

Capitolo 4

**Metodi numerici per la risoluzione
dell'equazione del calore e delle
equazioni dell'idrodinamica**

4.1 Introduzione

Nella prima parte di questo capitolo descriveremo le condizioni che ci permettono di utilizzare, per lo studio del riscaldamento di un campione colpito da un impulso laser, l'equazione della conduzione del calore in forma unidimensionale anzichè in forma tridimensionale. Illustreremo, quindi, i metodi numerici impiegati per la soluzione della stessa in presenza di condizioni al contorno non banali quali la condizione di evaporazione della superficie del solido considerato. Nell'ambito di questa trattazione verrà esposto anche il criterio di stabilità di tali soluzioni numeriche.

Nella seconda parte, invece, ci occuperemo della soluzione delle equazioni della gas dinamica per il gas evaporato dalla superficie. Descriveremo a tal fine il *metodo di Godunov*, un metodo relativamente nuovo che consente di avere una buona precisione nelle soluzioni numeriche con un tempo di calcolo ridotto rispetto ad una trattazione di tipo Monte Carlo a partire dall'equazione di Boltzmann.

4.2 Descrizione unidimensionale della conduzione termica

L'equazione che descrive il trasporto del calore per sistemi con bordi mobili (vedi Cap.2) è la seguente:

$$c \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(K(\mathbf{x}, T)\nabla T) + c \rho \mathbf{v}_e \nabla T + S(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

dove \mathbf{v}_e è la velocità del bordo mobile rispetto al sistema di riferimento di laboratorio.

Come si può vedere la 4.1 fornisce la possibilità di descrivere il trasporto del calore in tre dimensioni.

Una descrizione di questo tipo, nell'ambito della trattazione numerica del problema, richiede dei tempi di calcolo piuttosto lunghi.

Se facciamo la ragionevole ipotesi che l'impulso laser che colpisce perpendicolarmente un campione abbia un'estensione trasversale di gran lunga più larga

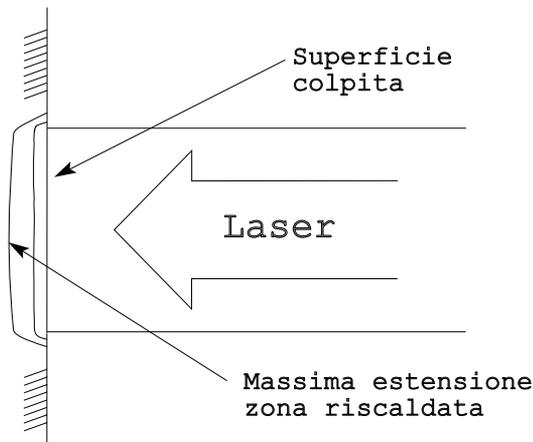


Figura 4.1: Zona colpita dall'impulso laser a confronto con lo spessore interessato al riscaldamento (la figura non è in scala).

dello spessore interessato dal successivo riscaldamento¹ (vedi Fig.4.1), allora si può passare da una descrizione tridimensionale ad una descrizione unidimensionale del fenomeno.

Questo è proprio ciò che faremo sia nella trattazione della conduzione che, per motivi analoghi, nella trattazione della gas dinamica.

In forma unidimensionale la 4.1 si riscrive come:

$$c \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K(x, T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + c \rho v_e \frac{\partial T}{\partial x} + S(x, t). \quad (4.2)$$

4.3 Metodo alle differenze finite per la risoluzione dell'equazione di trasporto del calore per sistemi con bordi mobili

Nell'ambito dello schema della risoluzione delle equazioni differenziali alle derivate parziali la 4.2 rientra in quelle che vengono dette *equazioni paraboliche*[36]. Per questo tipo di equazioni esiste un metodo di risoluzione iterativa del tutto

¹Tipicamente il diametro della superficie colpita (supposta di forma circolare) è di circa 1–3 mm (vedi [28,34]) a fronte di uno spessore tipico interessato dal riscaldamento, stimabile con la lunghezza caratteristica $l_c \simeq \sqrt{\frac{4K}{c\rho} \Delta t}$, pari, nell'alluminio, a $l_c \simeq 3 \mu m$ (per impulsi della durata di 30 nsec).

generale, il *metodo alle differenze finite*, che consiste nell'approssimare le derivate parziali con dei rapporti incrementali. Questo metodo ha il pregio di fornire sia dei criteri di stabilità che dei criteri di convergenza.

Prima di passare alla descrizione del metodo illustreremo delle approssimazioni, necessarie per alleggerire il numero di operazioni all'interno del programma sviluppato e quindi per ridurre il tempo di calcolo, che non inficiano, però, la fisica del problema esaminato.

In primo luogo, nel nostro lavoro, utilizzeremo per la densità e per il calore specifico dei valori che non dipendono né dalla temperatura né dalla fase in cui si trova il campione. Questo ci permette di calcolare l'energia per unità di area depositata, dall'inizio della simulazione, in una zona dello spazio, di spessore dx , delimitata da due facce parallele alla superficie e di temperatura T ($T \leq T_m$ con T_m temperatura di fusione) semplicemente come $E_d = c \rho (T - T_a) dx$ dove T_a è la temperatura di quello strato all'inizio della simulazione stessa.

Per $T \geq T_m$ la formula per calcolare E_d è simile alla precedente ma, in questo caso, bisogna tenere conto anche del calore latente di fusione che, come spiegato nel Cap.2, verrà calcolato alla temperatura T_m trascurando effetti di surriscaldamento. La necessità di calcolare l'energia depositata su di uno strato è legata al metodo utilizzato per tenere conto dell'evaporazione della superficie.

Un'ulteriore semplificazione del problema è stata ottenuta considerando valori costanti per la conducibilità termica del solido e del liquido (i valori nelle due fasi sono però diversi).

Nella trattazione numerica del problema è conveniente lavorare con quantità normalizzate. Quindi, anche alla luce delle approssimazioni fatte, dividiamo ambo i membri della 4.2 per $c \rho T_m$ e sostituiamo t e x rispettivamente con $\tilde{t} \tau$ e $x' ul$.

I valori di τ e di ul saranno posti pari rispettivamente a $1 nsec$ e alla lunghezza dell'intervallo di discretizzazione spaziale.

Si ottiene in tal modo la seguente equazione:

$$\frac{d\tilde{T}}{d\tilde{t}} = \frac{\partial}{\partial x'} K' \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x'} + S'(x', \tilde{t}) + v'_e \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x'}. \quad (4.3)$$

dove K' è la conducibilità normalizzata a $c \rho u l^2 / \tau$ e \tilde{T} la temperatura normalizzata a T_m .

Applichiamo ora il metodo delle differenze finite, nella variante nota come *explicit upwind method*, alla 4.3.

Se adottiamo la seguente notazione:

$$\begin{aligned}\tilde{T}_{i,j} &= \tilde{T}(i\Delta\tilde{t}, j\Delta x') \\ v'_i &= v'_e(i\Delta\tilde{t}) \\ S'_{i,j} &= S'(i\Delta\tilde{t}, j\Delta x').\end{aligned}$$

con $\Delta\tilde{t}$ e $\Delta x'$ rispettivamente intervallo temporale e intervallo spaziale e i , indici interi allora il metodo in questione consiste nell'approssimare le derivate spazio temporali in questo modo:

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\tilde{T}}{d\tilde{t}} \right|_{x',\tilde{t}} &= \frac{\tilde{T}_{i,j} - \tilde{T}_{i-1,j}}{\Delta\tilde{t}} \\ \left. \frac{\partial\tilde{T}}{\partial x'} \right|_{x',\tilde{t}} &= \frac{\tilde{T}_{i-1,j} - \tilde{T}_{i-1,j-1}}{\Delta x'} \\ \left. \frac{\partial^2\tilde{T}}{\partial x'^2} \right|_{x',\tilde{t}} &= \frac{\tilde{T}_{i-1,j+1} - 2\tilde{T}_{i-1,j} + \tilde{T}_{i-1,j-1}}{\Delta x'^2}.\end{aligned}\tag{4.4}$$

Come conseguenza la 4.3 diventa:

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{T}_{i,j} - \tilde{T}_{i-1,j}}{\Delta\tilde{t}} &= K' \frac{\tilde{T}_{i-1,j+1} - 2\tilde{T}_{i-1,j} + \tilde{T}_{i-1,j-1}}{\Delta x'^2} + \\ &S'_{i,j} + v'_{i-1} \frac{\tilde{T}_{i-1,j} - \tilde{T}_{i-1,j-1}}{\Delta x'}\end{aligned}\tag{4.5}$$

ovvero

$$\begin{aligned}\tilde{T}_{i,j} &= (\alpha K' - \beta v'_{i-1}) \tilde{T}_{i-1,j-1} + (1 - 2\alpha K' + \beta v'_{i-1}) \tilde{T}_{i-1,j} + \\ &\alpha K' \tilde{T}_{i-1,j+1} + S'_{i,j} \Delta\tilde{t}\end{aligned}\tag{4.6}$$

$$\text{con } \alpha = \frac{\Delta\tilde{t}}{\Delta x'^2} \text{ e } \beta = \frac{\Delta\tilde{t}}{\Delta x'}.$$

Come si può vedere la 4.5 permette di calcolare il valore approssimato di $\tilde{T}(x', \tilde{t})$ per $\tilde{t} = i\Delta\tilde{t}$ e $x' = j\Delta x'$ noti, al tempo $\tilde{t} = (i-1)\Delta\tilde{t}$, i valori della velocità di evaporazione, della sorgente di energia nel punto $j\Delta x'$ e della temperatura rispettivamente nei punti $(j-1)\Delta x'$, $j\Delta x'$ e $(j+1)\Delta x'$.

Stabilita la temperatura del campione al tempo $\tilde{t} = 0$ è possibile, quindi, seguirne l'evoluzione temporale a patto di fornire le opportune condizioni di bordo.

Per poter utilizzare i risultati ottenuti in questo modo è necessario conoscere la differenza massima tra i valori reali della soluzioni di 4.3 e quelli ottenuti tramite la 4.5. La stima di questo errore è data da un teorema che, sotto opportune condizioni, stabilisce la convergenza della soluzione approssimata verso i valori della soluzione esatta al tendere di $\Delta x'$ a zero.

Le condizioni che devono verificarsi sono le seguenti:

1. $S'(x, t)$ è limitata
2. $-N \leq \frac{\partial S'}{\partial \tilde{T}} \leq 0$
con $N \in \mathbf{R}$, $N \geq 0$ (nel nostro caso $N=0$)
3. $0 < K' \leq \nu'$
con $\nu' \in \mathbf{R}$, $\nu' > 0$
4. $|v'(t)| \leq M'$ con $M' \in \mathbf{R}$, $M' > 0$
- 5.

$$\Delta\tilde{t} \leq \frac{\Delta x'^2}{N\Delta x'^2 + 2\nu' + M'\Delta x'}. \quad (4.7)$$

La 4.7, in particolare, fornisce la condizione di stabilità delle soluzioni trovate e deve essere rispettata nella scelta dei valori di $\Delta\tilde{t}$ e di $\Delta x'$. Nel nostro caso, questa condizione può essere riscritta come:

$$\frac{\Delta\tilde{t} \left(K' + \frac{M'\Delta x'}{2} \right)}{\Delta x'^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (4.8)$$

Ripristinando le dimensioni delle grandezze in gioco, la 4.8 si riscrive nel modo seguente:

$$\frac{\Delta t \left(\frac{K}{c\rho} + \frac{1}{2}M\Delta x \right)}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (4.9)$$

dove M è legato ad una relazione analoga alla 4). La condizione 4.9 ci impone un restrizione sui possibili valori di Δt una volta fissato Δx .

Per poter utilizzare la 4.5 è necessario suddividere il campione in un numero finito di strati di spessore Δx delimitati da due facce piane parallele alla superficie. All'interno di ogni strato i parametri termodinamici del sistema sono considerati costanti. Il primo strato ($j = 1$) coincide con la parte superficiale del campione mentre l'ultimo strato ($j = j_{max}$) assume il ruolo di strato "infinitamente" distante dalla superficie stessa. Per la nostra simulazione abbiamo preso j_{max} inversamente proporzionale alla lunghezza dell'intervallo spaziale Δx in modo da avere lo strato finale sempre alla stessa distanza dalla superficie al variare del valore di Δx .

4.4 Condizioni iniziali, condizioni di bordo, problema delle transizioni di fase e calcolo della velocità di evaporazione

In questo paragrafo descriveremo le condizioni di bordo e le condizioni iniziali che permettono la risoluzione della 4.2 nella forma data dal metodo alle differenze finite.

Per quanto riguarda le condizioni iniziali, supponendo di volere simulare un campione che prima dell'irraggiamento si trova in equilibrio termico, è possibile scrivere:

$$T(x, t)|_{t=0} = T_a.$$

Supponendo $T_a < T_m$, trascurando effetti di sublimazione, si può considerare nulla la velocità di recessione della superficie all'istante iniziale: $v_e|_{t=0} = 0$.

Se (vedi Cap.2) l'evaporazione inizia a $T = T_m$, allora solo nell'istante in cui la temperatura raggiungerà tale valore avremo $v_e \neq 0$.

Per quanto riguarda le condizioni di bordo sullo strato "infinitamente" distante dalla superficie richiederemo che la temperatura rimanga immutata nel

corso di tutta la simulazione:

$$T(x, t)|_{x \rightarrow \infty} = T_a.$$

All'interno dello schema alle differenze finite questo corrisponde a porre $T_{i,j_{max}} = T_a$ per qualunque i .

La condizione da porre alla superficie in presenza di evaporazione è invece più delicata.

Cominciamo con l'osservare che, se siamo nell'intervallo di temperature $T_a \leq T \leq T_m$, allora non si hanno ancora effetti dovuti all'evaporazione e, trascurando eventuali perdite di energia per irraggiamento, possiamo supporre nullo il flusso di energia uscente dalla superficie, ovvero porre:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0, t} = 0.$$

Questo, in termini di metodo alle differenze finite, equivale a porre:

$$\frac{\tilde{T}_{i,1} - \tilde{T}_{i,0}}{\Delta x'} = 0 \quad (4.10)$$

dove l'indice $j = 1$ rappresenta lo strato superficiale, e consente di utilizzare la 4.5 anche per calcolare la temperatura $T_{i,1}$.

In presenza di evaporazione, tuttavia, il flusso uscente dalla superficie non è più nullo ma è pari all'energia contenuta per unità di area nello strato evaporato nell'unità di tempo sommata al calore latente di evaporazione necessario per la transizione di fase.

Di questa nuova condizione si può tenere conto, nell'ambito della trattazione numerica, calcolando dapprima la velocità di evaporazione (per $T \leq T_e$) con la 2.33 e mantenendo, in un primo tempo, la 4.10. La $\tilde{T}_{i,1}$, calcolata in questo modo tramite la 4.5, tiene conto del flusso di energia contenuta negli strati che evaporano ma non dell'energia necessaria per farli evaporare (calore latente di evaporazione). Questa è sottratta alla parte del campione che rimane ed è perciò necessario ridefinire la temperatura dello strato $j = 1$ in modo da tenere conto di questo fatto:

$$\tilde{T}_{i,1} = \tilde{T}_{i,1} - v' \Delta \tilde{t} H'_{lat}$$

con H'_{lat} calore latente di evaporazione opportunamente normalizzato.

Nel caso in cui, durante la fase del riscaldamento del campione, la temperatura dello strato superficiale, calcolata con questi metodi approssimati, dovesse superare la temperatura di ebollizione, allora è possibile pensare che l'energia in eccesso, E_e , contenuta nello strato $j = 1$ sia a disposizione per fornire il calore latente, H_{str} , necessario all'evaporazione di una frazione di strato di spessore, $v_e \Delta t$, calcolato sulla base di una velocità di evaporazione data dalla 2.33 per $T = T_e$. Se H_{str} dovesse però risultare superiore ad E_e allora la differenza di energia dovrebbe essere fornita, come nel caso precedente, dalla frazione di strato rimanente (quella che rimane in fase liquida).

Se, al contrario, E_e fosse maggiore della quantità necessaria a far evaporare lo strato $v_e \Delta t$ allora si presenterebbero due possibilità.

La prima è quella per la quale tutta l'energia in più rispetto a quella necessaria ha effettivamente innalzato la temperatura del campione oltre il punto di ebollizione fino a T_{sh} . A questo punto la velocità di evaporazione deve essere calcolata nuovamente, sempre sulla base della 2.33, ma con $T = T_{sh}$.

La seconda possibilità corrisponde alla situazione nella quale questa energia viene direttamente messa a disposizione per far evaporare un ulteriore strato del campione. La prima possibilità si avvicina maggiormente a quello che comunemente si interpreta come un surriscaldamento del campione oltre il punto di ebollizione mentre la seconda simula un regime di "ebollizione".

E' difficile dire (vedi Cap.2) quale interpretazione sia quella che descrive realmente il fenomeno fisico in esame.

Nel nostro lavoro abbiamo scelto la seconda. La velocità di evaporazione totale sarà data, allora, dalla somma della velocità calcolata tramite la 2.33 e la velocità calcolata sulla base dell'ulteriore strato del campione che evapora a causa dell'eccesso di energia. La condizione di bordo sulla superficie non si discosta di molto dalla precedente ($T \leq T_e$) ma, in questo caso non è descrivibile in una forma matematica semplice: lo è, invece, nell'ambito delle tecniche numeriche utilizzate al calcolatore.

4.4.1 Transizioni di fase nell'ambito della trattazione numerica

Con le condizioni di bordo viste precedentemente la 4.2 descrive l'evoluzione della temperatura del campione in zone dove è presente una fase unica. L'interfaccia solido-liquido richiede invece l'utilizzo di altre condizioni esprimibili in termini di equazioni di conservazione.

Supponiamo che, nel campione, i primi j_{liq} strati siano in fase liquida mentre a partire dallo strato $j_{liq} + 2$ la fase sia quella solida. Lo strato $j_{liq} + 1$ sarà quello interessato da una transizione di fase.

A partire dalla superficie e fino allo strato $j_{liq} - 1$ e dallo strato $j_{liq} + 3$ fino a j_{max} è

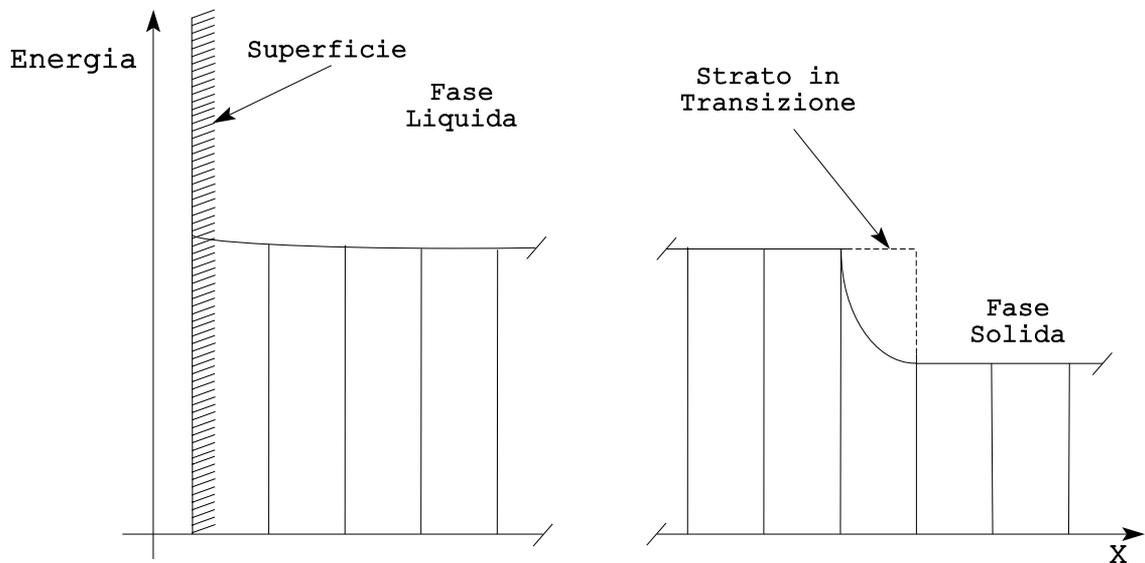


Figura 4.2: Transizione di fase solido liquido

possibile utilizzare la 4.2 con valori della conducibilità termica propri rispettivamente della fase liquida e della fase solida.

Per quanto riguarda gli strati j_{liq} , $j_{liq} + 1$, $j_{liq} + 2$ la prima difficoltà sorge allorchè si cerca di calcolare il flusso di calore all'interfaccia tra i primi due e all'interfaccia tra il secondo e il terzo. Infatti, lo strato $j_{liq} + 1$ non è caratterizzato da una conducibilità termica ben precisa non essendo né in fase liquida né

in fase solida.

La seconda difficoltà riguarda il modo in cui si tiene conto della transizione di fase. Per descrivere il metodo utilizzato, supponiamo per un momento che lo strato $j_{liq} + 1$ si trovi ad una temperatura $T < T_m$. In queste condizioni il flusso a destra sarà completamente caratterizzato dalla conducibilità termica del solido. Per quanto riguarda il flusso a sinistra abbiamo supposto che questo sia caratterizzato dalla conducibilità caratteristica dello strato j_{liq} . Fatte queste ipotesi è possibile utilizzare la 4.5 per calcolare i nuovi valori della temperatura sia per lo strato j_{liq} che per lo strato $j_{liq} + 2$. Per quanto riguarda lo strato $j_{liq} + 1$ la differenza tra i flussi in entrata e in uscita darà l'energia che si è accumulata all'interno dello strato stesso. Questa energia sarà utilizzata, all'inizio, per aumentare la temperatura dello strato fino alla temperatura pari a T_m e, raggiunta questa soglia, fornirà, invece, una frazione, J_f , del calore latente di fusione necessario per la transizione di fase dello strato.

A questo punto caratterizzeremo la conducibilità termica dello strato interessato alla transizione di fase con una media pesata delle conducibilità del solido e del liquido:

$$K_{j_{liq}+1} = J_f K_{liq} + (1 - J_f) K_{sol}. \quad (4.11)$$

Nel passaggio successivo il flusso a destra dello strato in fusione sarà calcolato sulla base della conducibilità 4.11 mentre il calcolo del flusso a sinistra rimarrà invariato. Il bilancio tra il flusso entrante e quello uscente fornirà un'ulteriore frazione del calore latente necessario e così via fino a quando J_f raggiungerà il valore dell'unità. A questo punto tutto lo strato sarà in fase liquida e il problema della transizione di fase coinvolgerà lo strato successivo.

Per quanto riguarda il passaggio di fase inverso (liquido-solido) il metodo utilizzato è analogo.

Nel caso di transizione di fase liquido-vapore il metodo utilizzato nella trattazione numerica è diverso dal precedente. Infatti, come abbiamo già spiegato, la velocità di evaporazione (almeno per temperature inferiori a quella di ebollizione) non è calcolata indirettamente dal bilancio energetico tra il flusso entrante e il flusso

uscite (anche se questo naturalmente determina la temperatura del campione). Si ricorre invece alla 2.33 e si sottrae il calore latente necessario per l'evaporazione dello strato relativo dal campione rimasto. Il fatto poi di utilizzare un riferimento mobile solidale con la superficie di evaporazione evita la complicazione di "memorizzare" la frazione di strato evaporata.

4.5 Caratteristiche dell'impulso laser considerato nel calcolo numerico

Per tenere conto del fatto che la potenza di un impulso laser non è costante ma varia nel tempo abbiamo supposto che la forma temporale della stessa sia di tipo triangolare. La potenza cresce dal valore $P_t = 0$ al tempo $t = 0$ al valore $P_{t_{max}}$ raggiunto in un tempo pari a metà della durata dell'impulso e ridiscende a zero per $t = \tau_e$:

$$P_t = \begin{cases} P_{t_0} t & 0 \leq t \leq \frac{\tau_e}{2} \\ 2 P_{t_0} \frac{\tau_e}{2} - P_{t_0} t & \frac{\tau_e}{2} \leq t \leq \tau_e \\ 0 & t \geq \tau_e. \end{cases} \quad (4.12)$$

La potenza P_{t_0} è legata all'energia totale dell'impulso , E_{tot} , tramite la seguente relazione:

$$E_{tot} = P_{t_0} \left(\frac{\tau_e}{2} \right)^2.$$

I parametri utilizzati per la simulazione sono proprio E_{tot} per unità di area e la durata dell'impulso τ_e .

Con la descrizione dell'impulso laser abbiamo completato le note sugli algoritmi numerici impiegati per la risoluzione del problema della conduzione del calore e delle transizioni di fase all'interno del campione. La velocità di evaporazione e il profilo di temperatura della superficie, in funzione del tempo, saranno i risultati che verranno utilizzati per stabilire le condizioni di superficie per la descrizione dei processi gas-dinamici.

4.6 Le equazioni della gas-dinamica e il metodo di Godunov

Le equazioni della gas dinamica si prestano poco per essere integrate con il metodo alle differenze finite usato per l'equazione del trasporto del calore. Questo è dovuto al fatto che, anche partendo da condizioni iniziali e di bordo prive di discontinuità nella densità del gas in funzione dello spazio, si possono realizzare delle configurazioni, per il sistema, nelle quali queste discontinuità sono invece presenti. Per questo motivo abbiamo preferito cercare un metodo di soluzione diverso, il *metodo di Godunov*. Questo metodo sviluppato alla fine degli anni '50 [37] è stato utilizzato recentemente per studiare problemi connessi con l'evaporazione di un gas da un solido [32]. La particolarità di questo metodo è il fatto di essere stato sviluppato proprio per lo studio di problemi di gas dinamica con condizioni iniziali in cui siano presenti delle discontinuità nella densità del gas in funzione dello spazio. Ecco quindi che, nonostante le nostre condizioni di bordo siano di tipo continuo, in quanto studiamo l'evaporazione del solido passando con continuità da un regime di evaporazione debole ad un regime parossistico, l'utilizzo del metodo di Godunov ci permette di trattare il problema anche nel caso in cui nel gas si formassero delle discontinuità.

Riassumiamo di seguito le equazioni di conservazione per la gas dinamica, descritte nel capitolo 3, nel caso si possano trascurare eventuali forze esterne:

1. Equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (4.13)$$

2. equazione di Eulero

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_\alpha u_i) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = 0. \quad (4.14)$$

e infine

3. equazione di conservazione dell'energia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}^2 + \mathcal{E} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}^2 + \mathcal{E} + \frac{P}{\rho} \right) \right) = 0. \quad (4.15)$$

Come si può vedere siamo in presenza di equazioni contenenti derivate prime. Risulta chiaro che in presenza di discontinuità le equazioni riportate perdono di significato. Il primo passo del metodo proposto da Godunov consiste, quindi, nel porre le equazioni 4.13, 4.14 e 4.15 in un'altra forma.

Limitandoci, come abbiamo già fatto per l'equazione del trasporto del calore, al caso di una descrizione unidimensionale del fenomeno in esame, abbiamo solo due variabili indipendenti, il tempo, t , e la coordinata x che fornisce la distanza dalla superficie da cui inizia il processo di evaporazione. A questo punto per compattare la scrittura consideriamo la funzione R_1 definita come :

$$R_1 = \begin{cases} \rho & \text{nell'equazione di continuità} \\ \rho u & \text{nell'equazione di Eulero} \\ \rho \left(\mathcal{E} + \frac{1}{2} u^2 \right) & \text{nell'equazione di conservazione dell'energia} \end{cases} \quad (4.16)$$

e la funzione R_2 :

$$R_2 = \begin{cases} \rho u & \text{nell'equazione di continuità} \\ (\rho u^2 + P) & \text{nell'equazione di Eulero} \\ \rho u \left(\frac{1}{2} u^2 + \mathcal{E} + \frac{P}{\rho} \right) & \text{nell'equazione di conservazione dell'energia.} \end{cases} \quad (4.17)$$

Le equazioni della idrodinamica si possono riscrivere, allora, in questo modo:

$$\frac{\partial R_1}{\partial t} + \frac{\partial R_2}{\partial x} = 0. \quad (4.18)$$

Considerando (R_1, R_2) come funzione vettoriale del tipo:

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{R}^2 & \longrightarrow & \mathbf{R}^2 \\ (t, x) & \longrightarrow & (R_1, R_2). \end{array}$$

integriamo quindi l'equazione 4.18 su una porzione, Ω , nel piano t - x racchiusa da una curva, $\Gamma(\Omega)$:

$$\int \int_{\Omega} \left(\frac{\partial R_1}{\partial t} + \frac{\partial R_2}{\partial x} \right) dt dx = 0. \quad (4.19)$$

Possiamo utilizzare ora il *Teorema di Green* e riscrivere il tutto nella forma:

$$\int_{\Gamma(\Omega)} \left(R_1 dx - R_2 dt \right) = 0. \quad (4.20)$$

Le soluzioni della 4.18 soddisfano naturalmente anche la 4.20 qualunque sia la curva considerata nel piano t - x . Tuttavia, poichè la 4.20 non contiene più termini con derivate prime del tempo e dello spazio, si può assumere che questa sia un'equazione di carattere più generale che permette di trattare anche le discontinuità.

Il secondo passo dello schema di Godunov consiste nella discretizzazione dello spazio e del tempo. In particolare, se il gas si propaga in uno spazio unidimensionale semiinfinito a partire dalla superficie di evaporazione, allora potremmo utilizzare degli strati di larghezza Δx_G abbastanza piccola da poter considerare costante la pressione e la densità all'interno del singolo strato (al tempo, t , fissato) individuando gli strati stessi con dei numeri interi $1, 2, \dots$ a partire dalla superficie (vedi Fig. 4.3). In questo caso lo strato n sarà quello compreso tra $x = (n-1)\Delta x_G$ e $x = n\Delta x_G$.

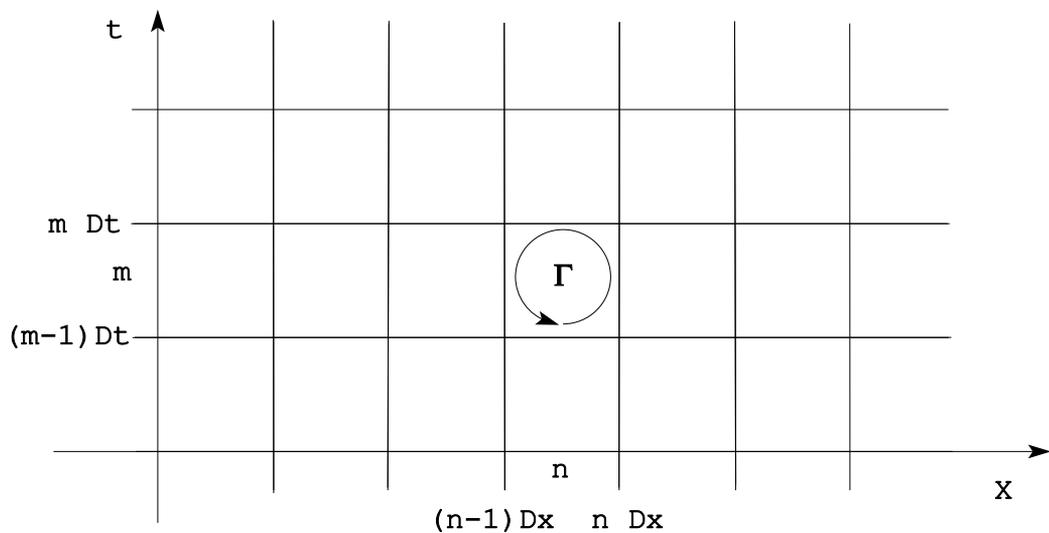


Figura 4.3: Discretizzazione del piano t - x

Allo stesso modo potremo discretizzare il tempo con degli intervalli Δt_G indicando con il numero naturale m lo strato compreso tra $t = (m-1)\Delta t_G$ e $t = m\Delta t_G$. La condizione da porre sulla durata di questi intervalli temporali sarà chiarita in seguito. Il procedimento di discretizzazione fa sì che il piano (t,x) risulti diviso in rettangoli di lati Δt_G e Δx_G .

Le funzioni continue R_1 e R_2 calcolate al tempo $t = m\Delta t_G$ saranno approssimate

per $(n-1)\Delta x_G < x < n\Delta x_G$ con i valori $R_{1m,n}$ e $R_{2m,n}$.

Se scegliamo come cammino di integrazione, $\Gamma(\Omega)$, un particolare rettangolo, ad esempio il rettangolo dato dall'intersezione dello strato spaziale n con lo strato temporale m otteniamo:

$$\int_{\Gamma(\Omega)} R_1 dx \simeq (R_{1m-1,n} - R_{1m,n}) \Delta x_G \quad (4.21)$$

e

$$\int_{\Gamma(\Omega)} R_2 dt \simeq (R_{2m-1,n}^{dx} - R_{2m-1,n}^{sx}) \Delta t_G \quad (4.22)$$

dove $R_{2m-1,n}^{dx}$ è un valore efficace di R_2 calcolata ad $x = n\Delta x_G$ per $(m-1)\Delta t_G \leq t \leq m\Delta t_G$ ($R_{2m-1,n}^{sx}$ è invece il valore efficace di R_2 calcolata sempre nello stesso intervallo temporale ma per $x = (n-1)\Delta x_G$).

Dalle 4.20, 4.21 e 4.22 otteniamo infine:

$$R_{1m,n} = R_{1m-1,n} - \frac{\Delta t_G}{\Delta x_G} (R_{2m-1,n}^{dx} - R_{2m-1,n}^{sx}). \quad (4.23)$$

Riscrivendo le equazioni componente per componente otteniamo:

$$\rho_{m,n} = \rho_{m-1,n} - \frac{\Delta t_G}{\Delta x_G} \left((\rho u)_{m-1,n}^{dx} - (\rho u)_{m-1,n}^{sx} \right) \quad (4.24)$$

$$(\rho u)_{m,n} = (\rho u)_{m-1,n} - \frac{\Delta t_G}{\Delta x_G} \left((P + \rho u^2)_{m-1,n}^{dx} - (P + \rho u^2)_{m-1,n}^{sx} \right) \quad (4.25)$$

e infine:

$$\begin{aligned} [\rho(\frac{1}{2}u^2 + \mathcal{E})]_{m,n} &= [\rho(\frac{1}{2}u^2 + \mathcal{E})]_{m-1,n} - \frac{\Delta t_G}{\Delta x_G} \left\{ \left[\rho u \left(\frac{1}{2}u^2 + \mathcal{E} + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \frac{P}{\rho} \right) \right]_{m-1,n}^{dx} - \left[\rho u \left(\frac{1}{2}u^2 + \mathcal{E} + \frac{P}{\rho} \right) \right]_{m-1,n}^{sx} \right\}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Le 4.24, 4.25 e la 4.27 costituiscono un sistema di equazioni che permettono di calcolare le grandezze fisiche che caratterizzano il gas al tempo $t = m\Delta t_G$ una volta note i valori delle stesse grandezze al tempo $(m-1)\Delta t_G$ e i valori delle grandezze con indice $dx - sx$.

In realtà, per giungere a questo risultato è necessario introdurre anche un'equazione di stato:

$$P = P(\rho, \mathcal{E})$$

che può essere identificata con la 3.45.

Come abbiamo visto nel Cap.3 l'equazione 3.45 assieme all'equazione di conservazione dell'energia ci conduce, sotto opportune ipotesi, all'adiabatica di Poisson 3.68. Il sistema da utilizzare è dato, quindi, dalla 4.24, 4.25 assieme con l'equazione di Poisson in forma discreta:

$$P_{m,n} = \frac{P_0}{\rho_0^\gamma} \rho_{m,n}^\gamma.$$

Per quanto riguarda il calcolo di $\frac{P_0}{\rho_0^\gamma}$ si potrebbero utilizzare i valori della pressione e della densità alla superficie (almeno durante la fase di evaporazione) ottenendo, in tal modo, una dipendenza di questa quantità dalla temperatura della superficie stessa e, quindi, indirettamente dal tempo (vedi Cap.3)². A causa delle difficoltà incontrate abbiamo deciso, però, di trattare $\frac{P_0}{\rho_0^\gamma}$ come una sorta di parametro "efficace" costante nel tempo.

Il terzo passo dello schema di Godunov consiste nel calcolo di $(\rho u)_{m-1,n}^{sx/dx}$ e di $(P + \rho u^2)_{m-1,n}^{sx/dx}$. Per arrivare a questo risultato si osservi che, nel processo di discretizzazione, si vengono a formare degli strati contigui che differiscono in densità, pressione e velocità di quantità finite (Godunov suggerisce per questa situazione il nome di *cascata di discontinuità*).

Tra due strati vicini, quindi, la condizione al tempo $t = (m - 1) \Delta t_G$ è simile a quella presente in un *tubo d'urto* (vedi Cap.3). Utilizzeremo perciò i risultati ottenuti tramite quel modello per ricavare i valori della pressione, P_{int} , della densità, ρ_{int} e della velocità v_{int} all'interfaccia.

Se ad esempio vogliamo calcolare i valori $(\rho u)_{m-1,n}^{sx}$ e $(P + \rho u^2)_{m-1,n}^{sx}$ allora, con

²Abbiamo osservato, tuttavia, che una descrizione di questo tipo provoca delle notevoli difficoltà nel calcolo numerico rendendo instabili le soluzioni. Non è ben chiaro come mai succeda questo ma, presumibilmente, la difficoltà insorge per la pretesa di utilizzare un solo valore (dipendente dalle condizioni superficiali) per determinare la costante presente nell'equazione di stato di tutto il gas. È chiaro che gli strati di gas più distanti dalla superficie, invece, non potranno seguire istantaneamente la variazione delle condizioni sulla superficie stessa, variazione che può essere considerata come una perturbazione nel gas a contatto con il campione che si propaga alla velocità locale del suono.

riferimento al paragrafo 3.7.4, definiremo:

$$\begin{aligned}\rho_2 &= \rho_{m-1,n-1} & \rho_1 &= \rho_{m-1,n} \\ u_2 &= u_{m-1,n-1} & u_1 &= u_{m-1,n} \\ P_2 &= P_{m-1,n-1} & P_1 &= P_{m-1,n}\end{aligned}$$

e seguiremo poi il metodo per la descrizione delle discontinuità ivi descritto.

Alla fine si potrà porre:

$$(\rho u)_{m-1,n}^{sx} = \rho_{int} u_{int}$$

e

$$(P + \rho u^2)_{m-1,n}^{sx} = P_{int} + \rho_{int} u_{int}^2.$$

Si avrà poi

$$(\rho u)_{m-1,n}^{dx} = (\rho u)_{m-1,n+1}^{sx} \tag{4.27}$$

$$(P + \rho u^2)_{m-1,n}^{dx} = (P + \rho u^2)_{m-1,n+1}^{sx}.$$

La differenza sostanziale tra il tubo d'urto e gli strati utilizzati nel metodo di Godunov consiste nel fatto che, mentre nel primo le zone a contatto sono di estensione semiinfinita, nel secondo siamo in presenza di zone di estensione limitata, Δx_G .

Questa condizione si riflette sulla scelta degli intervalli temporali in relazione agli intervalli spaziali. È chiaro, infatti, che se nel tempo Δt_G le onde generate all'interfaccia tra lo strato n e $n - 1$ raggiungono l'interfaccia tra gli strati n e $n + 1$ o quella tra gli strati $n - 2$ e $n - 1$ allora i valori di pressione, densità e velocità ivi stimati con il metodo descritto non corrispondono più a quelli realmente presenti. Quindi, per avere stabilità nelle soluzioni, il tempo Δt_G deve essere scelto in maniera tale che questa circostanza non si possa verificare mai.

Per quanto riguarda la convergenza della soluzione approssimata a quella esatta si dimostra che si ottiene nel limite $\Delta x_G \rightarrow 0$.

4.6.1 Condizioni iniziali e di bordo per l'integrazione delle equazioni dell'idrodinamica con il metodo di Godunov

Prima dell'inizio dell'evaporazione, $t \leq t_i$, lo spazio all'esterno del campione è supposto vuoto.

Possiamo quindi scrivere:

$$\rho(x, t) = u(x, t) = 0 \quad \text{per} \quad 0 \leq t \leq t_i \\ x > 0.$$

L'evaporazione procederà in un primo momento in un regime di flusso in cui non avvengono collisioni: la densità sarà ovunque molto bassa.

Abbiamo deciso di trascurare questa prima fase e considerare gli effetti dell'evaporazione solo quando v_e , velocità di evaporazione, raggiunge la soglia di 0.5 cm/sec (vedi paragrafo 3.8.3).

A partire da questo istante, t_s (con $t_s > t_i$), che abbiamo scelto come origine dei tempi per quanto riguarda la descrizione dei processi gas dinamici, abbiamo considerato il flusso di materia uscente dalla superficie come:

$$J_m = \rho v_e$$

con ρ densità del campione irraggiato

mentre, per quanto riguarda il flusso di quantità di moto (pressione), abbiamo ottenuto:

$$J_q = J_{q_1} + J_{q_2}$$

dove J_{q_1} è il flusso di quantità di moto dovuta al trasporto di materia, J_{q_2} quello dovuto alla presenza della superficie sulla quale le particelle rimbalzano.

Si ha:

$$J_{q_1} = \rho v_e \langle v_x \rangle$$

dove $\langle v_x \rangle$ è la velocità media delle particelle uscenti, stimata sulla base della 3.111

e

$$J_{q_2} = P$$

con P pressione presente sulla superficie.

Per quanto riguarda la $\langle v_x \rangle$ abbiamo utilizzato, in prima approssimazione, un valore prefissato, preferendolo al valore "esatto" calcolato sulla base della 3.111 per questioni di semplicità³ (in questo modo la velocità è costante per tutta la durata dell'evaporazione).

La pressione alla superficie è stata calcolata, invece, sulla base della densità presente sul primo strato interessato dalla gas dinamica, tramite l'equazione di Poisson.

Quando la velocità di evaporazione ritorna sotto la soglia dei 0.5 cm/sec , $t = t_f$, allora il numero di particelle che evaporano dalla superficie diviene molto basso. Quindi, nonostante queste particelle non possano entrare in un regime di flusso in cui non ci sono collisioni a causa dello strato di gas che ormai si è formato in prossimità della superficie, tuttavia, il loro numero sarà troppo esiguo per potere influenzare in maniera significativa la dinamica delle particelle già fuoriuscite. Per questo motivo, per quanto riguarda la dinamica del gas, abbiamo fatto coincidere la fine dell'evaporazione proprio con t_f (la durata complessiva dell'evaporazione è quindi $\tau_s = t_f - t_s$).

Da questo momento in poi, se non si verifica riconsolidazione e si può parlare quindi in termini di *modello a riflessione*, la somma delle particelle all'esterno del campione rimane costante nel tempo e di conseguenza anche la massa totale del gas, M_{tot} .

Condizioni di bordo per il modello a riflessione

Per quanto detto precedentemente, in assenza di riconsolidazione, in un generico istante $t = m \Delta t_G > t_f$, la massa complessiva delle particelle che costituiscono il gas sarà data da:

$$M_m = \Delta x_G \sum_{n=1}^{\infty} \rho_{m,n} = M_{tot}.$$

³Ricordiamo che per questo tipo di problemi non esistono soluzioni analitiche e, a nostra conoscenza, questo lavoro di tesi è il primo studio di tipo numerico relativo a processi idrodinamici generati da impulsi laser e per i quali la densità del gas generato, vicino alla superficie, varia durante l'impulso.

Al tempo $t = (m + 1) \Delta t_G$ la massa sarà data, tenuto conto della 4.23, da:

$$M_{m+1} = \Delta x_G \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \rho_{m,n} - \frac{\Delta t_G}{\Delta x_G} \left[(\rho u)_{m-1,n}^{dx} - (\rho u)_{m-1,n}^{sx} \right] \right\}$$

tenuto conto della 4.27 questa sommatoria può essere riscritta come:

$$\begin{aligned} M_{m+1} &= \Delta x_G \rho_{m,1} - \Delta t_G \left[(\rho u)_{m-1,2}^{sx} - (\rho u)_{m-1,1}^{sx} \right] + \\ &\quad \Delta x_G \rho_{m,2} - \Delta t_G \left[(\rho u)_{m-1,3}^{sx} - (\rho u)_{m-1,2}^{sx} \right] + \\ &\quad \vdots \\ &= M_m + \Delta t_G \left[(\rho u)_{m-1,1}^{sx} - (\rho u)_{m-1,\infty}^{sx} \right]. \end{aligned}$$

Considerando che $(\rho u)_{m-1,\infty}^{sx} = 0$, la conservazione della massa ci impone di porre, come condizione di bordo, $(\rho u)_{m-1,1} = 0$. Questo, ovviamente, è equivalente ad imporre $J_m = 0$ e $J_{q1} = 0$.

In definitiva, sulla superficie del campione, avremo le seguenti condizioni:

$$\begin{cases} \rho_{m,1}^{sx} = \rho_{m,1} \\ u_{m,1}^{sx} = 0 \end{cases} \quad \text{per } m \Delta t_G \geq t_f.$$

Condizioni di bordo per il modello a riconsolazione

Se vogliamo simulare una riconsolazione, allora, potremo supporre che tutte le particelle che colpiscono la superficie vi rimangano attaccate.

Questo è equivalente ad immaginare una situazione in cui la superficie non trasferisce quantità di moto al gas che, ad ogni istante, è quindi libero di espandersi nel "vuoto" a partire dalla superficie stessa.

Si può tenere conto di questo fatto introducendo, nella trattazione numerica, uno "strato fittizio" [32], che etichetteremo con l'indice spaziale $n = 0$ (vedi Fig.4.4), caratterizzato dalla seguente densità e velocità:

$$\begin{cases} \rho_{m,0} = 0 \\ u_{m,0} = 0 \end{cases} \quad \text{per } m \Delta t_G \geq t_f.$$

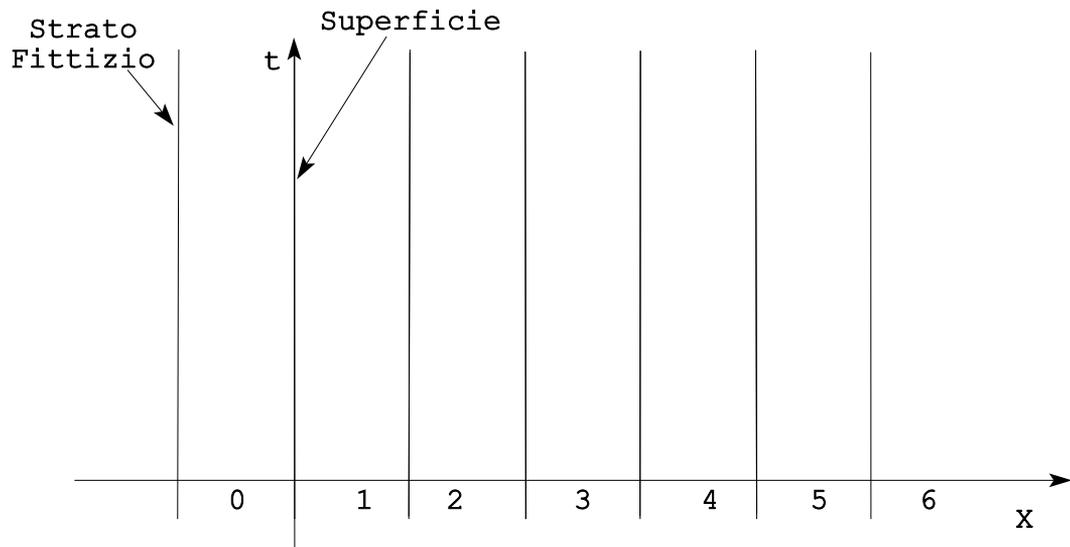


Figura 4.4: Introduzione dello strato fittizio per simulare le condizioni di bordo nel modello a riconsolazione.

Per quanto riguarda il fronte di espansione, n_{max} , questo sarà caratterizzato da una densità e da una velocità date da:

$$\begin{cases} \rho_{m,n_{max}}^{dx} = 0 \\ u_{m,n_{max}}^{dx} = 0 \end{cases} \quad \forall m.$$

L'indice n_{max} sarà poi incrementato di un unità ad ogni ciclo temporale.

Nel prossimo capitolo descriveremo i risultati ottenuti sulla base degli algoritmi numerici e delle condizioni al contorno illustrate in questa sezione.