

**SOLUZIONE NUMERICA DI PROBLEMI DI FLUSSO DI FLUIDI  
CON CONTEMPORANEO SCAMBIO DI CALORE E/O DI MASSA**

Nicola Forgiione

Pisa, luglio 2001

**INDICE**

<b>1. Introduzione</b>	<b>3</b>
<b>2. Modello fisico</b>	<b>4</b>
<b>3. Modello matematico</b>	<b>4</b>
3.1 Equazioni di bilancio	4
3.2 Condizioni iniziali ed al contorno	6
3.3 Relazioni costitutive	8
<b>4. Modello numerico</b>	<b>8</b>
4.1 Discretizzazione spaziale	8
4.2 Discretizzazione delle equazioni	11
4.3 Non linearità e sottorilassamento	18
<b>5. Risoluzione numerica delle equazioni discretizzate</b>	<b>20</b>
<b>6. Criteri di convergenza</b>	<b>25</b>
<b>BIBLIOGRAFIA</b>	<b>27</b>

## 1. Introduzione

Molti problemi di pratico interesse, inclusi i processi che avvengono nei sistemi presenti negli impianti nucleari di potenza, richiedono la simulazione numerica del flusso di fluidi, con contemporaneo trasferimento di calore e/o di massa, in due o tre dimensioni. Infatti, eccetto in casi particolari, le equazioni differenziali alle derivate parziali non possono essere risolte analiticamente, ma debbono essere risolte numericamente. Attualmente sono disponibili diversi codici che permettono di risolvere numericamente problemi di CFD (Computational Fluid Dynamics). I modelli numerici per trattare questo tipo di problemi sono stati sviluppati e messi a punto in questi ultimi trent'anni.

A Los Alamos, durante gli anni '60, un gruppo di ricercatori si è occupato dello sviluppo di algoritmi espliciti di simulazione tali come il MAC [1] ed il SIMAC [2] ottenendo però poco successo.

Nel 1972 Patankar e Spalding [3] descrivono una procedura di calcolo per flussi parabolici tridimensionali. Un flusso parabolico, come potrebbe essere il flusso di un fluido all'interno di un condotto, è risolto facendo avanzare il calcolo nella direzione e nel verso principale del flusso e risolvendo un problema ellittico bidimensionale per ciascuna sezione trasversale. L'estensione del metodo al caso di flusso ellittico bi e tridimensionale è descritta da Patankar in lavori successivi [4-5]. La particolare tecnica mediante la quale vengono accoppiate le equazioni della quantità di moto all'equazione cosiddetta della "pressione", è indicata con l'abbreviazione SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations).

La procedura SIMPLE, sebbene applicata tuttora con grande successo ad un'ampia varietà di problemi, possiede una velocità di convergenza non sempre soddisfacente e richiede la scelta di opportuni valori dei coefficienti di sottorilassamento affinché si abbia convergenza. Per ridurre questi inconvenienti Patankar propose nel 1980 una variazione al SIMPLE aggiungendo la risoluzione dell'equazione della pressione non corretta [4]. Questa nuova procedura, pur facendo aumentare il tempo richiesto per una singola iterazione esterna, è in grado di ridurre notevolmente il numero di iterazioni che in totale occorrono per raggiungere la convergenza. Il metodo risolutivo derivato a seguito della revisione del SIMPLE è stato indicato dal Patankar con l'acronimo SIMPLER (SIMPLE Revised)

Nel 1984 Doormaal e Raithby [6] hanno proposto l'algoritmo risolutivo SIMPLEC che sfrutta i vantaggi dell'algoritmo SIMPLE che utilizza un'equazione in meno rispetto al SIMPLER, ed i vantaggi del SIMPLER che ha una più alta velocità di convergenza rispetto al SIMPLER.

Un più recente algoritmo è il PISO proposto da Issa nel 1986 [7]. Analogamente agli algoritmi SIMPLER, SIMPLEC, anche il PISO non necessita del sottorilassamento dell'equazione di correzione della pressione.

## 2. Modello fisico

La risoluzione numerica di un problema di flusso di fluidi passa, in generale, attraverso le fasi riportate in Fig. 1. Il passaggio più critico di una simulazione numerica è l'individuazione del modello fisico più appropriato per lo studio di un particolare problema reale. La migliore scelta possibile è quello di adottare, almeno per uno studio preliminare, il modello fisico più semplice possibile per quel problema, ma che fornisca risultati adeguati. Ad esempio, la geometria e le condizioni al contorno potrebbero consentire di adottare un semplice modello bidimensionale per studiare un problema che effettivamente è di tipo tridimensionale. Un altro esempio è quello di approssimare un problema reale che non potrà mai essere di tipo stazionario con un problema fisico stazionario.

## 3. Modello matematico

### 3.1 Equazioni di bilancio

Problemi fisici che coinvolgono il flusso dei fluidi ed il trasferimento di massa e del calore sono governati dai principi di conservazione della massa, della quantità di moto, dell'energia, delle specie chimiche, ecc.. Questi principi sono matematicamente espressi in termini di equazioni differenziali parziali che possono essere scritte in coordinate cartesiane nella seguente forma generale (detta *equazione della convezione-diffusione*)

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{termine non stazionario}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi)}_{\text{termini convettivi}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial z}\right)}_{\text{termini diffusivi}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{termine di sorgente}} \quad (1)$$

dove  $\phi$  rappresenta la grandezza scalare che è trasferita dal fluido in movimento con velocità  $\vec{u} \equiv (u, v, w)$ , densità  $\rho$  e coefficiente di diffusione  $\Gamma$ . La variabile dipendente  $\phi$  può avere il significato di componente della velocità, di energia cinetica turbolenta (o di una scala della turbolenza), di entalpia (o di temperatura), di frazione massica di una specie chimica, ecc.. Il termine  $S$  rappresenta, invece, il rateo di generazione (o di distruzione) di  $\phi$  nell'unità di volume.

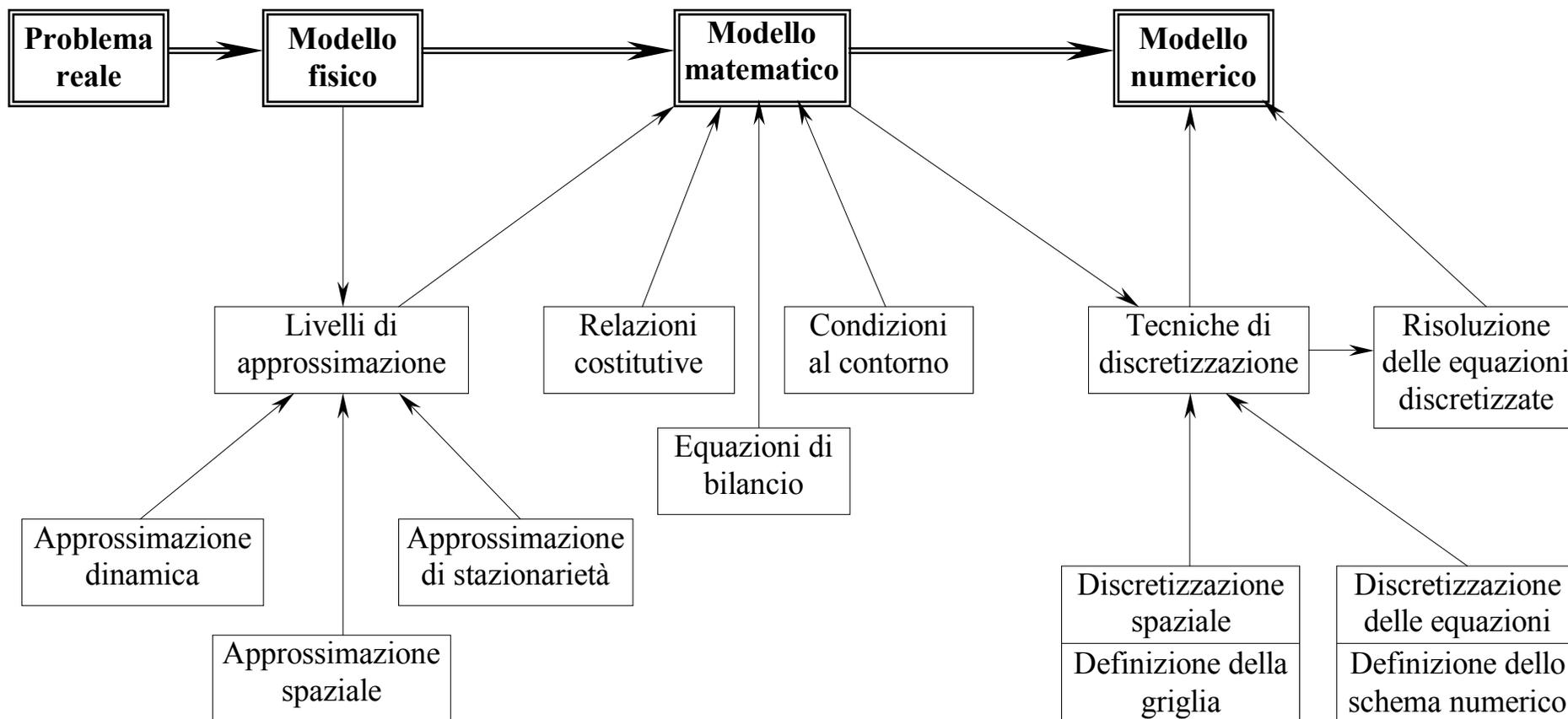


Figura 1 – Fasi di risoluzione numerica di un problema di flusso di fluidi.

I termini presenti nell'equazione differenziale generale precedente sono detti, nell'ordine, termine non stazionario, termini convettivi, termini diffusivi e termine di sorgente. Tutto ciò che in un'equazione di bilancio non può essere fatto rientrare come termine convettivo o diffusivo viene generalmente inserito all'interno del termine di sorgente. Fanno eccezione a questa regola le equazioni della quantità di moto. Infatti, in questo caso il termine in cui compare la pressione non viene inserito all'interno del termine di sorgente in quanto la pressione, così come la velocità, è una vera e propria variabile dipendente. Nel caso della quantità di moto lungo  $x$  l'Eq. (1) viene scritta nella seguente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho wu) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_u \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_u \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_u \frac{\partial u}{\partial z}\right) + S_u \quad (2)$$

La variabile dipendente  $\phi$  è in generale funzione di tre coordinate spaziali e di una temporale. Per quanto riguarda la coordinata temporale, la dipendenza è del tipo *one-way*, cioè il valore assunto in un dato istante è funzione solamente dei valori assunti negli istanti precedenti e non dei valori che  $\phi$  assumerà negli istanti successivi. Le coordinate spaziali possono essere del tipo *one-way* o *two-way*. In quest'ultimo caso le condizioni in una data posizione sono influenzate dalle variazioni delle condizioni su entrambi i lati della posizione. Una coordinata spaziale può risultare *one-way* a causa dell'azione di un flusso di fluido fortemente unidirezionale (nella direzione di quella coordinata); in questo caso le condizioni in un punto sono influenzate fortemente dalle condizioni a monte e molto debolmente da quelle a valle. La natura *one-way* di una coordinata spaziale è un'approssimazione; infatti, anche se la convezione è un processo unidirezionale, la diffusione, che è sempre presente, è un processo bidirezionale. Tuttavia, quando la convezione predomina sulla diffusione, cioè quando il numero di Peclet risulta notevolmente maggiore dell'unità, le coordinate spaziali assumono un comportamento *one-way*. Un'equazione differenziale parabolica nello spazio ha coordinate spaziali ( $x, y, z$ ) che sono di tipo *one-way*, mentre un'equazione ellittica nello spazio ha coordinate spaziali di tipo *two-way*. Un flusso con coordinate spaziali *one-way* è spesso chiamato flusso del tipo a strato limite, mentre un flusso con coordinate spaziali *two-way* è chiamato flusso ricircolante.

### 3.2 Condizioni iniziali ed al contorno

Una delle principali difficoltà nella risoluzione numerica di problemi di flusso di fluidi è il trattamento delle condizioni iniziali ed al contorno. Per un dato gruppo di equazioni devono essere definite condizioni appropriate alla natura fisica del problema al fine di ottenere un modello matematico ben posto, caratterizzato da una soluzione continua.

Le condizioni iniziali possono scriversi:

$$\phi(\vec{r}, t = 0) = \phi_0(\vec{r}), \quad \forall \vec{r} \in V \quad (3)$$

Un modo conciso per definire le condizioni sul contorno  $S$  è quello di imporre la seguente condizione generale

$$A\phi + B \frac{\partial \phi}{\partial n} = C, \quad \forall \vec{r} \in S \quad (4)$$

dove con  $n$  si è indicata la direzione normale al contorno. Scegliendo  $A=1$  e  $B=0$  si ottengono le *condizioni di Dirichlet* (o di prima specie), in cui vengono specificati i valori scalari di  $\phi$  sul contorno; scegliendo  $A=0$  e  $B=1$  si ottengono le *condizioni di Newmann* (o di seconda specie), in cui vengono specificati i valori dei flussi diffusivi sul contorno.

I contorni di un dominio di calcolo sono normalmente di tre tipi: contorni senza passaggio di fluido, contorni con flusso entrante di fluido (*inflow boundaries*) e contorni con flusso uscente di fluido (*outflow boundaries*). Normalmente i flussi convettivi sono assegnati agli inflow boundaries, sono posti uguali a zero nei contorni impermeabili al passaggio di fluido e sono considerati indipendenti dalla coordinata normale negli outflow boundaries. I flussi diffusivi vengono invece specificati sulle pareti.

Per quelle parti del contorno dove il fluido entra nel dominio devono essere assegnati tutti i valori di  $\phi$  all'ingresso, eccetto la pressione nel caso di flussi subsonici. Poiché la velocità e tutte le altre variabili sono date possono essere calcolati tutti i flussi convettivi. I flussi diffusivi non sono noti in ingresso, ma vengono posti uguale a zero od opportunamente approssimati.

Per le parti del contorno dove il fluido lascia il dominio normalmente non sono conosciuti né i valori di  $\phi$  né i valori dei flussi diffusivi. Generalmente per flussi subsonici e per grandi numeri di Peclet le regioni vicino alle uscite esibiscono un comportamento one-way; in tal caso, essendo il comportamento locale governato principalmente dalla convezione, i punti al contorno localizzati a valle del dominio di calcolo non influenzano la soluzione. Negli outflow boundary una possibilità è quella di imporre che tutte le derivate nella direzione della corrente sia zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0, \quad \forall \vec{r} \in S_{out} \quad (5)$$

Questa condizione viene spesso usata in flussi stazionari ma non è soddisfacente in flussi non stazionari. In quest'ultimo caso è meglio rimpiazzare questa condizione con una condizione convettiva non stazionaria del tipo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_n \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0, \quad \forall \vec{r} \in S_{out} \quad (6)$$

dove  $u_n$  è una velocità che è indipendente dalla posizione sulla superficie di uscita, scelta in modo che sia soddisfatta la conservazione globale di massa.

Per un contorno in cui non si ha né ingresso né uscita di fluido, il flusso convettivo è zero per definizione. In questo caso possono essere assegnati condizioni di prima o di seconda specie per  $\phi$ .

Le condizioni al contorno per la pressione richiedono particolare attenzione. Normalmente l'equazione della pressione necessita di condizioni al contorno su tutti i contorni:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad \forall \vec{r} \in S \quad (7)$$

Per rendere la soluzione unica, la pressione deve però essere fissata in un punto.

### 3.3 Relazioni costitutive

Nelle equazioni di bilancio compaiono proprietà termodinamiche quali viscosità, conducibilità, calore specifico, ecc. che in generale non sono costanti, ma sono funzione della pressione, della temperatura ed, in alcuni casi, della composizione del fluido. Occorrerà quindi individuare opportune equazioni costitutive che forniscano relazioni che legano queste proprietà termodinamiche alle variabili dipendenti.

## 4. Modello numerico

### 4.1 Discretizzazione spaziale

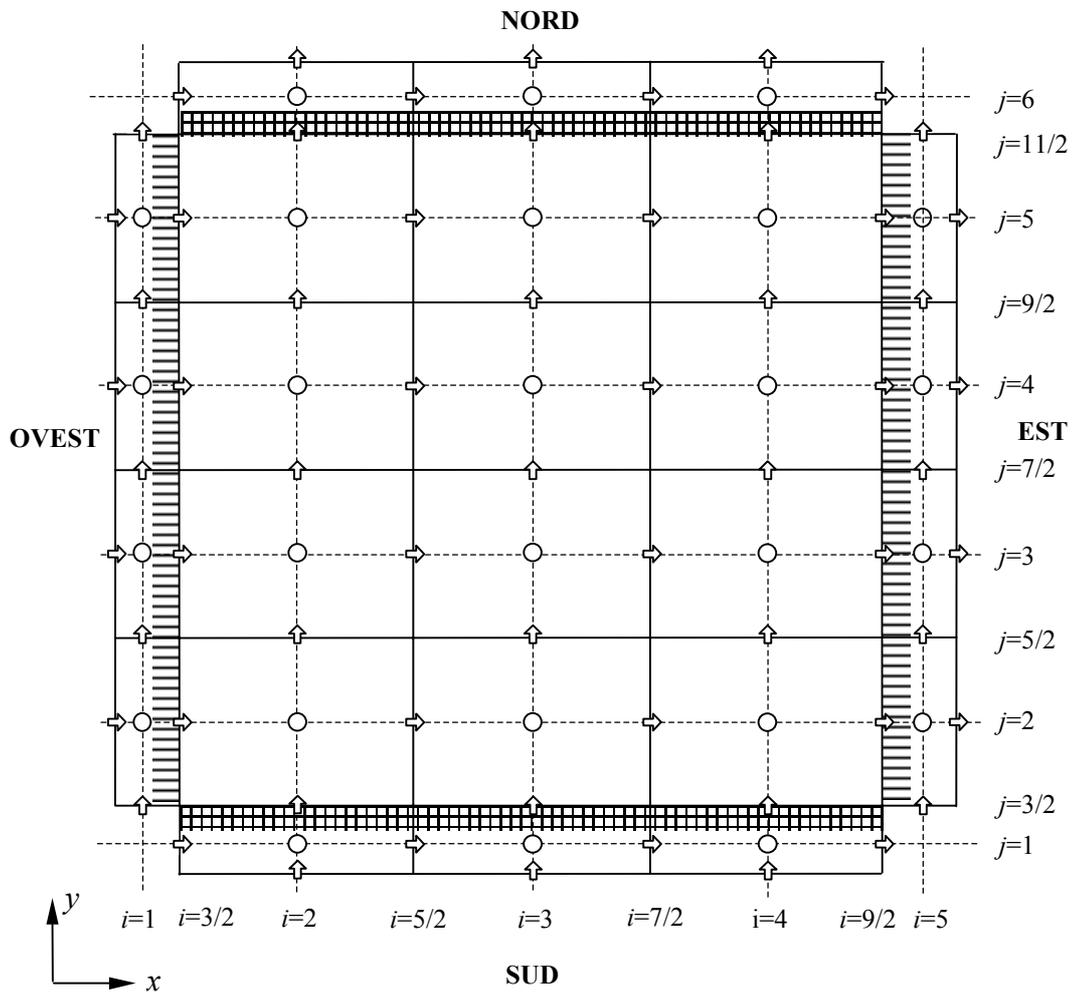
Per risolvere le equazioni di bilancio numericamente è necessario innanzitutto generare una *griglia* cioè una rappresentazione discreta del dominio geometrico sul quale il problema deve essere risolto. La griglia divide il dominio in un numero finito di sottodomini (elementi o volumi di controllo). Le griglie possono essere costruite in due differenti modi: griglie regolari o *strutturate* e griglie *non strutturate*. Nel primo caso i volumi di controllo possono essere univocamente identificati mediante una terna di indici  $(i, j, k)$ . Il vantaggio nell'utilizzare griglie strutturate è che semplifica notevolmente la programmazione, mentre lo svantaggio principale è che possono essere utilizzate solo per domini con geometrie relativamente semplici.

Le griglie non strutturate vengono utilizzate per geometrie complesse e prevalentemente per *metodi agli elementi finiti*. Nel seguito si farà riferimento unicamente a griglie strutturate ed al *metodo ai volumi finiti*.

Nei *punti nodali* (centri dei volumi di controllo) sono definite le più importanti proprietà del fluido. In particolare, le variabili relative al bilancio di massa e dell'energia (pressione, temperatura, densità, frazione massica, etc.) sono assegnati nei punti nodali della griglia primaria, mentre le variabili relative al bilancio della quantità di moto (le componenti della velocità,  $u$ ,  $v$  e  $w$ ) sono assegnate in punti sui bordi dei volumi di controllo della griglia primaria (posizioni sfalsate o *staggered locations*).

Il vantaggio maggiore nell'usare la configurazione staggered, utilizzata per la prima volta nel 1965 da Harlow e Welsh [8], sta nel forte accoppiamento tra le velocità e le pressioni che ne risulta. Questo aiuta ad impedire alcuni problemi di convergenza ed oscillazioni nei campi di pressione e di velocità. Un vantaggio aggiuntivo nell'usare la staggered grid è che le componenti della velocità e le variabili scalari vengono ad essere localizzate esattamente dove servono, vale a dire sulle facce dei volumi di controllo e sui punti nodali della griglia primaria, rispettivamente.

Un esempio di griglia per un dominio bidimensionale con l'indicazione delle posizioni nelle quali vengono calcolate le differenti variabili è riportato in Fig. 2. Nel seguito, anche per semplificare lo sviluppo delle equazioni discretizzate e la visualizzazione grafica, si farà riferimento al solo caso bidimensionale.



- ⇒ Posizioni della componente  $u$  della velocità (nel seguito  $U(i, j) \equiv U_{i+1/2, j}$ )
- ↑ Posizioni della componente  $v$  della velocità (nel seguito  $V(i, j) \equiv V_{i+1/2, j}$ )
- Posizioni delle altre variabili ( $p, \kappa, \varepsilon, T, \omega, \dots$ )

Figura 2 – Esempio di discretizzazione spaziale bidimensionale.

#### 4.2 Discretizzazione delle equazioni

Nel metodo ai volumi finiti la derivazione delle equazioni discretizzate è basata su una formulazione conservativa, nella quale le equazioni differenziali sono integrate sopra ciascun volume di controllo. I volumi di controllo, come già visto, sono staggered per le equazioni della quantità di moto lungo l'asse  $x$  e lungo l'asse  $y$  (v. Figg. 3 e 4) e sono centrati nei punti nodali della griglia primaria per le altre equazioni (v. Fig. 5).

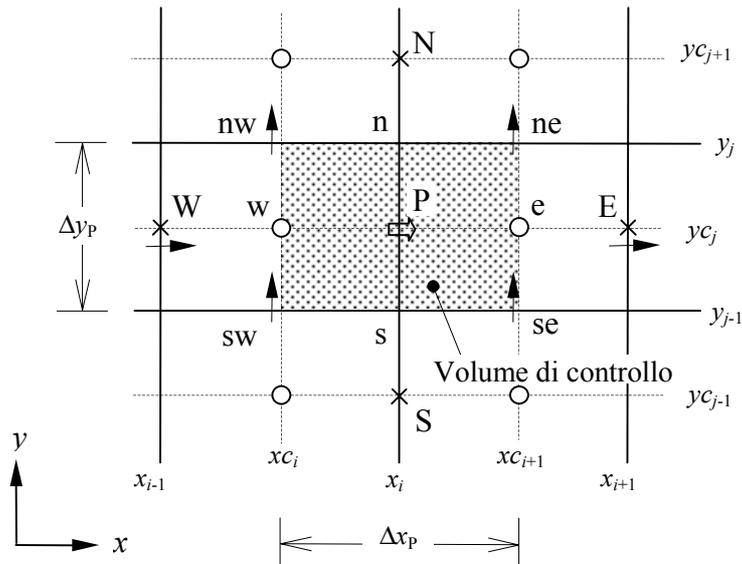


Figura 3 – Volume di controllo per l'equazione della quantità di moto lungo  $x$ .

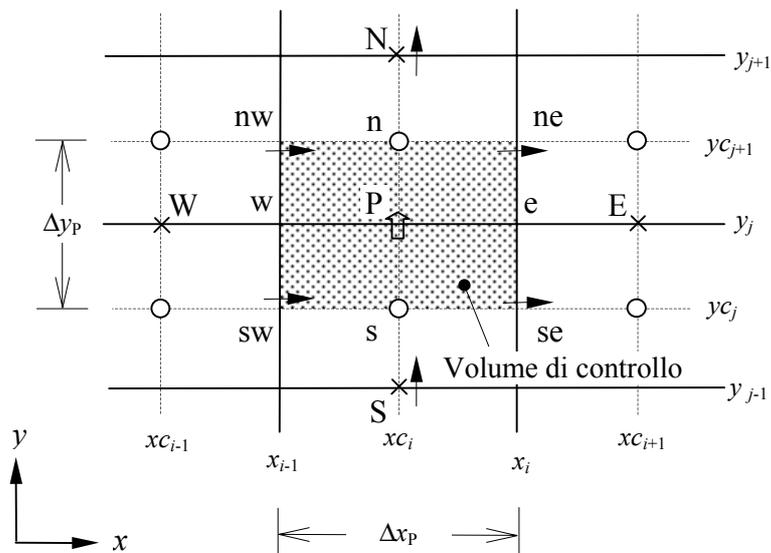


Figura 4 – Volume di controllo per l'equazione della quantità di moto lungo  $y$ .

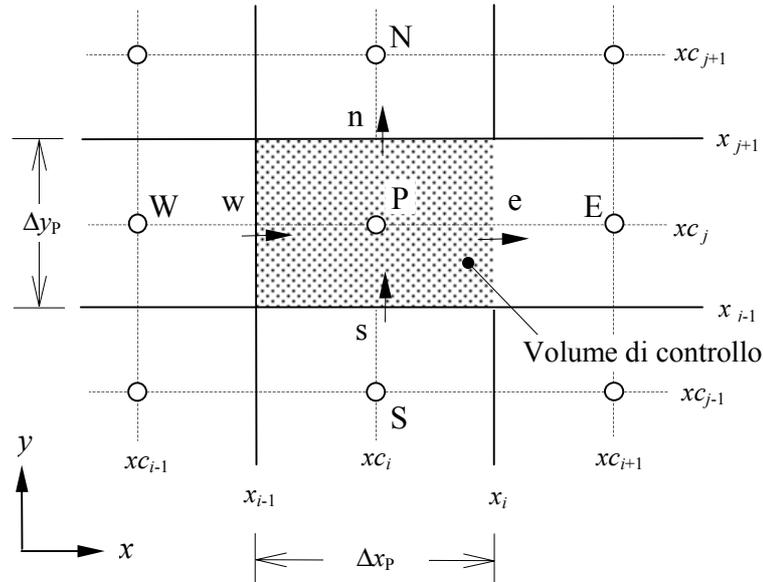


Figura 5 – Volume di controllo per le equazioni di bilancio dell'energia e della massa.

L'integrazione dell'equazione della convezione-diffusione relativa alla variabile  $\phi$  sul generico volume di controllo fornisce

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV + \int_V S_\phi dV \quad (8)$$

che utilizzando il teorema della divergenza dà:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \phi) dV + \int_S (\rho u \phi) \hat{i} \circ \hat{n} dA + \int_S (\rho v \phi) \hat{j} \circ \hat{n} dA = \int_S \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \hat{i} \circ \hat{n} dA + \int_S \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \hat{j} \circ \hat{n} dA + \int_V S_\phi dV \quad (9)$$

a) *Termine non stazionario*

Se la densità è costante, la generica equazione della diffusione-convezione (9) può essere scritta nella seguente forma semplificata:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \quad (10)$$

Un metodo di discretizzazione del termine transitorio è quello che fa uso di una procedura di differenza in avanti. In tal caso si parla di *metodo di Eulero in avanti* o *esplicito* e si ha:

$$\frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} = F(\phi^0) \quad (11)$$

dove  $\phi^0$  si riferisce al valore determinato all'istante temporale precedente ( $t^0$ ), mentre  $\phi$  rappresenta il valore incognito da valutare all'istante attuale ( $t = t^0 + \Delta t$ ). Essendo il secondo membro dell'Eq. (11) individuato all'istante temporale precedente, ogni incognita compare in una sola equazione del sistema e queste ultime possono essere risolte una alla volta, indipendentemente. La seconda parte del termine di sinistra viene quindi assorbito nel termine di sorgente (assicurando il mantenimento della dominanza diagonale).

Nel caso del *metodo di Eulero all'indietro* o *implicito* abbiamo:

$$\frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} = F(\phi) \quad (12)$$

Nell'Eq. (12) la linearizzazione dell'equazione di bilancio è di tipo *implicita* in quanto il secondo membro viene calcolato all'istante attuale e quindi oltre alla  $\phi$  valutata nel nodo in esame esistono altre incognite, cioè tutte le  $\phi$  dei nodi vicini. In questo modo ciascuna incognita può comparire in più di un'equazione (in più di un volume) del sistema e, quindi, queste equazioni devono essere risolte contemporaneamente.

Un metodo implicito più accurato del metodo di Eulero all'indietro è il *metodo di Crank-Nicholson* per il quale l'andamento della funzione tra l'istante  $t^0$  e l'istante  $t = t^0 + \Delta t$  viene interpolato linearmente:

$$\frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} = \frac{F(\phi) + F(\phi^0)}{2} \quad (13)$$

E' possibile utilizzare il seguente metodo generale per la discretizzazione del termine transitorio:

$$\frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} = \theta F(\phi) + (1 - \theta)F(\phi^0) \quad (14)$$

dove al variare di  $\theta$  possiamo ottenere uno dei differenti metodi visti precedentemente. Ponendo  $\theta = 0$  si ottiene il metodo di Eulero esplicito; se si pone  $\theta = 1$  si ottiene il metodo di Eulero implicito; scegliendo  $\theta = 1/2$  si ottiene il metodo di Crank-Nicholson. Sono comunque possibili anche valori intermedi di  $\theta$ .

b) *Termini convettivi*

I termini convettivi vengono discretizzati come

$$\int_S (\rho u \phi) \hat{i} \circ \hat{n} dA = F_e \phi_e - F_w \phi_w \quad (15)$$

$$\int_S (\rho v \phi) \hat{j} \circ \hat{n} dA = F_n \phi_n - F_s \phi_s \quad (16)$$

dove i flussi convettivi  $F$  valgono:

$$F_w = (\rho u)_w \Delta y_P; \quad F_e = (\rho u)_e \Delta y_P; \quad F_s = (\rho v)_s \Delta x_P; \quad F_n = (\rho v)_n \Delta x_P \quad (17)$$

Per calcolare i termini convettivi risulta necessario conoscere il valore assunto dalla variabile  $\phi$  sulle facce del volume di controllo in termini dei valori di  $\phi$  valutati nei centri dei volumi di controllo. Possono essere ottenuti differenti schemi numerici a seconda di come la variabile  $\phi$  viene valutata sul contorno del volume di controllo [4].

Per lo *schema "upwind"* (del primo ordine), il valore di  $\phi$  sulla periferia di ogni volume di controllo è stimato usando il valore nodale più vicino che viene visto dal nodo  $P$  sopravento. Con tale schema al valore di  $\phi_e$  è assegnato il valore di  $\phi_P$  se il flusso convettivo  $F_e$  è positivo, mentre è assegnato il valore  $\phi_E$ , se  $F_e$  è negativo. Questo può essere riassunto come:

$$F_e \phi_e = \|F_e, 0\| \phi_P - \| -F_e, 0\| \phi_E \quad (18)$$

dove l'operatore  $\|a, b\|$  restituisce il valore più grande tra  $a$  e  $b$ .

Oltre allo schema "upwind", esistono anche altri schemi del primo ordine per l'interpolazione della variabile  $\phi$  sulla frontiera dei volumi di controllo. Tra questi ricordiamo lo *schema alle differenze centrali*

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (19)$$

Lo schema alle differenze centrali pur essendo più accurato dello schema upwind non consente di realizzare modelli numerici veloci e stabili. E' per questo motivo che esso viene usato solo per flussi a bassa velocità mentre per quelli ad alta velocità si usa lo schema upwind.

Uno schema che sfrutta i vantaggi sia dello schema upwind che di quello alle differenze centrali è il cosiddetto *schema ibrido* per il quale si pone:

$$\begin{cases} F_e \phi_e = \|F_e, 0\| \phi_P - \| -F_e, 0\| \phi_E & \text{se } Pe_{cell} \geq 2 \\ F_e \phi_e = \frac{F_e \phi_P}{2} + \frac{F_e \phi_E}{2} & \text{se } Pe_{cell} < 2 \end{cases} \quad (20)$$

dove  $Pe_{cell}$  è il numero di Peclet della cella definito come:

$$Pe_{cell} \equiv \frac{F}{D} \quad (21)$$

Uno schema del secondo ordine molto usato è lo schema QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) proposto da Leonard nel 1979 [9]. In questo schema viene effettuata un'interpolazione quadratica tra due nodi vicini che si trovano sopravvento ed un nodo vicino sottovento

$$\phi_e = g_1 \phi_E - g_2 \phi_W + (1 - g_1 - g_2) \phi_P, \quad \text{se } F_e > 0 \quad (22)$$

$$\phi_e = g_3 \phi_P - g_4 \phi_{EE} + (1 - g_3 - g_4) \phi_E, \quad \text{se } F_e < 0 \quad (23)$$

dove i coefficienti  $g_i$  possono essere espressi come:

$$g_1 \equiv \frac{(2 - \lambda_{e,W}) \lambda_{e,P}^2}{1 + \lambda_{e,P} - \lambda_{e,W}}; \quad g_2 \equiv \frac{(1 - \lambda_{e,P})(1 - \lambda_{e,W})^2}{1 + \lambda_{e,P} - \lambda_{e,W}} \quad (24)$$

$$g_3 \equiv \frac{(1 + \lambda_{e,W})(1 - \lambda_{e,P})^2}{1 + \lambda_{e,E} - \lambda_{e,P}}; \quad g_4 \equiv \frac{\lambda_{e,P} \lambda_{e,E}^2}{1 + \lambda_{e,E} - \lambda_{e,P}} \quad (25)$$

Le Eqq. (22) e (23) possono allora essere riassunte nel seguente modo:

$$F_e \phi_e = \|F_e, 0\| [g_1 \phi_E - g_2 \phi_W + (1 - g_1 - g_2) \phi_P] - \|F_e, 0\| [g_3 \phi_P - g_4 \phi_{EE} + (1 - g_3 - g_4) \phi_E] \quad (26)$$

Confrontato con lo schema upwind del primo ordine, lo schema QUICK assume un profilo di forma parabolica per eseguire la procedura di interpolazione alla base della valutazione dei flussi convettivi.

### c) Termini diffusivi

I termini diffusivi sono discretizzati come:

$$\int_S \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) i \circ \hat{n} dA = D_{\phi,e} (\phi_E - \phi_P) - D_{\phi,w} (\phi_P - \phi_W) \quad (27)$$

$$\int_S \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) j \circ \hat{n} dA = D_{\phi,n} (\phi_N - \phi_P) - D_{\phi,s} (\phi_P - \phi_S) \quad (28)$$

dove i flussi diffusivi  $D$  sono:

$$D_{\phi,e} = \Gamma_{\phi,e} \Delta y_P / \delta x_e; \quad D_{\phi,w} = \Gamma_{\phi,w} \Delta y_P / \delta x_w; \quad (29)$$

$$D_{\phi,n} = \Gamma_{\phi,n} \Delta x_P / \delta y_n; \quad D_{\phi,s} = \Gamma_{\phi,s} \Delta x_P / \delta y_s \quad (30)$$

$$\Gamma_{\phi,e} = \left[ \frac{\lambda_{e,P}}{\Gamma_{\phi,P}} + \frac{1 - \lambda_{e,P}}{\Gamma_{\phi,E}} \right]^{-1}; \quad \Gamma_{\phi,n} = \left[ \frac{\lambda_{n,P}}{\Gamma_{\phi,P}} + \frac{1 - \lambda_{n,P}}{\Gamma_{\phi,N}} \right]^{-1} \quad (31)$$

e dove i fattori di interpolazione lineare sono definiti come nel seguente esempio relativo al caso di  $\lambda_{e,P}$ :

$$\lambda_{e,P} \equiv \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad (32)$$

d) *Termine di sorgente*

Spesso il termine di sorgente,  $S_\phi$ , è una funzione della variabile  $\phi$  e delle altre variabili dipendenti; è allora desiderabile sfruttare questa dipendenza nel costruire l'equazione di discretizzazione al fine di aumentare la velocità di convergenza. Affinché le equazioni discretizzate possano essere risolte mediante le tecniche per le equazioni algebriche lineari è possibile tener conto solo di una dipendenza lineare tra il termine di sorgente e la variabile dipendente  $\phi$ ; questa dipendenza viene espressa nella seguente forma linearizzata:

$$\int_V S_\phi dV = (S_{\phi,C} + S_{\phi,P} \phi_P) \Delta x_P \Delta y_P \quad (33)$$

nella quale i valori di  $S_{\phi,C}$  ed  $S_{\phi,P}$  possono dipendere da  $\phi$ . Quando il termine di sorgente viene linearizzato, il coefficiente  $S_{\phi,P}$  deve essere negativo o nullo al fine di assicurare il mantenimento della dominanza diagonale. Durante ciascun ciclo esterno di iterazione, i valori di  $S_{\phi,C}$  ed  $S_{\phi,P}$  dovrebbero allora essere ricalcolati utilizzando i nuovi valori di  $\phi$ .

Un metodo che può essere utilizzato per la linearizzazione è il seguente:

$$S_\phi = S_\phi^* + \left( \frac{dS_\phi}{d\phi} \right)^* (\phi_P - \phi_P^*) \quad (34)$$

dove il simbolo  $\phi_P^*$  è usato per indicare il valore assegnato a  $\phi_P$  o il valore della precedente iterazione esterna di  $\phi_P$ .

Nel caso di discretizzazione del termine transitorio con il metodo implicito e di discretizzazione dei termini convettivi con lo schema upwind, la generica equazione di bilancio discretizzata diventa:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x_P \Delta y_P = & -\|F_{e,0}\| \phi_P + \| -F_{e,0} \| \phi_E + \|F_{w,0}\| \phi_W - \| -F_{w,0} \| \phi_P - \|F_{n,0}\| \phi_P + \| -F_{n,0} \| \phi_N + \\ & + \|F_{s,0}\| \phi_S - \| -F_{s,0} \| \phi_P + D_{\phi,e} (\phi_E - \phi_P) - D_{\phi,w} (\phi_P - \phi_W) + D_{\phi,n} (\phi_N - \phi_P) - D_{\phi,s} (\phi_P - \phi_S) + \\ & + S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + S_{\phi,P} \phi_P \Delta x_P \Delta y_P \end{aligned}$$

↓

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x_P \Delta y_P = & (-F_e + F_w - F_n + F_s) \phi_P - \|-F_e, 0\| \phi_P + \|-F_e, 0\| \phi_E - \|-F_w, 0\| \phi_P + \|-F_w, 0\| \phi_W + \\ & - \|-F_n, 0\| \phi_P + \|-F_n, 0\| \phi_N - \|-F_s, 0\| \phi_P + \|-F_s, 0\| \phi_S + D_{\phi,e} (\phi_E - \phi_P) - D_{\phi,w} (\phi_P - \phi_W) + D_{\phi,n} (\phi_N - \phi_P) - D_{\phi,s} (\phi_P - \phi_S) \\ & + S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + S_{\phi,P} \phi_P \Delta x_P \Delta y_P \end{aligned}$$

Sfruttando l'equazione di continuità discretizzata e nell'ipotesi che non ci siano sorgenti di massa si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x_P \Delta y_P = & \frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x_P \Delta y_P - \|-F_e, 0\| \phi_P + \|-F_e, 0\| \phi_E - \|-F_w, 0\| \phi_P + \|-F_w, 0\| \phi_W + \\ & - \|-F_n, 0\| \phi_P + \|-F_n, 0\| \phi_N - \|-F_s, 0\| \phi_P + \|-F_s, 0\| \phi_S + D_{\phi,e} (\phi_E - \phi_P) - D_{\phi,w} (\phi_P - \phi_W) + D_{\phi,n} (\phi_N - \phi_P) - D_{\phi,s} (\phi_P - \phi_S) \\ & + S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + S_{\phi,P} \phi_P \Delta x_P \Delta y_P \end{aligned}$$

la quale può essere riorganizzata nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \rho_P^0 \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x_P \Delta y_P = & -[D_{\phi,e} + \|-F_e, 0\|] \phi_P - [D_{\phi,w} + \|-F_w, 0\|] \phi_P - [D_{\phi,n} + \|-F_n, 0\|] \phi_P - [D_{\phi,s} + \|-F_s, 0\|] \phi_P + \\ & + [D_{\phi,e} + \|-F_e, 0\|] \phi_E + [D_{\phi,w} + \|-F_w, 0\|] \phi_W + [D_{\phi,n} + \|-F_n, 0\|] \phi_N + [D_{\phi,s} + \|-F_s, 0\|] \phi_S + \\ & + S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + S_{\phi,P} \phi_P \Delta x_P \Delta y_P \end{aligned}$$

In forma compatta possiamo scrivere:

$$a_{\phi,P} \phi_P = a_{\phi,W} \phi_W + a_{\phi,E} \phi_E + a_{\phi,S} \phi_S + a_{\phi,N} \phi_N + b_\phi \quad (35)$$

o più semplicemente

$$a_{\phi,P} \phi_P = \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{nb} + b_\phi \quad (36)$$

dove la somma viene eseguita sugli appropriati punti nodali vicini (*neighbour*, "nb"). I coefficienti che compaiono all'interno dell'Eq. (35) sono dati da:

$$\begin{cases} a_{\phi,W} = D_{\phi,w} + \|-F_w, 0\| \\ a_{\phi,E} = D_{\phi,e} + \|-F_e, 0\| \\ a_{\phi,S} = D_{\phi,s} + \|-F_s, 0\| \\ a_{\phi,N} = D_{\phi,n} + \|-F_n, 0\| \\ a_{\phi,P}^0 = \rho_P^0 \Delta x_P \Delta y_P / \Delta t \\ b_\phi = S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + a_{\phi,P}^0 \phi_P^0 \\ a_{\phi,P} = a_{\phi,W} + a_{\phi,E} + a_{\phi,S} + a_{\phi,N} + a_{\phi,P}^0 - S_{\phi,P} \Delta x_P \Delta y_P \end{cases} \quad (37)$$

I termini  $\phi_P^0$  e  $\rho_P^0$  si riferiscono ai valori determinati al tempo  $t^0$ , mentre i coefficienti  $a_{\phi,nb}$ , ai valori determinati all'istante attuale  $t^0 + \Delta t$ ; questi ultimi rappresentano l'influenza della convezione e della diffusione sulle quattro facce del volume di controllo.

Nel caso di discretizzazione dei termini convettivi con lo schema alle differenze centrali si ha:

$$\begin{cases}
a_{\phi,W} = D_{\phi,W} + F_w / 2 \\
a_{\phi,E} = D_{\phi,e} + F_e / 2 \\
a_{\phi,S} = D_{\phi,s} + F_s / 2 \\
a_{\phi,N} = D_{\phi,n} + F_n / 2 \\
a_{\phi,P}^0 = \rho_P^0 \Delta x_P \Delta y_P / \Delta t \\
b_\phi = S_{\phi,C} \Delta x_P \Delta y_P + a_{\phi,P}^0 \phi_P^0 \\
a_{\phi,P} = a_{\phi,W} + a_{\phi,E} + a_{\phi,S} + a_{\phi,N} + a_{\phi,P}^0 - S_{\phi,P} \Delta x_P \Delta y_P
\end{cases} \quad (38)$$

Nel caso delle equazioni della quantità di moto il gradiente di pressione non è incluso nel termine di sorgente, ma viene riportato in modo esplicito all'interno dell'equazione discretizzata. Per esempio, per l'equazione della quantità di moto lungo  $x$  (v. Fig. 3) si ottiene:

$$a_{u,P} u_P - \sum_{nb} a_{u,nb} u_{nb} + (p_e - p_w) A_e = b_u \quad (39)$$

Poiché i valori delle componenti della velocità sono effettivamente calcolati solo sulle facce dei volumi di controllo della griglia primaria, tutti i valori di velocità assegnati nei punti nodali della griglia primaria devono essere valutati sulla base dei valori assunti sul contorno della griglia. Questa valutazione può essere fatta ad esempio mediante un'interpolazione lineare dei valori assunti nei punti vicini.

#### 4.3 Non linearità e sottorilassamento

Come si è visto precedentemente, ciascuna equazione discretizzata viene generalmente risolta mediante un metodo iterativo (ad es. mediante il metodo line-by-line). All'inizio di ciascun ciclo esterno i coefficienti sono valutati utilizzando i valori dei  $\phi$  ottenuti nel ciclo precedente. A causa delle variazioni dei coefficienti dell'equazione discretizzata da un ciclo esterno ad un altro, le risultanti variazioni nei valori di  $\phi$  possono essere relativamente grandi e questo può causare una convergenza molto lenta o addirittura una divergenza. Per ridurre le variazioni nelle soluzioni consecutive per  $\phi$  e quindi migliorare la convergenza, può essere utilizzata la tecnica del *sottorilassamento*. Patankar introduce il sottorilassamento attraverso l'uso del fattore  $\alpha_\phi$  come segue:

$$\underbrace{\frac{a_{\phi,P}}{\alpha_\phi}}_{\text{nuovo } a_{\phi,P}} \phi_P = \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{nb} + \underbrace{b_\phi + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_{\phi,P} \phi_P^*}_{\text{nuovo } b_\phi} \quad (40)$$

dove  $\phi_P^*$  è il valore di  $\phi_P$  del ciclo esterno precedente. Se  $\alpha_\phi \approx 0$ , il valore di  $\phi$  varia molto lentamente a causa del forte sottorilassamento; se  $\alpha_\phi = 1$  non c'è sottorilassamento; se  $\alpha_\phi > 1$

c'è sovrarilassamento. È l'Eq. (40) che andrà risolta iterativamente per ottenere i nuovi valori di  $\phi_p$ .

Non ci sono regole generali per la scelta del migliore valore di  $\alpha_\phi$ . Il valore ottimo dipende da un elevato numero di parametri come il numero di punti di griglia, la spaziatura della griglia e la procedura iterativa usata per la risoluzione. Normalmente, il valore di  $\alpha_\phi$  più appropriato è dato dall'esperienza e da calcoli preliminari per il dato problema. Non c'è necessità di mantenere lo stesso valore di  $\alpha_\phi$  durante l'intera computazione. Il valore può essere cambiato da un'iterazione esterna ad un'altra. Inoltre, è permesso, sebbene non è conveniente, scegliere un differente valore di  $\alpha_\phi$  per ciascun punto di griglia.

Doormaal e Raithby [6] suggeriscono di utilizzare la tecnica del sottorilassamento nel seguente modo:

$$a_{\phi,P} \left( 1 + \frac{1}{E_\phi} \right) \phi_P = \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{nb} + b_\phi + \frac{a_{\phi,P}}{E} \phi_P^* \quad (41)$$

I valori di  $E$  variano generalmente tra 4 e 10.

## 5. Risoluzione numerica delle equazioni discretizzate

L'equazione della convezione-diffusione scritta in forma discretizzata è nominalmente un'equazione lineare. In realtà i coefficienti dell'equazione discretizzata dipendono di solito dalla variabile dipendente  $\phi$  relativa a quella particolare equazione ed, alcune volte, anche dalle altre variabili dipendenti relative alle restanti equazioni. Per tener conto dei legami esistenti tra le varie equazioni e delle non linearità sono richieste ripetute soluzioni delle forme nominalmente lineari. Esistono due diversi modi per risolvere questo gruppo di equazioni.

### a) Soluzione sequenziale

Le equazioni discretizzate vengono risolte sequenzialmente. Ciascuna equazione viene trattata come se in essa fosse presente una sola variabile incognita (quella primaria), considerando le altre variabili conosciute (usando la migliore stima possibile per esse). Visto che si ha a che fare con sistemi di equazioni troppo grandi da poter essere risolti mediante un metodo diretto, ogni equazione discretizzata viene generalmente risolta mediante un metodo iterativo (ad es. mediante il metodo di Gauss Sidel) piuttosto che mediante un metodo diretto. Le iterazioni eseguite al fine di ottenere la convergenza della singola equazione sono dette *iterazioni interne*. Dato che, per una data equazione discretizzata, i coefficienti ed il termine di sorgente dipendono dalle altre variabili, una volta risolto sequenzialmente le varie equazioni di bilancio è necessario ripetere il ciclo e cioè sono necessarie *iterazioni esterne* al fine di ottenere la convergenza contemporanea di tutte le equazioni.

Dato che, per una data equazione discretizzata, i coefficienti ed il termine di sorgente cambiano tra una iterazione esterna ed un'altra, è inefficiente risolvere la singola equazione in modo eccessivamente accurato (eseguendo tantissime iterazioni interne).

Per ottenere un algoritmo che dia convergenza può in alcuni casi essere necessario limitare la variazione di una o più variabili tra un'iterazione esterna ed un'altra mediante la tecnica del sottorilassamento di cui si parlerà nel seguito.

### b) Soluzione simultanea

Tutte le equazioni discretizzate sono considerate parte di un grande sistema e sono risolte simultaneamente.

Indipendentemente dal tipo di soluzione adottata, il problema discretizzato risulta nella risoluzione di un grande sistema di equazioni del tipo:

$$\underline{A}\phi = \underline{b} \quad (42)$$

dove  $\underline{A}$  è la matrice dei coefficienti a struttura sparsa,  $\underline{b}$  è il vettore dei termini noti e  $\underline{\phi}$  è il vettore delle incognite. Il metodo iterativo produce una sequenza  $\underline{\phi}^i$  di vettori convergenti al vettore  $\underline{\phi}$  soluzione del sistema iniziale

$$\underline{\phi}^i = \underline{C}\underline{\phi}^{i-1} + \underline{d} \quad (43)$$

in cui  $\underline{C}$  è la matrice di iterazione e  $\underline{d}$  è un opportuno vettore.

I numerosi metodi iterativi attualmente disponibili per la risoluzione delle equazioni discretizzate possono essere raggruppati in due categorie: quella dei metodi “stazionari”, nei quali la matrice di iterazione  $\underline{C}$  ed il vettore  $\underline{d}$  rimangono le stesse attraverso le iterazioni interne e quella dei metodi “non stazionari”, nei quali le operazioni coinvolgono azioni che cambiano la matrice  $\underline{C}$  ed il vettore  $\underline{d}$  ad ogni iterazione interna.

a) *Metodi iterativi stazionari*

- Il metodo di Jacobi è basato sulla risoluzione di ciascuna variabile localmente rispetto alle altre variabili. Questo metodo, molto semplice, ha lo svantaggio di convergere piuttosto lentamente.
- Il metodo di Gauss-Seidel è simile al metodo di Jacobi, eccetto per il fatto che usa i valori delle variabili conosciuti così come essi sono utilizzabili. In generale questo metodo converge più rapidamente del metodo di Jacobi.
- Il metodo noto come Successive Over-Relaxation (SOR) viene ottenuto facendo uso del sovrarilassamento delle variabili nel metodo di Gauss-Sidel. Con l’uso del valore ottimale del coefficiente di sovrarilassamento, la velocità di convergenza del SOR è circa un ordine di grandezza maggiore di quella relativa al metodo di Gauss-Sidel. Nel caso particolare che si usi un coefficiente di sovrarilassamento pari ad 1 ci si riconduce al metodo di Gauss-Sidel.
- Il metodo di sovrarilassamento per linee (LOR) sfrutta l’algoritmo di Thomas per la risoluzione delle matrici tridiagonali che si ottengono per problemi 1D anche per trattare sistemi 2D o 3D. Nel caso particolare che si usi un coefficiente di sovrarilassamento pari ad 1 si ottiene il metodo detto *line by line*.

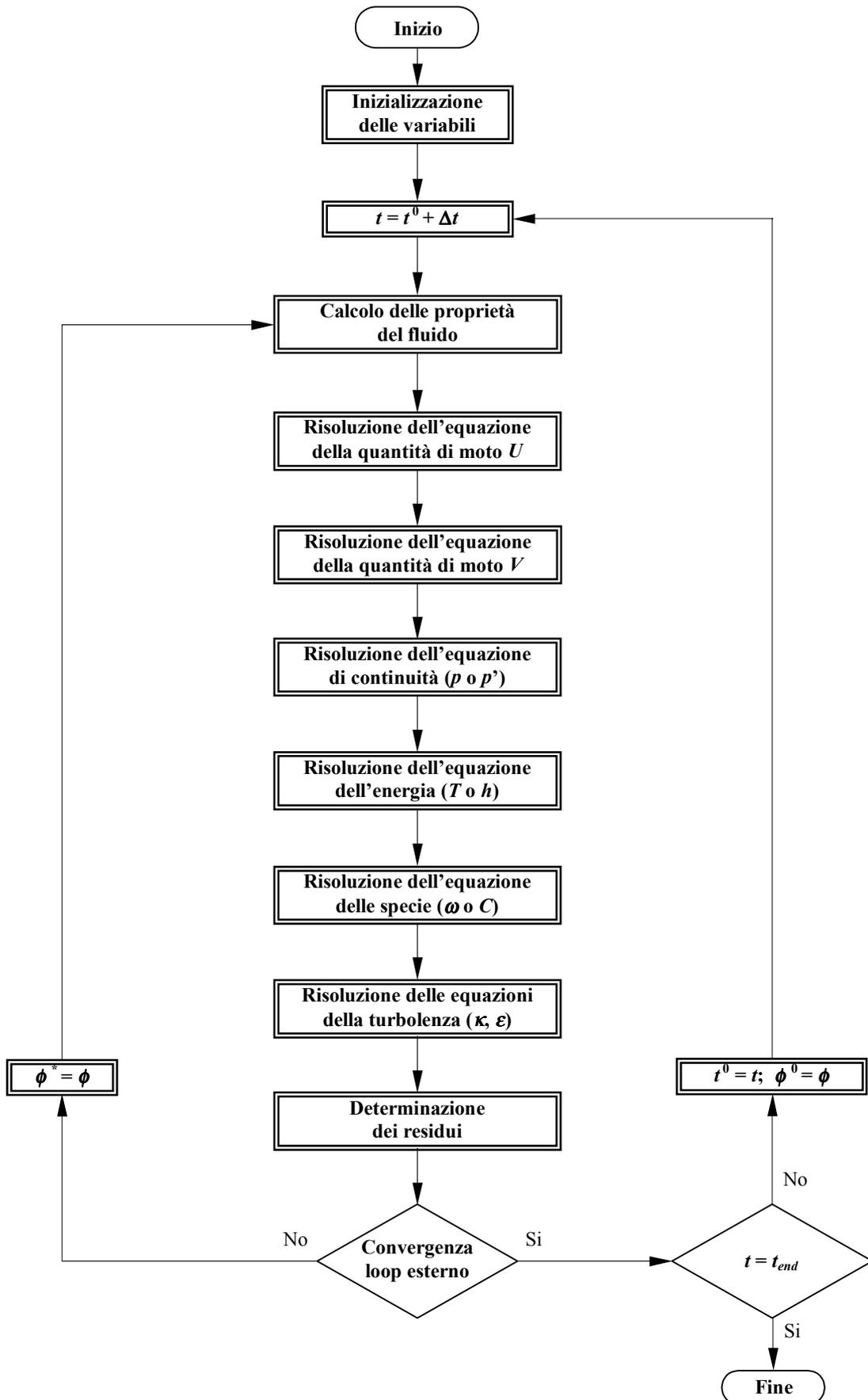


Figura 6 – Schema a blocchi del metodo di soluzione sequenziale delle equazioni di bilancio.

b) *Metodi iterativi non stazionari*

- Il metodo dei gradienti coniugati (CG) [11] è basato sull'idea di risolvere il sistema di equazioni attraverso la conversione in un problema di minimizzazione di una funzione; è possibile minimizzare la funzione rispetto a differenti direzioni simultaneamente mentre si sta indagando su una direzione alla volta. Il metodo si applica a matrici simmetriche definite positive. Il metodo dei gradienti coniugati deriva il suo nome dal fatto che esso genera una sequenza di vettori ortogonali (coniugati). Questi vettori sono i residui delle iterazioni; essi sono inoltre i gradienti di un funzionale quadratico la cui minimizzazione è equivalente a risolvere il sistema lineare.
- Il metodo dei gradienti biconiugati (BiCG) [12] è simile al metodo dei gradienti coniugati ma può essere utilizzato anche per la soluzione di sistemi lineari non simmetrici, purchè la matrice dei coefficienti sia non singolare. Esso genera due sequenze di vettori simili al metodo CG, uno basato su un sistema con matrice dei coefficienti. Non c'è una base teorica solida per la convergenza di questo metodo.
- Il metodo noto come Coniugate Gradient Squared (CGS) [13] accelera la convergenza del metodo dei gradienti biconiugati generando residui che sono correlati ai residui originali dalla radice quadrata di un polinomio in  $A$  invece che da un polinomio in  $A$  come nel caso dei metodi CG e BiCG. In pratica ciò comporta una velocità di convergenza che è circa doppia di quella del metodo BiCG, ma la convergenza può essere più irregolare.
- Il metodo dei minimi residui (MinRES) è utilizzabile per matrici simmetriche definite positive.
- Il metodo dei minimi residui generalizzato (GMRES) [14] calcola una sequenza di vettori ortogonali (similmente al metodo MinRES) e li combina attraverso una risoluzione ai minimi quadrati. Tuttavia, differentemente da MinRES esso richiede una grande quantità di memoria per immagazzinare i dati.
- Il metodo dei quasi minimi residui (QMR) [15] è uno degli algoritmi proposti quale rimedio alla convergenza irregolare dei metodi CG e BiCG.

La procedura di soluzione per i metodi iterativi non stazionari consiste di due fasi: il preconditionamento e la soluzione vera e propria. Sebbene da un punto di vista teorico questi metodi possono essere usati senza preconditionamento delle equazioni del sistema, l'uso delle tecniche di preconditionamento è essenziale per il soddisfacimento delle esigenze di stabilità e di convergenza della procedura iterativa stessa. E' ben noto infatti che

per un metodo iterativo quale quello CG il residuo numerico all'iterazione interna k-esima può essere stimato come:

$$\underline{e}^i = \underline{A}^{-1} \underline{r}^i \|\underline{r}^i\| < \left( \frac{\sqrt{\mu(A)} - 1}{\sqrt{\mu(A)} + 1} \right)^{2k} \|\underline{r}_0\|$$

dove  $\mu(A)$  è il condition number (cioè il rapporto tra l'autovalore massimo e quello minimo) della matrice  $A$ . E' ovvio che il miglior condition number per la convergenza del metodo si ha quando  $\mu(A)$  è piccolo e vicino a 1. Dall'altro lato se  $\mu(A)$  è grande, il metodo iterativo potrebbe o convergere molto lentamente o addirittura divergere a causa del round-off error. L'obiettivo del preconditionamento è quello di convertire il sistema lineare originario in un sistema equivalente ma meglio condizionato. Questo consiste nel trovare una matrice reale  $C$  tale che  $\mu(C^{-1}A) < \mu(A)$ . In questo modo il nuovo sistema lineare:

$$C^{-1} A \underline{\phi} = C^{-1} \underline{b}$$

ha migliori caratteristiche di convergenza e di stabilità. E' ovvio che la matrice  $C$  deve essere scelta con molta attenzione: essa dovrebbe essere vicina ad  $A$  ma facile da invertire in modo da evitare un aumento del costo computazionale.

## 6. Criteri di convergenza

Durante il processo iterativo è necessario tenere sotto controllo la dinamicità di convergenza dell'algoritmo di risoluzione. Idealmente bisognerebbe interrompere le iterazioni quando l'errore  $\underline{e}^i = \underline{\phi}^i - \underline{\phi}$  scende al di sotto di un certo valore di soglia. Il problema è che risulta difficile stimare direttamente  $\underline{e}^i$  per cui si usa spesso il residuo  $\underline{r}^i = \underline{A}\underline{\phi}^i - \underline{b}$  che è molto facilmente computabile. Essendo l'errore ed il residuo legati fra di loro mediante la seguente relazione:

$$\underline{e}^i = \underline{A}^{-1} \underline{r}^i$$

che implica:

$$\|\underline{e}^i\| \leq \|\underline{A}^{-1}\| \|\underline{r}^i\|$$

un criterio di fermata del tipo  $\|\underline{r}^i\| \leq \varepsilon$  garantisce che sia  $\|\underline{e}^i\| \leq \varepsilon \|\underline{A}^{-1}\|$ . Ancora una volta il problema maggiore è il calcolo della norma della matrice  $\underline{A}^{-1}$ .

Ci sono molti modi per giudicare la bontà di convergenza, ma il metodo più comune è quello di controllare ad ogni iterazione interna i residui definiti come:

$$R_\phi = \sum_{all\ C.V.} \left| a_{\phi,P} \phi_P - \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{\phi,nb} - b_\phi \right| \quad (44)$$

Generalmente, il criterio di convergenza viene applicato ai residui adimensionalizzati. L'adimensionalizzazione può essere effettuata in differenti modi. Ad esempio nel FLUENT si adotta la seguente espressione:

$$R_\phi^* = \frac{\sum_{all\ C.V.} \left| a_{\phi,P} \phi_P - \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{nb} - b_\phi \right|}{\sum_{all\ C.V.} |a_{\phi,P} \phi_P|} \quad (45)$$

mentre in altri lavori [6,10] i residui vengono adimensionalizzati sulla base della seguente grandezza:

$$R_{\phi,ref} = \max_{all\ iterations} (R_{\phi,ref}, R_\phi) \quad (46)$$

risultando:

$$R_\phi^* = \frac{\sum_{all\ C.V.} \left| a_{\phi,P} \phi_P - \sum_{nb} a_{\phi,nb} \phi_{nb} - b_\phi \right|}{R_{\phi,ref}} \quad (47)$$

Avendo i computer una precisione finita, si assume come criterio di convergenza per l'equazione discretizzata che  $R_{\phi}^*$ , calcolato mediante uno dei due precedenti metodi, risulti minore di un prefissato valore  $\varepsilon$  (ad esempio  $\varepsilon = 10^{-5}$ ).

Una definizione dei residui utile per una classe di problemi può risultare spesso forviante per altre classi di problemi. Per questo motivo è buona norma giudicare la convergenza non solo esaminando i livelli dei residui ma anche tenendo sotto controllo grandezze rilevanti, quali il coefficiente di scambio termico, la tensione tangenziale su di una parete, ecc..

**BIBLIOGRAFIA**

- [1] F.H. Harlow, J.E. Welch, “Numerical Calculation of Time-dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface”, *Phys. Fluids*, Vol. 8, No. 12, pp.2182-2189, 1965.
- [2] F.H. Harlow, A.A. Amsden, “The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows”, Los Alamos Scientific Laboratory Rept. LA-4370, 1970.
- [3] S.V. Patankar, D.B. Spalding, “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 1787-1806, 1972.
- [4] S.V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Hemisphere, Washington, 1980.
- [5] S.V. Patankar, “A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations”, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 4, pp. 409-425, 1981.
- [6] J.P. Van Doormaal, G.D. Raithby, “Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows”, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 7, pp. 147-163, 1984.
- [7] R.I. Issa, “Solution of Implicitly Discretized Fluid Flow Equations by Operator-Splitting”, *J. Comput. Phys.*, Vol. 62, pp. 40-65, 1986.
- [8] F.H. Harlow, J.E. Welsh, “Numerical Calculation of Time Dependent Viscous Incompressible Flow with Free Surface”, *Phys. Fluids*, Vol. 8, pp. 2182-2189, 1965.
- [9] B.P. Leonard, “A Stable and Accurate Convection Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation”, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 19, pp. 59-98, 1979.
- [10] L. Davidson, H. Nilsson, “CALC-PVM: A Parallel SIMPLEC Multiblock Solver for Turbulent Flow in Complex Domains”, Chalmers University of Technology, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Göteborg, August 1998.
- [11] M. Hestenes, E. Stiefel, “Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems” *J. Res. Natl. Bur. Stds.*, Vol. 49, pp. 409–436, 1952.
- [12] R. Fletcher “Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems”, *Lecture Notes in Mathematics*, Vol. 506, Springer–Verlag, Berlin, 1976.

- [13] P. Sonneveld, “CGS, A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 10, pp. 36–52, 1989.
- [14] Y. Saad and M. Schultz, “GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856–869, 1986.
- [15] R. Freund, N. Nachtigal, “QMR: a Quasi-Minimal Residual Method for non-Hermitian Linear Systems”, *Numer. Math.*, 60, pp 315–339, 1991.