GENERALITÀ SUI METODI NUMERICI

TE

2. PROPRIETÀ DI UN METODO NUMERICO COMPUTAZIONALE

2.1) CONSISTENZA

Un metodo si dice consistente se l'errore di troncamento va a zero quando la spaziatura della griglia e/o il passo temporale di integrazione tendono a zero:

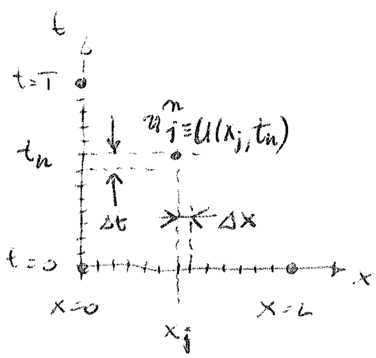
$$\boxed{\lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ (\Delta t \to 0)}} (PDE - FDE) = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ (\Delta t \to 0)}} TE = 0}$$

DEF. ERRORE DI TRONCAMENTO: è l'errore che si commette quando si determina la soluzione di una PDE per via numerica (quindi attraverso discretizzazione delle derivate che compongono la PDE) piuttosto che per via analitica.

$$\underbrace{PDE}_{\text{Equaz. esatta}} = \underbrace{FDE}_{\text{Equaz. discretizzata}} + \underbrace{TE}_{\text{Troncam.}}$$

(Finite Difference Equation)

ES. Consideriamo l'equazione $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$



SOLUZ. ESATTA: $u(x,t) = \sin(\pi x)\exp(-\pi^2 t)$

SOLUZ. NUMERICA: $U_j^{n+1} = U_j^n + \Delta t \left(\frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right)$

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t} \simeq \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} \quad ; \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \simeq \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right]$$

Per determinare l'errore di troncamento, si rappresenta innanzitutto la soluzione in termini di espansione in serie di Taylor:

$$u(x,t) \xrightarrow{\text{spazio}} u_{j+1}^{n} = \sum_{0}^{\infty} {}_m \frac{\Delta x^m}{m!}\left[\frac{\partial^m u}{\partial x^m}\right]_j^n$$

$$u(x,t) \xrightarrow{\text{tempo}} u_j^{n+1} = \sum_{0}^{\infty} {}_m \frac{\Delta t^m}{m!}\left[\frac{\partial^m u}{\partial t^m}\right]_j^n$$

Questa procedura va bene per la derivata prima. Per la derivata seconda vedi NOTA BENE!

Quindi:

$$u_{j+1}^{n} = u_j^n + \Delta x\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + \frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n + \underbrace{t.o.s.}_{\sim O(\Delta x^3)}$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^n + \frac{\Delta t^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^n + \underbrace{t.o.s}_{\sim O(\Delta t^3)}$$

Esplicitando queste equazioni abbiamo

→ VEDI NOTA BENE

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n \cong \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2}\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + \underbrace{\frac{t.o.s}{\Delta x}}_{\text{ERRORE DI TRONCAMENTO } \sim O(\Delta x^2)}$$

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^n \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \underbrace{\frac{\Delta t}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^n}_{\text{ERRORE DI TRONCAMENTO } \sim O(\Delta t)}$$

$\circ$

NOTA BENE: per ottenere la forma discretizzata di una derivata seconda usando le differenze finite si procede così:

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n = a\, u_{j-1}^n + b\, u_j^n + c\, u_{j+1}^n + \underbrace{O(\Delta x^m)}_{\text{questo termine determina l'accuratezza della discretizzazione}} \quad (*)$$

$$a u_{j-1}^n + b u_j^n + c u_{j+1}^n = \left(a u_j^n - a\Delta x\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + a\frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n - a\frac{\Delta x^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_j^n + t.o.s\right) + \left(b u_j^n\right) + \left(c u_j^n + c\Delta x\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + c\frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n + c\frac{\Delta x^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_j^n + t.o.s\right)$$

$$= (a+b+c)\, u_j^n + (-a+c)\Delta x\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + (a+c)\frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n + \underbrace{(-a+c)\frac{\Delta x^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_j^n}_{\to\ \text{t.o.s.}} + t.o.s.$$

Deve risultare:

$a + b + c = 0 \Rightarrow b = 0$

$(-a + c)\Delta x = 1 \Rightarrow c = 1/2\Delta x$

$(+a + c)\Delta x^3 = 0 \Rightarrow c = -a \Rightarrow a = -\dfrac{1}{2\Delta x}$

per ritrovare la (*). Pertanto, noti a, b e c la (*)

diventa:

$$\boxed{\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x}}$$

$+\,O(\Delta x)$!! per la derivata prima

Per la derivata seconda:

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n = a\,u_{j-1}^n + b\,u_j^n + c\,u_{j+1}^n \qquad (**)$$

$$a+b+c=0 \quad \Rightarrow \quad b = -2c = -\frac{1}{\Delta x^2}\cdot 2 = -\frac{2}{\Delta x^2}$$

$$(-a+c)\Delta x = 0 \quad \Rightarrow \quad a = c = \frac{1}{2\Delta x^2}\cdot 2 = \frac{1}{\Delta x^2}$$

$$(a+c)\frac{\Delta x^2}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad c = \frac{1}{2\Delta x^2}\cdot 2 = \frac{1}{\Delta x^2}$$

Pertanto:

$$\boxed{\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n \cong \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)}$$

— o —

L'errore di troncamento è praticamente la differenza tra l'equazione discretizzata che si vuole risolvere numericamente e l'equazione esatta (che probabilmente non si riesce a risolvere analiticamente).

Solitamente è proporzionale a Δx^m o a Δt^m con

Δx = spaziatura della griglia

Δt = passo temporale di integrazione

Se il termine più importante della PDE è discretizzato con errore di troncamento proporzionale a Δx^m o Δt^m allora il <u>metodo di discretizzazione</u> usato è detto <u>di ordine m</u>.

- $m > 0$ è necessario per garantire la consistenza del metodo
- tutti i termini della PDE dovrebbero essere discretizzati producendo uguale errore di troncamento. Non sempre però è possibile / conveniente usare metodi di discretizzazione dello stesso ordine: in alcune equazioni, ad es., vi possono essere dei termini dominanti che richiedono di essere discretizzati usando metodi di ordine superiori ad altri.
- l'errore di troncamento può essere funzione non solo di Δx o Δt ma anche del loro rapporto $\Delta x / \Delta t$ (o $\Delta t / \Delta x$). In questo caso, la consistenza del metodo si dice condizionata perchè richiede che l'errore di troncamento vada a zero quando $\Delta x / \Delta t$ (o $\Delta t / \Delta x$) va a zero.
- uno schema consistente non garantisce che la soluzio-

numerica coincida con quella esatta della PDE.
Affinché ciò accada è necessario che il metodo sia stabile.

2.2) STABILITÀ

Un metodo si dice <u>stabile</u> se non amplifica l'errore che si produce durante il calcolo numerico.
Quando si integra nel tempo, un metodo stabile garantisce una soluzione numerica limitata (<u>bounded solution</u>) se la soluzione esatta è limitata.
Quando il calcolo richiede procedure iterative, il metodo stabile è quello che <u>non diverge</u>.
L'approccio più utilizzato per studiare la stabilità di uno schema numerico è l'approccio di <u>VON NEUMANN</u>, che consente di determinare la propagazione numerica dell'errore in termini di fase e ampiezza. A tal fine è possibile definire un parametro detto <u>NUMERO DI COURANT</u>:

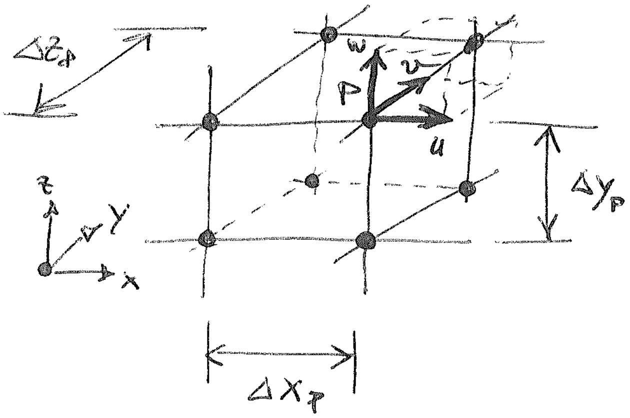
$$\boxed{Co = u\frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

ove : Δt = passo temporale di integrazione

ΔX = spaziatura della griglia

u = velocità caratteristica

Ad es., per una griglia strutturata 3D:



✓ $Co_x = u_{eP} \frac{\Delta x_P}{\Delta t}$

✓ $Co_y = v_{eP} \frac{\Delta y_P}{\Delta t}$

✓ $Co_z = w_{eP} \frac{\Delta z_P}{\Delta t}$

✓ $Co = \sqrt{Co_x^2 + Co_y^2 + Co_z^2}$

Tramite l'analisi di Von Neumann è possibile per quali valori del numero di Courant lo schema numerico risulta stabile (condizione necessaria e sufficiente):

$$\boxed{Co^{min} < Co < Co^{max}}$$

CFL CONDITION

C – Courant
F – Friedrichs
L – Lewy

Una possibile fonte di errore nel calcolo numerico è rappresentata dal cosiddetto <u>ROUND-OFF ERROR (o ERRORE DI ARROTONDAMENTO</u>) generato dal fatto che i computer sono basati sull'aritmetica binaria mentre gli uomini adottano il sistema decimale.

Nella conversione binario → decimale si possono usare 8 cifre significative (SINGOLA PRECISIONE) o 16 cifre significative (DOPPIA PRECISIONE) per rappresentare il valore da convertire: in entrambi i casi si deve fare un arrotondamento per le cifre "in eccesso".

Tale arrotondamento diventa importante se effettuato su numeri "piccoli", ossia vicini allo zero della macchina.

2.3) CONVERGENZA

Un metodo si dice <u>convergente</u> se la soluzione numerica (i.e. la soluzione dell'equazione discretizzata, la FDE) tende alla soluzione esatta (i.e. la soluzione della PDE) quando $\Delta x, \Delta t \to 0$.

Esiste un teorema, detto <u>TEOREMA DELL'EQUIVALENZA DI LAX</u> (LAX EQUIVALENCE THEOREM), che postula quanto segue:

"Dato un problema lineare di valori iniziali ben posto ed una approssimazione alle differenze finite che soddisfa la condizione di consistenza, condizione necessaria e sufficiente affinché lo schema converga e che esso sia stabile".

$$\boxed{\text{CONSISTENZA} + \text{STABILITÀ} = \text{CONVERGENZA}}$$

Questo però vale solo per problemi (ovvero per PDE) ai valori iniziali lineari, ovvero per una famiglia limitata di problemi.

Per problemi (ovvero PDE) non-lineari, che sono fortemente influenzati dalle particolari BC imposte, non è così facile determinare stabilità e convergenza per via analitica. Quello che di solito si fa è di determinare stabilità e convergenza per via empirica, ovvero ripetendo il calcolo con raffinamenti nello spazio e nel tempo sempre maggiori fino a raggiungere (se lo schema è stabile) ad una <u>grid-independent solution</u>.
Il tasso di convergenza verso tale soluzione dipende dall'errore di troncamento del termine dominante nella PDE.

2.4) CONSERVAZIONE

Un metodo si dice <u>conservativo</u> se garantisce, in assenza di termini sorgenti, la validità del principio di conservazione su cui si basano le equazioni che vogliamo risolvere numericamente

2.5 BOUNDEDNESS

Un metodo si dice <u>bounded</u> se garantisce che la soluzione numerica prodotta si mantiene entro opportuni intervalli di variazione.
Questo vuol dire che il metodo non deve fornire come soluzione valori negativi per qtà fisicamente non-negative quali l'energia cinetica turbolenta, oppure la densità e/o la viscosità del fluido.
La proprietà della boundedness è difficile da garantire: solo alcuni schemi/metodi del I° ordine garantiscono "bounded solutions", mentre con la maggior parte degli schemi/metodi di ordine più elevato è necessario raffinare la griglia.

→ Schemi che tendono a produrre "unbounded solutions" tendono anche ad avere problemi di stabilità e convergenza, e vanno quindi evitati.

2.6 REALIZZABILITÀ

Un metodo numerico deve garantire soluzioni fisicamente realistiche e deve quindi garantire che le istruzioni dell'algoritmo su cui (il metodo) si basa siano eseguibili materialmente.

2.7 ACCURATEZZA (DELLA SOLUZIONE)

La soluzione numerica di un'equazione è sempre una SOLUZIONE APPROSSIMATA, in quanto affetta da:

1. ERRORI DI MODELLIZZAZIONE* dovuti al modello matematico utilizzato per descrivere il problema fluidodinamico
2. ERRORI DI DISCRETIZZAZIONE** dovuti alla differenza fra soluzione esatta delle equazioni del modello matematico e soluzione delle equazioni discretizzate
3. ERRORI DI CONVERGENZA dovuti alla differenza tra soluzione esatta e soluzione iterativa delle eq. discretizzate (es.: nel cavity flow prendo la soluzione per la vorticità che corrisponde ad un residuo inferiore ad un certo valore soglia ε piccolo a piacere. Se $\varepsilon \to 0$ allora l'errore di convergenza $\to 0$!)

* si generano perché:
- si fanno ipotesi semplificative nel derivare le equazioni di bilancio che costituiscono il modello matematico
- si fanno ipotesi semplificative nel definire il dominio di calcolo e le condizioni iniziali e/o al contorno

** metodi numerici dello stesso ordine (ovvero caratterizzati da un errore di troncamento proporzionale a $\Delta x^m / \Delta t^m$)

possono produrre soluzioni differenti ed errori corrispondenti significativamente diversi. Questo perché l'ordine di un metodo numerico ci dice solo il TASSO DI RIDUZIONE (RATE) dell'errore al ridursi di $\Delta x / \Delta t$.