

▷ Lezione IX

Leggi di conservazione

Leggi di conservazione

Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, con $n \in \{1, 2, 3\}$, un dominio sufficientemente regolare. Consideriamo una legge di conservazione generica del tipo

$$\partial_t c + \nabla \cdot \mathbf{f}(c) = 0 \quad \text{per } t > t_0$$

dove c è la quantità che viene conservata e \mathbf{f} una funzione a valori vettoriali $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ data, detta flusso. Assumendo che Ω non vari in tempo, integrando la precedente equazione su Ω e utilizzando il teorema della divergenza otteniamo la seguente relazione:

$$\int_{\Omega} \partial_t c + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{f}(c) = 0 \quad \rightarrow \quad \partial_t \int_{\Omega} c = \int_{\partial\Omega} \mathbf{f}(c) \cdot \mathbf{n}$$

dove \mathbf{n} è la normale di $\partial\Omega$, unitaria e che punta verso l'esterno di Ω . L'equazione precedente esprime il fatto che la variazione della quantità (massa) $\int_{\Omega} c$ nel tempo è dovuta ad uno scambio (di massa) con l'esterno descritto dal flusso attraverso il bordo $\partial\Omega$. Se quest'ultimo risulta nullo allora abbiamo che $\int_{\Omega} c$ risulta costante nel tempo.

Associata alla precedente equazione dobbiamo prescrivere una condizione iniziale, ossia il valore di c al tempo $t = t_0$, e dei dati sul bordo di Ω . Quest'ultima parte risulta più complessa, infatti devo anzitutto identificare la parte di $\partial\Omega$ tale per cui $\mathbf{f}'(c) \cdot \mathbf{n} < 0$, dove \mathbf{f}' è la derivata di \mathbf{f} rispetto a c , tale condizione implica che la parte di bordo su cui la derivata del flusso $\mathbf{f}'(c)$ risulta entrante e quindi in grado di "portare" massa dall'esterno. Ricordiamo che la normale è rivolta verso l'esterno e quindi il fatto che \mathbf{f}' e \mathbf{n} abbiano verso opposto implica che \mathbf{f}' è entrante. Definiamo poi la porzione del bordo su cui $\mathbf{f}'(c) \cdot \mathbf{n} > 0$, che quindi fa uscire massa da Ω verso l'esterno e infine una parte un cui $\mathbf{f}'(c) \cdot \mathbf{n} = 0$ che è quindi "sigillata" e non permette scambi con l'esterno. Sulla prima parte, detta di *inflow* e indicata con $\partial_{in}\Omega$, dobbiamo prescrivere un valore di c , la seconda viene detta di *outflow* mentre la terza di *no-flow*. Quest'ultima può essere, in alternativa, inclusa nel bordo di inflow o di outflow come caso particolare in cui il flusso di massa risulta nullo: ad esempio possiamo definire $\partial_{in}\Omega$ come la parte del bordo in cui $\mathbf{f}'(c) \cdot \mathbf{n} \leq 0$. Le condizioni quindi che dobbiamo aggiungere sono le seguenti

$$\begin{cases} c(\mathbf{x}, t_0) = c_0(\mathbf{x}) & \text{in } \Omega \\ c = \bar{c} & \text{su } \partial_{in}\Omega \end{cases}$$

dove appunto c_0 e \bar{c} sono dati del problema. Notiamo che, per la seconda condizione, $\partial_{in}\Omega$ potrebbe cambiare nel tempo dato che dipende dal valore di c (ad esempio se il flusso cambiasse segno con c).

Un esempio di flusso è dato dal caso lineare ed in particolare da $\mathbf{f}(c) = \mathbf{q}c$ dove \mathbf{q} è un vettore dato a priori, avremo che $\mathbf{f}' = \mathbf{q}$. L'equazione risulta

$$\partial_t c + \nabla \cdot (\mathbf{q}c) = 0.$$

Includendo la regione di no-flow in quella di inflow e assumendo che c sia una quantità positiva allora l'identificazione di $\partial_{in}\Omega$ può essere fatta una sola volta, dato che essa risulta appunto la regione in cui $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \geq 0$.

Volumi finiti

Procediamo ora con la discretizzazione dell'equazione mediante il metodo dei volumi finiti nel caso monodimensionale $c = c(x, t)$, in cui l'equazione è semplicemente

$$\partial_t c + \partial_x f(c) = 0 \quad \text{in } \Omega. \quad (1.1)$$

Successivamente descriveremo brevemente la trattazione dei problemi per $n = 2$ e 3 . Nel caso monodimensionale, sul dominio $\Omega = (a, b)$, introduciamo una griglia computazionale che per semplicità assumiamo equi-spaziata. Sia quindi N il numero di suddivisioni o celle di Ω e h la lunghezza di ciascuna di esse. Indichiamo con K_i la generica cella i -esima (quando non necessario il pedice i verrà sottinteso). Data una cella possiamo identificare il suo centro, il punto x_i , e il suo bordo che coincide con i due estremi associati $x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - \frac{h}{2}$ e $x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2}$, che connettono la cella i -esima a quella $i-1$ e $i+1$ -esima, rispettivamente. Definiamo inoltre una discretizzazione dell'intervallo temporale $[0, T]$ in intervalli di ampiezza Δt , tali per cui $t_n = n\Delta t$. Dobbiamo ora definire i gradi di libertà associati alla variabile c che la rappresentano nel discreto. Due possibili scelte equivalenti sono rispettivamente l'integrale e la media integrale sulla cella i -esima, dati da

$$\int_{K_i} c(x, t_n) = c_i^n \in \mathbb{R} \quad \text{oppure} \quad \frac{1}{|K_i|} \int_{K_i} c(x, t_n) = c_i^n \in \mathbb{R}$$

Una volta calcolati i valori di c_i^n , per ogni cella, possiamo reinterpretare la soluzione come costante a tratti in tutta la cella stessa. E quindi, a valle di questa reinterpretazione, possiamo anche dire che $c_i^n \in \mathbb{P}_0(K_i)$. La soluzione numerica risulta quindi discontinua tra due celle adiacenti che è una buona strategia in quanto le leggi di conservazione possono sviluppare soluzioni discontinue anche in presenza di dati iniziali continui.

Per la nostra trattazione consideriamo la seconda scelta, che nel caso monodimensionale (equi-spaziato) diventa

$$c_i^n = \frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t_n) dx.$$

La soluzione numerica sarà quindi costante a tratti sulle celle e data da

$$c_h(x, t) = c_i^n \quad \text{per } x \in \left(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right) \quad \text{e per } t \in [t_n, t_{n+1}).$$

Il valore c^0 è l'approssimazione della condizione iniziale calcolata nello stesso modo, ovvero

$$c_i^0 = \frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c_0(x) dx \quad \forall K_i.$$

Procediamo separando la discretizzazione in tempo e in spazio, partendo dalla discretizzazione dell'equazione (1.1) in tempo, utilizzando un opportuno schema numerico. Per semplicità di trattazione consideriamo lo schema di Eulero esplicito anche se altre possibilità sono possibili. Discuteremo successivamente le implicazioni della nostra scelta. Abbiamo il seguente problema semi-discretizzato

$$\frac{c(x, t_{n+1}) - c(x, t_n)}{\Delta t} + \partial_x f(c(x, t_n)) = 0.$$

Integrando ora questa equazione per ogni cella i -esima e utilizzando l'integrazione per parti, possiamo integrare il termine con la derivata in spazio, ottenendo

$$\begin{aligned} \frac{\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t_{n+1}) - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t_n)}{\Delta t} + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \partial_x f(c(x, t_n)) &= 0 \\ h \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, t_n)) - f(c(x_{i-\frac{1}{2}}, t_n)) &= 0 \end{aligned}$$

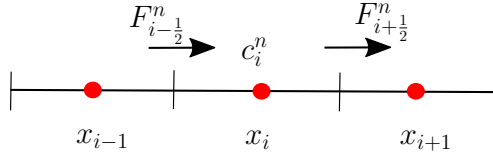
Notiamo che, per come è definita, la soluzione discreta $c_h(x, t_n)$ è discontinua tra le celle e quindi non definita sulle interfacce tra due celle. Nell'approssimazione numerica dobbiamo quindi sostituire tali valutazioni di f in $x_{i-\frac{1}{2}}$ e $x_{i+\frac{1}{2}}$ con il cosiddetto “flusso numerico” $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ e $F_{i+\frac{1}{2}}^n$, rispettivamente, che approssimerà f come

$$f(c(x_{i-\frac{1}{2}}, t_n)) \approx F_{i-\frac{1}{2}}^n(c_{i-1}^n, c_i^n) \quad \text{e} \quad f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, t_n)) \approx F_{i+\frac{1}{2}}^n(c_i^n, c_{i+1}^n)$$

ottenendo quindi che l'equazione di prima si scrive nel seguente modo

$$h \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + F_{i+\frac{1}{2}}^n(c_i^n, c_{i+1}^n) - F_{i-\frac{1}{2}}^n(c_{i-1}^n, c_i^n) = 0.$$

Il flusso numerico $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ e $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ rappresenta quindi lo scambio alle interfacce tra due celle vicine, e può essere rappresentato nel seguente modo



Richiediamo che il flusso numerico $F(a, b)$, che dipende dai valori della soluzione in due celle vicine, qui indicati con a e b per semplicità, soddisfi le seguenti condizioni:

- sia localmente Lipschitz rispetto ad entrambi gli argomenti, ossia che esista $K > 0$ tale che

$$|F(a, b) - F(c, b)| \leq K|a - c|,$$

e analogamente per il secondo argomento;

- sia consistente, ovvero $F(a, a) = f(a)$;
- sia non-decrescente rispetto ad a e non-crescente rispetto a b .

Indipendentemente dalla definizione di F , che verrà discussa nel seguito, notiamo che lo schema numerico risulta conservativo per costruzione. Infatti, se consideriamo la vicina cella $i + 1$ -esima

$$h \frac{c_{i+1}^{n+1} - c_{i+1}^n}{\Delta t} + F_{i+\frac{3}{2}}^n(c_{i+1}^n, c_{i+2}^n) - F_{i+\frac{1}{2}}^n(c_i^n, c_{i+1}^n) = 0,$$

abbiamo che il flusso che esce dalla cella i entra esattamente nella cella $i + 1$, abbiamo quindi conservazione locale della massa. Inoltre, se sommiamo tutte le equazioni (per ogni i) allora i flussi interni si cancellano garantendo quindi anche conservazione globale della massa, se ai bordi esterni abbiamo flusso nullo; altrimenti la variazione di massa compenserà il flusso netto entrante al bordo.

Il flusso numerico

In questa sezione presentiamo alcune strategie per costruire il flusso numerico, notiamo che nel caso più semplice $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ è una funzione di (c_i^n, c_{i+1}^n) e potenzialmente del tempo. Per semplicità in seguito ometteremo dove possibile l'apice n sottintendendo che i flussi numerici dipendono da c_i^n e c_{i+1}^n se usiamo uno schema esplicito.

Flusso upwind

Se il flusso $f(c)$ è monotono, ossia $f'(c) > 0$ (o $f'(c) < 0$) per ogni valore di $c \in [c_m, c_M]$ dove c_m e c_M sono il massimo e minimo valore della condizione iniziale c^0 , allora possiamo usare il cosiddetto flusso *upwind* definito come

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{UP}(c_i, c_{i+1}) = \begin{cases} f(c_i) & \text{se } f'(c) \geq 0 \quad \forall c \in [c_i, c_{i+1}] \\ f(c_{i+1}) & \text{se } f'(c) \leq 0 \quad \forall c \in [c_i, c_{i+1}] \end{cases}.$$

Il nome “upwind” suggerisce che, per costruire il flusso all’interfaccia, dobbiamo usare il valore della soluzione nella cella che si trova “controvento”. Nel caso lineare è infatti ovvio che la soluzione venga infatti trasportata nel senso concorde alla velocità. Tale idea può essere generalizzata considerando una decomposizione del flusso in due parti, ovvero $f = f_1 + f_2$, dove $f'_1(c) \geq 0$ and $f'_2(c) \leq 0$ per ogni valore di $c \in [c_m, c_M]$. Lo schema di approssimazione detto *flux splitting* costruisce quindi il flusso numerico nel seguente modo

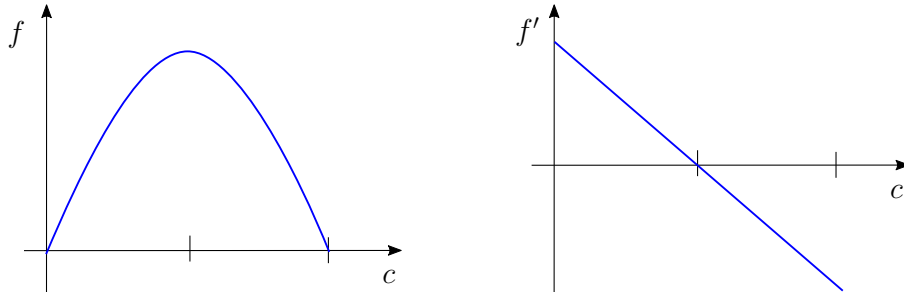
$$F_{i+\frac{1}{2}}^{SP}(c_i, c_{i+1}) = f_1(c_i) + f_2(c_{i+1}).$$

Flusso di Godunov

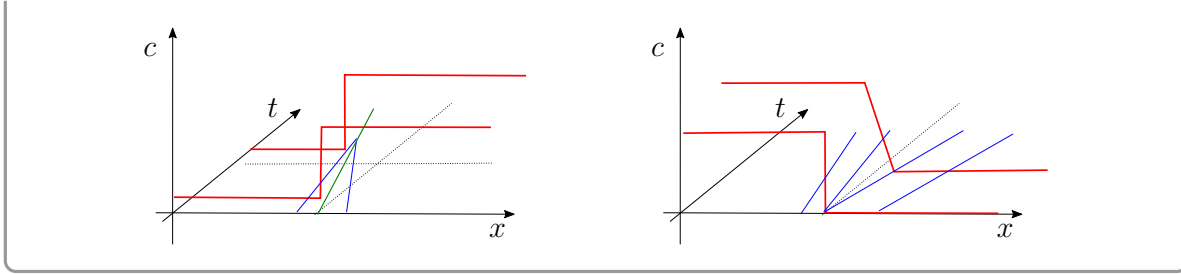
Nel caso in cui abbiamo una funzione flusso più complessa, ad esempio non monotona, è opportuno considerare un diverso flusso numerico. Il metodo di Godunov, proposto nel 1959, cerca di utilizzare i concetti legati alle caratteristiche nel framework di un metodo conservativo (come i volumi finiti). In particolare l’idea è quella di partire da una soluzione costante a tratti al tempo t_n , e di risolvere problemi di Riemann ad ogni interfaccia fra due celle vicine. Per calcolare il flusso di Godunov fra le celle i e $i+1$ consideriamo che, a seconda dei valori di c_i^n e c_{i+1}^n e della “forma” del flusso, possiamo avere uno shock, una rarefazione o una combinazione dei due; questo determina il valore della soluzione c^* nel nodo $i + \frac{1}{2}$ nell’intervallo di tempo $[t_n, t_{n+1}]$. Utilizzando c^* possiamo valutare il flusso numerico all’interfaccia.

Esempio 9.1

Consideriamo $f(c) = c(1 - c)$, mostrato in figura insieme alla sua derivata $f'(c) = 1 - 2c$, e studiamo il problema di Riemann sull’interfaccia $i + \frac{1}{2}$ con $c_i = \frac{1}{4}$ e $c_{i+1} = 1$.



Osserviamo che $f'(c_i) = \frac{1}{2}$ e $f'(c_{i+1}) = -1$. Le caratteristiche convergono e abbiamo la formazione di uno shock di velocità negativa. La soluzione c^* all’interfaccia è quindi $c^* = 1$. All’interfaccia useremo quindi $f(1) = 0$. Consideriamo ora il caso $c_i = 1$, $c_{i+1} = 0$. In questo caso abbiamo una rarefazione perché $f'(c_i) = -1$, $f'(c_{i+1}) = 1$ e grazie alla simmetria possiamo affermare che $c^* = \frac{1}{2}$. All’interfaccia useremo quindi $f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{4}$.



Il flusso di Godunov risultante si può esprimere in modo sintetico con la seguente definizione:

$$F_{i+\frac{1}{2}}^G(c_i, c_{i+1}) = \begin{cases} \min_{\xi \in [c_i, c_{i+1}]} f(\xi) & \text{se } c_i \leq c_{i+1} \\ \max_{\xi \in [c_{i+1}, c_i]} f(\xi) & \text{se } c_i \geq c_{i+1} \end{cases}$$

Osserviamo che se f è monotono questa definizione coincide con il flusso upwind. Un comportamento più interessante si osserva nel caso di flussi non monotoni, come quello dell'esempio precedente.

Esempio 9.2

Consideriamo l'esempio precedente in cui $c_i = \frac{1}{4}$ e $c_{i+1} = 1$ allora abbiamo che il flusso di Godunov risulta essere

$$F_{i+\frac{1}{2}}^G(c_i, c_{i+1}) = \min_{\xi \in [c_i, c_{i+1}]} f(\xi) = \min_{\xi \in [\frac{1}{4}, 1]} \xi(1 - \xi) = f(1) = 0$$

Mentre nel caso in cui abbiamo $c_i = 1$ e $c_{i+1} = 0$, ovvero risulta che $c_i \geq c_{i+1}$ e quindi il flusso numerico

$$F_{i+\frac{1}{2}}^G(c_i, c_{i+1}) = \max_{\xi \in [c_{i+1}, c_i]} f(\xi) = \max_{\xi \in [0, 1]} \xi(1 - \xi) = f\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}$$

Al contrario, il flusso upwind non sarebbe applicabile.

Flusso di Lax-Friedrichs modificato

Un'altra possibilità è considerare un flusso composto da una media del valore di c tra le due celle, ovvero definire un flusso numerico dato da

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{AVG}(c_i, c_{i+1}) = \frac{f(c_i) + f(c_{i+1})}{2}$$

tuttavia tale flusso numerico non soddisfa l'ultima proprietà ovvero che non è non-decrescente rispetto al primo argomento e non-crescente rispetto al secondo. Un'altra possibilità è considerare quindi un flusso composto da una media e una correzione, detto flusso di Lax-Friedrichs modificato:

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{LF}(c_i, c_{i+1}) = \frac{f(c_i) + f(c_{i+1})}{2} + D(c_i - c_{i+1})$$

dove $D \in \mathbb{R}$ è un coefficiente tale che $D \geq \frac{|\max f'(c)|}{2}$ con $c \in [c_m, c_M]$.

Trasporto lineare

Nel caso in cui la funzione flusso risulta lineare, ovvero della forma $f(c) = vc$ dove v è una velocità nota, allora gli schemi precedenti sono equivalenti. Infatti abbiamo che il flusso upwind risulta

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{UP}(c_i, c_{i+1}) = \begin{cases} vc_i & \text{se } v \geq 0 \\ vc_{i+1} & \text{se } v \leq 0 \end{cases}$$

per il flusso di Godunov otteniamo la seguente espressione

$$F_{i+\frac{1}{2}}^G(c_i, c_{i+1}) = \begin{cases} \begin{cases} vc_i & \text{se } c_i \leq c_{i+1} \\ vc_i & \text{se } c_i \geq c_{i+1} \end{cases} & \text{se } v > 0 \\ \begin{cases} vc_{i+1} & \text{se } c_i \leq c_{i+1} \\ vc_{i+1} & \text{se } c_i \geq c_{i+1} \end{cases} & \text{se } v < 0 \end{cases} = \begin{cases} vc_i & \text{se } v > 0 \\ vc_{i+1} & \text{se } v < 0 \end{cases}.$$

Infine il flusso di Lax-Friedrichs nel caso di flusso lineare risulta dato da

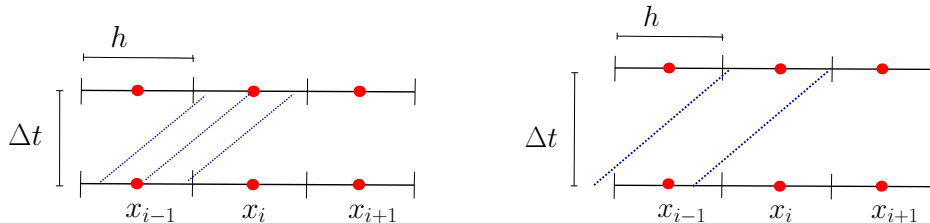
$$F_{i+\frac{1}{2}}^{LF}(c_i, c_{i+1}) = v \frac{c_i + c_{i+1}}{2} + \frac{|v|}{2}(c_i - c_{i+1}) = \begin{cases} vc_i & \text{se } v > 0 \\ vc_{i+1} & \text{se } v < 0 \end{cases}$$

Condizione CFL

Per ora abbiamo utilizzato una discretizzazione temporale esplicita, mediante il metodo di Eulero esplicito. Per evitare oscillazioni non fisiche della soluzione numerica, la scelta del passo temporale Δt non è però arbitraria ma deve soddisfare la condizione denominata condizione CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). Tale condizione esprime il fatto che, per avere stabilità, il dominio di dipendenza del metodo numerico deve includere il vero dominio di dipendenza dell'equazione, almeno per Δt , $h \rightarrow 0$. Per fornire un'idea, consideriamo il caso lineare

$$\partial_t c + \partial_x(vc) = 0,$$

con $v > 0$ (per semplicità). Sappiamo che la soluzione nel punto (x, t) nel piano $x - t$ dipende solamente dalla condizione iniziale in un singolo punto: al piede della caratteristica associata ossia nel punto $x_0 = x - vt$. Nel caso discreto quindi, è corretto che il valore c_i^{n+1} dipenda da c_{i-1}^n solo se scegliamo opportunamente Δt , in particolare dobbiamo garantire che $v\Delta t \leq h$ in modo che la soluzione c_{i+1}^{n+1} dipenda solamente dalle celle vicine al tempo precedente. In altre parole chiediamo che la "velocità numerica" $h/\Delta t$ sia almeno pari alla velocità del problema v , ovvero che $|v| \leq h/\Delta t$ e quindi che $|v|\Delta t/h \leq 1$. Nelle immagini seguenti a sinistra la condizione CFL è soddisfatta infatti i "piedi" delle caratteristiche della cella i -esima cadono nella cella stessa e precedente. La figura di destra mostra invece il caso in cui la condizione CFL non è rispettata, le caratteristiche legate alla cella i -esima al passo $n+1$ intercettano la cella antecedente alla $i-1$ -esima.



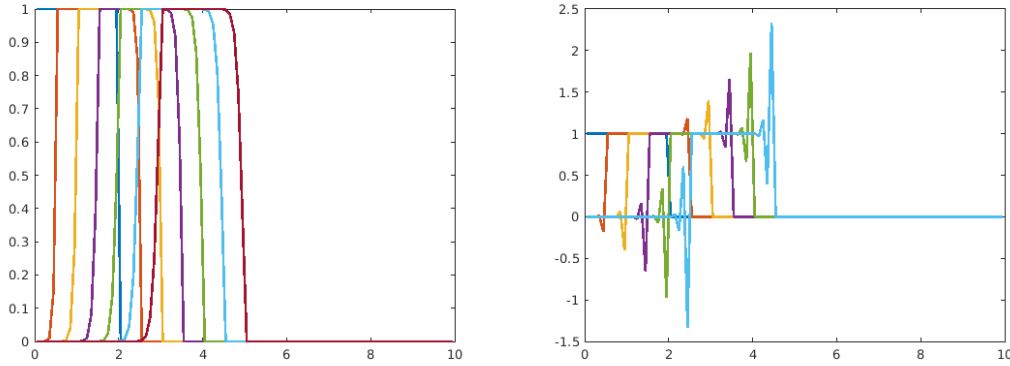


Figure 1.1: Sulla sinistra la soluzione c per un problema di trasporto lineare con $CFL = 0.97$, a destra per un valore di $CFL = 1.03$.

Osserviamo la discretizzazione con un flusso numerico di tipo upwind e $v > 0$, abbiamo che

$$\begin{aligned} h \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + v c_i^n - v c_{i-1}^n &= 0 \\ c_i^{n+1} &= c_i^n - \frac{\Delta t v}{h} (c_i^n - c_{i-1}^n) \\ c_i^{n+1} &= c_i^n \left(1 - \frac{\Delta t v}{h} \right) + \frac{\Delta t v}{h} c_{i-1}^n \end{aligned}$$

e possiamo osservare che il valore di c_i^{n+1} è una combinazione lineare convessa dei valori nelle celle vicine al tempo n solamente se la condizione CFL è soddisfatta.

Nel caso non lineare tale condizione si traduce come

$$\frac{\Delta t L}{h} \leq 1$$

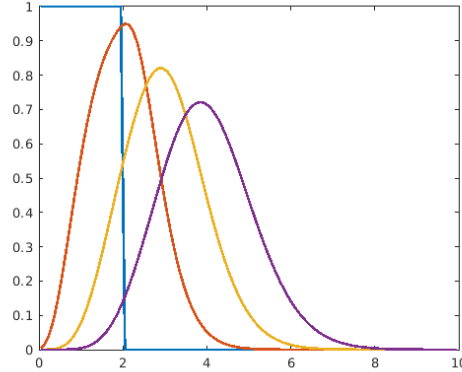
dove la costante $L > 0$ è data da $|f'(c)| < L$ per ogni valore di $c \in [c_m, c_M]$, assumendo una spaziatura della griglia uniforme. In Figura 1.1 rappresentiamo la soluzione numerica per un problema di trasporto lineare con dato iniziale discontinuo. Sono stati utilizzati due differenti Δt che forniscono, rispettivamente, un valore della condizione CFL pari a 0.97 e 1.03. Si noti che nel primo caso la soluzione evolve come ci si aspetta, mentre nel caso in cui la condizione CFL non viene rispettata (anche di poco) la soluzione presenta delle oscillazioni spurie non fisiche.

Metodi impliciti

Fino ad ora abbiamo utilizzato per la discretizzazione temporale un metodo esplicito, potendo quindi calcolare immediatamente c^{n+1} dato c^n . Se utilizzassimo invece un metodo implicito, qui Eulero implicito, per la discretizzazione temporale, dovremmo risolvere un problema della seguente forma discreta

$$h \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + F_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}(c_i^{n+1}, c_{i+1}^{n+1}) - F_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}(c_i^{n+1}, c_{i-1}^{n+1}) = 0$$

La soluzione al passo $n+1$ -esimo non è quindi direttamente calcolabile data la soluzione al passo n , ma richiede la soluzione di un sistema che tipicamente risulta non lineare. Quest'ultimo può essere risolto utilizzando il metodo di Newton o un altro solutore per sistemi non lineari. Dipendentemente dal metodo per la discretizzazione temporale considerato, la regione di stabilità aumenta e la condizione CFL risulta meno restrittiva. Riportiamo nella seguente figura la soluzione ottenuta con il metodo di Eulero implicito per un'equazione di trasporto lineare con soluzione iniziale discontinua



La soluzione analitica è discontinua, la cui discontinuità viene preservata nel tempo e trasportata a destra. La soluzione numerica è stata calcolata con CFL pari a 2, notiamo che non presenta oscillazioni ma tuttavia risulta eccessivamente diffusa e la discontinuità non è più presente. In ogni caso, raffinando la griglia otteniamo che la soluzione numerica converge alla soluzione analitica.

Generalizzazione a dimensioni superiori

I metodi presentati possono essere generalizzati al caso multidimensionale, introducendo una notazione leggermente più complessa. Indichiamo con $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, con $d = 2, 3$, un dominio con bordo $\partial\Omega$ sufficientemente regolare. Sia inoltre \mathbf{n} la normale unitaria di $\partial\Omega$ che punta esternamente rispetto a Ω . Indichiamo con $\mathcal{T} \approx \Omega$ la griglia computazionale approssimazione del dominio Ω composta da N_K elementi che non si sovrappongono. Ognuno di essi è un poligono che indicheremo generalmente con $K \in \mathcal{T}$. Introduciamo una numerazione delle celle che dipenderà da eventuali scelte implementative. Infine, per semplicità assumiamo che Ω sia poligonale e che quindi il suo bordo venga rappresentato esattamente dalla griglia computazionale. Alternativamente commetteremo anche un errore geometrico che inciderà sulla qualità della soluzione numerica calcolata.

L'equazione che vogliamo ora considerare è la seguente: determinare c tale che

$$\begin{cases} \partial_t c + \nabla \cdot \mathbf{f}(c) = 0 & \text{in } \Omega \times (0, T) \\ c(\mathbf{x}, 0) = c^0(\mathbf{x}) & \text{in } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t) = \bar{c}(\mathbf{x}, t) & \text{su } \partial_{in}\Omega \end{cases}$$

Dove la seconda equazione impone il dato iniziale c^0 per la soluzione c e l'ultima un valore sulla porzione di inflow di $\partial\Omega$ che abbiamo indicato con $\partial_{in}\Omega$. Tale è definita da avere $\mathbf{f}(c) \cdot \mathbf{n} < 0$, ovvero il flusso e la normale uscente \mathbf{n} puntano in direzioni diverse, si noti come il flusso dipende dal valore di c .

Per discretizzare tale problema procediamo come nel caso monodimensionale, ovvero approntiamo prima una semi-discretizzazione temporale del problema, qui scegliamo Eulero esplicito, andando a dividere l'intervallo temporale $(0, T)$ in N_t sotto-intervalli che per semplicità possiamo assumere tutti di lunghezza pari a Δt . Otteniamo il seguente problema in cui la soluzione è $c^{n+1} = c^{n+1}(\mathbf{x}) \approx c(\mathbf{x}, t_{n+1})$ dove $n+1$ indica il generico istante di tempo $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$, abbiamo

$$\begin{cases} \Delta t^{-1} c^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{f}(c^n) = \Delta t^{-1} c^n & \text{in } \Omega \\ c^{n+1} = \bar{c}(\mathbf{x}, t_{n+1}) & \text{su } \partial_{in}\Omega \end{cases}$$

avendo imposto come condizione iniziale che $c^0 = c^0(\mathbf{x})$. Procediamo ora alla discretizzazione spaziale e consideriamo la generica cella K poligonale, in 2D, o poliedrica, in 3D, che appartiene alla mesh \mathcal{T} . L'approssimazione a volumi finiti della legge di conservazione si può derivare seguendo i passaggi che qui dettagliamo. Anzitutto, integriamo su K e quindi utilizziamo il teorema di Gauss

sul termine con la divergenza

$$\int_K \Delta t^{-1} c^{n+1} + \int_K \nabla \cdot \mathbf{f}(c^n) = \int_K \Delta t^{-1} c^n \quad \rightarrow \quad \int_K \Delta t^{-1} c^{n+1} + \int_{\partial K} \mathbf{f}(c^n) \cdot \mathbf{n}_K = \int_K \Delta t^{-1} c^n$$

dove abbiamo indicato con \mathbf{n}_K la normale unitaria al bordo ∂K della cella K uscente rispetto alla cella stessa. Introduciamo ora i gradi di libertà che rappresentano la seguente quantità

$$c_K^n = \frac{1}{|K|} \int_K c(\mathbf{x}, t^n),$$

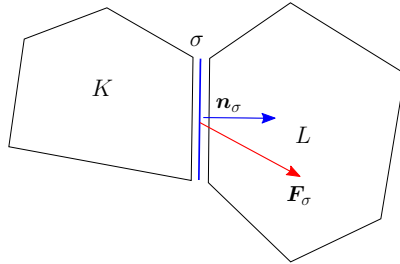
dove $|K|$ indica la misura, ovvero area in 2d o volume in 3d, dell'elemento K . Definiamo la matrice di massa, che risulta diagonale, M data dai valori di $|K|$ per ogni cella della griglia computazionale:

$$[M]_{ik} = \begin{cases} |K| & \text{se } i = k \\ 0 & \text{se } i \neq k \end{cases}.$$

Il bordo ∂K di ogni cella è composto da un sottoinsieme \mathcal{E}_K delle facce della mesh \mathcal{E} , quindi l'integrale è equivalente a

$$\int_{\partial K} \mathbf{f}(c^n) \cdot \mathbf{n} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathbf{F}_{K,\sigma}^n(c_L^n, c_K^n) \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma|$$

dove \mathbf{n}_σ è la normale uscente alla faccia, $|\sigma|$ è l'area (lunghezza in 2D) della faccia, $\mathbf{F}_{K,\sigma}^n$ è il flusso numerico al tempo n e L è la cella che condivide la faccia σ con K .



Se supponiamo che la funzione flusso si possa esprimere come il prodotto $\mathbf{f}(c) = \mathbf{v}g(c)$, come nel caso del trasporto lineare o ad esempio del flusso bifase in mezzi porosi, il flusso numerico $\mathbf{F}_\sigma(a, b)$ può essere espresso come:

$$\mathbf{F}_\sigma(a, b) = \mathbf{v}G(a, b).$$

Infine, la condizione CFL nel caso multidimensionale deve garantire che

$$\Delta t \leq \min_{\sigma \in \mathcal{E}} \left| \frac{|K|}{\mathbf{F}_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma|} \right|.$$