

INTRODUZIONE ALLA FLUIDODINAMICA COMPUTAZIONALE E AL METODO DEI VOLUMI FINITI

Marco CAPOZZI *

* *Ingegnere Meccanico; Master in “Science in Aerospace Engineering”, Mississippi State University (USA)*

EVOLUZIONE DELLA FLUIDODINAMICA

In natura avvengono molti fenomeni che possono essere convenientemente sfruttati dall'uomo. I fluidi – ad esempio - possono essere impiegati per produrre energia, per trasportare beni e persone con gli aerei, oppure possono essere studiati per comprendere meglio i meccanismi della meteorologia, o dell'azione delle onde del mare sulle coste.

La fluidodinamica è la scienza che studia il comportamento dei fluidi. Data la vastità dell'argomento, è possibile una prima classificazione delle fenomenologie osservate in base alla natura dei fluidi: ci sono i liquidi e i gas. Lo studio dei liquidi è affrontato dall'idrodinamica, quello dei gas dall'aerodinamica e dalla gasdinamica. Benché ciascuna branca sia caratterizzata dalle sue peculiarità, è possibile stabilire leggi comuni che verranno poi particolarizzate al caso in esame. Ad esempio, l'equazione di conservazione della massa vale per tutti i fluidi, comprimibili ed incompressibili, liquidi o gas, e può essere semplificata in taluni casi.

Fino agli anni Settanta circa lo studio della fluidodinamica era soprattutto teorico, essendo di fatto impossibile la risoluzione analitica o numerica delle equazioni che ne reggono i relativi fenomeni fisici. A partire da quel periodo la fluidodinamica si è divisa in due strade parallele: la fluidodinamica classica e quella numerica.

La fluidodinamica classica presuppone lo studio analitico e fornisce modelli di problemi le cui equazioni sono spesso non lineari.

La fluidodinamica numerica (detta anche *CFD*, *Computational Fluid-Dynamics*) affronta squisitamente la risoluzione numerica dei problemi posti dalla fluidodinamica classica.

La fluidodinamica numerica è ancor oggi oggetto di viva ricerca nel mondo intero, coinvolgendo essa informatica, fisica e matematica. Nella seconda metà degli anni ottanta, a seguito di uno sviluppo impressionante delle capacità risolutive della fluidodinamica numerica, si riteneva che “...Fra dieci anni non ci sarà più bisogno delle gallerie del vento”.

I fatidici dieci anni sono passati, e tutt'oggi le gallerie del vento sono impiegate nella progettazione di aerei, autovetture, camion, treni e navi. Resta vero, però, che il numero di ore spese in galleria del vento è sensibilmente diminuito proprio grazie all'affiancamento del computer ad essa, e si tenga presente che gli esperimenti in galleria sono costosi.

Lo sviluppo dei microcomputer ha portato ad un netto abbassamento dei costi hardware, e la potenza di calcolo di un portatile odierno è paragonabile a quella dei mainframe dei primi anni Novanta. Ciò ha contribuito al successo che stanno avendo i programmi commerciali di fluidodinamica numerica, consentendo di introdurre tale scienza anche in ambienti esterni a quelli di ricerca o dediti ad applicazioni aerospaziali.

E' certo che i prossimi anni vedranno sempre più lo sviluppo e l'uso della simulazione numerica quale comune strumento progettuale, ma il momento in cui si abbandoneranno per sempre le gallerie del vento non è ancora giunto.

IMPORTANZA DELLA FLUIDODINAMICA COMPUTAZIONALE

La *Fluidodinamica Computazionale* si occupa dello studio di metodi, tecniche e algoritmi che consentono di simulare il comportamento dinamico dei fluidi in complessi problemi fisici. Tale simulazione consiste nell'elaborazione numerica di sofisticati modelli matematici che descrivono l'evoluzione temporale del fluido attraverso i suoi parametri fluidodinamici fondamentali: velocità, pressione, temperatura, densità. Il ricorso alla simulazione numerica in fase di progetto si rende necessaria laddove, la necessità di eseguire previsioni ad analisi su un elevato numero di casi di studio, consente di eliminare, almeno nelle fasi iniziali, la realizzazione di numerosi prototipi. Nella pratica, questo strumento di simulazione virtuale, è in grado di fornire risposte coerenti con la realtà, in tempi e costi decisamente ridotti rispetto a quanto necessario per realizzare la sperimentazione fisica. È questo infatti uno dei principali motivi che rende la CFD un mezzo estremamente vantaggioso in sede di analisi progettuale: essa permette di eseguire, in maniera relativamente semplice e, in ogni caso, sempre più semplice rispetto all'indagine reale, parametrizzazioni per differenti configurazioni iniziali, sia per geometrie, che per condizioni al contorno, consentendo di valutare le risposte dei componenti in esame a condizioni operative vicine alla realtà fisica.

Un altro grande vantaggio della CFD è l'indipendenza rispetto al fattore di scala: questo permette l'eliminazione dei problemi, a volte molto importanti o di difficile e costosa risoluzione, di visualizzazione dei parametri fluidodinamici nella simulazione su prototipi reali. Il modello geometrico da analizzare al computer viene realizzato definendo le superfici che racchiudono il dominio di fluido da esaminare. Ora, mentre nei programmi di analisi strutturale l'oggetto da schematizzare con una mesh è la parte solida, quella che viene disegnata con il CAD (per esempio, un cilindro per la pila di un ponte), nelle analisi fluidodinamiche, ciò che interessa è tutto meno il corpo stesso (Figura 1), il quale, in questo caso, funziona da confine per il fluido (nell'esempio del ponte, ciò che importa è il volume di fluido racchiuso tra la superficie del volume di controllo e la superficie del cilindro stesso). Il dominio di fluido così definito viene meshato, in maniera automatica o meno, e tutto continua come per le altre procedure di tipo numerico (Figura 2).

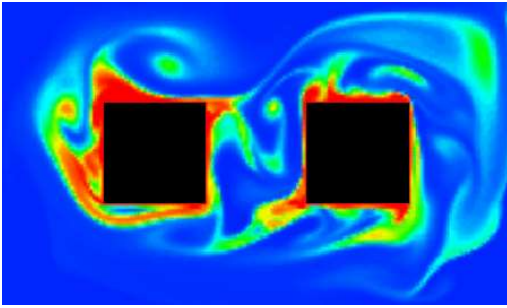


Figura 1

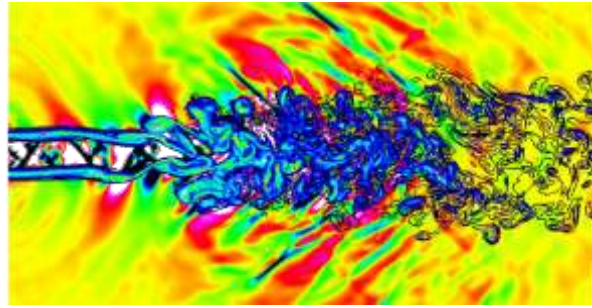


Figura 2

Per questo motivo la Fluidodinamica Numerica costituisce uno strumento indispensabile per progettisti e ricercatori nei settori aeronautico, automobilistico, motoristico, elettronico, spaziale, navale, dell'industria di processo, dell'energia e dell'ambiente, dell'industria degli elettrodomestici e della bioingegneria.

CFD E CALCOLO AD ALTE PRESTAZIONI

Come detto all'inizio, la Fluidodinamica Computazionale è da sempre considerata una delle applicazioni principali del *Calcolo ad Alte Prestazioni (High Performance Computing, HPC)*, sia per la ricerca di base, sia per la ricerca applicata. Anche la più semplice applicazione di Fluidodinamica Computazionale necessita di milioni di variabili, in interazione non lineare, per poter essere simulata in modo corretto. È possibile caratterizzare le applicazioni di questo tema in funzione di alcune tecniche ben precise, come quelle riportate di seguito.

Il grado di approssimazione del modello fisico-matematico di riferimento

Per grado di approssimazione del modello di riferimento si intende la validità riconosciuta a priori relativamente al modello utilizzato. In molti casi, infatti, è necessario nelle applicazioni di Fluidodinamica Numerica utilizzare un modello che descriva quella parte del moto del fluido non esplicitamente rappresentata dalla simulazione. Tale necessità deriva in gran parte dal meccanismo di dissipazione di un fluido, che non sempre può essere simulato rigorosamente e che, pertanto, deve essere approssimato con opportune formulazioni fenomenologiche, includendo, eventualmente, informazioni di tipo sperimentale e osservativo.

Il tipo di griglia necessaria alla simulazione

Un altro elemento importante in Fluidodinamica Computazionale è la necessità o meno di utilizzare griglie non regolari per descrivere il comportamento del fluido. È questo il caso, ad esempio, dei flussi nei mezzi porosi e nelle applicazioni di aerodinamica. L'utilizzo di griglie non regolari aumenta la qualità della simulazione, e necessità di opportune ottimizzazioni sia rispetto al problema da risolvere, sia rispetto al grado di approssimazione del modello utilizzato: è inutile disporre di una griglia che risolve i più fini dettagli di una automobile se il modello che si vuole utilizzare presenta a priori incertezze troppo elevate.

L'incompressibilità del fluido

L'incompressibilità del fluido caratterizza in modo univoco due possibili tipologie di applicazioni fluidodinamiche. Per fluidi incompressibili e debolmente incompressibili, le fluttuazioni di densità del fluido non costituiscono un problema di simulazione numerica. Viceversa, nel caso in cui è prevedibile la formazione di onde di shock è necessario ricorrere a particolari tipologie di simulazione che descrivano l'onda di shock e il suo effetto nel fluido.

Il numero di costituenti attivi e passivi nel fluido

Altra caratteristica fondamentale concerne il numero di componenti attive e passive nel fluido. Per componente passiva si intende una grandezza trasportata dal moto del fluido che non esercita nessuna influenza sul fluido stesso, ad esempio il moto di un inquinante non reattivo nell'atmosfera o nell'oceano. Per componente attiva si intende, viceversa, una grandezza che è trasportata dal fluido e che esercita, a seconda del valore in un punto, una forza sul fluido stesso. Un esempio di questo tipo è la temperatura nei moti atmosferici. Esistono poi situazioni in cui più componenti passive possono interagire chimicamente fra di loro provocano forze che mettono in movimento il fluido stesso. Caso classico in questo senso è il fenomeno della combustione.

L'algoritmo numerico necessario alla simulazione

L'algoritmo di simulazione è una caratteristica che dipende esclusivamente dalle altre caratteristiche descritte e, in molti casi, dalla tipologia di supercalcolatore a disposizione. Da questo punto di vista, è bene notare che non esiste un algoritmo ottimale per una data applicazione di Fluidodinamica Numerica, in quanto raramente il grado di accuratezza del modello e la sua descrizione in termini di griglia risultano essere sufficientemente accurate da individuare in modo univoco la formulazione algoritmica più adeguata. La precisione numerica richiesta deve essere commensurata al tipo di simulazione da effettuare.

APPLICAZIONI DELLA CFD

Da questa breve disanima delle caratteristiche delle applicazioni della Fluidodinamica Computazionale, si evince la grande varietà di problematiche interdisciplinari che sono proprie di questo tema applicativo. Nell'Ingegneria la Fluidodinamica Computazionale trova importanti applicazioni in ambito Aerospaziale, Meccanico, Nucleare e Industriale in genere.

Oltre che ad ambiti strettamente ingegneristici, la CFD trova interessanti applicazioni anche in altri settori. Nel seguito è presentata una classificazione dei sottotemi applicativi che è stata realizzata considerando raggruppamenti relativamente omogenei rispetto alle caratteristiche tecniche indicate precedentemente.

Fluidodinamica Incompressibile

Il sottotema è caratterizzato dall'insieme di applicazioni di turbolenza sviluppata, ivi inclusi il trasporto e diffusione di sostanze passive. In questo sottotema rientrano tutte le applicazioni di turbolenza negli strati limiti, di controllo della turbolenza, di trasporto di inquinanti.

Aerodinamica

Il sottotema è caratterizzato dall'insieme di applicazioni tipiche dell'aerodinamica industriale sia compressibile che incompressibile. In questo sottotema assume rilevanza non marginale disporre di buoni prodotti per la configurazione della griglia di simulazione, che deve essere adattata con sufficiente precisione ai dettagli della forma in considerazione.

Fluidodinamica dei mezzi porosi

A questo sottotema afferiscono sia le simulazioni per la gestione delle falde acquifere, sia le simulazioni per la gestione dei flussi di estrazione dei giacimenti petroliferi. Le applicazioni in entrambi i settori sono caratterizzate da necessità di calcolo estremamente elevate e utilizzano, spesso ma non sempre, griglie di simulazione adattate alle caratteristiche del sottosuolo.

Geofluidodinamica

L'insieme principale delle applicazioni in questo sottotema afferisce alla Meteorologia e all'Oceanografia Fisica. In particolare i modelli di simulazione e previsione meteorologica sono da sempre considerati gli archetipi del Calcolo ad Alte Prestazioni. A differenza dei sottotemi precedenti, in questo tipo di applicazioni si utilizzano griglie regolari, anche in quelle applicazioni definite ad area limitata. Infine appartengono a questo sottotema anche le applicazioni di Idrologia Superficiale, caratterizzate negli ultimi anni da un notevole incremento nelle necessità di utilizzo di Calcolo ad Alte Prestazioni.

METODO DEI VOLUMI FINITI NELLA FLUIDODINAMICA NELLA CFD

Le equazioni differenziali alle derivate parziali (*Partial Differential Equations, PDE*) descrittivi i fenomeni fluidodinamici sono usualmente risolte con tecniche numeriche a causa della loro non linearità che rende di fatto impossibile l'integrazione analitica. L'approccio seguito col metodo delle differenze finite è essenzialmente quello di sviluppare tramite procedimenti opportuni una forma discretizzata delle derivate, o meglio, degli operatori differenziali che intervengono all'interno di una equazione. La discretizzazione dell'equazione avviene per mera sostituzione dell'operatore differenziale col suo equivalente discreto. Tale procedimento meccanico non è applicabile a domini aventi forme irregolari.

Al tempo in cui furono sviluppate tali tecniche risolutive non esistevano i computer, per cui non esisteva neanche il problema di dover rappresentare geometrie complesse mediante griglie di calcolo (*grid o mesh*), dovendo i calcoli essere effettuati a mano e per scopi puramente accademici.

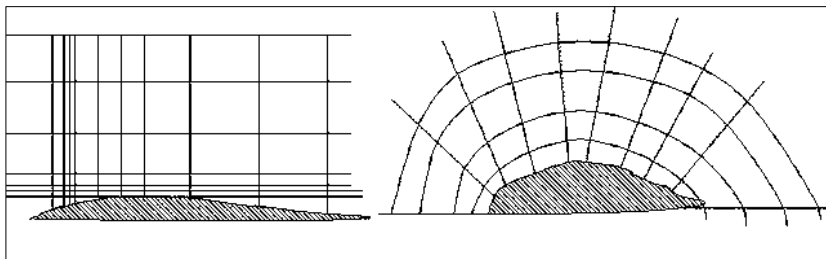


Figura 3

Con l'avvento dei computer e con le spingenti esigenze di modellare flussi complessi fu subito chiaro che i metodi a differenze finite, benché meccanici –e quindi praticamente *semplici* da implementare- non erano idonei per geometrie complicate e/o grid di tipo non cartesiano (Figura 3 a destra). In Figura 3 a sinistra una grid di tipo cartesiano.

La necessità di risolvere geometrie varie imponeva l'impiego di mesh non cartesiane, per esempio vedasi ancora la Figura 3. Per affrontare la soluzione numerica delle PDE tramite operatori a differenze finite si rese indispensabile effettuare un cambiamento di coordinate (e di spazi): dallo spazio fisico si 'saltava' in quello computazionale, si eseguiva il calcolo a differenze finite su griglie cartesiane, si tornava indietro nello spazio fisico.

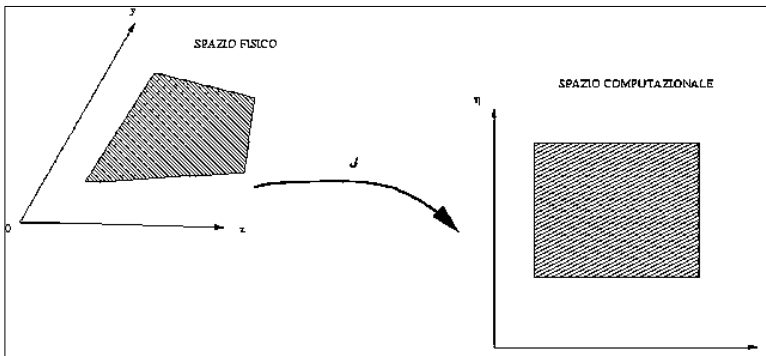


Figura 4

La Figura 4 rappresenta concettualmente questa serie di operazioni. Ad ogni cambiamento di spazio era associata una trasformazione con relativo Jacobiano J. La complicazione numerica, l'allungamento dei tempi di calcolo, le fonti di errore numerico derivanti e la lunghezza dei codici portò alla formulazione del *Metodo dei Volumi Finiti (Finite Volume Method, FVM)*. Questo metodo adotta un approccio di tipo integrale nella formulazione discreta di una equazione differenziale

Il vantaggio principale del Metodo dei Volumi Finiti è insito nella sua natura integrale: la capacità di impiegare volumi di forma arbitraria per la suddivisione del dominio fisico. Questa proprietà fondamentale consente di evitare i 'salti' dallo spazio fisico a quello computazionale e viceversa, con tutti i relativi svantaggi. La formulazione a volumi finiti consente di sfruttare un'ulteriore proprietà di cui si dirà fra breve.

Forma Conservativa di una PDE

Dal punto di vista della fluidodinamica numerica è conveniente porre una PDE –se possibile- in *forma di divergenza*, detta anche *forma conservativa*. Una PDE si dice in forma conservativa se coefficienti delle sue derivate sono costanti o, se variabili, non compaiono esplicitamente nell'equazione.

Se tutte le derivate spaziali che compaiono all'interno di una PDE sono racchiudibili in un operatore divergenza, allora la PDE si dice posta in forma conservativa forte. Per esempio: la forma conservativa dell'equazione di continuità è:

$$(1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0$$

in cui ρ è la densità, t il tempo, x, y, z le coordinate spaziali. La sua forma non conservativa è:

$$(2) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

Nella fluidodinamica numerica si ha a che fare con equazioni discretizzate. È molto importante riuscire a trasferire la forma conservativa di una PDE anche nella sua rappresentazione discreta: gli schemi per i quali si riesce ad ottenere tale caratteristica riescono a 'forzare' la conservazione delle quantità fisiche sia nelle vicinanze di un punto della mesh, sia in regioni aventi volumi maggiori. Tale capacità si rivela critica in alcuni schemi, ed è ottenibile eseguendo la discretizzazione delle derivate a partire da una PDE posta in forma di divergenza.

DISCRETIZZAZIONE A VOLUMI FINITI

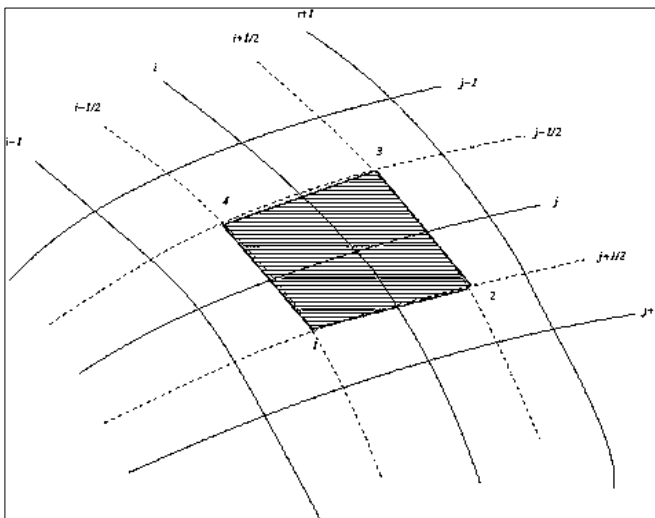


Figura 5

La discretizzazione a volumi finiti delle PDE, coinvolgendo la forma integrale delle equazioni differenziali, soddisfa automaticamente le leggi di conservazione della massa, dell'energia, della quantità di moto.

Dalla seguente PDE, di cui si vuole sviluppare una discretizzazione a volumi finiti:

$$(3) \quad \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = 0$$

dove U, E ed F sono i vettori rappresentativi del flusso, (in seguito si spiegherà meglio cosa essi siano), si consideri il volume finito (avente profondità unitaria, ma non è condizione stringente) rappresentato in Figura 5.

Integrando la (3) in tale volume si ottiene:

$$(4) \quad \iiint \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \right) dv = 0$$

Assumendo la profondità unitaria il volume di integrazione diventa $dx dy$. Applicando il teorema di Green la (4) diventa:

$$(5) \quad \frac{\partial}{\partial t} \iint_{1234} U dx dy + \iint_{S(1234)} \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

ove $S(1234)$ è la superficie del volumetto di integrazione, \mathbf{n} la normale ed \mathbf{H} , se \mathbf{i} e \mathbf{j} sono i versori degli assi, è dato da:

$$(6) \quad \mathbf{H} = E\mathbf{i} + F\mathbf{j}$$

Poiché \mathbf{n} ha espressione vettoriale:

$$(7) \quad \mathbf{n} = n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j} = dy \mathbf{i} + (-dx) \mathbf{j}$$

allora:

$$(8) \quad \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dS = (E dy - F dx)$$

Sostituendo la (8) nella (5) si perviene a:

$$(9) \quad \frac{\partial}{\partial t} \iint_{1234} U dx dy + \oint_{1234} (E dy - F dx) = 0$$

Considerata ancora la fig. (3), se U_{ij} è il valore di U mediato al centro della cella a due passi temporali successivi, $E_{i-1,j}$, $E_{i+1,j}$, $E_{i,j-1}$, $E_{i,j+1}$ i valori dei flussi di E (o di qualunque altra variabile di cui si voglia ottenere la rappresentazione discreta) alle facce della cella, la espressione (9) può essere approssimata, per esempio, nella maniera seguente (schema a celle centrate):

$$(10) \quad \left(\frac{U_{ij}^{n+1} - U_{ij}^n}{\Delta t} \right) S_{1234} + \left(E_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta y_{12} + E_{i+\frac{1}{2},j} \Delta y_{23} + E_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta y_{34} + E_{i-\frac{1}{2},j} \Delta y_{41} \right) - \\ - \left(F_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta x_{12} + F_{i+\frac{1}{2},j} \Delta x_{23} + F_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta x_{34} + F_{i-\frac{1}{2},j} \Delta x_{41} \right) = 0$$

La (10) è solo una delle possibili formulazioni a volumi finiti che si possono ricavare per discretizzare una PDE. Ovviamente il discorso può essere esteso al caso tridimensionale. Nel metodo dei volumi finiti si possono adottare gli stessi schemi sviluppati per le differenze finite, ricordando che si fa riferimento a flussi e volumi anziché a differenze numeriche fra punti nello spazio.

Vettori di flusso

Riguardo i vettori di flusso si era in precedenza annunciato un maggiore chiarimento. Si considerino le equazioni di Navier-Stokes. È possibile trascrivere tali equazioni in molte forme: da un punto di vista numerico torna particolarmente comoda la forma vettoriale. In tale forma le equazioni vengono espresse come somma di derivate di vettori, detti *vettori di flusso*, le cui componenti sono proprio i termini che compaiono all'interno delle equazioni stesse. Per esempio: prima di intraprendere lo studio numerico delle equazioni di Navier-Stokes è conveniente trascriverle in forma vettoriale come:

$$(11) \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = 0$$

Nella (11) i vettori $\mathbf{U}, \mathbf{E}, \mathbf{F}, \mathbf{G}$, detti vettori di flusso, rappresentano rispettivamente le quantità:

$$(12) \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E_T \end{bmatrix} \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ (E_T + p)u - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} - w\tau_{xz} + q_x \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho v^2 + p - \tau_{yy} \\ \rho vw - \tau_{yz} \\ (E_T + p)v - u\tau_{xy} - v\tau_{yy} - w\tau_{yz} + q_y \end{bmatrix} \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ \rho vw - \tau_{yz} \\ \rho w^2 + p - \tau_{zz} \\ (E_T + p)w - u\tau_{xz} - v\tau_{yz} - w\tau_{zz} + q_z \end{bmatrix}$$

Nelle (12) p è la pressione, mentre le t rappresentano le componenti opportune del tensore degli sforzi viscosi. Le derivate delle quantità che compaiono nei vettori rappresentano: la prima riga la conservazione della portata massica, la seconda, la terza e la quarta la conservazione della quantità di moto, la quinta la conservazione dell'energia. Per quanto concerne q_x , q_y e q_z esse sono le componenti, proiettate sui tre assi, del trasferimento di calore, la cui espressione vettoriale è data da:

$$(13) \quad \mathbf{q} = -k\nabla T$$

essendo k il coefficiente di conduttività termica del fluido e T la temperatura. Il termine E_T rappresenta l'energia associata al fluido. Non si entra nel dettaglio del significato dei termini poiché ciò esula dallo scopo del presente articolo e si assume che il lettore conosca i fondamenti della teoria delle equazioni di Navier-Stokes.