP,RO,RM,YOUT)
44     C
45     DO 1 I=2,KH3
46     C(I)=0
47     1  CONTINUE
48     C(KH2)=(QP(KH2)-RLAM*RP(KH2))*UKH
49     C
50     C  CALCOLO DELLA MATRICE E DEL VETTORE TERMINE NOTO DEL SISTEMA
51     C  TRIDIAGONALE DI INCOGNITA UT AL LIVELLO NT.
52     UMP(1)=QP(1)-RLAM*RP(1)+(QM(1)-RLAM*RM(1))*ALF2*EPS*CNI*DT*
53     UMO(1)=QO(1)-RLAM*RO(1)+(QM(1)-RLAM*RM(1))*ALF2*GAM*CNI*DT*
54     UNOTO(1)=QM(1)*G(1)+QO(1)*G(2)+QP(1)*G(3)
55     *      -(QM(1)-RLAM*RM(1))*CNI*(UO*(1+ALF*BET*DT*.5)+ALF*DT*
56     *      (GAM*.5*UT(1)+EPS*.5*UT(2)+OME*(UX(1)*(1-DT*VIN/RIN)
57     *      +DT*.5*UXT1)+
58     *      CSI*(UX(2)*(1-DT*VIN/RIN)
59     *      +DT*.5*UXT2)+PIG*(CC*VIN*(1-DT*VIN/RIN)+DT*.5*
60     *      (CPUNTO*VIN+CC*VPUNTO))))
61     DO 2 I=2,KH2
62     I1=I+1
63     I2=I+2
64     UMP(I)=QP(I)-RLAM*RP(I)

```

```

65      UMO(I)=QO(I)-RLAM*RO(I)
66      UMM(I)=QM(I)-RLAM*RM(I)
67      UNOTO(I)=QM(I)*G(I)+QO(I)*G(I1)+QP(I)*G(I2)-C(I)
68      2      CONTINUE
69          UT1=UT(1)
70          UT2=UT(2)
71      C
72      C  SOLUZIONE DEL SISTEMA DI INCOGNITA UT
73          CALL SOLTRIC(UMO,UMM,UMP,UNOTO,KH2,UT)
74          UD=CNI*(UO*(1+DT*.5*ALF*BET)+ALF*DT*(GAM*.5*(UT(1)+UT1)
75      *      EPS*.5*(UT(2)+UT2)+OME*(UX(1)+DT*.5*UXT1)+CSI*
76      *      (UX(2)+DT*.5*UXT2)+PIG*(CC*VIN+.5*DT*(CPUNTO*VIN+
77      *      CC*VPUNTO))))
78          VIN=VOUT
79          RIN =ROUT
80          RETURN
81          END

```

```

1      SUBROUTINE QR(R, QP, QO, QM, RP, RO, RM, V)
2      C  CALCOLO DEI DUE OPERATORI TRIDIAGONALI Q E R
3      C
4      COMMON/PARAM/BDAT, T8DAT, ZDAT, DDAT, KH, KT, SH, ST, RINZ, VINZ
5      COMMON/CALCOL/DH, DT, KH1, KH2, KH3, NT, T
6      DIMENSION QP(KH2), QO(KH2), QM(KH2), RP(KH2), RO(KH2), RM(KH2)
7      DO 2 I=1, KH2
8          DI=I*DH
9          CALL ALFA(DI, R, AI, V)
10         DI1=(I+1)*DH
11         CALL ALFA(DI1, R, AI1, V)
12         DIM1=(I-1)*DH
13         CALL ALFA(DIM1, R, AIM1, V)
14         CALL BETA(DI, R, BI, V)
15         CALL BETA(DI1, R, BI1, V)
16         CALL BETA(DIM1, R, BIM1, V)
17         QP(I)=6*AI*AIM1+DH*(5*AIM1*BI-2*AI*BIM1)-DH*DH*BI*BIM
18         QO(I)=60*AI1*AIM1-16*DH*(AI1*BIM1-BI1*AIM1)-
19         *      4*DH*DH*BI1*BIM1
20         QM(I)=6*AI*AI1-DH*(5*AI1*BI-2*AI*BI1)-DH*DH*BI*BI1
21         RP(I)=QP(I)*(AI1+1.5*DH*BI1)+QO(I)*(AI+.5*DH*BI)+
22         *      QM(I)*(AIM1-.5*DH*BIM1)
23         RM(I)=QP(I)*(AI1+.5*DH*BI1)+QO(I)*(AI-.5*DH*BI)+
24         *      QM(I)*(AIM1-1.5*DH*BIM1)
25         RO(I)=- (RP(I)+RM(I))
26     2      CONTINUE
27     RETURN
28     END

```

```

1      SUBROUTINE ALFA(Z,R,AV,V)
2      COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
3      COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
4      COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
5      AV=DDAT/R**2.*(1+3*Z)**(4./3.)
6      RETURN
7      END

```

```

1      SUBROUTINE BETA(Z,R,BV,V)
2      COMMON/PARAM/BDAT,TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
3      COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
4      COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
5      BV=3*V*Z/R+4*DDAT/R**2.*(1+3*Z)**(1./3.)
6      RETURN
7      END

```

```

1      SUBROUTINE TGRAD(GRT,UT,UO,UTKH,G,RIN,VIN)
2      C QUESTO SOTTOPROGRAMMA CALCOLA IL VALORE DEL GRADIENTE DELLA
3      C TEMPERATURA ALLA SUPERFICIE DELLA BOLLA AL LIVELLO NT
4      C UTILIZZANDO UNA FORMULA IMPLICITA PER IL CALCOLO DEL
5      C GRADIENTE SU TUTTO LO SPAZIO
6      C DO = DIAGONALE PRINCIPALE
7      C DM = DIAGONALE INFERIORE
8      C DP = DIAGONALE SUPERIORE
9      C TER= VETTORE DEI TERMINI NOTI
10     PARAMETER NN=1010
11     COMMON/PARAM/BDAT, TSDAT,ZDAT,DDAT,KH,KT,SH,ST,RINZ,VINZ
12     COMMON/COF/CC,EE
13     COMMON/CALCOL/DH,DT,KH1,KH2,KH3,NT,T
14     COMMON/DENS/ROV,DROV
15     COMMON/DERIV/UX
16     COMMON/BOLLA/ELLE,TKAPPA,ROL,PIV,P8,SIGMA
17     DIMENSION G(KH),UT(KH2),UX(NN),DO(NN),DM(NN),DP(NN),TER(NN)
18     DP(1)=DH+5.*EE
19     DO(1)=4*DH+16.*EE
20     TER(1)=UT(2)*(3.+EE*14.5/DH)-UT(1)*8.*EE/DH-DH*CC*VIN
21     * -UO*(3+6.5*EE/DH)
22     DO 1 I=2,KH3
23         I1=I+1
24         IM1=I-1
25         DO(I)=4*DH/3
26         DP(I)=DH/3
27         DM(I)=DH/3
28         TER(I)=UT(I1)-UT(IM1)
29     1 CONTINUE
30     DM(KH2)=DH/3
31     DO(KH2)=4*DH/3
32     TER(KH2)=UTKH-UT(KH3)
33     CALL SOLTRI(DO,DM,DP,TER,KH2,UX)
34     ESSE=(48.*(UT(1)-UO)/DH-20.*UX(1)+UX(2))/29.
35     GRT=(ESSE+6.*DH*CC*VIN/29./EE)/(1+6.*DH/29./EE)
36     RETURN
37     END

```

```

1          SUBROUTINE SOLTRI(MA,MB,MC,F,N,X)
2          C
3          C QUESTO SOTTOPROGRAMMA RISOLVE UN SISTEMA LINEARE LA CUI MATRICE
4          C HA STRUTTURA TRIDIAGONALE
5          C
6          C          *** LEGENDA ***
7          C MA = DIAGONALE PRINCIPALE DELLA MATRICE * INPUT
8          C MB = DIAGONALE INFERIORE DELLA MATRICE * INPUT
9          C MC = DIAGONALE SUPERIORE DELLA MATRICE * INPUT
10         C F = TERMINI NOTI * INPUT
11         C N = N. DI ELEMENTI DEL SISTEMA * INPUT
12         C X = SOLUZIONE DEL SISTEMA * OUTPUT
13         C
14         C PER COMODITA' MB E MC HANNO N ELEMENTI ANCHE SE NE SONO
15         C UTILIZZATI (N-1), RISPETTIVAMENTE DA 2 A N E DA 1 A (N-1).
16         C
17         C          PARAMETER NFIT=1010
18         C          REAL MA(N),MB(N),MC(N),F(N),X(N),A(NFIT),GA(NFIT),G(NFI
19         C          N1=N-1
20         C          N1B=N-1
21         C          IF(N.EQ.2)N1B=2
22         C
23         C IL METODO DI CALCOLO DELLA SOLUZIONE E' QUELLO CLASSICO
24         C DELLA LETTERATURA, BASATO SULLA FATTORIZZAZIONE IN DUE
25         C MATRICI BIDIAGONALI, UN A INFERIORE E UNA SUPERIORE
26         C
27         C FATTORIZZAZIONE
28         C          A(1)=MA(1)
29         C          IF(A(1).EQ.0) GO TO 666
30         C          GA(1)=MC(1)/A(1)
31         C          DO 1 I=2,N1B
32         C             I1=I -1
33         C             A(I)= MA(I) - MB(I) * GA(I1)
34         C             IF(A(I).EQ.0) GO TO 666
35         C             GA(I) = MC(I)/A(I)
36         C          1 CONTINUE
37         C          A(N) = MA(N)-MB(N)*GA(N1)
38         C          IF(A(N).EQ.0) GO TO 666
39         C
40         C SOLUZIONE
41         C
42         C          G(1) = F(1)/A(1)
43         C          DO 2 IK =2,N
44         C             IK1=IK - 1
45         C             G(IK)= (F(IK)-MB(IK)*G(IK1))/A(IK)
46         C          2 CONTINUE
47         C          X(N)=G(N)
48         C          DO 3 IL=1,N1
49         C             LI=N-IL
50         C             LI1=LI+1
51         C             X(LI)=G(LI)-GA(LI)*X(LI1)
52         C          3 CONTINUE
53         C
54         C          RETURN
55         C
56         C          666 WRITE(6,5) (A(L),L=1,N)
57         C          5  FORMAT(' ANNULLAMENTO DI UN VALORE DI A, FATTORIZZAZIO
58         C          *IMPOSSIBILE',/,100(10E10.4,/)
59         C          RETURN
60         C          END

```

CONCLUSIONI E ULTERIORI SVILUPPI

Lo studio numerico del problema modello, dei casi di crescita e di collasso della bolla di vapore nel sodio, ci hanno fornito un test più che soddisfacente della efficacia del metodo di integrazione proposto nel cap. 3°.

Il fatto che il nostro lavoro abbia preso spunto dal problema concreto della dinamica di una bolla non deve far credere che l'applicazione del metodo di integrazione si limiti a tali fenomeni fisici. La struttura, piuttosto generale, del problema parabolico col legame al contorno tra derivata temporale e gradiente si può adattare ad altri problemi di natura diversa.

Concludendo questo lavoro vogliamo evidenziare che lo scopo inizialmente prefissatoci è stato pienamente raggiunto, avendo ottenuto uno strumento di calcolo preciso e veloce su problemi di difficile o attualmente impossibile soluzione analitica. Inoltre ci è stato possibile studiare per la prima volta (precedenti soluzioni di altri autori erano molto approssimative) in dettaglio il collasso di una bolla di vapore.

Le linee direttrici su cui continua questo studio sono essenzialmente due: il raffinamento del metodo numerico e l'applicazione dell'attuale metodo a problemi di bolle in

campi di pressione variabile e temperatura iniziale non uniforme.

Per quanto riguarda il raffinamento del metodo numerico, si procede a generalizzare lo schema di integrazione temporale implicita proposta per il problema della bolla (schema che, tra l'altro, consente un risparmio di tempo di circa un terzo rispetto al corrispondente metodo esplicito, evitando, come abbiamo visto, il calcolo delle derivate seconde).

Riguardo all'applicazione a casi di bolle in campi di pressione variabile, il metodo numerico non va modificato, potendo essere immediatamente esteso senza difficoltà. Altrettanto si può dire per campi di temperatura iniziale non uniforme.

BIBLIOGRAFIA

1. CIMENT M. and LEVENTHAL S.H. and WEINBERG B.C.
"The operator compact implicit method for parabolic equations", J. Comp. Phys., vol.28, 1978, pp. 135-136
2. ISAACSON E. - KELLER H.B. "Analysis of numerical methods", J. Wiley & Sons, New York 1966
3. PROSPERETTI A. and PLESSET M.S. "Vapour-bubble growth in a superheated liquid", J. Fluid Mech., vol.85, 1978, pp. 349-368
4. CUGIANI M. "Metodi dell'analisi numerica", UTET, 1977 (3° ed.)
5. ERDELY - MAGNUS - OBERHETTINGER - TRICOMI
"Tables of integral transforms", Mc Graw-Hill 1954
6. ADAM Y. "Highly accurate compact implicit methods and boundary conditions", J. Comp. Phys., vol.24, 1977, pp. 10-22
7. PLESSET M.S. and PROSPERETTI A. "Bubble dynamics and cavitation", Ann. Rev. Fluid Mech. vol.9, 1977, pp. 145-185
8. LANDAU L. - LIFCHITZ E. "Mécanique des fluides", MIR, Moscou 1971
9. DALLE DONNE M. and FERRANTI M.P. "The growth of vapor bubbles in superheated sodium", Int. J. Heat Mass Transfer, vol.18, 1975, pp. 477-493