

# Capitolo 2

## Il metodo numerico

In questo capitolo verranno descritte sinteticamente le caratteristiche principali del codice numerico utilizzato nella presente tesi.

### 2.1 Griglia di calcolo e i termini di metrica

Il codice di calcolo discretizza le equazioni di Navier-Stokes per un flusso incomprimibile tridimensionale in un sistema di coordinate curvilinee *body-fitted*, cioè adattato alla forma del corpo. Per procedere con la discretizzazione è necessario effettuare una trasformazione di coordinate dallo *spazio fisico* allo *spazio computazionale*. La discretizzazione avviene su una griglia nelle cui celle verranno calcolati i valori delle grandezze in esame. La griglia utilizzata nella presente tesi è strutturata, cioè ogni nodo ha lo stesso numero di vicini e le celle sono ordinate e numerate in maniera sequenziale (vedi figura 2.1), di tipo *non-straggered*, cioè sono noti nel centro di ogni cella il valore della velocità e della pressione, e *colocated* poiché vengono definiti sulle facce delle celle i flussi volumetrici normali (definiti in seguito).

La trasformazione di coordinate tra spazio fisico e computazionale, che cambia una generica cella della griglia di forma esaedrica nello spazio fisico in un cubo di lato unitario nello spazio computazionale (vedi figura 2.2), provoca la comparsa termini di metrica che, dovendo essere calcolati in maniera discreta, introducono errori. Tali grandezze sono:

- lo *Jacobiano*: data una funzione  $f$ , il suo dominio e codominio corrispondenti rispettivamente allo spazio computazionale  $(O'; \xi, \eta, \zeta)$  e allo spazio fisico  $(O; x, y, z)$ , lo Jacobiano associato ad  $f$  corrisponde alla matrice di trasformazione

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

la cui norma  $|\mathbf{J}|$  rappresenta il rapporto fra i volumi della generica cella nello spazio fisico e la sua corrispondente nello spazio computazionale e, dal momento che in quest'ultimo tutte le celle hanno volume unitario, essa coincide con il volume del generico esaedro nello spazio fisico.

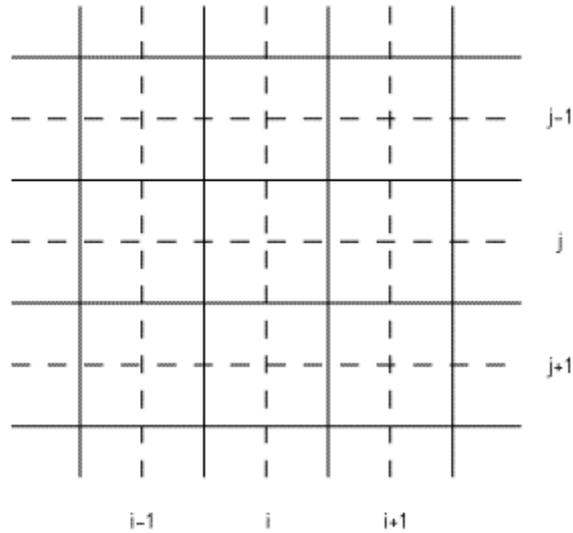


Fig. 2.1 – Griglia strutturata

- I vettori covarianti:

$$\mathbf{a}_{\xi_n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi_n} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi_n} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi_n} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

il cui modulo rappresenta la lunghezza dello spigolo in direzione  $\xi_n$  (vedi figura 2.3)

- I vettori:

$$\mathbf{b}_{\xi_i} = \mathbf{a}_{\xi_n} \wedge \mathbf{a}_{\xi_m} \quad (2.3)$$

rappresentanti l'area orientata della faccia a  $\xi_i$  costante dal momento che il modulo del vettore è pari all'area della superficie indicata e la direzione è quella della normale a tale superficie mentre il verso è uscente (vedi figura 2.3).

- Il tensore simmetrico di distorsione della griglia  $\mathbf{G}_{mn}$  ( $m,n=1,2,3$ ) dato da

$$\mathbf{G}_{mn} = |\mathbf{J}^{-1}| \cdot \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \quad (2.4)$$

in cui  $|\mathbf{J}^{-1}|$  è lo Jacobiano della trasformazione inversa  $\mathbf{f}^I$ .

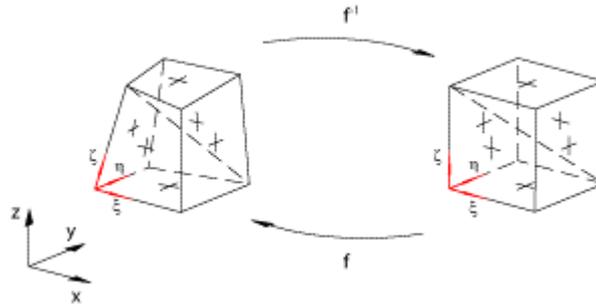


Fig. 2.2 – Trasformazione di coordinate da spazio fisico a spazio computazionale

Come accennato in precedenza la griglia adottata è di tipo *colocated*, cioè vengono definiti sulle facce della generica cella i flussi volumetrici

$$U_m = \hat{U}_m \cdot |\mathbf{J}| \quad (2.5)$$

in cui  $\hat{U}_m$  è la velocità controvariante definita come

$$\hat{U}_m = \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \cdot u_i \quad (2.6)$$

È stato effettuato inoltre un taglio (*branch-cut*) nella griglia in modo definire uno spazio di calcolo semplicemente connesso (vedi figura 2.4). Ai confini di tale spazio sono presenti delle celle particolari, dette celle ghost, che non corrispondono alle celle del dominio fisico ma che sono necessarie per poter imporre le varie condizioni al contorno del problema.

## 2.2 Equazioni del moto

Le equazioni del moto di un fluido incomprimibile (vedi 1.2 e 1.3) che vengono discretizzate dal codice di calcolo sono scritte in forma conservativa:

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{B}] = 0 \quad (2.7)$$

con il vettore A e la matrice B dati da

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 \\ u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

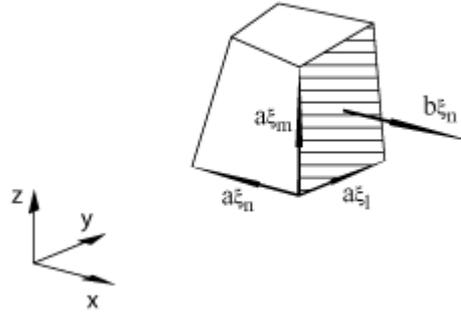


Fig. 2.3 – Termini di metrica

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} u & v & w \\ u^2 + \frac{p}{\rho} - v \frac{\partial u}{\partial x} & vu - v \frac{\partial u}{\partial y} & wu - v \frac{\partial u}{\partial z} \\ uv - v \frac{\partial v}{\partial x} & v^2 + \frac{p}{\rho} - v \frac{\partial v}{\partial y} & wv - v \frac{\partial v}{\partial z} \\ uw - v \frac{\partial w}{\partial x} & vw - v \frac{\partial w}{\partial y} & w^2 + \frac{p}{\rho} - v \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Poiché la discretizzazione avviene nel dominio computazionale è necessario riscrivere le precedenti equazioni derivandole rispetto alle coordinate  $\xi, \eta, \zeta$ , tenendo presente che fra queste ultime e le coordinate dello spazio fisico  $(x,y,z)$  sono valide le relazioni

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \quad (2.12)$$

Moltiplicando poi per  $|\mathbf{J}^{-1}|$  e compiendo passaggi matematici non esposti per brevità, si arriva alla seguente scrittura delle equazioni:

$$\frac{\partial U_m}{\partial \xi_m} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial (|\mathbf{J}^{-1}| u_i)}{\partial t} + \frac{\partial F_{im}}{\partial \xi_m} = 0 \quad (2.14)$$

con la notazione di sommatoria su indici ripetuti,  $i,m=1,2,3$  e  $F_{im}$  dato da

SPAZIO FISICO

SPAZIO COMPUTAZIONALE

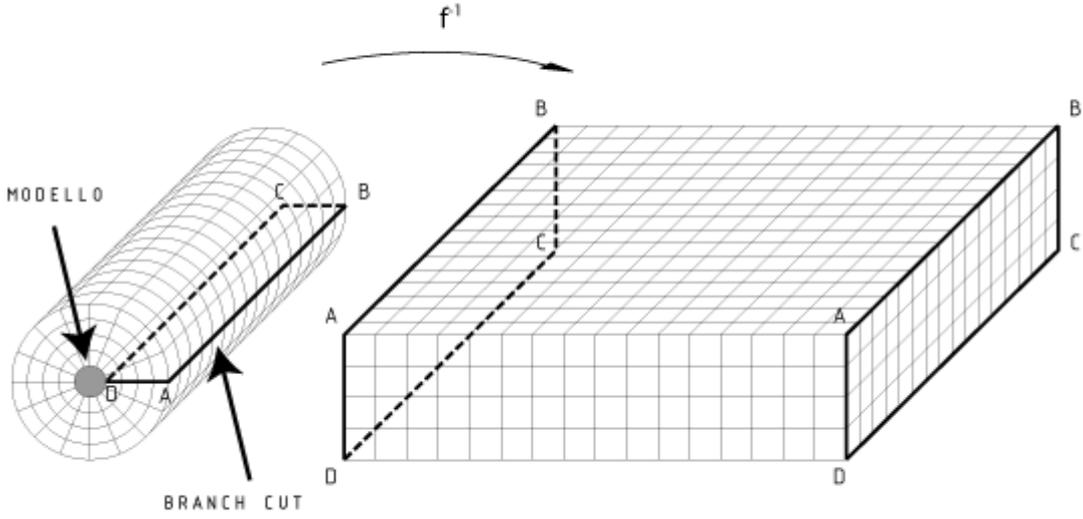


Fig. 2.4 – Trasformazione da spazio fisico a spazio computazionale: Branch Cut

$$F_{im} = U_m \cdot u_i + |\mathbf{J}^{-1}| \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \cdot \frac{p}{\rho} - \nu \cdot G_{mn} \cdot \frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} = 0 \quad (2.15)$$

A seguito dell'applicazione del filtro di subgrid le equazioni del moto 2.13, 2.14 e 2.15 vengono riscritte in questo modo:

$$\frac{\partial (|\bar{J}^{-1}| \cdot \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{U}_m \cdot u_i)}{\partial \xi_m} + \frac{\partial \left( |\bar{J}^{-1}| \frac{\partial \bar{\xi}_m}{\partial x_i} \cdot \frac{\bar{p}}{\rho} \right)}{\partial \xi_m} - \frac{\partial \left( \nu \cdot |\bar{J}^{-1}| \frac{\partial \bar{\xi}_m}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \bar{\xi}_n}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \xi_n} \right)}{\partial \xi_m} = 0 \quad (2.16)$$

Da questa, dopo alcuni passaggi matematici omessi per brevità e l'introduzione del modello di subgrid, si attiene la forma da discretizzare

$$\frac{\partial (|\bar{J}^{-1}| \cdot \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{U}_m \cdot \bar{u}_i)}{\partial \xi_m} = - \frac{\partial \left( |\bar{J}^{-1}| \frac{\partial \bar{\xi}_m}{\partial x_i} \cdot \frac{\bar{p}}{\rho} \right)}{\partial \xi_m} + \frac{\partial \left( (\nu + \nu_t) \cdot \bar{G}_{mn} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \xi_n} \right)}{\partial \xi_m} + \frac{\partial \left( \nu_t \frac{\partial \bar{\xi}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{U}_m}{\partial \xi_n} - KO_{ij}^m \right)}{\partial \xi_m} \quad (2.17)$$

valida per i modelli dinamici "semplici" ponendo  $K = 0$  e per il modello dinamico misto a 2 parametri (DTM). In essa compare la viscosità di subgrid scale  $\nu_t = -2C\bar{\Delta}^2 |\bar{S}|$ .

## 2.3 Discretizzazione spaziale delle equazioni

Indicando con  $\frac{\delta}{\delta\xi}$  la generica discretizzazione della derivata spaziale e con la notazione ad apici quella temporale, si riportano di seguito le equazioni discretizzate in cui, per semplicità di notazione, non si mette il soprassegno che indica l'operazione di filtraggio

$$\frac{\delta U_m}{\delta\xi_m} = 0 \quad (2.18)$$

$$|\mathbf{J}| \cdot \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{3}{2}(C_i^n + D_E(u_i^n)) - \frac{1}{2}(C_i^{n-1} + D_E(u_i^{n-1})) + R_i(P^{n+1}) + \frac{1}{2}(D_I(u_i^{n+1} + u_i^n)) \quad (2.19)$$

dove  $P = \frac{p}{\rho}$  e gli operatori che vi compaiono sono così definiti:

$$R_i = -\frac{\delta}{\delta\xi_m} \left( |\mathbf{J}| \frac{\delta\xi_m}{\delta x_i} \right) \quad (2.20)$$

indica il gradiente di pressione discretizzato,

$$C_i = -\frac{\partial U_m u_i}{\partial \xi_m} + S_i \quad (2.21)$$

che è composto dal termine convettivo e dal termine relativo al modello di subgrid

$$S_i = \frac{\partial \left( v_t \frac{\partial \bar{\xi}_n}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{U}_m}{\partial \xi_n} - KO_{ij}^m \right)}{\partial \xi_m}$$

e

$$D_I = -\frac{\delta}{\delta\xi_m} \left( (v + v_t) G_{mn} \frac{\delta}{\delta\xi_n} \right) \quad \text{per } m = n \quad (2.22)$$

$$D_E = -\frac{\delta}{\delta\xi_m} \left( (v + v_t) G_{mn} \frac{\delta}{\delta\xi_n} \right) \quad \text{per } m \neq n \quad (2.23)$$

che sono i termini diffusivi viscosi costituiti da una componente dovuta alla viscosità fisica ( $v$ ) ed una che deriva dalla modellizzazione di sottogriglia ( $v_t$ ); dal momento che la griglia utilizzata non è eccessivamente distorta, i termini esterni alla diagonale danno un contributo minore rispetto agli altri; per questo motivo vengono trattati, commettendo un errore trascurabile, in maniera esplicita in virtù di una notevole semplificazione dal punto di vista numerico. I termini sulla diagonale vengono invece trattati in modo implicito.

Tutte quante le derivate spaziali sono approssimate da uno schema ai volumi finiti centrato di ordine 2. L'unico termine ad essere trattato diversamente è il termine convettivo per il quale si

adotta, a seconda dei casi, uno schema QUICK di tipo upwind o uno schema centrato di ordine 2.

La generica derivata spaziale è discretizzata nel seguente modo:

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} = T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}}$$

dove  $T_{i+\frac{1}{2}}$  e  $T_{i-\frac{1}{2}}$  sono i flussi delle varie grandezze attraverso le facce delle celle; essi sono approssimati in generale nel seguente modo

$$T_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(T_i + T_{i+1}) - R(T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}) \quad (2.33)$$

$$T_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(T_i + T_{i-1}) - R(T_{i-2} - 2T_{i-1} + T_i) \quad (2.34)$$

Lo schema ai volumi finiti centrato e quello QUICK si distinguono a seconda del valore che si dà alla costante  $R$  :

- schema centrato,  $R = 0$
- schema upwind,  $R = \frac{1}{8}$

L'impiego dello schema QUICK è dovuto al fatto che esso, rispetto allo schema centrato, ha il vantaggio di essere meno instabile dal punto di vista numerico; tuttavia da precedenti studi si è dimostrato che l'utilizzo di uno schema upwind associato ad un approccio di tipo "large-eddy" può dare risultati poco soddisfacenti, in quanto la dissipazione numerica introdotta dalla discretizzazione upwind può risultare più rilevante dell'effetto del modello di subgrid (rif. [3], rif. [7], rif. [12]).

## 2.4 Avanzamento temporale

Per la discretizzazione temporale sono stati utilizzati sia l'algoritmo di *Adam-Bashfort* di tipo esplicito, applicato ai termini viscosi di indice  $m=n$  (cioè quelli sulla diagonale principale del tensore  $G_{mn}$ ), che quello implicito di *Crank-Nicholson* applicato invece agli altri termini del tensore. La tecnica utilizzata per l'avanzamento temporale è quella frazionale (*fractional-step*) costituita da due passi:

- Predittore

$$\left( \mathbf{I} - \frac{\Delta t}{2|\mathbf{J}|} D_I \right) (u_i^* - u_i^n) = \frac{\Delta t}{|\mathbf{J}|} \left( \frac{3}{2} (C_i^n + D_E(u_i^n)) - \frac{1}{2} (C_i^{n-1} + D_E(u_i^{n-1})) + D_I(u_i^n) \right) \quad (2.35)$$

- Correttore

$$u_i^{n+1} - u_i^* = \frac{\Delta t}{|\mathbf{J}|} (R_i(\Phi^{n+1})) \quad (2.36)$$

P e  $\Phi$  sono legate dalla relazione

$$R_i(P) = \left( |\mathbf{J}| - \frac{\Delta t}{2} D_i \right) \left( \frac{R_i(\Phi)}{|\mathbf{J}|} \right) \quad (2.37)$$

L'equazione di Poisson si ricava in maniera indiretta dall'equazione di continuità in questo modo: nell'equazione 2.36 portando a secondo membro  $u_i^*$ , sviluppando quindi  $R_i$  e cancellando i termini nulli, ipotizzando la validità del teorema di Schwarz, si ottiene:

$$u_i^{n+1} = u_i^* - \Delta t \left( \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi^{n+1}}{\partial \xi_m} \right) \quad (2.38)$$

Dalla relazione fra i flussi volumetrici attraverso le facce delle celle e le velocità su tali facce (le velocità precedenti infatti, riferite al centro di ogni maglia, vengono interpolate tramite uno schema di interpolazione simile al QUICK o alle differenze finite di ordine 2, a seconda dello schema che si utilizza nell'approssimazione del termine convettivo, ricavando i valori sulle facce delle celle) si ottiene

$$U_m^{n+1} = U_m^* - \Delta t \left( G_{mn} \frac{\partial \Phi^{n+1}}{\partial \xi_m} \right) \quad (2.39)$$

che, sostituito nell'equazione di continuità, dà

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left( G_{mn} \frac{\partial \Phi^{n+1}}{\partial \xi_m} \right) = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial U_m^*}{\partial \xi_m} \quad (2.40)$$

che è l'equazione di Poisson risolta nel codice utilizzato e scritta in forma compatta in termini di  $\Phi$ .

L'avanzamento temporale delle equazioni si ottiene quindi in questo modo:

I°) Si risolve il *Predittore* 2.35 esplicitando il primo membro con precisione 3 nel tempo, cioè

$$\left( \mathbf{I} - \frac{\Delta t}{2|\mathbf{J}|} D_1 \right) (u_i^* - u_i^n) = \left( \mathbf{I} - \frac{\Delta t}{2|\mathbf{J}|} D_1 \right) \left( \mathbf{I} - \frac{\Delta t}{2|\mathbf{J}|} D_2 \right) \left( \mathbf{I} - \frac{\Delta t}{2|\mathbf{J}|} D_3 \right) (u_i^* - u_i^n) \quad (2.41)$$

con

$$D_j = - \frac{\partial}{\partial \xi_{jm}} \left( (v + v_i) G_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) \quad (2.42)$$

per  $j=1,2,3$  senza la notazione di sommatoria sugli indici ripetuti. La risoluzione di questo sistema comporta l'inversione di 3 matrici e permette di valutare le varie quantità transitorie  $u_i^*$  nel centro delle celle.

II°) Dalle  $u_i^*$ , tramite l'interpolazione tipo QUICK o alle differenze finite centrate, si ricavano i flussi  $U_m^*$ , anche questi transitori, che permettono di esplicitare il secondo membro dell'equazione di Poisson 2.40.

III°) Si determina il valore di  $\Phi^{n+1}$  nell'equazione di Poisson attraverso un procedimento iterativo di tipo multigrid (rif. [18], rif. [20]), cioè utilizzando, partendo dalla principale, griglie sempre più rade ad ogni ciclo per poi risalire nuovamente a quelle più fini (cicli a V); ciò permette di velocizzare la convergenza grazie alla dissipazione sia delle alte che delle basse frequenze associate ai modi di Fourier in cui può essere scomposto il residuo di calcolo. Il procedimento multigrid è valido se è accompagnato da uno schema iterativo adeguato: il codice utilizzato adotta il metodo linea per linea di Gauss-Seidel.

Il ciclo iterativo termina quando si raggiunge la convergenza, cioè quando la soluzione al passo  $n+1$  dista da quella al passo  $n$  meno di un certo valore  $R_p$ ; il criterio per la convergenza del ciclo iterativo è il seguente:

$$R_p = \frac{1}{n_i n_j n_k} \sqrt{\sum_{j,j,k} r_p^2} < \varepsilon_p \quad (2.43)$$

dove  $R_p$  è il residuo globale alla generica iterazione,  $n_i, n_j$  ed  $n_k$  sono il numero dei nodi della griglia nelle direzioni principali  $i, j, k$ ,  $r_p$  è il residuo locale calcolato in ogni cella ed  $\varepsilon_p$  è l'errore ammissibile fissato a priori. L'utilizzo di  $R_p$  come stima dell'errore è stata avvalorata da studi in cui è stato dimostrato che esso assume valori dipendenti da  $p^n$  (quindi stimando effettivamente l'errore sulla pressione) e da una funzione complessa dei termini di metrica del tensore  $\mathbf{G}_{mm}$ . Quello appena descritto è un criterio di convergenza globale; ne esiste anche uno sulla convergenza locale che si basa sulla determinazione del massimo termine di *sorgente di massa* tramite l'applicazione dell'equazione 2.40 nelle maglie della griglia che permette di verificare se è rispettata o meno la conservazione della massa.

IV°) Noti il campo  $\Phi$  e le  $u_i^*$  si procede con la risoluzione del *Correttore* 2.36 ricavando le velocità  $u_i^{n+1}$  ed i flussi volumetrici  $U_m^{n+1}$ .

## 2.5 Stabilità numerica

Il procedimento descritto nel paragrafo precedente funziona correttamente se è soddisfatto il requisito di stabilità; esso si basa sulla valutazione nei vari nodi del dominio di un parametro detto CFL (Courant-Friedrichs- Lewy) che non deve superare il valore unitario, cioè

$$CFL = \left[ \frac{|u_1|}{\Delta x_1} + \frac{|u_2|}{\Delta x_2} + \frac{|u_3|}{\Delta x_3} \right] \Delta t = \frac{[|U| + |V| + |W|] \Delta t}{|\mathbf{J}|} \leq 1 \quad (2.44)$$

dove  $\Delta x_1$ ,  $\Delta x_2$ ,  $\Delta x_3$  sono le dimensioni caratteristiche delle celle nelle direzioni principali.