# CONFRONTO FRA METODI NUMERICI IN SEMPLICI PROBLEMI MONODIMENSIONALI

Enrico Nobile DIA - Dipartimento di Ingegneria e Architettura Università degli Studi di Trieste Via A. Valerio 10, 34127 TRIESTE

1 maggio 2006 (1a rev. 1 maggio 2020)

### Introduzione

Lo scopo di questa breve nota è quello di familiarizzare gli allievi del corso di Termofluidodinamica Computazionale (CFD, Computational Fluid Dynamics), rivolto ai corsi di Laurea Magistrale (e Specialistica) dell'area dell'Ingegneria Industriale, con alcuni dei metodi numerici utilizzati in questa disciplina. Per esperienza diretta di chi scrive, lo studente, alle prese con prodotti di CFD commerciale (e per meglio dire *industriale*), durante le esercitazioni del corso, sempre più potenti, versatili ed *accattivanti* nell'interfaccia grafica, tende invariabilmente a trascurare l'aspetto teorico e metodologico, concentrando viceversa molti dei suoi sforzi sull'applicazione pratica, richiesta attraverso la realizzazione di un opportuno *student project*. Il rischio, quindi, è quello di ottenere, alla fine del corso, allievi sufficientemente preparati sul prodotto/prodotti, ma incapaci di comprendere le scelte che stanno alla base del loro corretto utilizzo.

L'autore, assieme ad alcuni colleghi, ha da tempo contribuito alla preparazione di un volume [1] che, evitando allo studente lo sforzo di rivolgersi a volumi in lingua Inglese, e che inoltre non privilegia, a differenza di questi ultimi, nessun particolare metodo numerico, si prefigge proprio lo scopo di fornire le informazioni e le conoscenze *minime* per un uso consapevole di questa moderna tecnologia. Questa nota, quindi, integra ed estende, attraverso semplici esempi pratici, le basi teoriche dei metodi numerici più diffusi nell'ambito della CFD industriale.

### **1** Descrizione del problema

A scopo illustrativo, consideriamo la seguente equazione differenziale ordinaria

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d} x^2} - 2 = 0 \tag{1a}$$

con le condizioni al contorno di Dirichlet

$$\begin{cases} u = 0 \quad \text{per} \quad x = 0\\ u = 0 \quad \text{per} \quad x = 1 \end{cases}$$
(1b)

Si tratta di una semplice equazione differenziale lineare del second'ordine, la cui soluzione analitica è

$$u = x^2 - x \tag{2}$$

Questo problema – semplice equazione monodimensionale con altrettanto semplici condizioni al contorno – possiede una soluzione particolarmente regolare (*smooth*), e quindi, come vedremo, tutti i metodi numerici considerati forniscono la soluzione esatta anche con una discretizzazione molto grossolana.

### 2 Uso del metodo delle Differenze Finite

In riferimento alla figura 1 le equazioni alle differenze finite (FD - *Finite Differences*) per du/dxe  $d^2u/dx^2$  sono

$$\begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \end{pmatrix}_{i+1/2} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \approx \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_i & \text{differenza in avanti} \\ \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \end{pmatrix}_{i-1/2} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \approx \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_i & \text{differenza all'indietro} \\ \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \end{pmatrix}_i \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} & \text{differenza centrata} \\ \end{pmatrix}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d} x^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} x} \left( \frac{\mathrm{d} u}{\mathrm{d} x} \right) \cong \frac{1}{\Delta x} \left[ \left( \frac{\mathrm{d} u}{\mathrm{d} x} \right)_{i+1/2} - \left( \frac{\mathrm{d} u}{\mathrm{d} x} \right)_{i-1/2} \right]$$
$$\approx \frac{1}{\Delta x} \left( \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \tag{4}$$

Sostituendo la (4) nella (1a)

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} = 2$$

Usando una mesh molto rada con solo tre nodi ( $x_1 = 0, x_2 = 0.5, x_3 = 1, \Delta x = 0.5$ ), e con le condizioni al contorno  $u_1 = 0, u_3 = 0$ , si ricava

$$u_2 = \frac{1}{2} \left( u_3 + u_1 \right) - \Delta x^2 = -\frac{1}{2}$$

Il risultato è lo stesso fornito dalla (2)

$$u_2 = u(1/2) = (x^2 - x)_{1/2} = -$$

In quanto segue, verificheremo che la stessa soluzione esatta è ottenuta attraverso il metodo degli Elementi Finiti (FEM per brevità), ed il metodo dei Volumi Finiti (FV nel seguito).

 $\overline{4}$ 



Figura 1: Approssimazione alle differenze finite.

## 3 Uso del metodo degli Elementi Finiti

In analogia con quanto fatto con il metodo delle differenze finite, suddividiamo il dominio con una mesh il più rada possibile, costituita quindi da due soli elementi (e = 1, 2), come schematizzato in figura 2.

Per quanto riguarda la notazione (si veda il capitolo 3 in [1] a cui si rimanda per maggiori dettagli), un pedice che identifica una grandezza nodale si intende riferito alla numerazione locale se il simbolo è accompagnato dall'apice e, altrimenti si intende riferito alla numerazione globale. Ad esempio, nel nostro caso

$$u_{1} = u_{1}^{1}$$
$$u_{2} = u_{2}^{1} = u_{1}^{2}$$
$$u_{3} = u_{2}^{2}$$

Assumiamo la variabile  $u^e(x)$  funzione lineare di x

$$u^e(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x$$

2

(5)



Figura 2: Discretizzazione agli elementi finiti per un problema monodimensionale con due elementi. (a) Dominio  $\Omega$  e contorno  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ . (b) Numerazione globale dei nodi. (c) Numerazione locale degli elementi. (d) Funzioni di forma.

Imponendo

$$u^e(x_1^e) = u_1^e$$
$$u^e(x_2^e) = u_2^e$$

e sostituendo nella (6), si ottiene

$$u_1^e = \alpha_1 + \alpha_2 x_1^e$$
$$u_2^e = \alpha_1 + \alpha_2 x_2^e$$

Risolvendo per  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ 

$$\alpha_1 = u_1^e - \frac{u_2^e - u_1^e}{x_2^e - x_1^e} x_1^e$$
$$\alpha_2 = \frac{u_2^e - u_1^e}{x_2^e - x_1^e}$$

e sostituendo infine questi valori nella (6), otteniamo l'espressione esplicita dell'andamento della variabile all'interno dell'elemento

$$u^{e}(x) = u_{1}^{e} \frac{x_{2}^{e} - x}{x_{2}^{e} - x_{1}^{e}} + u_{2}^{e} \frac{x - x_{1}^{e}}{x_{2}^{e} - x_{1}^{e}} = u_{1}^{e} \left(\frac{x_{2}^{e} - x}{h}\right) + u_{2}^{e} \left(\frac{x - x_{1}^{e}}{h}\right)$$
(7a)

che può essere generalizzata (v. equazione (3.1) del capitolo 3 in [1]) nella

$$u^{e}(x) = \sum_{i=1}^{r} N_{i}^{e}(x) u_{i}^{e} = N_{i}^{e}(x) u_{i}^{e} = [N^{e}] \{u^{e}\}$$
(7b)

dove, nella (7b), l'espressione con gli indici ripetuti implica somma. La sommatoria va estesa, in generale, a tutti i nodi r dell'elemento, ed in questo caso r = 2.  $N_i^e$  rappresenta la funzione di forma per il nodo i dell'elemento e,  $[N^e]$  è la matrice riga, di dimensioni  $1 \times r$ , delle funzioni di forma dell'elemento, ed  $\{u^e\}$  è il vettore di lunghezza r delle grandezze nodali dell'elemento. Nel nostro caso le funzioni di forma sono quindi

$$N_1^e(x) = \frac{x_2^e - x}{h}, \quad N_2^e(x) = \frac{x - x_1^e}{h}$$
 (8a)

$$0 \le N_i^e(x) \le 1 \tag{8b}$$

Queste funzioni sono rappresentate in figura 2d, e si noti che

$$N_i^e\left(x_i^e\right) = 1$$

$$N_i^e(x_j^e) = 0 \text{ per } i \neq j$$

ed inoltre

$$\sum_{i=1}^{r} N_i^e(x) = 1 \tag{10}$$

Quest'ultima proprietà garantisce la rappresentazione *esatta* dell'andamento costante della variabile su un elemento: infatti, se  $u^e(x) = u^e$  costante su tutto l'elemento, e quindi anche nei nodi, risulta

$$u^{e}(x) = \sum_{i=1}^{r} N_{i}^{e}(x) u_{i}^{e} = u^{e} \sum_{i=1}^{r} N_{i}^{e}(x) = u^{e}$$

verificata solo se vale la (10).

Utilizzando il metodo dei residui pesati per costruire le equazioni nodali, si ha

$$\int_{\Omega} W_i \left( \frac{\mathrm{d}^2 u^e(x)}{\mathrm{d} x^2} - 2 \right) \,\mathrm{d}\Omega = 0 \tag{11}$$

che può essere scritta come somma (assembly) dei contributi di tutti gli m elementi del dominio

$$\sum_{e=1}^{m} \int_{\Omega^{e}} W_i \left( \frac{\mathrm{d}^2 u^e(x)}{\mathrm{d} x^2} - 2 \right) \,\mathrm{d}\Omega^e = 0$$

e quindi, con riferimento al generico elemento

$$\int_{\Omega^e} W_i \left( \frac{\mathrm{d}^2 u^e(x)}{\mathrm{d} x^2} - 2 \right) \mathrm{d}\Omega^e = \int_x^{x+h} W_i \left( \frac{\mathrm{d}^2 u^e(x)}{\mathrm{d} x^2} - 2 \right) \mathrm{d}x = 0$$

Utilizzando il metodo di Galerkin, per il quale

 $W_i = N_i$ 

$$N_{i}^{e}(x)\left(\frac{\mathrm{d}^{2}u^{e}(x)}{\mathrm{d}x^{2}}-2\right)\,\mathrm{d}x=0$$
(13)

Come riportato in [1] cap. 3, si dovrebbe ora sostituire la (7b) nella (13) ma, prima di procedere in tal modo, è opportuno fare un breve richiamo all'integrazione per parti. Nel nostro caso, operando con funzioni scalari di una sola variabile indipendente, vale la

$$\int_{a}^{b} f(x) g'(x) \, \mathrm{d}x = \left[f(x), g(x)\right]_{a}^{b} - \int_{a}^{b} f'(x) g(x) \, \mathrm{d}x$$

che applicata alla (13) fornisce

$$\left[N_i^e(x)\frac{\mathrm{d}u^e}{\mathrm{d}x}\right]_x^{x+h} - \int_x^{x+h}\frac{\mathrm{d}N_i^e(x)}{\mathrm{d}x} \cdot \frac{\mathrm{d}u^e(x)}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x - \int_x^{x+h}2N_i^e(x) \,\mathrm{d}x = 0$$
(14)

ed infine sostituendo la (7b) nella (14)

$$\left[N_i^e(x)\frac{\mathrm{d}u^e}{\mathrm{d}x}\right]_0^h - \left[\int_0^h \frac{\mathrm{d}N_i^e(x)}{\mathrm{d}x} \cdot \frac{\mathrm{d}N_j^e(x)}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x\right] u_j^e - \int_0^h 2N_i^e(x) \,\mathrm{d}x = 0 \tag{15}$$

(9a)

(9b)

(12)

Questa è nota come *forma debole (weak form*), poiché l'equazione non contiene più la derivata seconda, ma la derivata prima, quindi è più *permissiva*: ammette infatti funzioni che sono derivabili una sola volta. La derivata du/dx nel primo termine della (15) non rappresenta più la variabile nel dominio, ma assume il significato di condizione al contorno di Neumann (costante), da specificare eventualmente a x = 0 e x = h. La funzione di forma sul contorno assume valore pari a 1 se viene applicata la condizione di Neumann, 0 altrimenti. Ricordando inoltre che la normale n sul contorno è sempre rivolta all'esterno, bisogna assegnare opportuni valori ai coseni direttori. Questi, con riferimento alla figura 3, sono desumibili facilmente, ad esempio, dal caso bidimensionale



Figura 3: Normali e coseni direttori: (a) caso bidimensionale; (b) problema monodimensionale.

Usando la notazione compatta, ed omettendo da adesso per brevità di esplicitare la dipendenza da (x) delle funzioni di forma e di pesata, la (15) può scriversi come

$$K_{ij}^{e}u_{j}^{e} = s_{i}^{e} + r_{i}^{e} \quad (i, j = 1, \dots, r)$$
(17)

dove  $K_{ij}^e$ , per (i, j = 1, ..., r) è la *matrice di conduzione* (in alternativa chiamata di diffusione, di viscosità o di rigidità), che deriva dal termine con derivata seconda nell'equazione di partenza. Per il caso in esame r = 2, quindi

$$K_{ij}^{e} = \int_{0}^{h} \frac{\mathrm{d}N_{i}^{e}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}N_{j}^{e}}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x$$

$$= \begin{bmatrix} \int_{0}^{h} \frac{\mathrm{d}N_{1}^{e}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}N_{1}^{e}}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x & \int_{0}^{h} \frac{\mathrm{d}N_{1}^{e}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}N_{2}^{e}}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x \\ \int_{0}^{h} \frac{\mathrm{d}N_{2}^{e}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}N_{1}^{e}}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x & \int_{0}^{h} \frac{\mathrm{d}N_{2}^{e}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}N_{2}^{e}}{\mathrm{d}x} \,\mathrm{d}x \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \int_{0}^{h} \left(-\frac{1}{h}\right) \left(-\frac{1}{h}\right) \,\mathrm{d}x & \int_{0}^{h} \left(-\frac{1}{h}\right) \left(\frac{1}{h}\right) \,\mathrm{d}x \\ \int_{0}^{h} \left(\frac{1}{h}\right) \left(-\frac{1}{h}\right) \,\mathrm{d}x & \int_{0}^{h} \left(\frac{1}{h}\right) \left(\frac{1}{h}\right) \,\mathrm{d}x \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} K_{11}^{e} & K_{12}^{e} \\ K_{21}^{e} & K_{22}^{e} \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$
(18)
(19)

Nella (17)  $s_i^e$  è il vettore sorgente

$$s_i^e = -\int_0^h 2N_i^e \, \mathrm{d}x = -2 \begin{bmatrix} \int_0^h \left(1 - \frac{x}{h}\right) \, \mathrm{d}x \\ \int_0^h \frac{x}{h} \, \mathrm{d}x \end{bmatrix} = -h \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$
(20)

ed  $r_i^e$  è il vettore dei flussi termici (Neumann)

$$r_i^e = N_i^e \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_0^h = N_i^e \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \cos\theta \tag{21}$$

I contributi di tutti gli elementi, e = 1, 2 nel nostro caso, vengono quindi assemblati nei nodi globali (i = 1, 2, 3)

$$\begin{bmatrix} K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} K_{11}^{11} & K_{12}^{1} & 0 \\ K_{21}^{1} & K_{22}^{1} + K_{11}^{2} & K_{12}^{2} \\ 0 & K_{21}^{2} & K_{22}^{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$
(22)

$$\{s\} = \left\{ \begin{array}{c} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} s_1^1 \\ s_2^1 + s_1^2 \\ s_2^2 \end{array} \right\} = -h \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 1 \end{array} \right\}$$
(23)

$$\{r\} = \begin{cases} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{cases} = \begin{cases} r_1^1 \\ r_2^1 + r_1^2 \\ r_2^2 \end{cases} = \begin{cases} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{cases} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \cos\theta$$
$$= \begin{cases} N_1^1 \\ N_2 \\ N_3 \end{cases} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \cos\theta$$
$$= \begin{cases} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{cases} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \cos\theta$$
$$(24)$$

in quest'ultimo caso indicando che non vanno applicate condizioni al contorno di Neumann a nessun nodo globale. Il sistema di equazioni finale risultante è

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix} = -h^2 \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{Bmatrix}$$
(25)

Esplicitando la precedente per il nodo 2

$$-u_1 + 2u_2 - u_3 = -2\,h^2$$

o, in altra forma

$$\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2} = 2$$

identica alla (5) già trovata con il metodo FD.

### 4 Uso del metodo dei Volumi Finiti

Il metodo dei volumi finiti (FV nel seguito) può essere formulato ricorrendo all'approccio FD, oppure utilizzando il FEM. Ambedue le formulazioni, spesso indicate rispettivamente come *cell-centered FV* e CV-FEM per *Control Volume - Finite Element Method*<sup>1</sup>, trovano ampio impiego nei codici industriali di Fluidodinamica Computazionale (CFD – *Computational Fluid Dynamics*), e perciò nel seguito li considereremo entrambi. Anticipiamo sin d'ora che, per problemi *semplici* quale il caso in esame, i risultati sono identici per ambedue le formulazioni.



Figura 4: Approssimazione ai volumi finiti

In riferimento alla figura 4, si sono indicati con CV i volumi finiti, o volumi di controllo (Control Volumes), e con CS le superfici di controllo (Control Surfaces) che li delimitano. Ad esempio il volume di controllo per il nodo *i* si estende per  $\Delta x/2$  a destra e a sinistra del nodo *i*, mentre le superfici di controllo si trovano a i - 1/2 e i + 1/2.

### 4.1 FV via FD

L'idea alla base del metodo FV con l'uso di FD, consiste nell'integrare l'equazione per un generico volume di controllo, in particolare per un volume finito. L'applicazione del teorema di Gauss (si veda a tal proposito il cap. 3 di [1]), consente di trasformare l'integrale di volume, per i termini espressi sotto forma di *divergenza*, in un integrale di superficie, riducendo inoltre, come per il caso FEM, l'ordine della derivata<sup>2</sup>. Nel nostro caso

$$\int_{CV} \left( \frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d} x^2} - 2 \right) \, \mathrm{d}V = 0$$

che può essere integrata ottenendo

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{i-1/2}^{i+1/2} - \int_{i-1/2}^{i+1/2} 2 \,\mathrm{d}x = 0 \tag{26a}$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{CS_1}^{CS_2} - 2\Delta x = 0 \tag{26b}$$

Esprimendo quindi du/dx tramite le FD

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} - \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = 2\Delta x$$
cioè
$$\frac{-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}}{\Delta x^2} = 2$$

uguale a quanto già ricavato con FD e FEM.

<sup>1</sup>In realtà, si possono ottenere anche formulazioni FV *node-centered* utilizzando l'approccio FD [2].

<sup>2</sup>Il metodo FV, in effetti, appartiene alla classe più ampia del metodo dei residui pesati, con la differenza che le funzioni di pesata  $W_i$ , scelte uguali alle funzioni di forma per il metodo FEM-Galerkin, sono in questo caso assunte pari all'unità.

#### 4.2 FV via FEM

Possiamo formulare il metodo FV anche utilizzando le funzioni di forma (8a) per esprimere du/dx, ed inserire quest'ultima nella (26), qui ripetuta per comodità

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{CS_1}^{CS_2} - 2\Delta x = 0$$

Infatti, dalla (7a) o (7b)

$$u^{e}(x) = [N^{e}] \{u^{e}\} = u_{1}^{e} \left(1 - \frac{x}{h}\right) + u_{2}^{e} \left(\frac{x}{h}\right)$$

Pertanto

$$\frac{\mathrm{d}u^e}{\mathrm{d}x} = \frac{u_2^e - u_1^e}{h}$$

Ricordando quanto già visto a proposito dei coseni direttori, eq. (16a) e (16b), risulta

$$\frac{\mathrm{d}u^{1}}{\mathrm{d}x}\Big|_{CS_{1}} = \frac{u_{2}^{1} - u_{1}^{1}}{h}\cos\theta\Big|_{\theta=\pi} = \frac{u_{2}^{1} - u_{1}^{1}}{h}(-1)$$
(27a)

$$\frac{\mathrm{d}u^2}{\mathrm{d}x}\Big|_{CS_2} = \frac{u_2^2 - u_1^2}{h}\cos\theta\Big|_{\theta=0} = \frac{u_2^2 - u_1^2}{h}\,(1)$$
(27b)

Infatti, per  $CS_1$  il coseno direttore è  $\cos \theta = \cos \pi = -1$ , mentre per  $CS_2$  il coseno direttore vale  $\cos \theta = \cos \theta = 1$ . Inserendo quindi le (27) nella (26), ed utilizzando la notazione globale, otteniamo

$$\frac{u_3 - u_2}{\Delta x} - \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} = 2\,\Delta x$$

cioè

$$\frac{u_3 - 2u_2 + u_1}{\Delta x^2} = 2$$

analogo a quanto già trovato con gli altri metodi.

### 5 Condizioni al contorno di Neumann

Finora abbiamo considerato solo condizioni al contorno di Dirichlet, ma abbiamo già osservato che le condizioni al contorno di Neumann, du/dx, sorgono automaticamente con FEM e FV attraverso l'integrazione per parti, vedi eq. (15) e (26). Questa informazione, infatti, se assegnata in input, può venire implementata sui nodi del contorno. Ciò però non accade per il metodo FD. Per dimostrarlo, torniamo all'equazione differenziale già esaminata, che per convenienza riportiamo

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d} \, x^2} - 2 = 0$$

con le nuove condizioni al contorno

$$\begin{cases} u = 0 \text{ per } x = 0 \quad \text{(Dirichlet)} \\ \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(1) = 1 \text{ per } x = 1 \quad \text{(Neumann)} \end{cases}$$
(28)

Ricordiamo che l'equazione differenziale è specificata solo *nel* dominio 0 < x < 1, e non sul contorno, x = 0 e x = 1, che è riservato per specificare le condizioni al contorno, di Dirichlet, Neumann o altro tipo. Solo durante l'integrazione dell'equazione è necessario far uso delle condizioni al contorno.

#### 5.1 Uso FDM

Un possibile approccio per implementare le condizioni al contorno di Neumann, è quello di far uso di un *nodo fantasma* (ghost, imaginary, o fictitious node), indicato con il numero 4 in figura 5.



Figura 5: Utilizzo di un nodo fantasma per l'applicazione della condizione al contorno di Neumann con il metodo delle differenze finite.

Scrivendo l'equazione alle differenze finite e la condizione al contorno di Neumann al nodo 3, si ha

$$u_4 - 2u_3 + u_2 = 2\Delta x^2$$

$$\frac{u_4 - u_2}{2\Delta x} = 1$$
Sostituendo la (30) nella (29), al fine di eliminare  $u_4$ , si ha
$$(29)$$

$$2\Delta x + u_2 - 2u_3 + u_2 = 2\Delta x^2 \tag{31}$$

Scrivendo l'equazione alle differenze finite al nodo 2

$$u_3 - 2u_2 + u_1 = 2\,\Delta x^2 \tag{32}$$

Risolvendo simultaneamente le (31) e (32), e ricordando la (28), si ottiene

$$u_2 = -\frac{1}{4}; \quad u_3 = 0$$

che è la soluzione esatta. In questo caso la bontà del risultato è dovuto alla sufficiente accuratezza della (30) rispetto alla soluzione esatta, ma in generale l'uso del nodo fantasma può dar luogo a errori notevoli se ciò non accade o, ancora, se la soluzione non è simmetrica rispetto al nodo fantasma ed al nodo interno adiacente.

Anziché ricorrere al nodo fantasma, possiamo usare un'espressione asimmetrica per du/dxal nodo 3. Supponiamo ad esempio di adottare un'espressione del tipo

$$\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_{i} = \frac{au_{i} + bu_{i-1} + cu_{i-2}}{\Delta x} \tag{33}$$

I coefficienti a, b, e c possono venire ricavati sviluppando dapprima in serie di Taylor i valori della variabile nei nodi a monte (all'indietro o *upstream*) del nodo i

$$u_{i-1} = u_i + \left(-\Delta x\right) \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_i + \frac{\left(-\Delta x\right)^2}{2} \left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2}\right)_i + \frac{\left(-\Delta x\right)^3}{3!} \left(\frac{\mathrm{d}^3 u}{\mathrm{d}x^3}\right)_i + \dots \quad (34a)$$

$$u_{i-2} = u_i + (-2\Delta x) \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_i + \frac{(-2\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2}\right)_i + \frac{(-2\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\mathrm{d}^3 u}{\mathrm{d}x^3}\right)_i + \dots (34b)$$

Sostituendo le (34) nella (33)

$$\begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \end{pmatrix}_{i} = \frac{1}{\Delta x} \left\{ au_{i} \\ +b \left[ u_{i} - \Delta x \left( \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right)_{i} + \frac{\Delta x^{2}}{2} \left( \frac{\mathrm{d}^{2}u}{\mathrm{d}x^{2}} \right)_{i} - \frac{\Delta x^{3}}{3!} \left( \frac{\mathrm{d}^{3}u}{\mathrm{d}x^{3}} \right)_{i} + O\left(\Delta x^{4}\right) \right] \\ +c \left[ u_{i} - 2\Delta x \left( \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right)_{i} + \frac{4}{2} \Delta x^{2} \left( \frac{\mathrm{d}^{2}u}{\mathrm{d}x^{2}} \right)_{i} - \frac{8}{3!} \Delta x^{3} \left( \frac{\mathrm{d}^{3}u}{\mathrm{d}x^{3}} \right)_{i} + O\left(\Delta x^{4}\right) \right] \right\}$$

Raccogliendo

$$\begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \end{pmatrix}_{i} = \frac{u_{i}}{\Delta x} \left[ a + b + c \right] + \left( \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right)_{i} \left[ -b - 2c \right] + \left( \frac{\mathrm{d}^{2}u}{\mathrm{d}x^{2}} \right)_{i} \left[ \Delta x \left( \frac{b}{2} + 2c \right) \right]$$
$$+ \left( \frac{\mathrm{d}^{3}u}{\mathrm{d}x^{3}} \right)_{i} \left[ \Delta x^{2} \left( \frac{b}{6} + \frac{8c}{6} \right) \right] + O\left( \Delta x^{3} \right)$$

Per poter soddisfare la (33) dobbiamo quindi imporre

$$\begin{cases} a+b+c &= 0\\ -b-2c &= 1\\ \frac{b}{2}+2c &= 0 \end{cases}$$

la cui soluzione fornisce a = 3/2, b = -2, e c = 1/2. Sostituendo questi valori nella (33) abbiamo

$$\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_{i} = \frac{3u_{i} - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x} + O\left(\Delta x^{2}\right) \tag{36}$$

Usando la (36) nel nostro caso

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(1) = \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_3 = \frac{3u_3 - 4u_2 - u_1}{2\Delta x} = 1$$

Risolvendo quest'ultima per  $u_3$ , e sostituendo nella (32), otteniamo ancora una volta la soluzione esatta  $u_2 = -1/4$  e  $u_3 = 0$ .

Ricordiamo infine che la procedura appena illustrata può essere facilmente applicata, oltre che al caso di espressione in avanti della derivata prima, anche al caso della derivata seconda, o di ordine maggiore. Tuttavia, come è facile intuire, il procedimento, soprattutto se è necessario garantire un'accuratezza formale del second'ordine o maggiore, diventa particolarmente laborioso. La complessità, inoltre, aumenta ulteriormente qualora sia necessario, come inevitabilmente accade nei problemi di CFD (cattura di strati limite), far uso di griglie non uniformi. Per tale ragione, già in passato sono stati messi a punto dei sistemi che consentono di ottenere i risultati desiderati in modo più agevole e rapido. Per maggiori informazioni si rimanda alla bibliografia specializzata [2, 3, 4].

#### 5.2 Uso FEM

Dalla (21) segue che nel nodo 3, dov'è applicata la condizione al contorno di Neumann, si ha

$$r_i^e = N_i^e \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_0^h \quad \text{dove} \quad N_i^e = 1$$

quindi

$$r_3 = (1) \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_{x=h} = (1) \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \cos 0 = 1$$

Ricordando la (17) e la (25) possiamo osservare che, avendo applicato la condizione al contorno di Dirichlet al nodo 1,  $u_1 = 0$ , è in questo caso conveniente eliminarne l'equazione relativa, come descritto nel cap. 4 in [1], ottenendo quindi un sistema di equazioni di dimensioni ridotte

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} u_2 \\ u_3 \end{array} \right\} = -h^2 \left\{ \begin{array}{c} 2 \\ 1 \end{array} \right\} + h \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}$$
(37)

la cui soluzione fornisce la soluzione esatta  $u_2 = -1/4$  e  $u_3 = 0$ .

#### 5.3 Uso FVM via FD

Ricordando la (26a), qui riportata per comodità

$$\left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_{i-1/2}^{i+1/2} - \int_{i-1/2}^{i+1/2} 2 \, \mathrm{d}x = 0$$

essa può venire espressa, in termini di differenze finite, per il nodo 2

$$\frac{u_3 - u_2}{\Delta x} - \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} - 2\Delta x = 0$$

e per il nodo 3 (si veda la figura 4)

$$\left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_{3} - \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right|_{i+1/2} - 2\frac{\Delta x}{2} = 0 \tag{39}$$

cioè

1

$$-\frac{u_3 - u_2}{\Delta x} - 2\frac{\Delta x}{2} = 0$$
(40)

Combinando la (38) con la (40) otteniamo il seguente sistema di equazioni

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} u_2 \\ u_3 \end{array} \right\} = -h^2 \left\{ \begin{array}{c} 2 \\ 1 \end{array} \right\} + h \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}$$

identico al sistema (37), a dimostrazione del fatto che il metodo dei volumi finiti, via FD, è in grado di implementare la condizione al contorno di Neumann in modo esatto (naturale), a differenza di FD.

### 5.4 Uso FVM via FEM

Ritorniamo alla (26a), qui riscritta per comodità

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{i-1/2}^{i+1/2} - \int_{i-1/2}^{i+1/2} 2 \,\mathrm{d}x =$$

Applicata al nodo 2, dalle (27) abbiamo

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{i-1/2}^{i+1/2} - \int_{i-1/2}^{i+1/2} 2 \,\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\cos\pi + \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\cos0 - 2h = 0$$
tri termini

0

o, in altri termini

cioè

$$\frac{u_2 - u_1}{h}(-1) + \frac{u_3 - u_2}{h}(1) - 2h = 0 \tag{41}$$

Al nodo 3 (come al solito non è necessario scrivere esplicitamente l'equazione al nodo 1, per il quale è imposto il valore tramite una condizione al contorno di Dirichlet)

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{i+1/2}^{i+1} - \int_{i+1/2}^{i+1} 2 \,\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{2\frac{1}{2}}^3 - 2\frac{h}{2} = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_3 + \frac{u_3 - u_2}{h}(-1) - h = 1 + \frac{u_3 - u_2}{h}(-1) - h = 0$$
(42)

Combinando la (41) e la (42) otteniamo il seguente sistema

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} u_2 \\ u_3 \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} -2h^2 \\ h-h^2 \end{array} \right\}$$

che fornisce la soluzione esatta  $u_2 = -1/4$  e  $u_3 = 0$ .

Una volta ancora, nel metodo FVM via FEM (uso di funzioni di forma) l'imposizione della condizione al contorno di Neumann è preciso e formulato in modo semplice.

(38)

## Riferimenti bibliografici

- [1] AA. VV.,*FONDAMENTI DI TERMOFLUIDODINAMICA COMPUTAZIONALE*, a cura di G. Comini, SGEditoriali, Padova, 4a Ediz., (2014).
- [2] T.J. Chung, COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, Cambridge University Press, 2003.
- [3] J.H. Ferziger, M. Perić, *COMPUTATIONAL METHODS FOR FLUID DYNAMICS*, 3rd ed., Springer, Berlin, (2002).
- [4] L. Collatz, *THE NUMERICAL TREATMENT OF DIFFERENTIAL EQUATIONS*, Springer-Verlag, New York, (1966).