



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS
"MAT. LUIS MANUEL RIVERA GUTIÉRREZ "

**Solución numérica de las ecuaciones de
Euler usando el método SPH**

T E S I S

PARA OBTENER EL GRADO DE:
Licenciado En Ciencias Físico Matemáticas

PRESENTA:

Armando Madrigal Lucatero

DIRECTOR DE TESIS:

DR. JOSÉ ANTONIO GONZÁLEZ CERVERA



MORELIA MICHOACÁN

AGOSTO

DE 2017

Agradecimientos

Creo que el concluir una etapa de nuestra educación es siempre un mérito importante, y hoy que me toca a mí concluir mis estudios de licenciatura no puedo evitar el ver hacia atrás y recordar lo difícil que ha sido llegar hasta aquí y el gran esfuerzo y dedicación requerido para por fin concluir este largo camino. Pero todo esto no hubiera sido posible sin el apoyo de familiares, amigos y profesores que en algún momento me extendieron la mano para ofrecerme su ayuda o darme algún consejo, y no hablo solo en lo académico sino también en la parte humana, es por eso que el día de hoy les doy las gracias a todos.

Quiero agradecer en primer lugar a mi asesor de tesis, el Dr. José Antonio Gonzalez Cervera por su ayuda en la realización de este trabajo, por tenerme paciencia a lo largo del tiempo que he trabajado bajo su asesoría, y por motivarme siempre a cada instante que lo he necesitado durante el trabajo realizado. También debo agradecer al Dr. Francisco Siddhartha que junto con el Dr. José Antonio inspiraron en mí el gusto por la física computacional, gracias a su iniciativa en la impartición de su taller de física computacional y sistemas complejos.

Agradezco también a la casa de Hidalgo que me dio la oportunidad de estudiar una carrera universitaria, gracias a los apoyos tanto académicos como económicos y por darme un techo en donde vivir durante mi estancia como estudiante. Gracias por permitirme formar parte de esta gran comunidad de la cual el día de hoy puedo sentirme orgulloso de ser Nicolaita.

Quiero agradecer también a mi familia en especial a mi hermano y carnal Geovanni que ha estado siempre apoyandome y dandome ánimo cuando lo he necesitado, gracias por escucharme y también por soportarme en momentos

de tensión o nerviosismo cuando me pongo difícil. También debo agradecer a mi abuelita Apolonia que aunque ya no estés con nosotros físicamente, siempre llevo presente tus consejos, y sé que donde quiera que estés, estaras orgullosa tu niño.

Debo agradecer también a mis amigos de Fismat que me han ayudado en el trabajo de la escuela, pero también que han sido buenos amigos no sólo en la escuela sino fuera de ella. Agradezco a todos los buenos momentos que hemos pasado y que me han inspirado a hecharle ganas y dar siempre lo mejor. También quiero agradecer a algunos de ellos que han soportado mis nervios cuando me pongo terco. Gracias a todos compañeros y compañeras!

Por ultimo quiero darle las gracias a mis sinodales, el Dr. Mauricio Ortiz Gutiérrez, el Dr. Francisco Domínguez Mota, el Dr. Luis Mariano Hernández Ramírez y el Dr. Joaquin Estévez Delgado por tomarse el tiempo para revisar mi trabajo.

Resumen

En este proyecto de tesis se estudio el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (Smoothed Particles Hydrodynamics, SPH) y se desarrolló un código numérico en el lenguaje de programación fortran 90. Este código es capaz de simular fluidos basado en las ecuaciones de Euler que es el modelo físico que describe el comportamiento de fluidos ideales, es decir, la finalidad de este algoritmo desarrollado es, el aproximar soluciones numéricas de las ecuaciones de la dinámica de fluidos, en particular de las ecuaciones de Euler. Con este algoritmo se resolvieron las ecuaciones de Euler para dos casos diferentes, el primer caso consiste en un fluido que se mueve en una caja bidimensional con condiciones de frontera periódicas, y el segundo caso consiste en la evolución de un fluido en un tubo de choque en dos dimensiones. Con la realización de estas pruebas fue posible, no solo validar el algoritmo numérico desarrollado, sino también hacer una interpretación física de los problemas estudiados.

Palabras clave: dinámica de fluidos computacional, método SPH, métodos lagrangianos, simulación numérica de fluidos, métodos numéricos.

Abstract

In this thesis project the method of Smoothed Particles Hydrodynamics (SPH) was studied and a numerical code was developed in the language of programming fortran 90. This code is able to simulate fluids based on Euler's equations that is The physical model that describes the behavior of ideal fluids, ie, the purpose of this algorithm is to approximate numerical solutions of the equations of fluid dynamics, in particular Euler's equations. With this algorithm the Euler equations were solved for two different cases, the first case consists of a fluid moving in a two-dimensional box with periodic boundary conditions, and the second case consists of the evolution of a fluid in a shock tube In two dimensions. With the accomplishment of these tests it was possible, not only to validate the numerical algorithm developed, but also to make a physical interpretation of the studied problems.

Índice general

Agradecimientos	3
Resumen	5
Abstract	7
Lista de figuras	11
Lista de tablas	13
1. Introducción	13
1.1. Motivación	13
1.2. Objetivo	14
1.3. Estructura	14
2. La Dinámica de Fluidos y las Ecuaciones de Euler	15
2.1. Introducción	15
2.2. Ecuaciones de Euler	16
2.2.1. Ecuación de Continuidad	17
2.2.2. Ecuación de Momento	18
2.2.3. Ecuación de Energía	19
2.3. Métodos numéricos en Dinámica de Fluidos	20
3. Método SPH	23
3.1. Introducción	23
3.2. Interpolación en SPH	24
3.2.1. Función delta y operador promedio	24
3.2.2. Funciones de Kernel	26
3.2.3. Cantidades de interpolación	29

3.2.4.	Calculando la densidad	31
3.2.5.	Ajustando la distancia de suavizado h	32
3.3.	Discretización de las ecuaciones de Euler	33
3.3.1.	Ecuación de Continuidad	33
3.3.2.	Ecuación de Momento	34
3.3.3.	Ecuación de Energía	37
3.3.4.	Ecuación de Estado para la Presión	37
3.3.5.	Interpretación de las Ecuaciones de SPH	38
3.3.6.	En Resumen	39
3.4.	Propiedades de las ecuaciones de SPH	41
3.4.1.	Leyes de conservación	41
3.4.2.	Invarianza de Galileo	42
3.5.	Implementación de SPH	43
4.	Aplicaciones y Resultados	47
4.1.	Fluido en una caja bidimensional	47
4.1.1.	Condiciones de frontera periódicas	47
4.1.2.	Partículas uniformemente distribuidas	48
4.1.3.	Distribución uniforme con una partícula fuera de equilibrio	50
4.1.4.	Partículas distribuidas aleatoriamente	52
4.2.	Tubo de choque bidimensional	54
4.2.1.	Condiciones de frontera	54
4.2.2.	Discusión de resultados	55
5.	Conclusiones	63
5.1.	Trabajo futuro	64
A.	Anexo I: Método de Runge-Kutta	65
A.1.	Sistemas de Ecuaciones Diferenciales	67
A.2.	Validación de Runge-Kutta	70
B.	Anexo II: Método de Newton-Raphson	73
B.1.	Validación de Newton-Raphson	74

Índice de figuras

3.1. Comparación entre el kernel de orden cúbico y la función Gaussiana.	27
3.2. Comparación entre el kernel de cuarto orden y la función Gaussiana.	28
3.3. Comparación entre el kernel de quinto orden y la función Gaussiana.	29
3.4. Estas gráficas muestran una comparación entre la derivada de la función Gaussiana y las derivadas de los kernels de orden cúbico, cuártico y quíntico respectivamente.	30
3.5. En este esquema se puede apreciar una descripción gráfica de los pasos que sigue el método SPH para el cálculo de soluciones de las ecuaciones de Euler y la simulación de fluidos.	45
4.1. Distancia de suavizado y densidad para una configuración de 100 partículas distribuidas uniformemente	49
4.2. Distancia de suavizado y densidad para una configuración de 256 partículas distribuidas uniformemente	49
4.3. En la parte superior se muestran los valores de las componentes de la velocidad para 100 partículas y en la parte inferior para 256 partículas	50
4.4. Del lado izquierdo se muestran las posiciones de las partículas al tiempo inicial, y del lado derecho al tiempo $t = 30$ segundos, para el caso en que todas las partículas se encuentran inicialmente en una distribución uniforme dentro del dominio de la caja.	51
4.5. Distribución de las partículas a los tiempos de 0, 8 y 12 segundos respectivamente para la configuración inicial ordenada con una partícula fuera del equilibrio.	53

4.6.	En las gráficas se muestran los resultados obtenidos para las variables en diferentes instantes de tiempo. En ellas se observa que el sistema tiende irse a un equilibrio dinámico.	57
4.7.	En las gráficas se muestran la posiciones de las partículas en los tiempos $t = 0$, $t = 10$, $t = 20$ y $t = 30$ segundos respectivamente, para el caso en que las partículas estan en una distribución desordenada al tiempo inicial.	58
4.8.	En las gráficas se comparan los valores de las variables en diferentes instantes de tiempo. Se observa que el sistema tiende a equilibrarse dinámicamente a medida que transcurre el tiempo.	59
4.9.	En las imagenes se observan las posiciones de las partículas a diferentes tiempos, para el caso del tubo de choque. Se puede apreciar que la partículas se mueven de la parte mas densa a la menos densa, hasta distribuirse de manera uniforme a lo largo del tubo de choque.	60
4.10.	En las gráficas se comparan los valores de las variables en diferentes instantes de tiempo, en las que se puede observar que el sistema se equilibra al transcurrir el tiempo pues los valores de la energía, la presión y la aceleración decrecen rápidamente en el tiempo.	61
A.1.	Comparación entre la solución numérica y la solución analítica	71
A.2.	Gráfica de error contra número de iteraciones en la resolución del sistema de ecuaciones usando Runge-Kutta a cuarto orden	72

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Historicamente, la dinámica de fluidos surgió con el estudio teórico y el planteamiento de modelos físicos que describen el comportamiento de los fluidos. Para la construcción de todos estos modelos, la dinámica de fluidos necesitó de la realización de experimentos que permitieran tanto el razonamiento teórico para el planteamiento de dichos modelos, así como para contrastar los resultados obtenidos teóricamente con los resultados experimentales y validar los modelos. A su vez los ensayos experimentales requieren de los modelos teóricos para establecer la relación entre los ensayos de laboratorio y los problemas reales que se analizan. Es decir, existe una estrecha relación entre la parte teórica y experimental.

A finales del siglo pasado con el desarrollo de la tecnología y las cada vez mas sofisticadas computadoras, ha surgido un tercer elemento que ha venido a complementar a la teoría y a los experimentos, este elemento es la dinámica de fluidos computacional, la cual hace uso del análisis numérico y las técnicas computacionales para aproximar soluciones numéricas de las ecuaciones y simular fluidos en regímenes complejos, donde de otra manera sería imposible debido a la complejidad que puede presentar el resolver las ecuaciones analíticamente. Los métodos numéricos representan pues, una herramienta muy útil tanto para la validación de los modelos teóricos como para llevar acabo experimentos numéricos para simular entornos reales y hacer predicciones. En el presente proyecto de tesis se utiliza el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas conocido como SPH por sus siglas en inglés (Smoothed

Particles Hydrodynamics) para aproximar soluciones numéricas de las ecuaciones de Euler. La razón por la cual se utiliza este método es su eficiencia y ventaja sobre otros métodos, al momento de simular entornos complejos.

1.2. Objetivo

El objetivo del presente proyecto de tesis es el estudio e implementación de técnicas numéricas aplicadas a la simulación de fluidos, en particular el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas aplicado a la solución numérica de las ecuaciones de Euler, que es el modelo matemático que describe la física de fluidos ideales. Se estudia la física que hay detrás de este modelo, así como los principios en base a los cuales se contruye dicho modelo. Nos centramos en el estudio del método SPH como una técnica numérica para la solución de las ecuaciones de la dinámica de fluidos. La idea es profundizar en la parte fenomenológica que hay detrás de la implementación de este método. Finalmente se discute la implementación de un código SPH en el lenguaje de programación Fortran 90, el cual se usa para resolver algunos problemas sencillos de dinámica fluidos los cuales nos permiten validar el algoritmo.

1.3. Estructura

La estructura de la tesis es la siguiente: en el capítulo 2 se estudian las ecuaciones de Euler, se da una descripción de los sistemas físicos que describen y se da una descripción física de su construcción. En el capítulo 3 se estudia el método SPH y se aplica en la discretización de las ecuaciones de Euler, posteriormente se describe la implementación del algoritmo. En el capítulo 4 se presentan un par de problemas de fluidos, a saber un fluido en una caja bidimensional con condiciones de frontera periódicas y la evolución de un fluido en un tubo de choque bidimensional, los cuales fueron resueltos usando el método SPH. Por último en el capítulo 5 se presentan las conclusiones acerca del trabajo realizado en la presente tesis, así como el trabajo futuro que se espera desarrollar posterior a este.

Capítulo 2

La Dinámica de Fluidos y las Ecuaciones de Euler

2.1. Introducción

La parte de la mecánica clásica que estudia el comportamiento de los fluidos (gases y líquidos) en movimiento es la dinámica de fluidos. El comportamiento de un fluido se estudia considerando a este como un medio continuo, es decir, una distribución continua de materia. El modelo matemático más general de la hidrodinámica son las ecuaciones de Navier-Stokes que describen el movimiento de cualquier fluido Newtoniano, es decir, fluidos donde la viscosidad es constante, esto quiere decir que la relación entre la fuerza por unidad de superficie que una capa de fluido ejerce sobre las capas vecinas y la velocidad de deformación es constante. Estas ecuaciones forman un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de primer orden en el tiempo y de segundo orden en la parte espacial. Es posible simplificar un poco este sistema de ecuaciones, si consideramos un fluido ideal, es decir, un fluido en el que se despreja la viscosidad. Esto nos lleva a tener un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de primer orden tanto en el tiempo como en la parte espacial para la velocidad, la densidad, la energía y la presión, este sistema contiene las llamadas ecuaciones de Euler. Para resolver este sistema es necesario considerar cada caso particular pues las soluciones dependen de las condiciones iniciales y de contorno del problema considerado. Las soluciones del sistema nos proporcionan el campo de velocidades, presión y densidad, a partir de las cuales se pueden obtener las

demás variables que caracterizan al fluido, si se conoce la ecuación de estado del fluido que establece la relación entre la presión y la densidad.

En general, obtener soluciones analíticas de estas ecuaciones no es tarea sencilla debido a la complejidad que pueden presentar, pues las soluciones dependen de las condiciones de frontera que se impongan al espacio donde se mueve el fluido. Es por eso, que para fines prácticos se recurre a los métodos numéricos. En la presente tesis nos ocupamos del estudio de los métodos numéricos usados en la actualidad para resolver problemas de dinámica de fluidos y realizar simulaciones numéricas de fluidos, en particular nos centramos en el método SPH, todo esto con la finalidad de desarrollar un código numérico que nos permita resolver problemas de fluidos en general.

2.2. Ecuaciones de Euler

Para estudiar el movimiento de un fluido se considera como un medio continuo, debido a que los fenómenos considerados en la dinámica de fluidos son macroscópicos. Cuando hablamos de un elemento infinitesimal de volumen, nos referimos a un volumen muy pequeño en comparación con el tamaño del sistema, pero grande en comparación con la distancia entre las moléculas que lo forman. Para describir matemáticamente un fluido se hace, considerando una función para la velocidad $v = v(x, y, z, t)$, la cual nos dice como se mueve el fluido, y dos magnitudes termodinámicas, a saber la presión $P = P(x, y, z, t)$ y la densidad $\rho = \rho(x, y, z, t)$, a partir de las cuales es posible conocer cualquier otra cantidad termodinámica. Cabe resaltar también que estas cantidades son funciones de las coordenadas x, y, z y el tiempo t , es decir, cada una de ellas está determinada en cada punto en el espacio y en cada instante de tiempo.

A continuación deducimos las ecuaciones que describen el comportamiento de un fluido ideal, para lo cual partimos de tres principios físicos fundamentales: la conservación de la masa, la segunda ley de Newton o conservación del momento lineal, y la conservación de la energía. Estos tres principios nos permiten construir un sistema de cinco ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de primer orden tanto en el tiempo como en la parte espacial, estas ecuaciones están conformadas por tres ecuaciones para la velocidad, una ecuación para cada componente, y una ecuación para la densidad y otra para la presión. Cuando decimos fluido ideal, nos referimos a un fluido en el que el efecto de la viscosidad es muy débil que puede despreciarse, es decir, se

puede despreciar las fuerza de rozamiento entre las capas del fluido.

2.2.1. Ecuación de Continuidad

Consideremos primero el principio de conservación de la masa y construyamos la ecuación matemática que describe dicho principio. Lo que nos dice este principio es que la masa no se crea ni se destruye.

Sea V_0 un cierto volumen del espacio que contiene al fluido. La masa contenida en este volumen es

$$m = \int \rho dV \quad (2.2.1)$$

donde ρ es la densidad del fluido y la integral se aplica sobre todo el volumen V_0 . El flujo de masa por unidad de tiempo a través de un elemento $d\mathbf{a}$ de la superficie que limita al volumen V_0 es $\rho\mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$, donde $d\mathbf{a}$ es normal a la superficie con sentido hacia afuera, por tanto el flujo se considera positivo si sale del volumen y negativo si entra. Por consiguiente la masa total de fluido que sale del volumen V_0 por unidad de tiempo es

$$\Phi = \oint \rho\mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}, \quad (2.2.2)$$

donde la integral se extiende a toda la superficie que rodea el volumen V_0 . Por otro lado, considerando la ecuación 2.2.1, la disminución de la masa del volumen V_0 se puede escribir como

$$\Phi = -\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV \quad (2.2.3)$$

podemos por tanto, igualar las dos expresiones anteriores, obteniendo la siguiente ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV = - \oint \rho\mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}. \quad (2.2.4)$$

Usando el teorema de Green del análisis vectorial se puede transformar la integral del lado derecho de la ecuación anterior en una integral de volumen

$$\oint \rho\mathbf{v} \cdot d\mathbf{a} = \int \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) dV. \quad (2.2.5)$$

Por tanto, sustituyendo en la ecuación 2.2.4 se tiene

$$\int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] dV = 0, \quad (2.2.6)$$

esta integral es válida para cualquier volumen, así pues, el integrando debe ser igual a cero, por tanto podemos escribir

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}). \quad (2.2.7)$$

Esta es la ecuación de continuidad en forma diferencial, la cual nos indica que el cambio en la densidad de masa es igual al cambio en el flujo de masa $\rho \mathbf{v}$ que entra a un cierto volumen V_0 , decir, lo que tenemos es una ley de conservación. Cabe mencionar que esta ecuación es válida para cualquier fluido.

2.2.2. Ecuación de Momento

Consideremos ahora, la segunda ley de Newton, con la cual obtendremos la ecuación de evolución de la velocidad

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.2.8)$$

Esta ley expresa el principio de conservación del momento lineal, pues afirma que la variación del momento lineal en el tiempo es igual a la resultante de las fuerzas que actúan sobre cierta masa del fluido. Considerando nuevamente un volumen V_0 del fluido, la fuerza total que actúa sobre el es

$$\mathbf{F} = - \oint P d\mathbf{a}, \quad (2.2.9)$$

donde $d\mathbf{a}$ es un elemento de la superficie que rodea al volumen V_0 , y la integral se aplica sobre toda la superficie. Transformando esta integral en una integral de volumen se tiene

$$- \oint P d\mathbf{a} = - \int (\nabla P) dV. \quad (2.2.10)$$

Además, tomando en cuenta que $m = \int \rho dV$, e igualando las fuerzas, se obtiene la siguiente expresión

$$\int \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} dV = - \int (\nabla P) dV. \quad (2.2.11)$$

Las dos integrales se aplican sobre todo el volumen, por lo cual los integrandos deben ser iguales, obteniendo así

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P. \quad (2.2.12)$$

Esta es la ecuación de momento, la cual expresa la conservación del momento lineal. Como se puede ver, esta es una ecuación vectorial, pues aparece la velocidad la cual tiene tres componentes. Esta ecuación es válida solo para fluidos ideales.

2.2.3. Ecuación de Energía

Por último, consideramos el principio de conservación de la energía, este principio es la primera ley de la Termodinámica, la cual se expresa matemáticamente como sigue

$$dU = TdS - PdV, \quad (2.2.13)$$

donde dU es el cambio en la energía interna del sistema, T es la temperatura, P la presión, dS es el cambio en la entropía y dV el cambio de volumen. El primer término del lado derecho $dQ = TdS$ se refiere al calor que el sistema intercambia con su entorno y el segundo término $dW = PdV$ hace referencia al trabajo que se hace sobre el sistema. Si consideramos un fluido ideal, es decir, libre de viscosidad, la variación de la entropía es cero, pues el proceso es adiabático, es decir, no hay intercambio de calor entre el sistema y su entorno. Además teniendo en cuenta que $V = \frac{m}{\rho}$, la variación de volumen es $dV = -\frac{m}{\rho^2}d\rho$. Tomando cantidades por unidad de masa, se puede escribir

$$du = \frac{P}{\rho^2}d\rho. \quad (2.2.14)$$

Así pues, la variación de la energía en el tiempo viene dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (2.2.15)$$

Como se puede observar, del lado derecho de la ecuación aparece la derivada de la densidad con respecto al tiempo, la cual ya fue calculada en la ecuación 2.2.7, sustituyendo se obtiene

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{P}{\rho} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}). \quad (2.2.16)$$

Hemos obtenido la ecuación para la energía interna del sistema, como podemos observar, esta energía depende del flujo de masa $\rho \mathbf{v}$ que entra al volumen V_0 , es decir a mayor masa mayor energía.

2.3. Métodos numéricos en Dinámica de Fluidos

En la sección anterior se expuso el proceso de obtención de las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de fluidos ideales partiendo de algunos principios físicos fundamentales. A lo que se llegó es a que este modelo físico está descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, para el cual ahora nos preguntamos por la forma en que podemos obtener sus soluciones. Como es bien sabido para un sistema de ecuaciones como este, compuesto por una parte espacial y parte temporal es necesario especificar las condiciones iniciales y de frontera, las cuales determinan las soluciones del sistema. Cabe mencionar también que la complejidad o facilidad de obtener soluciones de estas ecuaciones la determinan el tipo de condiciones de frontera espaciales y la geometría del dominio espacial en el cual se mueve el fluido. Es posible obtener soluciones analíticas a este sistema de ecuaciones, pero solo en unos cuantos casos donde las condiciones de frontera son bastante idealizadas. En general cuando se quiere simular fluidos en entornos reales se recurre a técnicas numéricas, pues aunque estas técnicas proporcionan solo aproximaciones, estas son muy precisas y de gran relevancia en el aspecto práctico.

El sistema de las ecuaciones de Euler está constituido por derivadas temporales de primer orden y derivadas espaciales también de primer orden. Para aproximar soluciones numéricas de este sistema es necesario utilizar dos tipos de métodos numéricos, a saber, métodos de líneas para integrar la evolución temporal y métodos de discretización del dominio para aproximar la parte espacial. Entre las técnicas numéricas de discretización del dominio, encontramos diferentes métodos numéricos los cuales se clasifican en dos grupos: los métodos Eulerianos y los métodos Lagrangianos. Esto no se refiere a otra

cosa, que a la forma en la que se describe físicamente la evolución de un fluido. La descripción Euleriana consiste en observar el movimiento del fluido en puntos determinados del espacio y ver como evolucionan las variables con el tiempo en cada punto, es por esto que las variables que describen al fluido son consideradas funciones que dependen de las coordenadas espaciales (x, y, z) y el tiempo t , es decir, si f es una de estas variables entonces $f = f(x, y, z, t)$. Por otro lado la descripción Lagrangiana, consiste en seguir el movimiento de cada partícula fluida, de manera que podamos conocer sus propiedades en cada instante de tiempo, por ello las variables que describen al fluido son funciones que dependen unicamente del tiempo t y de las condiciones iniciales de estas variables, por ejemplo, si \mathbf{r} describe la posición de un elemento de fluido, entonces $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x_0, y_0, z_0, t)$ es la posición al tiempo t , donde x_0 , y_0 y z_0 son las condiciones iniciales de cada una de las componentes espaciales de la posición al tiempo $t = t_0$. Para el cálculo de derivadas espaciales estos métodos se basan en dos técnicas distintas, los métodos Eulerianos están basados en una malla sobre la cual se calculan las derivadas en cada punto de esta, para cada instante de tiempo, por otro lado los métodos Lagrangianos se basan en el cálculo de promedios sobre las regiones vecinas de cada elemento fluido. El método usado para resolver las ecuaciones de Euler en el presente trabajo de tesis es el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH), el cual se clasifica dentro de los métodos Lagrangianos.

A lo largo de este capítulo se discutió el modelo físico que describe la dinámica y comportamiento de los fluidos ideales, el cual está dado por las ecuaciones de Euler. Además, se ha discutido la motivación del por qué usar técnicas numéricas para resolver este sistema de ecuaciones y hacer simulaciones de fluidos. En el capítulo siguiente nos centramos en dar una descripción del funcionamiento e implementación método SPH, aplicado a la solución de las ecuaciones de la dinámica de fluidos.

Capítulo 3

Método SPH

3.1. Introducción

Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH por sus siglas en ingles) es un método para obtener soluciones numéricas de las ecuaciones de la dinámica de fluidos, tomando el fluido como un sistema de partículas, las cuales se mueven libremente en el espacio ocupado por el fluido.

Las ecuaciones que rigen un fluido se pueden resolver numéricamente, usando una malla, con la descripción Euleriana, o sin el uso de mallas con la descripción Lagrangiana. Los metodos basados en mallas, como los son el método de diferencias finitas, volúmenes finitos y elementos finitos, proporcionan resultados muy precisos, cuando se tienen sistemas donde las fronteras permanecen fijas o están bien delimitadas. Pero para sistemas más complejos estos métodos resultan ineficientes ya que pueden producir problemas de difusión numérica con lo cual los resultados serían muy poco precisos. Por otro lado, tenemos los métodos Lagrangianos, entre los que se encuentra SPH, estos permiten simular más fácilmente y con mayor eficiencia sistemas con geometrías más complejas. SPH surgió como una técnica para resolver problemas de dinámica de gases en astrofísica. Los primeros documentos acerca de este método fueron publicados a finales de la década de 1970 por Gingold Monaghan y Lucy. Durante las cuatro décadas de su existencia, el método se ha extendido a numerosas aplicaciones en el campo de la dinámica de fluidos, la física computacional y la ingeniería, e incluso tiene aplicaciones en la industria de los videojuegos. El hecho de que sea un método sin malla lo vuelve atractivo para realizar simulaciones de problemas donde se tengan

geometrías con condiciones de frontera complejas o incluso cuando se tiene problemas libres de fronteras físicas.

En SPH se resuelven las ecuaciones de la dinámica de fluidos discretizando al fluido como un sistema de partículas, cuando hablamos de partículas no nos referimos a la totalidad de partículas físicas o moléculas que conforman al fluido, sino en suponer que el sistema está compuesto por un cierto número finito de elementos de fluido. A medida que se aumenta el número de partículas que conforman el sistema, este tiene un comportamiento más preciso y parecido al sistema continuo, pero también se incrementa su complejidad computacional. Cada partícula tiene asociada ciertas variables que caracterizan al fluido, tales como velocidad, densidad, presión, energía, etc. Para calcular los valores de las variables SPH se basa en el cálculo de promedios de los valores de las partículas vecinas mediante el concepto de interpolación.

3.2. Interpolación en SPH

Como ya se ha mencionado, el método SPH describe un fluido como un sistema de partículas puntuales, las cuales al ser elementos de fluido deben estar caracterizadas por ciertas cantidades físicas propias de los fluidos. Un fluido al ser considerado un medio continuo está descrito físicamente por cantidades macroscópicas, algunas de ellas mecánicas como la velocidad o la aceleración o termodinámicas como la densidad o la presión. Aunque tendría sentido hablar de la velocidad o aceleración de las partículas, no sería así al referirnos a la densidad o a la presión pues estas son cantidades macroscópicas propias de sistemas continuos, es por eso que utiliza el concepto de interpolación para asociar cantidades a las partículas en base al cálculo de promedios de las cantidades físicas de las partículas vecinas. En este contexto cobra un poco más de sentido el asociar cantidades macroscópicas pues ahora nos estamos refiriendo a conjuntos de partículas.

3.2.1. Función delta y operador promedio

La interpolación en SPH se basa en un conjunto de puntos (partículas) desordenados en un continuo, es decir, no hay una malla en la cual se muevan dichos puntos. Para interpolar, SPH se basa en la siguiente identidad.

$$A(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')d\mathbf{V}' \quad (3.2.1)$$

donde A es una función escalar y δ es la función delta de Dirac.

Existen varias formas de definir la función delta de Dirac, aquí se define como el siguiente límite

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{cases} 0; & x < -\frac{\epsilon}{2} \\ \frac{1}{\epsilon}; & -\frac{\epsilon}{2} < x < \frac{\epsilon}{2} \\ 0, & x > \frac{\epsilon}{2}. \end{cases} \quad (3.2.2)$$

Esta función cumple las siguientes propiedades

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = \int_{-\frac{\epsilon}{2}}^{\frac{\epsilon}{2}} \frac{1}{\epsilon}dx = 1 \quad (3.2.3)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - x)f(\xi)d\xi = f(x). \quad (3.2.4)$$

Sin embargo, la función delta de Dirac no puede ser usada directamente en la interpolación, pues es una función generalizada que no tiene las propiedades de una función "normal", como lo son la continuidad y la diferenciabilidad. Para remediar este problema se sustituye la función delta por otra función $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)$, que llamamos kernel de suavizado, esta función debe conservar las propiedades de la función delta.

Se define el operador promedio en SPH como:

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle \approx \int A(\mathbf{r}')W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)d\mathbf{V}' \approx \sum_{b=1}^N A(\mathbf{r}')W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)\Delta\mathbf{V}' \quad (3.2.5)$$

donde $\langle \rangle$ denota al operador promedio, y la función h hace referencia a la distancia de suavizado, además la suma se aplica sobre el número de partículas que conforman al fluido. Si $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)$ es una función de soporte compacto h se refiere al radio o tamaño del soporte. Se hacen entonces dos aproximaciones, la primera de ellas es la aproximación de la función delta de Dirac con la función $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)$ la cual se discute mas adelante, la otra es la aproximación de la integral por una suma discreta. Estas aproximaciones, nos permiten tratar a un fluido como sistema discreto lo cual facilita el hecho

de poder simularlo en un entorno computacional y obtener así buenas aproximaciones a las ecuaciones de la dinámica de fluidos que de otra manera no sería posible obtener.

3.2.2. Funciones de Kernel

La función Kernel debe cumplir las siguientes propiedades:

- (i) $\int W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{V}' = 1$
- (ii) $\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
- (iii) $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \in C_0^k(\mathbb{R}^d), k \geq 1$

Las propiedades (i) y (ii) hacen referencia a las propiedades de la función delta de Dirac. La última propiedad (iii), nos dice que la función W debe ser de clase C_0^k , es decir, tiene que ser derivable por lo menos una vez, esto garantiza su "suavidad". Una función que cumple con estas propiedades es la función Gaussiana:

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) = \frac{\sigma}{h^d} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{h^2} \right] \quad (3.2.6)$$

donde d es la dimensión espacial y σ es un factor de normalización dado por $\sigma = [\frac{1}{\sqrt{\pi}}, \frac{1}{\pi}, \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}]$ en $[1, 2, 3]$ dimensiones. Sin embargo, aunque esta función, da aproximaciones muy buenas al momento de calcular promedios, tiene una desventaja práctica, a saber, el coste computacional, pues la contribución de las partículas disminuye con la distancia, y ésta se vuelve insignificante si las partículas están muy alejadas, por tanto se vuelve innecesario calcular el promedio sobre todas las partículas. Por esta razón, en la práctica es mejor utilizar un kernel que conserve la misma forma que el kernel gaussiano, pero truncado a un cierto radio.

Las funciones kernel más utilizadas que cumplen con la condición anterior son las funciones B-spline (spline básica), que son funciones polinómicas a trozos, las cuales son interpolaciones de la función Gaussiana. La primera de estas funciones es el spline cúbico, el cual está truncado a un radio de $2h$, este es el radio del soporte

$$\omega(q) = \sigma \begin{cases} \frac{1}{4}(2-q)^3 - (1-q)^3, & 0 \leq q < 1 \\ \frac{1}{4}(2-q)^3, & 1 \leq q < 2 \\ 0, & q \geq 2 \end{cases} \quad (3.2.7)$$

donde, usamos $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) := \frac{1}{h^d} \omega(q)$ con $q = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{h}$ y σ es la constante de normalización, dada por $\sigma = [\frac{2}{3}, \frac{10}{7\pi}, \frac{1}{\pi}]$ en $[1, 2, 3]$ dimensiones.

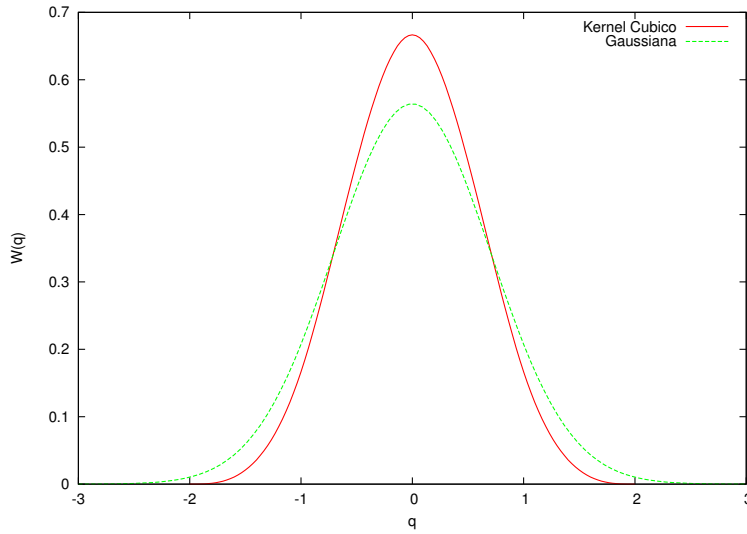


Figura 3.1: Comparación entre el kernel de orden cúbico y la función Gaussiana.

El siguiente es el spline de cuarto orden, que tiene un radio de soporte de $2,5h$

$$\omega(q) = \sigma \begin{cases} (\frac{5}{2} - q)^4 - 5(\frac{3}{2} - q)^4 + 10(\frac{1}{2} - q)^4, & 0 \leq q < \frac{1}{2} \\ (\frac{5}{2} - q)^4 - 5(\frac{3}{2} - q)^4, & \frac{1}{2} \leq q < \frac{3}{2} \\ (\frac{5}{2} - q)^4, & \frac{3}{2} \leq q < \frac{5}{2} \\ 0, & q \geq \frac{5}{2} \end{cases} \quad (3.2.8)$$

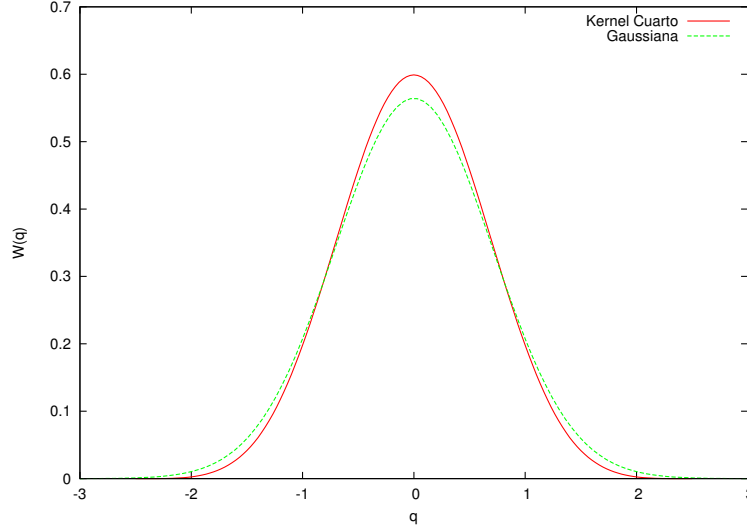


Figura 3.2: Comparación entre el kernel de cuarto orden y la función Gaussiana.

con $\sigma = [\frac{1}{24}, \frac{96}{1199\pi}, \frac{1}{20\pi}]$.

El spline de quinto orden, truncado a un radio de soporte de $3h$ es:

$$\omega(q) = \sigma \begin{cases} (3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5, & 0 \leq q < 1 \\ (3-q)^5 - 6(2-q)^5, & 1 \leq q < 2 \\ (3-q)^5, & 2 \leq q < 3 \\ 0, & q \geq 3 \end{cases} \quad (3.2.9)$$

con $\sigma = [\frac{1}{120}, \frac{7}{478\pi}, \frac{1}{120\pi}]$ en $[1, 2, 3]$ dimensiones.

A medida que se va aumentando el orden y el radio de soporte de estas funciones spline, se obtiene una mejor aproximación a la función Gaussiana. Es decir, entre mayor sea el orden del spline, tenemos la ventaja de una mejor aproximación del kernel gaussiano, pero también tenemos una desventaja, y esta es que al aumentar el grado también aumenta el radio del soporte y con ello aumentará el número de partículas vecinas sobre las cuales calcular promedios, teniendo así un mayor costo computacional.

Para definir, el promedio de algunas cantidades vectoriales, las cuales se

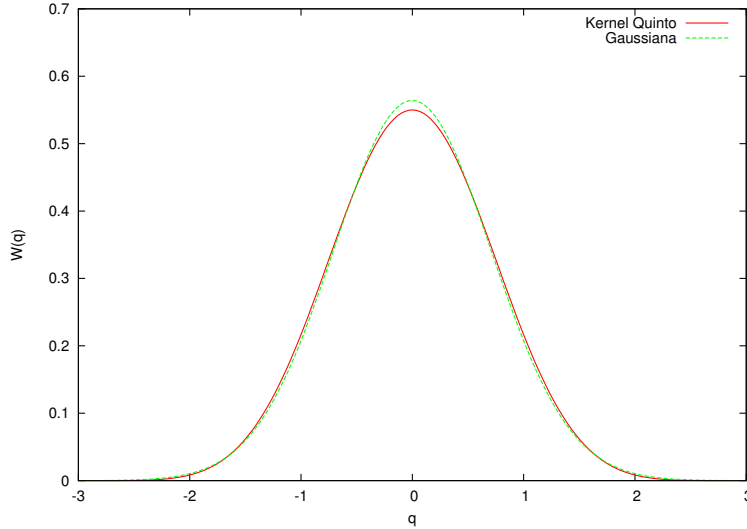


Figura 3.3: Comparación entre el kernel de quinto orden y la función Gaussiana.

explican en el siguiente apartado, es necesario calcular el gradiente del kernel. Como ya se mencionó antes, la función kernel esta dada por

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) := \frac{1}{h^d} \omega(q) \quad (3.2.10)$$

donde $q = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{h}$, $\omega(q)$ es alguna de las funciones spline, h es la distancia de suavizado y d es la dimensión espacial. Por tanto el gradiente esta dado por

$$\nabla W = \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\sigma}{h^{d+1}} \omega(q) \quad (3.2.11)$$

como observación, vemos que el gradiente depende de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

3.2.3. Cantidades de interpolación

En la ecuación 3.2.5 se definió el operador promedio, el cual se aproxima con una suma discreta. Pero nos interesa el valor de la variable A . Una primera aproximación que se puede hacer es $\langle A(\mathbf{r}) \rangle \approx A(\mathbf{r})$. Además teniendo en cuenta que $m = \int \rho dV$, y aplicando la suma sobre todas las partículas que conforman el sistema, se puede escribir.

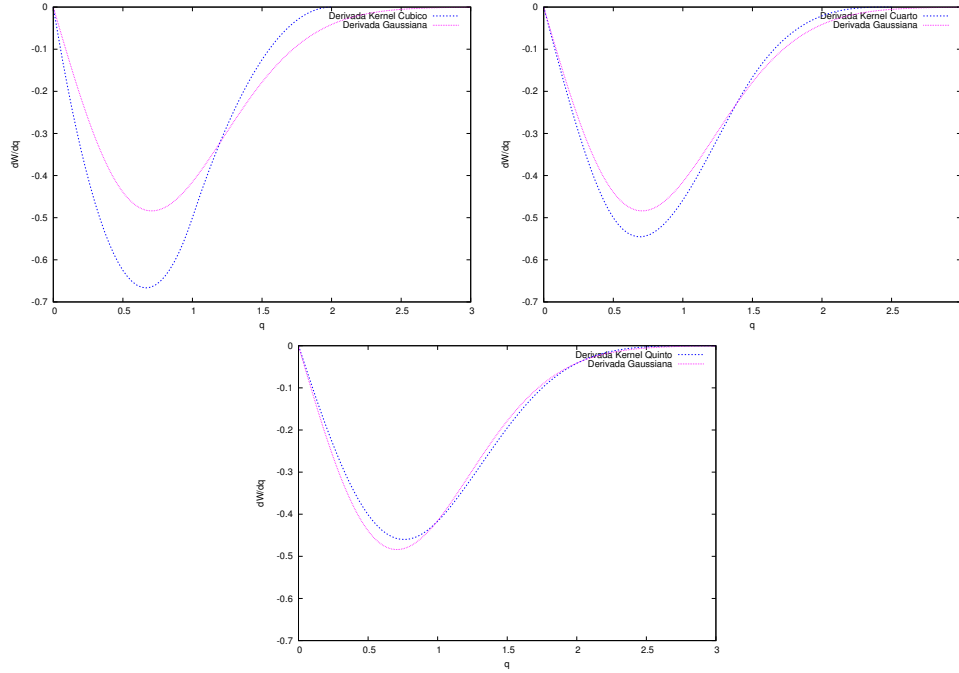


Figura 3.4: Estas gráficas muestran una comparación entre la derivada de la función Gaussiana y las derivadas de los kernels de orden cúbico, cuártico y quíntico respectivamente.

$$A(\mathbf{r}) = \int \frac{A(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{V}' \approx \sum_{b=1}^N m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \quad (3.2.12)$$

A partir de esta suma de interpolación, es posible aproximar otras cantidades, como el gradiente, la divergencia, o el rotacional

$$\nabla A(\mathbf{r}) \approx \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \quad (3.2.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \approx \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \quad (3.2.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \approx - \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \times \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \quad (3.2.15)$$

$$\nabla^j A^i(\mathbf{r}) \approx \sum_b m_b \frac{A_b^i}{\rho_b} \nabla^j W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \quad (3.2.16)$$

se debe notar, que \mathbf{A} en "negritas" se refiere a una cantidad vectorial. Estas cantidades son útiles, al momento que se desea discretizar las ecuaciones de la dinámica de fluidos, pues estas están dadas en términos de algunas de estas cantidades en su parte espacial. Esto nos permitirá reducir el sistema de ecuaciones en derivadas parciales a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como se verá mas adelante, aunque el precio a pagar será que la dimensión de este sistema la determinará el número de partículas que conformen al fluido.

3.2.4. Calculando la densidad

Otra de las características que distingue al método SPH es la forma en que se estima la densidad. Una manera de calcular la densidad de un fluido, es construir una malla y dividir la masa de cada celda entre su volumen, éste es precisamente el enfoque que utilizan los métodos de malla. Sin embargo, ésta manera de calcular la densidad presenta limitaciones cuando se tienen regiones donde la distribución de masa es muy agrupada o muy escasa.

Una forma más eficiente es, quitar la malla y utilizar un muestreo local, por ejemplo una esfera centrada en la ubicación de una partícula, la densidad sería entonces, la masa total dividida entre el volumen de la esfera. Esto resuelve el problema de las regiones donde la distribución de masa es agrupada o escasa, ajustando el radio de la esfera. Pero ahora surge un nuevo problema, este enfoque puede producir resultados muy ruidosos, ya que la estimación es muy sensible si una partícula está en el límite o frontera del muestreo, ya sea dentro o fuera de éste. Este problema nos lleva a la idea, de que la contribución de las partículas, debe disminuir con la distancia conforme estas se alejan del centro del muestreo. Este es precisamente el enfoque que utiliza el método SPH.

Es posible construir un estimador de densidad utilizando el concepto de interpolación. En la ecuación 3.2.12 tomando $A(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})$ se tiene la siguiente expresión

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{b=1}^N m_b W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b, h) \quad (3.2.17)$$

donde la densidad $\rho(\mathbf{r})$ es la densidad asociada a la partícula en la posición \mathbf{r} . Siendo estrictos con las unidades de la densidad, $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b, h)$ debe tener unidades de inverso de volumen. Es fácil notar como ésta estimación de la densidad, cumple con el criterio antes mencionado, esto se debe a las propiedades del kernel de interpolación, pues conforme una partícula en la posición \mathbf{r}_b se aleja de la partícula en la posición \mathbf{r} esta contribuye menos a su densidad. El radio del muestreo es entonces equivalente al radio del soporte el kernel el cual es un múltiplo de la distancia de suavizado h , la pregunta que surge ahora es la manera en base a la cual se debe calcular la distancia de suavizado, que cumpla con el objetivo de resolver el problema de las regiones agrupadas o escasas de vecinos.

3.2.5. Ajustando la distancia de suavizado h

Nos ocupamos ahora de calcular la distancia de suavizado h . Como ya se ha mencionado, la razón de ajustar el parametro h , es resolver el problema de las regiones agrupadas (con muchos vecinos) o escasas (con pocos vecinos). Así pues, la elección de la distancia de suavizado debe estar relacionada con la densidad del número de vecinos $n(\mathbf{r})$.

$$h(\mathbf{r}) \propto n(\mathbf{r})^{-\frac{1}{d}} \quad (3.2.18)$$

donde d es la dimensión del espacio, y $n(\mathbf{r})$ esta dado por

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{b=1}^N W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b, h). \quad (3.2.19)$$

Si todas las partículas tienen masas iguales, h es inversamente proporcional a la densidad, es decir, h es una función que depende de ρ . A su vez la suma con la cual se calcula la densidad ρ depende explícitamente de h . Esto nos lleva a tener dos ecuaciones simultaneas para h .

$$\rho(\mathbf{r}_a) = \sum_{b=1}^N m_b W(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h_a) \quad (3.2.20)$$

$$h(\mathbf{r}_a) = \eta \left(\frac{m_a}{\rho_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (3.2.21)$$

donde η es un parámetro, el cual puede ser ajustado libremente dependiendo de cada caso particular que se desee resolver. Estas ecuaciones pueden resolverse simultáneamente usando métodos numéricos para buscar raíces, como el método de Newton-Raphson (que se describe en el apéndice B) o el método de bisección, entre otros.

3.3. Discretización de las ecuaciones de Euler

Hemos discutido hasta ahora, el concepto de interpolación y la forma en que se calculan los promedios haciendo uso de un kernel de interpolación, también se obtuvieron las formulas de interpolación para las diferentes cantidades vectoriales (gradiente, divergencia, rotacional), las cuales son muy importantes, pues algunas de estas cantidades aparecen en la parte espacial de las ecuaciones de la dinámica de fluidos, las cuales se discutieron en el capítulo anterior. Podemos en principio ir directamente a las ecuaciones y aplicar la interpolación para obtener su versión discreta, pero para fines de interpretar y entender mejor la física involucrada, aquí construimos las ecuaciones de movimiento asociadas al sistema de partículas que conforman al fluido, partiendo del lagrangiano de la hidrodinámica en versión discreta y haciendo uso del principio variacional de la mecánica y las ecuaciones de Euler-Lagrange. Posteriormente, una vez obtenidas las ecuaciones en una versión discreta, se utilizan las cantidades de interpolación vectoriales para comparar las ecuaciones discretas con la versión continua y mostrar que son equivalentes. Cabe mencionar también que la única cantidad que es necesario interpolar para esta construcción de las ecuaciones discretas, es la densidad.

3.3.1. Ecuación de Continuidad

La ecuación de continuidad expresa el cambio de la densidad en el tiempo, tal como se discutió en la sección 2.1.2 del capítulo anterior. Es posible construir una versión discreta de esta ecuación, tomando la derivada temporal de la densidad, usando directamente la ecuación 3.2.17

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_a}{dt} &= \frac{d}{dt} \sum_{b=1}^N m_b W(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h_a) \\
&= \sum_{b=1}^N m_b \left[\frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial \mathbf{r}_c} \cdot \frac{d\mathbf{r}_c}{dt} (\delta_{ac} - \delta_{bc}) + \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial h_a} \frac{dh_a}{d\rho_a} \frac{d\rho_a}{dt} \right]
\end{aligned} \tag{3.3.1}$$

$$\frac{d\rho_a}{dt} \left[1 - \frac{dh_a}{d\rho_a} \sum_{b=1}^N m_b \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial h_a} \right] = \sum_{b=1}^N m_b \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial \mathbf{r}_c} \cdot (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b)$$

haciendo

$$\Omega_a = \left[1 - \frac{dh_a}{d\rho_a} \sum_{b=1}^N m_b \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial h_a} \right] \tag{3.3.2}$$

tenemos

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \frac{1}{\Omega_a} \sum_{b=1}^N m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla_a W_{ab}(h_a) \tag{3.3.3}$$

donde la \mathbf{v} es la velocidad y la derivada de h con respecto a ρ se calcula a partir de la ecuación 3.2.5 y esta dada por

$$\frac{\partial h}{\partial \rho} = -\frac{h}{\rho d} \tag{3.3.4}$$

La ecuación 3.3.3 es una versión discreta de la ecuación de continuidad.

3.3.2. Ecuación de Momento

La ecuación de momento describe la conservación el momento lineal, el principio que describe esta ley de conservación es la segunda ley de Newton. Para el caso de un sistema de partículas la segunda ley de Newton describe la dinámica del sistema.

Para obtener la versión discreta de la ecuación de momento, lo haremos usando el lagrangiano de la hidrodinámica y las ecuaciones de Euler-Lagrange que son una alternativa para construir las ecuaciones de movimiento de un sistema. El lagrangiano para la hidrodinámica esta dado por

$$L = \int [\rho v^2 - \rho u(\rho, s)] dV \tag{3.3.5}$$

donde ρ es la densidad, v la velocidad, u la energía térmica que es una función que depende de la densidad ρ y la entropía s , y dV es el diferencial de volumen. Este lagrangiano es una versión continua, pero para el fin que se tiene de construir las ecuaciones de movimiento de un fluido constituido por un sistema de partículas, es necesario considerar una versión discreta

$$L = \sum_{b=1}^N m_b \left[\frac{1}{2} v_b^2 - u_b(\rho_b, s_b) \right]. \quad (3.3.6)$$

Las ecuaciones de movimiento asociadas a cada una de las partículas pueden ser derivadas a partir de éste lagrangiano, usando las ecuaciones de Euler-Lagrange.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = 0 \quad (3.3.7)$$

Calculando la derivada del lagrangiano con respecto a las velocidades se tiene

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} = m_a \mathbf{v}_a \quad (3.3.8)$$

por tanto,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} \right) = m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \quad (3.3.9)$$

Al calcular la derivada con respecto a las coordenadas, se asume que la entropía s es constante, esto es equivalente a decir que no hay disipación de energía, esta hipótesis viene de asumir que el fluido es ideal. Se tiene entonces el producto de dos términos, la derivada de la energía con respecto a la densidad y el gradiente de la densidad

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = - \sum_b m_b \frac{\partial u_b}{\partial \rho_b} \frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a}. \quad (3.3.10)$$

El gradiente de densidad se calcula, derivando directamente la ecuación 3.2.17.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} \left(\sum_{c=1}^N m_c W(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_c, h_b) \right) \\
&= \sum_{c=1}^N m_c \left[\frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} (\delta_{ba} - \delta_{ca}) + \frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial h_b} \frac{\partial h_b}{\partial \rho_b} \frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} \right] \\
\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} \left[1 - \frac{\partial h_b}{\partial \rho_b} \sum_{c=1}^N m_c \frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial h_b} \right] &= \sum_{c=1}^N m_c \frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} (\delta_{ba} - \delta_{ca})
\end{aligned}$$

tenemos entonces

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} = \frac{1}{\Omega_b} \sum_{c=1}^N m_c \frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} (\delta_{ba} - \delta_{ca}) \quad (3.3.11)$$

donde Ω_b esta dado por la expresión 3.3.2 y δ_{ij} es la función delta de Kronecker, la cual esta dada por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (3.3.12)$$

Para obtener la derivada de la energía u con respecto a la densidad ρ , consideramos el principio de conservación de la energía, el cual esta dado por la primera ley de la termodinámica

$$dU = TdS - PdV \quad (3.3.13)$$

donde, como ya se había explicado anteriormente, dU es el cambio en la energía interna del sistema, $dQ = TdS$ es el calor que el sistema intercambia con su entorno y $dW = PdV$ es el trabajo que el entorno hace sobre el sistema. Teniendo en cuenta que la entropía S es constante, tenemos solo la contribución a la energía interna dada por el trabajo que se hace sobre el sistema. Por otro lado se tiene que $V = \frac{m}{\rho}$, por tanto $dV = -\frac{m}{\rho^2} d\rho$. Tomando cantidades por unidad de masa tenemos

$$du = \frac{P}{\rho^2} d\rho \quad (3.3.14)$$

por tanto

$$\frac{\partial u_b}{\partial \rho_b} = \frac{P_b}{\rho_b^2}. \quad (3.3.15)$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.3.11 y 3.3.15 en la ecuación 3.3.10 se obtiene

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} &= - \sum_b m_b \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \sum_c m_c \frac{\partial W_{bc}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} (\delta_{ba} - \delta_{ca}) \\
&= - \left[m_a \frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \sum_{c=1}^N m_c \frac{\partial W_{ac}(h_a)}{\partial \mathbf{r}_a} - m_a \sum_{b=1}^N m_b \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \frac{\partial W_{ba}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} \right] \\
&= - m_a \sum_{b=1}^N m_b \left[\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \frac{\partial W_{ac}(h_a)}{\partial \mathbf{r}_a} + \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \frac{\partial W_{ba}(h_b)}{\partial \mathbf{r}_a} \right].
\end{aligned} \tag{3.3.16}$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.3.8 y 3.3.16 en las ecuaciones de Euler-Lagrange 3.3.7 obtenemos la versión discreta de la ecuación de momento

$$\frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = - \sum_{b=1}^N \left[\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \nabla_a W_{ab}(h_a) + \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \nabla_a W_{ab}(h_b) \right] \tag{3.3.17}$$

3.3.3. Ecuación de Energía

Para discretizar la ecuación de la energía interna consideramos nuevamente el principio de conservación de la energía dado por la primera ley de la termodinámica. Usando la ecuación 3.3.14 es posible calcular el cambio de la energía interna en el tiempo

$$\frac{du_a}{dt} = \frac{P_a}{\rho_a^2} \frac{d\rho_a}{dt}. \tag{3.3.18}$$

Del lado derecho de esta expresión aparece la derivada temporal de la densidad, la cual ya fue calculada en la ecuación 3.3.3, sustituyendo se obtiene

$$\frac{du_a}{dt} = \frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \sum_b m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla W_{ab}(h_a). \tag{3.3.19}$$

3.3.4. Ecuación de Estado para la Presión

Una vez discretizadas las ecuaciones de Euler, se puede observar que tanto en la ecuación de momento, como en la ecuación de la energía aparece la presión. Para encontrar una ecuación para la presión usamos la siguiente ecuación de estado, la cual describe el comportamiento de un gas ideal

$$P = K(s) \rho^\gamma \tag{3.3.20}$$

donde la evolución temporal de la variable K esta dada por

$$\frac{dK}{dt} = \frac{\gamma - 1}{\rho^{\gamma-1}} \left(\frac{du}{dt} - \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} \right) = \frac{\gamma - 1}{\rho^{\gamma-1}} \left(\frac{du}{dt} \right)_{disipada} \quad (3.3.21)$$

de donde se obtiene que la energía térmica disipada es

$$u = \frac{K}{\gamma - 1} \rho^{\gamma-1}. \quad (3.3.22)$$

Usando estas las ecuaciones 3.3.20 y 3.3.22 es posible obtener una expresión para la presión

$$P = (\gamma - 1)\rho u. \quad (3.3.23)$$

La presión esta dada entonces, en términos de la energía interna y la densidad.

3.3.5. Interpretación de las Ecuaciones de SPH

El objetivo principal del método SPH es obtener soluciones numéricas de las ecuaciones de la dinámica de fluidos, en este caso las ecuaciones de Euler. Se partió del lagrangiano de la hidrodinámica en una versión discreta y de alguna leyes de conservación como la primera ley de la termodinámica, y se obtuvieron las ecuaciones de evolución para un fluido formado por un sistema de partículas. Ahora se debe mostrar, que esas ecuaciones son en efecto, una versión discreta de las ecuaciones de Euler.

Tomando la derivada temporal de la densidad de la ecuación 3.3.3 para una distancia de suavizado constante se tiene.

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla W_{ab}(h_a) \quad (3.3.24)$$

Reescribiendo esta ecuación y usando las identidades 3.2.13 y 3.2.14 se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_a}{dt} &= \mathbf{v}_a \cdot \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \rho_b \nabla W_{ab}(h_a) - \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (\rho_b \mathbf{v}_b) \cdot \nabla W_{ab}(h_a) \\ &\approx \mathbf{v}_a \cdot \nabla \rho_a - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v})_a \approx -\rho_a (\nabla \cdot \mathbf{v})_a \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

hemos obtenido la ecuación de continuidad. De igual forma, para la ecuación de momento 3.3.17, tomando una distancia de suavizado constante y usando la identidad 3.2.13 obtenemos la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} &= - \sum_b m_b \left(\frac{P_a}{\rho_a^2} + \frac{P_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab} \approx - \frac{P_a}{\rho_a^2} \nabla \rho_a - \nabla \left(\frac{P_a}{\rho_a} \right) \\ &\approx - \frac{\nabla P_a}{\rho_a} \end{aligned} \quad (3.3.26)$$

que es la ecuación de momento en su versión continua. Para la ecuación de la energía térmica basta sustituir la ecuación de continuidad 3.3.25 en la ecuación 3.3.15, obteniendo así la siguiente expresión

$$\frac{du_a}{dt} \approx \frac{P_a}{\rho_a} (\nabla \cdot \mathbf{v})_a \quad (3.3.27)$$

que representa a la ecuación de la energía interna en versión continua. Con esto mostramos que en efecto las ecuaciones obtenidas por medio de la interpolación del método SPH son la versión discreta de las ecuaciones de Euler, que describen a un fluido formado por un sistema de partículas puntuales.

3.3.6. En Resumen

Usando el concepto de interpolación de SPH y suponiendo que el fluido esta constituido por un sistema de partículas, se discretizaron las ecuaciones de Euler que describen el comportamiento de fluidos ideales. Dado que el fluido esta constituido por un sistema de partículas puntuales, estas ecuaciones en versión discreta deben describir la dinámica del sistema de partículas. Lo que tenemos es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden en el tiempo. Otro detalle que se debe observar es que no es necesario calcular una solución para la ecuación de continuidad, pues esta describe el cambio de la densidad en el tiempo, pero para esta cantidad ya se tiene una forma de calcularla a partir de la expresión 3.2.17, por tanto se puede eliminar esta ecuación del sistema de ecuaciones. Por otro lado, aun no tenemos una expresión para la posición de cada una de las partículas, pero esta es posible obtenerla a partir de la velocidad introduciendo una nueva ecuación al sistema de ecuaciones, a saber

$$\frac{d\mathbf{r}_a}{dt} = \mathbf{v}_a \quad (3.3.28)$$

tenemos por tanto que el sistema de ecuaciones diferenciales que describen la dinámica del sistema de partículas esta dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{r}_a}{dt} = \mathbf{v}_a \\ \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = - \sum_{b=1}^N m_b \left[\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \nabla W_{ab}(h_a) + \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \nabla W_{ab}(h_b) \right] \\ \frac{du_a}{dt} = \frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \sum_b m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla W_{ab}(h_a) \end{array} \right. \quad (3.3.29)$$

donde las funciones ρ_a , P_a , Ω_a y h_a estan dadas por

$$\rho_a = \sum_{b=1}^N m_b W_{ab}(h_a) \quad (3.3.30)$$

$$P_a = (\gamma - 1) \rho_a u_a \quad (3.3.31)$$

$$\Omega_a = \left[1 - \frac{\partial h_a}{\partial \rho_a} \sum_{b=1}^N m_b \frac{\partial W_{ab}(h_a)}{\partial h_a} \right] \quad (3.3.32)$$

$$h_a = \eta \left(\frac{m_a}{\rho_a} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (3.3.33)$$

Ademas, $a = 1, 2, \dots, N$ donde N es el número de partículas que conforman el fluido, notemos también que los vectores \mathbf{r}_a y \mathbf{v}_a tienen d coordenadas, siendo d la dimension del espacio donde evoluciona el sistema. Por tanto, tenemos que la dimension del sistema de ecuaciones diferenciales es $(2d+1)N$. Este tipo de sistemas se resuelven usando métodos numéricos como el método de Euler o el método de Runge-Kutta entre otros, en el presente proyecto de tesis se utilizó el método de Runge-Kutta a cuarto orden, el cual ofrece tanto precisión como estabilidad al momento de aproximar soluciones numéricas de problemas de valor inicial, además de su fácil implemetación.

3.4. Propiedades de las ecuaciones de SPH

3.4.1. Leyes de conservación

SPH considera un fluido como un sistema de partículas discretas, este sistema, es un sistema físico que debe cumplir con ciertas leyes, algunas de estas son las leyes de conservación de algunas cantidades, tales como, el momento lineal, el momento angular y la energía total del sistema.

Considerando primero el momento lineal total del sistema, usando la ecuación 3.3.17 con una distancia de suavizado constante, se tiene

$$\frac{d}{dt} \sum_a m_a \mathbf{v}_a = \sum_a m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = \sum_a \sum_b m_a m_b \left(\frac{P_a}{\rho_a^2} + \frac{P_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab} = 0 \quad (3.4.1)$$

donde la doble sumatoria es igual a cero por la antisimetría del gradiente del kernel.

En segundo lugar tenemos, la conservación del momento angular total

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_a \mathbf{r}_a \times m_a \mathbf{v}_a &= \sum_a m_a \left(\mathbf{r}_a \times \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right) \\ &= - \sum_a \sum_b m_a m_b \left(\frac{P_a}{\rho_a^2} + \frac{P_b}{\rho_b^2} \right) \mathbf{r}_a \times \nabla_a W_{ab} = 0 \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

donde $\nabla_a W_{ab} = (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \frac{\sigma}{qh^{d+2}} \omega(q)$. Se obtiene que la doble sumatoria es igual a cero, lo cual se debe a la antisimetría de ésta, puesto que se cumple la propiedad del producto vectorial $(\mathbf{r}_a \times \mathbf{r}_b) = -(\mathbf{r}_b \times \mathbf{r}_a)$.

Por ultimo, para verificar la conservación de la energía, debemos primero encontrar la energía total del sistema, la cual puede ser calculada a partir del hamiltoniano.

$$H = \sum_a \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}_a} - L = \sum_a \left(\frac{1}{2} v_a^2 + v_a \right) \quad (3.4.3)$$

El hamiltoniano, no es otra cosa que la energía total del sistema, entonces se debe obtener la derivada temporal de éste.

$$\frac{dE}{dt} = \sum_a m_a \left(\mathbf{v}_a \cdot \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} + \frac{du_a}{dt} \right) \quad (3.4.4)$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.3.17 y 3.3.15 en la ecuación 3.4.4, se tiene

$$\frac{dE}{dt} = - \sum_a \sum_b m_a m_b \left[\frac{P_a}{\Omega_a \rho_a^2} \mathbf{v}_b \cdot \nabla_a W_{ab}(h_a) + \frac{P_b}{\Omega_b \rho_b^2} \mathbf{v}_a \cdot \nabla_a W_{ab}(h_b) \right] \quad (3.4.5)$$

donde nuevamente, la doble sumatoria es igual a cero por la antisimetría del gradiente del kernel.

3.4.2. Invarianza de Galileo

Otro de los principios que debe cumplir todo sistema físico es el principio de relatividad, el cual nos dice que las leyes de la física son independientes del sistema de referencia, es decir, si dos observadores analizan al sistema desde diferentes puntos de vista observarán los mismos principios físicos. Otra forma de ver esto, es aplicando las transformaciones de Galileo a las ecuaciones que describen un cierto principio físico del sistema, y ver que estas ecuaciones quedan invariantes. Las transformaciones de Galileo no son otra cosa que las expresiones matemáticas que nos dicen como están conectados dos sistemas de referencia inerciales, es decir, cómo se transforman las cantidades físicas que caracterizan al sistema, como el tiempo, la posición, la velocidad. A continuación nos enfocamos entonces en mostrar que las ecuaciones que hemos obtenido son invariantes bajo transformaciones de Galileo. Consideremos dos sistemas de referencia inerciales O y O' , las transformaciones de Galileo que conectan a estos dos sistemas son

$$\begin{aligned} t' &= t \\ \mathbf{r}' &= \mathbf{r} + \mathbf{v}_0 t \\ \mathbf{v}' &= \mathbf{v} + \mathbf{v}_0 \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

donde las cantidades primadas t' , \mathbf{r}' y \mathbf{v}' son las que mide un observador en O' mientras las cantidades no primadas t , \mathbf{r} y \mathbf{v} son las que mide un observador en el sistema O , además v_0 es la velocidad relativa entre los dos sistemas. Aplicamos entonces estas transformaciones a las ecuaciones discretizadas para ver que en efecto cumplen con el principio de relatividad.

Primero hay que observar que en las tres ecuaciones aparece el gradiente del kernel, el cual depende de la diferencia de las posiciones ($\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$). Aplicando las transformaciones a esta cantidad se obtiene

$$(\mathbf{r}'_a - \mathbf{r}'_b) = (\mathbf{r}_a + \mathbf{v}_0 t - \mathbf{r}_b - \mathbf{v}_0 t) = (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \quad (3.4.7)$$

lo cual nos indica que esta cantidad es invariante. Por otro lado, tanto en la ecuación de continuidad como en la ecuación de la energía aparece la cantidad ($\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b$). Aplicando nuevamente las transformaciones se tiene

$$(\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}'_b) = (\mathbf{v}_a + \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_b - \mathbf{v}_0) = (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \quad (3.4.8)$$

lo que no dice que también esta cantidad es invariante bajo transformaciones de Galileo. Por tanto, concluimos que las ecuaciones de Euler en versión discreta son invariantes bajo transformaciones de Galileo, es decir, cumplen el principio de relatividad.

3.5. Implementación de SPH

Una vez estudiado en que consiste el método SPH así como sus propiedades y la forma en que se aplica para discretizar las ecuaciones de la dinámica de fluidos, es momento de describir la forma en que este se implementa. El algoritmo se programó con el lenguaje de programación fortran 90, la razón por la cual se eligió este lenguaje, es que este es el lenguaje por excelencia para el cálculo científico debido a su estructura y eficiencia. En la figura 3.5 se muestra un esquema a grandes rasgos la estructura del algoritmo de SPH que se programó, a continuación se da una descripción de los pasos seguidos.

1. El primer paso consiste en inicializar las condiciones iniciales del sistema, es decir, se debe dar los valores al tiempo inicial para la posición, la velocidad y la energía de cada una de las partículas.
2. El siguiente paso es el cálculo de la distancia de suavizado la cual está dada en términos del número de vecinos tal como se estudió en la sección 3.2.5. Para calcular la distancia de suavizado h lo hacemos usando el método de Newton-Raphson. Manipulando la ecuación 3.3.33 construimos la siguiente función

$$g(h_a) = \rho_a(h_a) - \eta^d \frac{m}{h_a^d} \quad (3.5.1)$$

donde la igualdad se cumple para $g(h_a) = 0$, es decir, se debe encontrar la raíz de la función $g(h_a)$, para lo cual aplicamos el método de Newton-Raphson descrito en apéndice B.

3. Posteriormente se debe calcular el valor del kernel para cada partícula, este proceso se lleva a cabo usando las funciones B-spline descritas en la sección 3.2.2.
4. Se actualizan tanto la densidad como la presión usando las expresiones 3.3.30 y 3.3.31.
5. Se calcula el gradiente del kernel usando la expresión 3.2.11.
6. Una vez teniendo los valores para la densidad, la presión y el gradiente del kernel, se pueden calcular los valores de la aceleración y el cambio de energía usando las ecuaciones de momento y energía discretas.
7. Se actualizan los valores para la posición, velocidad y energía integrando un paso de tiempo el sistema de ecuaciones diferenciales 3.3.29 usando el método de Runge-Kutta para el cual se describe su implementación en el apéndice A.
8. Se calcula el siguiente paso de tiempo, que está dado por el valor del paso de tiempo anterior más un incremento $\Delta t \ll 1$, entre más pequeño sea el valor de Δt se obtendrá una mayor precisión en la integración temporal de las ecuaciones, pero al mismo tiempo se requerirá mayor costo computacional.
9. El siguiente paso es verificar si se cumple el criterio de parada del algoritmo. El criterio que se usó fue el de establecer un tiempo final de parada, es decir, un tiempo hasta el cual se va a evolucionar el sistema a partir del tiempo inicial. Si el criterio de parada no se cumple el algoritmo se iterará nuevamente a partir del paso 2.

Para simular la evolución temporal de un fluido, este algoritmo se debe iterar por varios pasos de tiempo discretos. Además, antes de empezar a iterar el algoritmo se deben especificar los valores de algunos parámetros como el tiempo final de evolución, el valor del paso de tiempo Δt , el grado del kernel a utilizar, el valor de la tolerancia del método de Newton-Raphson y el parámetro η que controla el valor de la distancia de suavizado (ver ecuación 3.3.33). Por otro lado, también se deben aplicar las condiciones de frontera en cada paso de tiempo, pero estas dependen de cada problema que se considere por lo cual no es posible crear un algoritmo genérico para ello. En el capítulo siguiente se describe como se implementaron las condiciones de frontera para cada problema que se analizó.

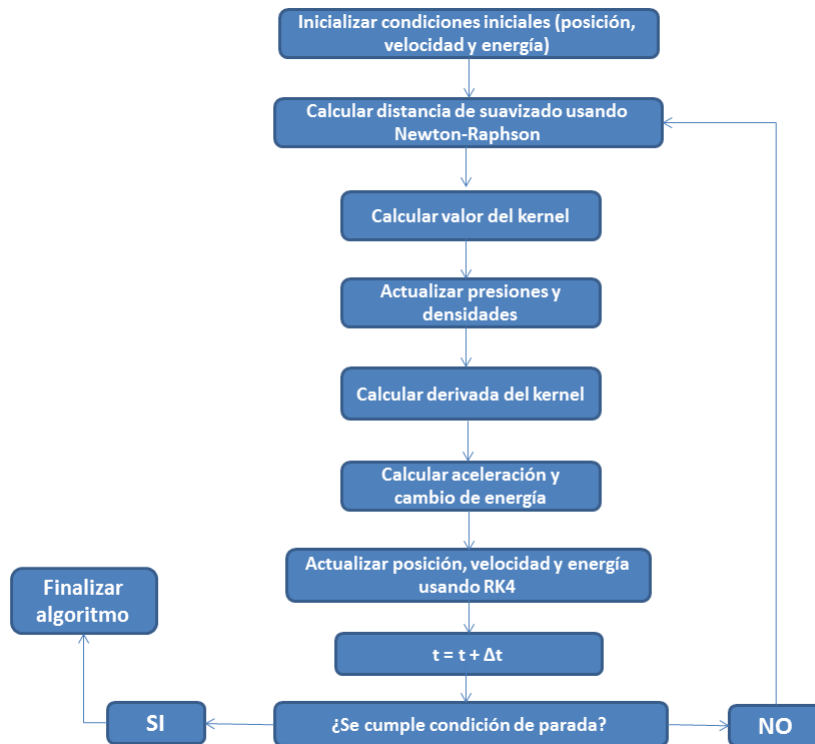


Figura 3.5: En este esquema se puede apreciar una descripción gráfica de los pasos que sigue el método SPH para el cálculo de soluciones de las ecuaciones de Euler y la simulación de fluidos.

Capítulo 4

Aplicaciones y Resultados

Llegados a este punto, es momento de utilizar el código SPH desarrollado en la solución de algunos casos particulares, tanto para validar el algoritmo como para analizar la física de los diferentes problemas. A continuación se discuten los resultados de dos casos analizados, un fluido en una caja bidimensional con condiciones de frontera periódicas y un tubo de choque en dos dimensiones.

4.1. Fluido en una caja bidimensional

El primer problema implementado del método SPH trata de la evolución de un fluido en una caja bidimensional, la cual tiene condiciones de frontera periódicas, es decir, las fronteras están conectadas entre sí. El comportamiento que tiene el fluido es como si éste estuviera libre, pues en realidad no existen fronteras físicas con las cuales haya interacción. La caja está dada en el dominio $[0, 1] \times [0, 1]$ en el plano cartesiano. Se realizaron varias pruebas con diferente número de partículas y con diferentes configuraciones iniciales. Los resultados de estas pruebas se discuten más adelante. Por lo pronto pasemos a describir en qué consisten las condiciones de frontera periódicas que se han mencionado.

4.1.1. Condiciones de frontera periódicas

Existen dos cuestiones a discutir sobre las condiciones de frontera periódicas, la primera de ellas es el movimiento de las partículas sobre el dominio de

la caja, y la segunda es la forma en que se calcula el kernel para las partículas que se encuentran muy cerca de las fronteras de la caja a una distancia menor que el radio del soporte del kernel. Como ya se mencionó, cuando hablamos de condiciones de frontera periódicas nos referimos a que las fronteras o lados de la caja están conectados entre sí. La forma en que éstas se conectan es, cada lado con su lado opuesto y cada vértice también con su opuesto. Es decir, si una partícula va a salir por uno de los lados de la caja, entrará por el lado opuesto de esta. De igual forma para una partícula que está muy cerca de un lado de la caja a una distancia menor que el radio de soporte del kernel, éste se calcula sobre las partículas que están en la vecindad del lado opuesto de la caja. El movimiento de las partículas en este tipo de situación, equivale al movimiento sobre la superficie de un toro en 3D.

4.1.2. Partículas uniformemente distribuidas

Consideremos una configuración donde las partículas que conforman al fluido están uniformemente distribuidas en el dominio de la caja. Lo que se espera para tal configuración es que las partículas permanezcan uniformemente distribuidas al hacer la evolución temporal del sistema, es decir, si todas las partículas tienen velocidad inicial cero, permanecerán en reposo a lo largo de la evolución temporal. Se realizaron pruebas con diferentes números de partículas las cuales se distribuyeron uniformemente en un arreglo cuadrado, con condiciones iniciales $v(0) = 0$ y $u(0) = 0,05$. A todas las partículas se les dio masa $m = 0,1$. En la figura 4.1 se muestran los resultados obtenidos para el cálculo de la distancia de suavizado h y la densidad ρ para la configuración de 100 partículas con cada uno de los kernels. Como se puede observar la distancia de suavizado calculada es la misma para todas las partículas, esto se debe precisamente a la distribución uniforme de estas. Por otro lado, observamos también que la densidad calculada es igual para todas las partículas, al igual que en el caso anterior esto es de esperarse debido a la distribución uniforme de las partículas. Además tomando en cuenta que todas las partículas tienen masa $m = 0,1$ y que la caja tiene área unitaria, la densidad promedio debe ser igual a 10 unidades, con este dato podemos verificar y comparar la precisión que se tiene para cada kernel, y en efecto si se observa la gráfica de la densidad es fácil darse cuenta que a mayor grado del kernel se tiene una mejor precisión. De igual forma en la figura 4.2 se muestran los resultados del cálculo de la distancia de suavizado y la densidad para una configuración ordenada de 256 partículas, en este caso la

densidad promedio es igual a 2,56 unidades por lo cual podemos corroborar nuevamente que a mayor grado del kernel se tiene mayor precisión. Por otro lado, si se comparan los valores de la distancia de suavizado, observamos que esta es menor para la configuración de 256 partículas, lo cual nos permite verificar que a medida que aumentemos el número de partículas obtendremos una mayor precisión numérica en la evolución del fluido.

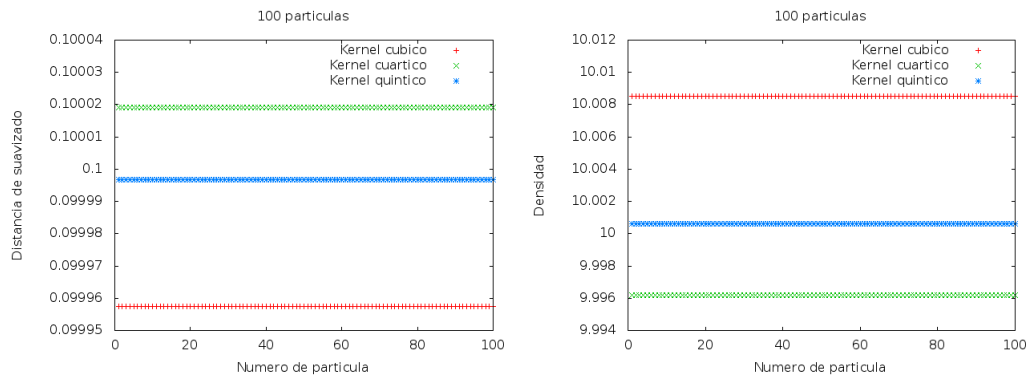


Figura 4.1: Distancia de suavizado y densidad para una configuración de 100 partículas distribuidas uniformemente

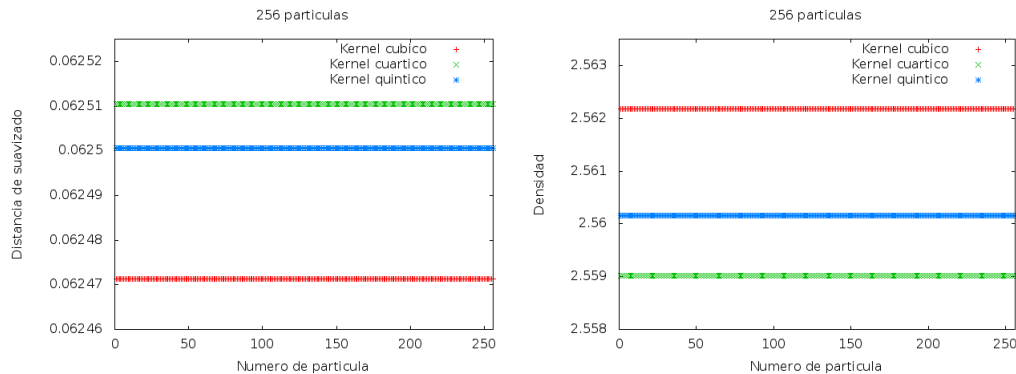


Figura 4.2: Distancia de suavizado y densidad para una configuración de 256 partículas distribuidas uniformemente

En la figura 4.3 se muestran los resultados obtenidos para las componentes de la velocidad al tiempo $t = 30$ segundos, físicamente se espera que esta velocidad sea igual a cero. En las gráficas observamos valores muy pequeños

del orden de 10^{-11} para 100 partícula y 10^{-21} para 256 patículas, el obtener estos valores se debe precisamente a errores numéricos los cuales son prácticamente despreciables pues estos no afectan de manera notoria la distribución de las partículas. En la figura 4.4 se muestran las posiciones de las partículas al tiempo inicial $t = 0$ y al tiempo $t = 30$ segundos, como se puede observar estas permanecen iguales a lo largo de la evolución temporal.

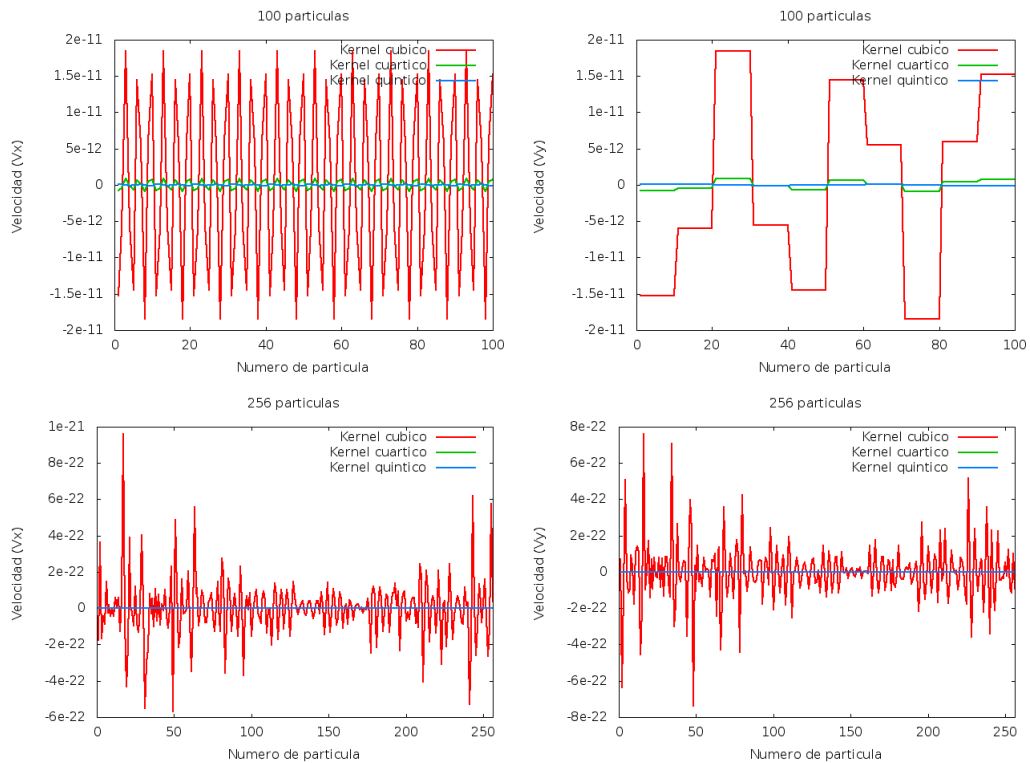


Figura 4.3: En la parte superior se muestran los valores de las componentes de la velocidad para 100 partículas y en la parte inferior para 256 partículas

4.1.3. Distribución uniforme con una partícula fuera de equilibrio

De la misma forma que en el caso anterior, se dispone una configuración inicial de partículas uniformemente distribuidas, pero con una de ellas fuera de equilibrio, es decir, se le aplica un pequeño desplazamiento que la saca de

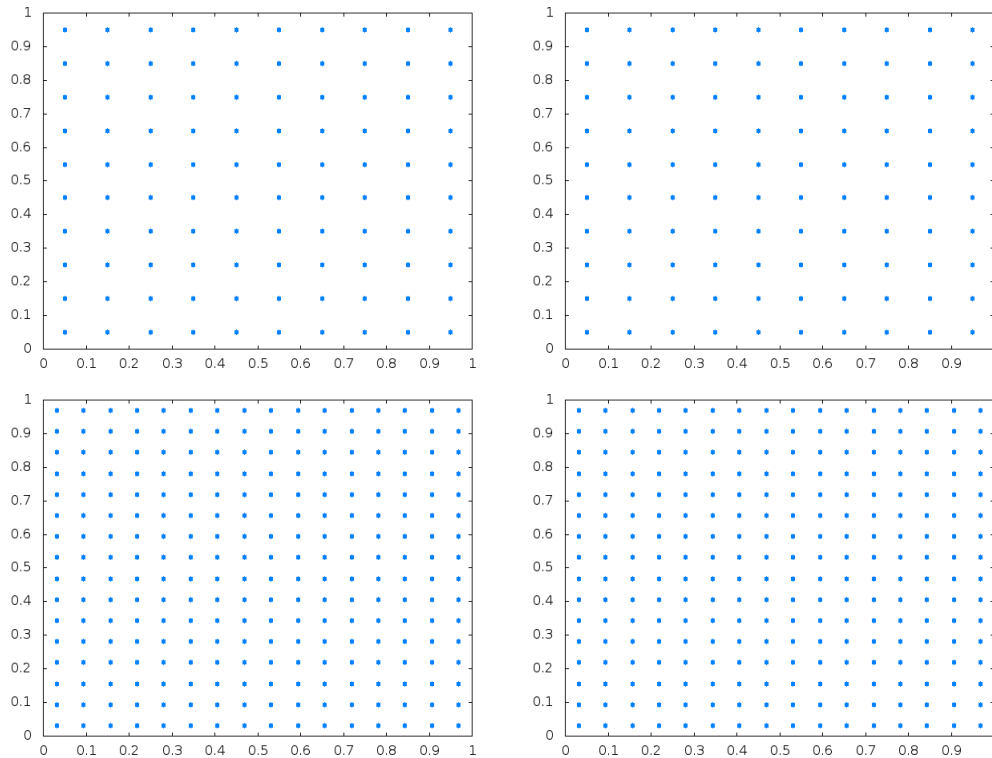


Figura 4.4: Del lado izquierdo se muestran las posiciones de las partículas al tiempo inicial, y del lado derecho al tiempo $t = 30$ segundos, para el caso en que todas las partículas se encuentran inicialmente en una distribución uniforme dentro del dominio de la caja.

su posición de equilibrio. En la figura 4.5 se muestran las posiciones de las partículas a diferentes tiempos de la evolución del fluido, lo que observamos es que a medida que corre el tiempo la configuración de las partículas se vuelve cada vez más desordenada, de tal forma que al tiempo $t = 12$ segundos la configuración de partículas es completamente desordenada. Lo interesante es que esto ocurrió solo por el hecho de sacar una partícula de equilibrio, esto nos muestra el efecto de repulsión que experimentan las partículas entre sí. Al momento que se saca una partícula de su posición de equilibrio se provoca que tanto esta como sus partículas vecinas experimenten una fuerza que hace que estas se empiecen a mover y se rompa la configuración de equilibrio de todo el sistema. Es interesante también analizar el comportamiento de las

demás variables, en la figura 5.6 se observan las gráficas donde se muestra la evolución de estas variables a lo largo del tiempo, para $t = 0, 8$ y 12 segundos respectivamente. Como podemos observar en estas gráficas el valor de las variables al tiempo $t = 0$ es uniforme para todas las partículas, pero a medida que este avanza y que la configuración de partículas se vuelve más desordenada los valores para la distancia de suavizado, la densidad, la presión y la energía, también se vuelven menos uniformes, es decir, la diferencia entre los valores máximos y mínimos es mayor. Además se observa también que tanto la energía como la presión empiezan a decrecer, si comparamos los valores de la energía y la presión al tiempo $t = 12$ segundos con los tiempos $t = 0$ y $t = 8$ segundos se ve claramente como la mayoría de las partículas tienen valores menores. Por otro lado al analizar los valores tanto para la velocidad como para la aceleración, se ve como estos valores crecen a medida que las partículas se desordenan, esto se debe precisamente a que, al estar en una configuración de desorden la fuerza de interacción entre las partículas es mayor que cuando estas están distribuidas de manera uniforme. Algo que sería interesante es dejar evolucionar el sistema sistema por un tiempo mayor ver si este en algún momento tiende a estabilizarse, que es lo que se espera físicamente, este caso se analiza en el siguiente apartado.

4.1.4. Partículas distribuidas aleatoriamente

Ahora toca el turno de analizar el comportamiento del sistema con una configuración inicial generada de manera aleatoria, es decir, una configuración donde las partículas que conforman al fluido están desordenadas al tiempo inicial, esto es equivalente físicamente a tener un fluido para el cual la densidad no es uniforme, es decir, existe una diferencia de densidad con respecto a las diferentes regiones del fluido. Esta distribución consta de un total de 500 partículas las cuales evolucionan con la influencia del kernel de quinto orden el cual brinda una buena precisión y estabilidad en los cálculos numéricos. Las condiciones iniciales para la velocidad y la energía están dadas por $\mathbf{v}(0) = 0$ y $u(0) = 0,05$ respectivamente.

En la figura 4.7 se muestran las posiciones de las partículas en diferentes instantes de tiempo, como se puede apreciar no hay gran diferencia en cuanto al orden en que se encuentran dichas partículas, pues al parecer siguen estando posiciones desordenadas, sin embargo si analizamos el comportamiento de las demás variables en las gráficas mostradas en la figura 4.8, podemos concluir que el sistema tiende a un estado de equilibrio, pues tanto la energía, como

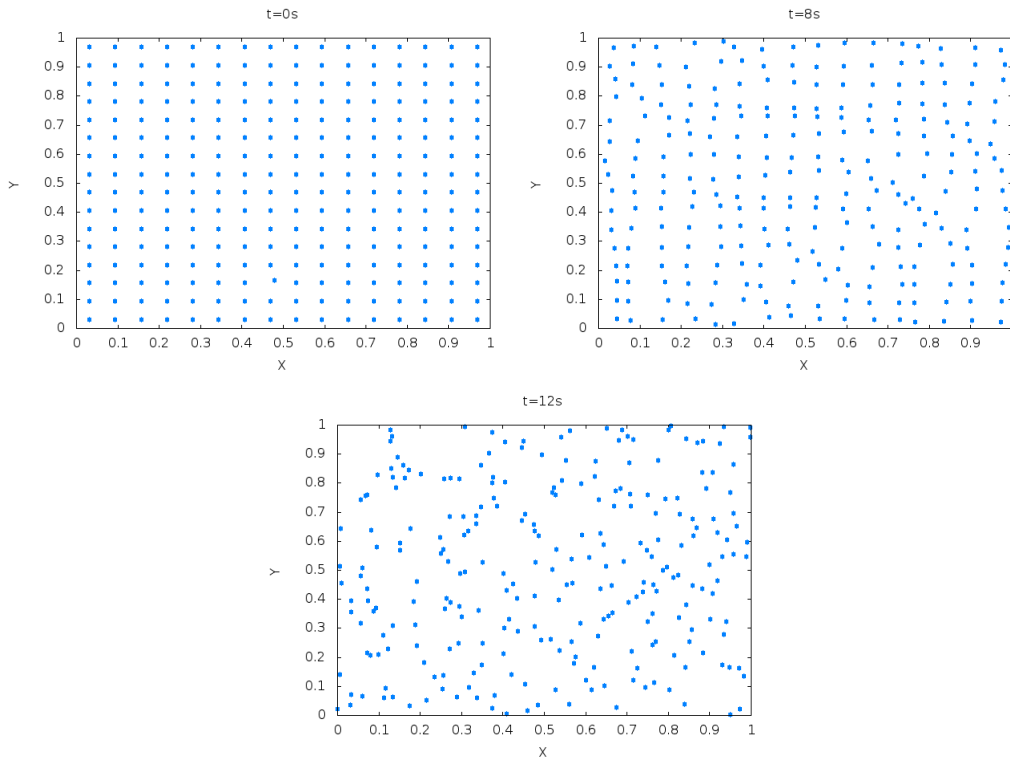


Figura 4.5: Distribución de las partículas a los tiempos de 0, 8 y 12 segundos respectivamente para la configuración inicial ordenada con una partícula fuera del equilibrio.

la presión y la aceleración disminuyen al paso del tiempo, esto es equivalente físicamente a decir que la resultante de la fuerza de interacción entre las partículas es cada vez menor, es decir, las partículas interaccionan de tal forma que el sistema tiende a equilibrarse. Por otro lado si se observan las gráficas de la densidad y las componentes de la velocidad, nos damos cuenta que su comportamiento no es para nada uniforme, sino que hay una gran variación en cuanto a sus valores, esto explica el hecho de que las posiciones de las partículas permanezcan en desorden, pues aunque esto suceda, su movimiento tiende a ser cada vez más ordenado debido a la disminución en los valores de las componentes de la aceleración. Además se observa también que los valores de la velocidad crecieron con el tiempo, pero esta no puede crecer indefinidamente debido a la disminución de la aceleración, es decir,

llegará un momento en que esta velocidad permanezca constante para cada una de las partículas. Este hecho de nuevo nos permite respaldar la idea de que el sistema tiende a un estado de equilibrio, pues aunque la velocidad crece al principio, esta lo hace cada vez menos hasta que deja de cambiar y permanece constante, esto se debe a que la interacción entre las partículas se da de tal forma que las fuerzas que ejercen entre ellas se equilibran.

4.2. Tubo de choque bidimensional

El segundo problema implementado es un tubo de choque en dos dimensiones, el cual consiste en un tubo donde se tiene un fluido comprimido en una dirección al tiempo inicial, este tubo está dado en el rectángulo $[0,5] \times [0,1]$ en el plano cartesiano. Al tiempo inicial se tiene la mitad de las partículas distribuidas uniformemente en el dominio $[0,1] \times [0,1]$, y la otra mitad en el resto del tubo también uniformemente distribuidas. Esta prueba se realizó con un total de 512 partículas y usando el kernel de quinto orden. Las condiciones iniciales para la velocidad y la energía están dadas por $v(0) = 0$ y $u(0) = 0,05$ respectivamente.

4.2.1. Condiciones de frontera

Al contrario del caso anterior donde se analizó el comportamiento de un fluido en una caja con condiciones de frontera periódicas, en este caso se tienen fronteras físicas con las cuales interactúa el fluido, estas son las fronteras que limitan al tubo, es necesario entonces analizar el comportamiento de las partículas cuando estas interactúan con las fronteras del tubo, para poder implementar las condiciones de frontera. Existen dos situaciones a considerar al momento de analizar el comportamiento de las partículas en la frontera, una de estas es el movimiento de las partículas y la otra el cálculo del kernel. En cuanto al movimiento de las partículas, estas interactúan con las paredes del tubo de tal forma que las paredes actúan como un espejo, es decir, si una partícula choca con una pared esta rebotará cambiando su dirección de movimiento, es decir, cambiará la dirección de su velocidad. Por otro lado, para el cálculo del valor kernel de una partícula que se encuentra en la vecindad de alguna de las paredes del tubo a una distancia menor que el radio de soporte del kernel, se suponen partículas ficticias las cuales actúan como las paredes físicas ejerciendo una fuerza de repulsión sobre las partículas que

se mueven dentro del tubo de choque.

4.2.2. Discusión de resultados

Ahora pasemos a discutir los resultados obtenidos en la simulación del fluido en el tubo de choque. Al tener al fluido comprimido en una dirección tendremos que la densidad es mayor en esta región con respecto al resto del tubo, por lo cual se espera que el fluido se empiece a mover en la otra dirección por la diferencia de presiones. En la figura 4.9 se muestran las posiciones de las partículas que conforman al fluido en diferentes instantes de tiempo, como se puede observar las partículas se empiezan a mover en la dirección x del tubo, además se pierde la configuración ordenada que se tenía al inicio a medida que pasa el tiempo. Al tiempo $t = 12$ segundos podemos darnos cuenta que las partículas están más agrupadas ahora en el extremo contrario del tubo con respecto al tiempo inicial. Ya para el tiempo $t = 20$ segundos se tiene una distribución uniforme de partículas en todas las regiones del tubo aunque estas no estén ordenadas.

En la figura 4.10 se muestra la evolución de las variables físicas que describen al sistema para diferentes instantes de tiempo. Como podemos observar los valores de la densidad a lo largo de la evolución temporal no son uniformes, y esto al igual que en problema de la caja bidimensional es debido a la existencia de regiones agrupadas o escasas de vecinos. Por otro lado podemos observar como la presión, la energía y la aceleración disminuyen en el tiempo de manera que podemos afirmar que la interacción entre las partículas ya no es tan fuerte a medida que avanza el tiempo, o lo que es lo mismo, decimos que el sistema se estabiliza o tiende a su configuración de equilibrio, además si observamos las gráficas para las componentes de la velocidad vemos que esta crece en el tiempo, pero debe llegar un punto en el cual esta deja de crecer, debido a que la aceleración decrece muy rápido, por tanto la velocidad en algún momento permanecerá constante, lo cual es otro factor que indica que el sistema se estabiliza conforme transcurre el tiempo.

Como nos hemos podido dar cuenta en los problemas analizados, los dos sistemas tienden a equilibrarse dinámicamente lo cual nos da un indicio de que el algoritmo desarrollado funciona correctamente, pues este es el comportamiento físico esperado para tales sistemas. Por otro lado, cabe señalar que estos sistemas analizados, son sistemas en dos dimensiones, pero el algoritmo fue implementado para poder resolver problemas incluso en tres dimensiones,

pues la dimensión es solo un parametro mas dentro del código desarrollado en el presente trabajo de tesis. Esto nos deja abierta la posibilidad de aplicar este algoritmo a mas variedad de problemas dentro de la dinámica de fluidos.

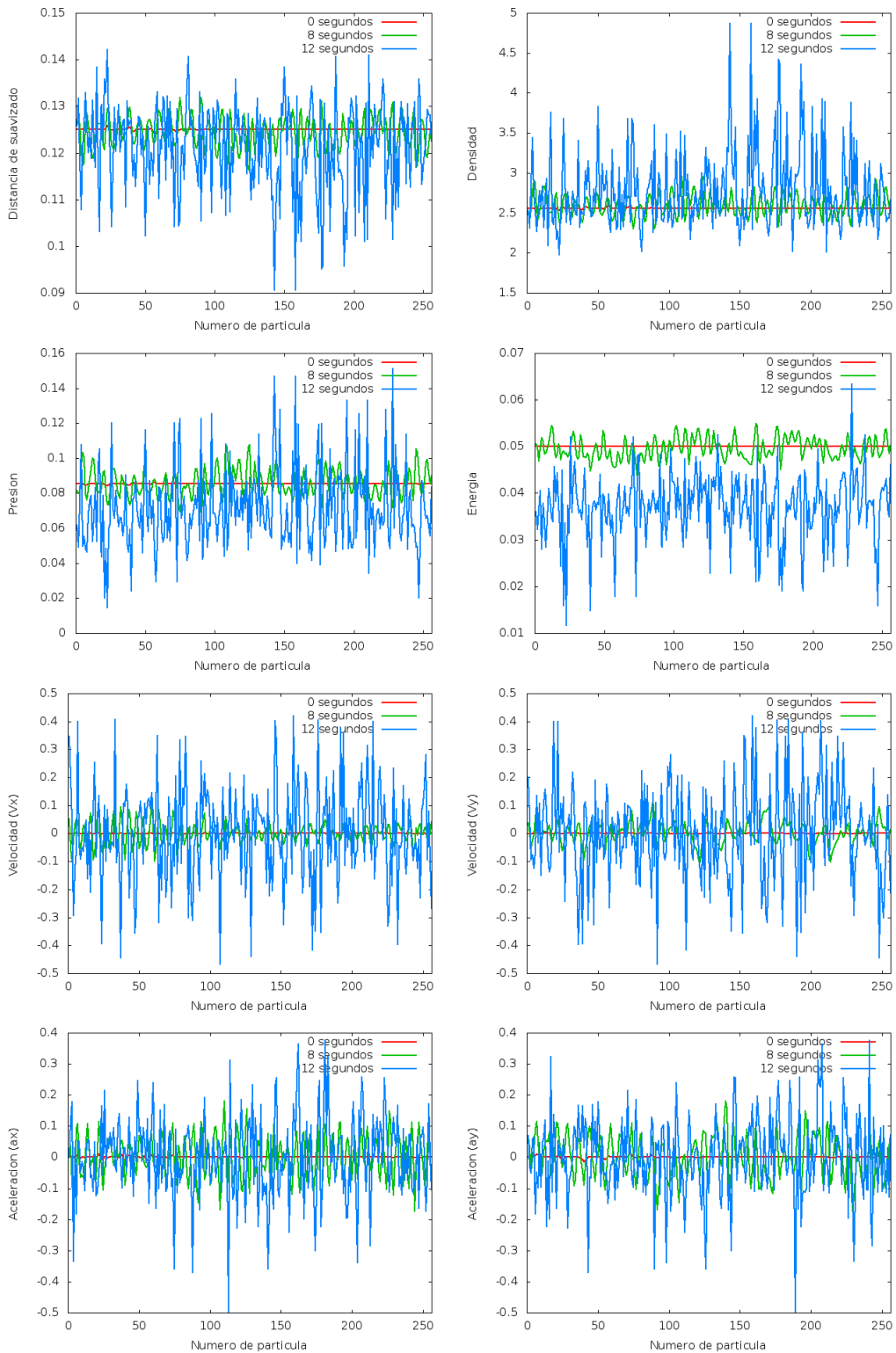


Figura 4.6: En las gráficas se muestran los resultados obtenidos para las variables en diferentes instantes de tiempo. En ellas se observa que el sistema tiende irse a un equilibrio dinámico.

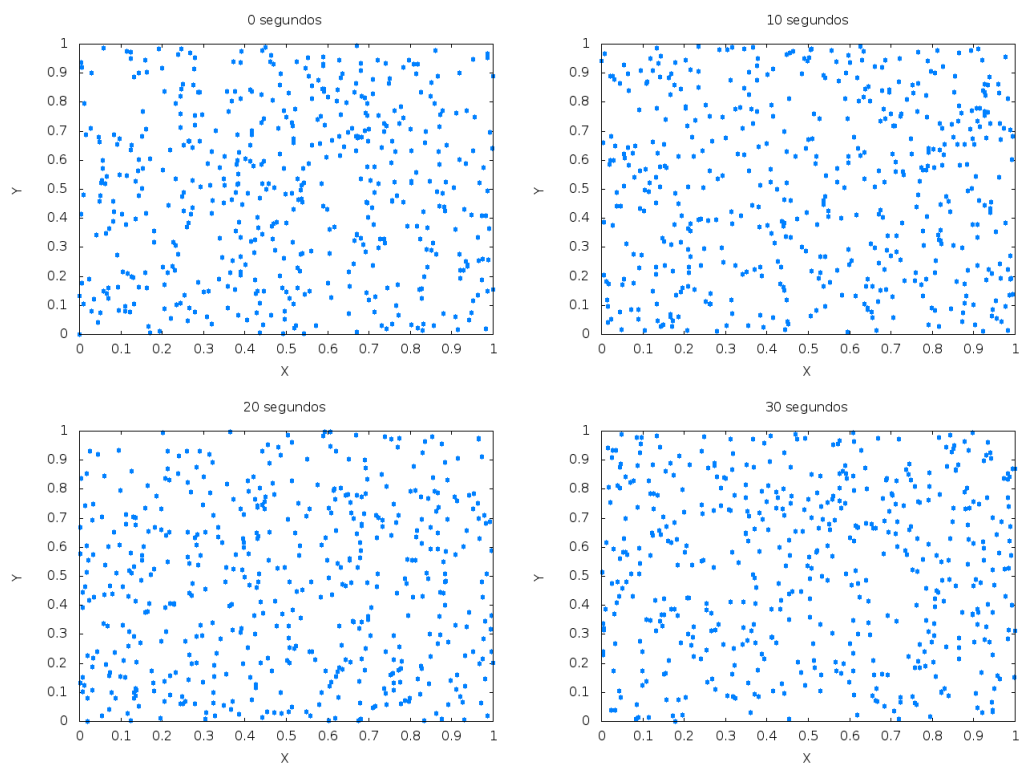


Figura 4.7: En las gráficas se muestran la posiciones de las partículas en los tiempos $t = 0$, $t = 10$, $t = 20$ y $t = 30$ segundos respectivamente, para el caso en que las partículas están en una distribución desordenada al tiempo inicial.

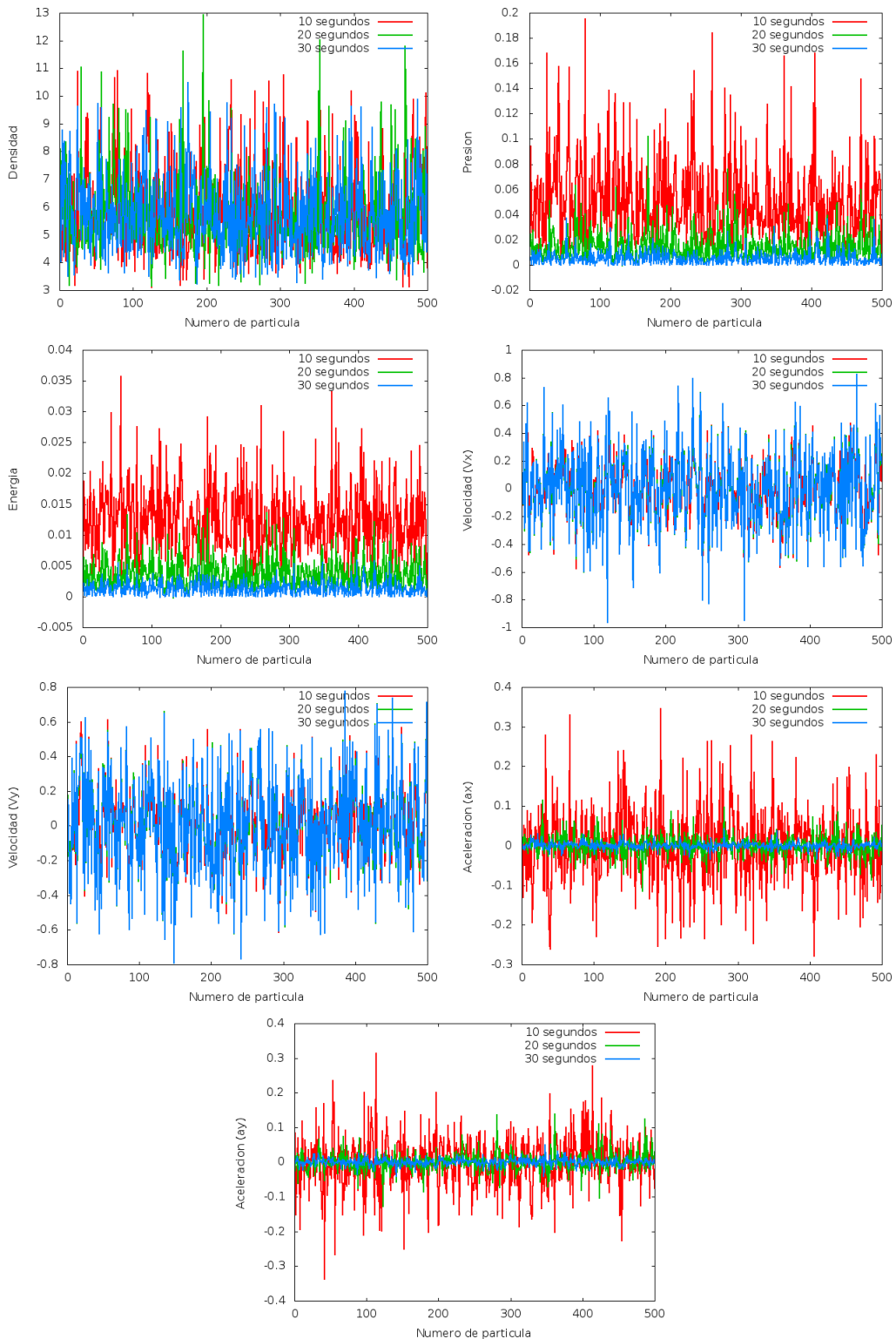


Figura 4.8: En las gráficas se comparan los valores de las variables en diferentes instantes de tiempo. Se observa que el sistema tiende a equilibrarse dinámicamente a medida que transcurre el tiempo.

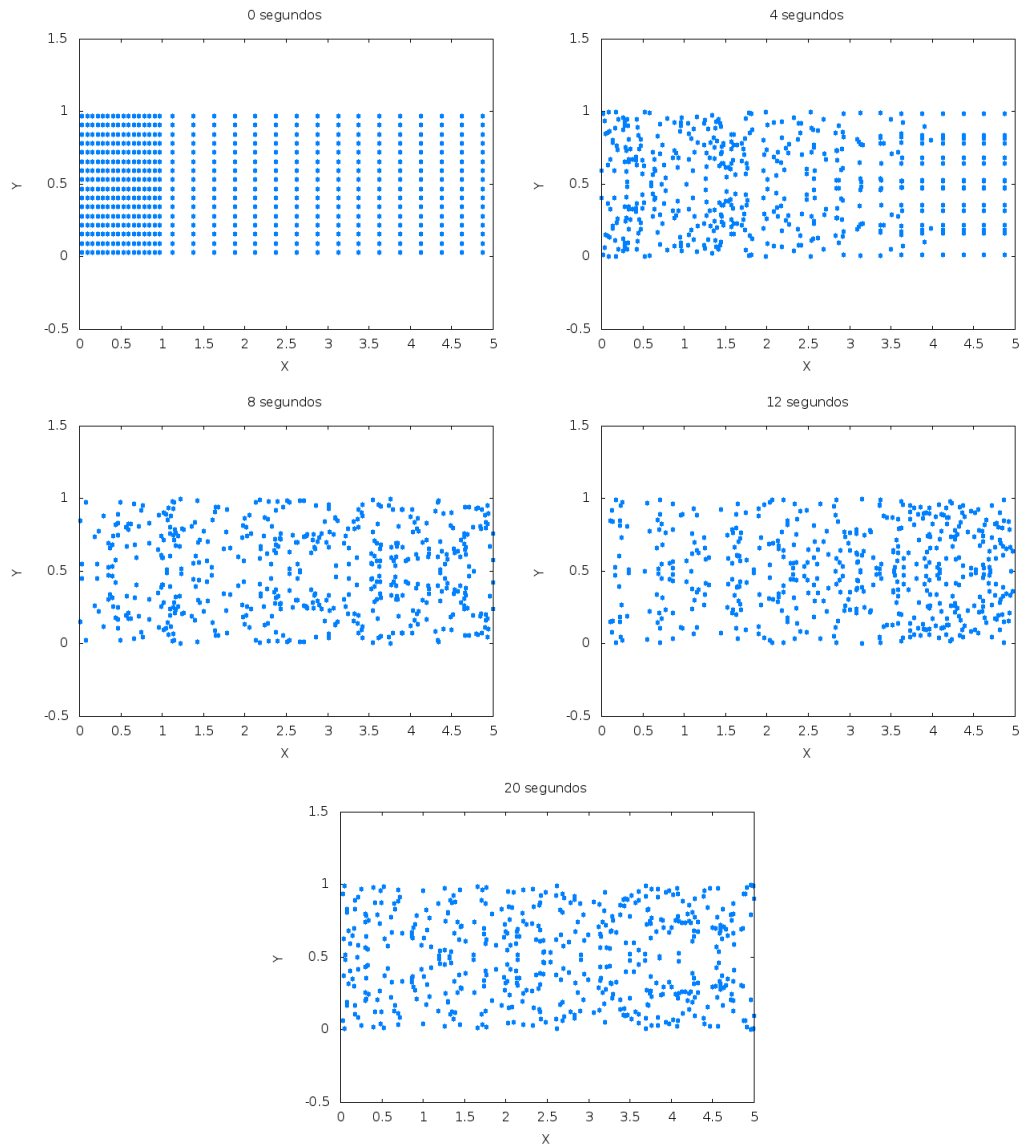


Figura 4.9: En las imágenes se observan las posiciones de las partículas a diferentes tiempos, para el caso del tubo de choque. Se puede apreciar que la partículas se mueven de la parte mas densa a la menos densa, hasta distribuirse de manera uniforme a lo largo del tubo de choque.

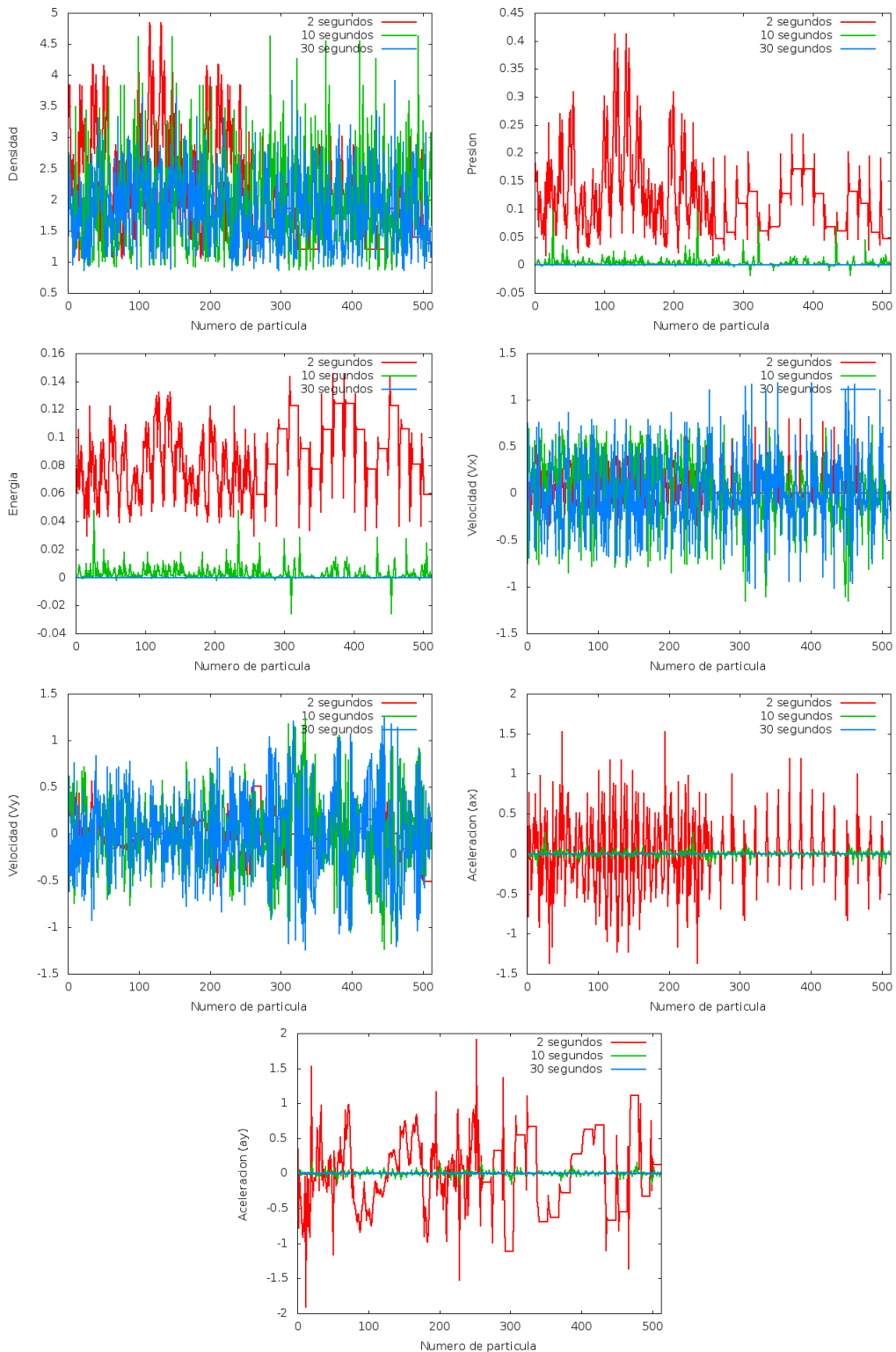


Figura 4.10: En las gráficas se comparan los valores de las variables en diferentes instantes de tiempo, en las que se puede observar que el sistema se equilibra al transcurrir el tiempo pues los valores de la energía, la presión y la aceleración decrecen rápidamente en el tiempo.

Capítulo 5

Conclusiones

En el presente trabajo de tesis se estudió el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (Smoothed Particle Hydrodynamics SPH) como una técnica numérica aplicada a la simulación de fluidos por medio de la resolución de las ecuaciones de Euler que es el modelo físico que describe la dinámica y comportamiento de los fluidos ideales. En base a esto se desarrolló un código numérico, el cual nos permite simular fluidos ideales, este código se utilizó en la solución de algunos problemas, la evolución de un fluido en una caja bidimensional con condiciones de frontera periódicas y un tubo de choque en 2D. Lo que pudimos concluir de la realización de estas pruebas es que el algoritmo desarrollado funciona correctamente y además pudimos corroborar la eficiencia del método SPH en la simulación de fluidos pues al evolucionar los sistemas pudimos observar como estos tienden a irse a su estado de equilibrio conforme transcurre el tiempo, que es lo que se esperaba físicamente, es decir, si comparamos los resultados obtenidos en las simulaciones con la física que describe a estos sistemas concluimos que estos resultados son consistentes.

El método SPH por su enfoque lagrangiano, es una técnica numérica muy eficiente en la simulación de fluidos y medios continuos, en la presente tesis lo hemos empleado en la simulación de fluidos ideales descritos por las ecuaciones de Euler, aunque este puede ser fácilmente extendido a otros problemas que involucren otras propiedades físicas. Por otro lado, aunque SPH tiene la gran ventaja de ser un método muy eficiente en las simulaciones de fluidos como ya se ha discutido, al realizar las pruebas del algoritmo implementado, rápidamente nos dimos cuenta de que este requiere un gran

costo en términos computacionales, lo cual podría verse como una desventaja práctica frente a otras técnicas numéricas.

5.1. Trabajo futuro

Aunque ya se tiene implementado un algoritmo SPH capaz de resolver problemas de dinámica de fluidos de manera eficiente, aun podemos hacer algunas mejoras tanto para describir problemas que sean físicamente más complicados y requieran extender el modelo de las ecuaciones de Euler a otros modelos mas complejos, como para mejorar la eficiencia computacional del algoritmo. Centrandonos en lo primero, y con vista hacia el futuro, se planea incorporar al algoritmo ya desarrollado, un modelo físico de dinámica de fluidos que incorpore campos magnéticos, es decir, se pretende extender el presente proyecto a desarrollar un código numérico capaz de resolver problemas de magnetohidrodinámica, todo esto con el objetivo de aplicar estas técnicas en problemas astrofísicos. Por otro lado, centrandonos en el problema de la eficiencia computacional del algoritmo, se requerira el estudio de técnicas computacionales que permitan mejorar los algoritmos, una de estas técnicas es el computo paralelo, el cual consiste en distribuir el trabajo computacional entre varios procesadores, trabajando en paralelo, esto nos permitira reducir el tiempo de ejecución de las simulaciones.

Apéndice A

Anexo I: Método de Runge-Kutta

El método de Runge-Kutta es un método para obtener soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales ordinarias, concretamente, de problemas con valores iniciales. Este es un método basado en la serie de Taylor y es uno de los más utilizados en la práctica por su fácil implementación, además de que evita uno de los inconvenientes de los métodos basados en la serie de Taylor, a saber, el cálculo de derivadas.

A continuación nos ocupamos en dar la idea de como se derivan las ecuaciones del método de Runge-Kutta, primero para una ecuación diferencial de primer orden y posteriormente se extiende a sistemas de ecuaciones diferenciales de orden n . Se deducen las ecuaciones de Runge-Kutta a segundo orden para introducir la idea de como se obtiene dichas ecuaciones, y se presentan las ecuaciones a cuarto orden, las cuales fueron utilizadas para resolver las ecuaciones de SPH, no nos ocuparemos aquí de deducir estas ecuaciones pues no es el objetivo de éste trabajo.

El problema que se desea resolver en primer lugar, es el de aproximar la solución numérica de un problema de valor inicial, dado por la siguiente ecuación diferencial de primer orden y una condición inicial

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = f(x, t) \\ x(t_0) = x_0 \end{array} \right. \quad (\text{A.0.1})$$

Partimos de la serie de Taylor truncada a orden Δt^2

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \frac{dx(t)}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} + \Theta(\Delta t^3) \quad (\text{A.0.2})$$

Apartir la ecuación A.0.1 se pueden calcular las derivadas de la función $x(t)$

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \quad (\text{A.0.3})$$

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + f(t, x) \frac{\partial f(t, x)}{\partial x}$$

Sustituyendo estas derivadas en la serie se tiene

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= x(t) + \Delta t f(t, x) + \frac{\Delta t^2}{2} \left[\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + f(t, x) \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right] + \Theta(\Delta t^3) \\ &= x(t) + \frac{\Delta t}{2} f(t, x) + \frac{\Delta t}{2} \left[f(t, x) + \Delta t \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + \Delta t f(t, x) \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right] + \Theta(\Delta t^3) \end{aligned} \quad (\text{A.0.4})$$

Consideremos el siguiente desarrollo en serie de la función $f(t, x)$

$$f(t + \Delta t, x + \Delta t f(t, x)) = f(t, x) + \Delta t \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + \Delta t f(t, x) \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} + \Theta(\Delta t^2) \quad (\text{A.0.5})$$

Sustituyendo en la ecuación anterior y despreciando los terminos de segundo orden se tiene

$$x(t + \Delta t) \approx x(t) + \frac{\Delta t}{2} f(t, x) + \frac{\Delta t}{2} f(t + \Delta t, x + \Delta t f(t, x)) \quad (\text{A.0.6})$$

Introduciendo los siguientes coeficientes

$$k_1 = f(t, x) \quad (\text{A.0.7})$$

$$k_2 = f(t + \Delta t, x + \Delta t k_1)$$

podemos reescribir la expresión anterior como sigue

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{\Delta t}{2}(k_1 + k_2) \quad (\text{A.0.8})$$

que da lugar al método de Runge-Kutta de segundo orden, el cual nos permite aproximar soluciones numéricas de problemas de valores iniciales. Como se puede observar, el valor de la solución en un paso de tiempo esta dado por el valor del paso anterior mas dos correcciones k_1 y k_2 , el hecho de que haya dos correcciones es debido a que la aproximación se hizo a segundo orden. De manera similar se puede proceder para obtener la aproximación a cuarto orden, aquí no lo haremos pues no es el objetivo de este trabajo, la intención es sólo dar la idea de como se obtienen las ecuaciones del método y como funcionan. El método de Runge-Kutta a cuarto orden esta dado por

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (\text{A.0.9})$$

donde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t, x) \\ k_2 &= f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, x + \frac{\Delta t}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, x + \frac{\Delta t}{2}k_2\right) \\ k_4 &= f(t + \Delta t, x + \Delta tk_3) \end{aligned} \quad (\text{A.0.10})$$

Notese que ahora se tienen cuatro correcciones y esto es debido al orden cuarto de la aproximación. Este resultado es válido para aproximar soluciones numéricas de ecuaciones de primer orden, pero lo que se requiere para aplicarlo al método SPH es la extensión de este resultado a la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias.

A.1. Sistemas de Ecuaciones Diferenciales

La formula de Runge-Kutta obtenida, permite aproximar soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales de primer orden con una condición inicial. Este resultado es posible extenderlo a sistemas de ecuaciones diferenciales.

La forma general de un sistema de ecuaciones diferenciales de orden n es la siguiente

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_1}{dt} = f_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \frac{dx_2}{dt} = f_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = f_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{array} \right. \quad (\text{A.1.1})$$

donde se debe tener una condición inicial por cada ecuación. Para extender la fórmula de Runge-Kutta a sistemas de ecuaciones diferenciales es necesario introducir la notación vectorial, para lo cual es conveniente escribir el sistema de ecuaciones en forma autónoma, es decir, la función f_i (con $i = 1, \dots, n$) no debe depender de la variable independiente t , para ello introducimos el cambio de variable $x_0 = t$, con lo cual el sistema de ecuaciones se reescribe como

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_0}{dt} = 1 \\ \frac{dx_1}{dt} = f_1(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \frac{dx_2}{dt} = f_2(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = f_n(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{array} \right. \quad (\text{A.1.2})$$

ahora se tiene que las funciones f_i (con $i = 0, \dots, n$) ya no tienen dependencia de t , sino que en vez de eso aparece x_0 , lo cual es conveniente para escribir el sistema en forma vectorial como sigue

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) \\ \mathbf{X}(t_0) = \mathbf{X}_0 \end{array} \right. \quad (\text{A.1.3})$$

donde

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.4})$$

es un vector de \mathbb{R}^{n+1} , y

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_0(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_1(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.5})$$

es una función que va de \mathbb{R}^{n+1} a \mathbb{R}^{n+1} , además $f_0(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) = 1$. De igual forma que se hizo para el caso de una ecuación diferencial de primer orden, se puede obtener la fórmula de Runge-Kutta a cuarto orden para el sistema de ecuaciones partiendo de la serie de Taylor

$$\mathbf{X}(t+\Delta t) = \mathbf{X}(t) + \Delta t \frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} + \Delta t^2 \frac{d^2\mathbf{X}(t)}{dt^2} + \Delta t^3 \frac{d^3\mathbf{X}(t)}{dt^3} + \Delta t^4 \frac{d^4\mathbf{X}(t)}{dt^4} + \Theta(\Delta t^5) \quad (\text{A.1.6})$$

observando la expansión, rápidamente nos damos cuenta que tiene la misma forma que en el caso de primer orden, excepto que aquí tiene un carácter vectorial, es decir, las derivadas se aplican a cada una de las entradas del vector X , por tanto la fórmula de Runge-Kutta tiene la misma forma que en el caso de primer orden, pero con cantidades vectoriales

$$\mathbf{X}(t + \Delta t) = \mathbf{X}(t) + \frac{\Delta t}{6} (\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4) \quad (\text{A.1.7})$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_1 &= \mathbf{F}(\mathbf{X}) \\ \mathbf{K}_2 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_1\right) \\ \mathbf{K}_3 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_2\right) \\ \mathbf{K}_4 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \Delta t \mathbf{K}_3\right) \end{aligned} \quad (\text{A.1.8})$$

La implementación de este algoritmo se realizó con el lenguaje de programación fortran 90, para aplicarlo a las ecuaciones de la dinámica de fluidos discretizadas con el método SPH. Antes de pasar a resolver estas ecuaciones se realizó una prueba de validación, la cual se describe a continuación.

A.2. Validación de Runge-Kutta

Con la finalidad de validar el algoritmo de Runge-Kutta implementado para integrar las ecuaciones de Euler discretizadas con el método SPH, se resolvieron las ecuaciones que describen el comportamiento de un oscilador armónico amortiguado.

Un oscilador armónico consiste en una masa unida a un resorte la cual oscila en torno a su posición de equilibrio, si además esta masa está unida a un amortiguador decimos que el oscilador armónico es amortiguado. El modelo matemático que describe la dinámica de un oscilador armónico amortiguado está dado por la siguiente ecuación diferencial de segundo orden

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{b}{m} \frac{dx}{dt} + \frac{k}{m}x = 0 \quad (\text{A.2.1})$$

donde m es la masa de la partícula, k es la constante del resorte y b es el coeficiente que mide el amortiguamiento. Buscamos soluciones para el caso $b^2 < 4km$, donde el valor de estos parámetros está dado por $b = 0,5$, $m = 1,0$ y $k = 10,0$, en este régimen se tiene un amortiguamiento débil, donde el oscilador, oscila alrededor de su centro de equilibrio con amplitud decreciente. Si imponemos las condiciones iniciales $x(0) = 1$ y $\frac{dx(0)}{dt}$, la solución analítica para este caso está dada por

$$x(t) = e^{-\frac{b}{2m}t} \cos(\omega t) \quad (\text{A.2.2})$$

donde el valor de ω está dado por

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m} - \left(\frac{b}{2m}\right)^2} \quad (\text{A.2.3})$$

Para resolver esta ecuación diferencial numéricamente es necesario convertirla en un sistema de dos ecuaciones de primer orden, esto se logra introduciendo el cambio de variable $y = \frac{dx}{dt}$, de tal manera que nos queda el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = -\frac{k}{m}x - \frac{b}{m}y \end{cases} \quad (\text{A.2.4})$$

con condiciones iniciales $x(0) = 1$ y $y(0) = 0$. Este sistema ya tiene la forma requerida para poder ser resuelto con el método de Runge-Kutta implementado. En la figura A.1 se compara la solución numérica con la solución analítica, como se puede observar se ha obtenido una muy buena aproximación. Esta solución se aproximó usando el parámetro $\Delta t = 0,05$ en el intervalo $[0, 20]$

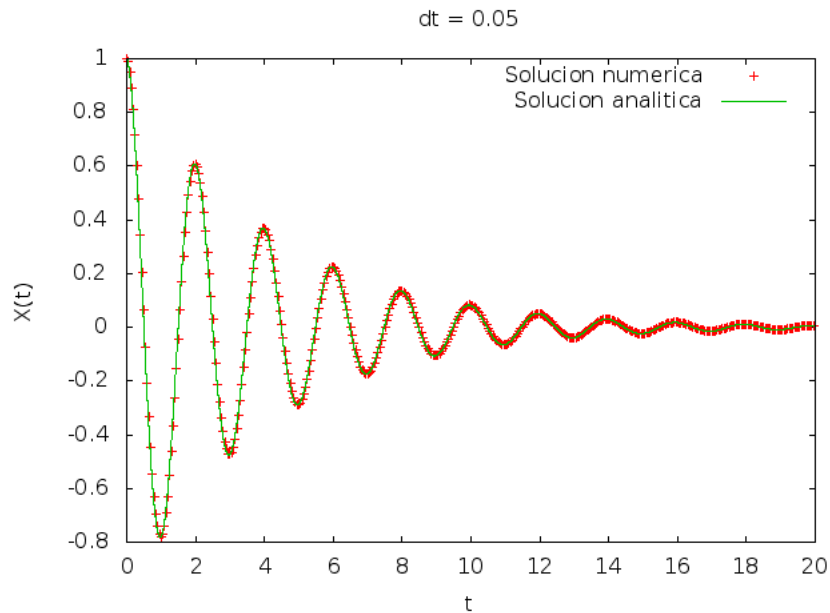


Figura A.1: Comparación entre la solución numérica y la solución analítica

En la figura A.2 se puede apreciar la gráfica de error contra el número de iteraciones, donde se puede observar que a medida que aumenta el número de iteraciones el error disminuye, esto se debe a que, al aumentar el número de iteraciones el parámetro Δt se hace más pequeño, lo cual nos da cada vez un error menor.

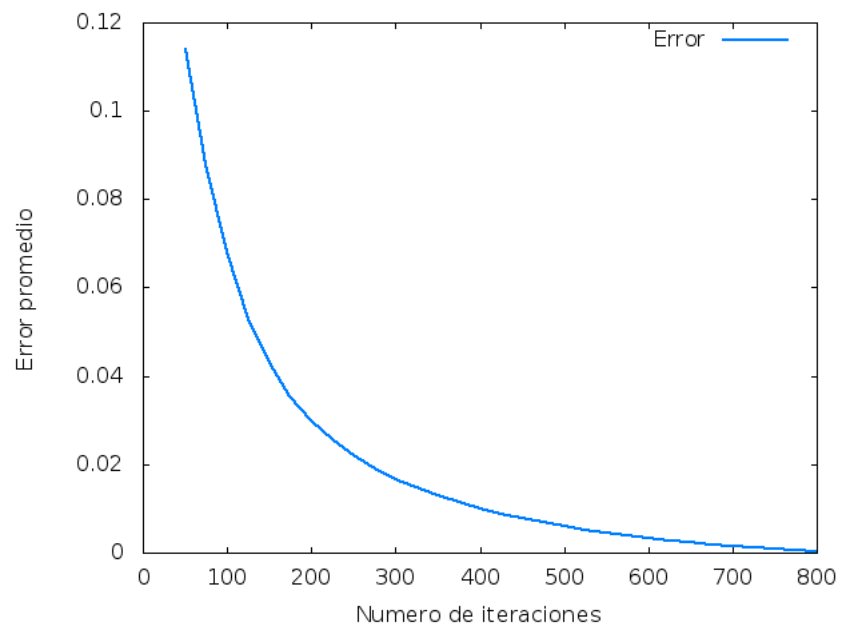


Figura A.2: Gráfica de error contra número de iteraciones en la resolución del sistema de ecuaciones usando Runge-Kutta a cuarto orden

Apéndice B

Anexo II: Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson es un método numérico para buscar raíces de funciones reales de una variable, y es uno de los más eficientes para tal fin, además de que su implementación es muy sencilla. Para introducir en que consiste este método nos basamos en la serie de Taylor, cabe señalar que no nos enfocamos en el rigor matemático sino en obtener la fórmula y explicar en que consiste.

Supongamos que f es una función continuamente diferenciable dos veces en el intervalo $[a, b]$, es decir, $f \in C^2[a, b]$. Sea además x_i una aproximación a la raíz x^* de f tal que $f'(x_i) \neq 0$, tenemos entonces que $|x^* - x_i| \ll 1$. Consideramos la serie de Taylor a primer orden alrededor de x_i

$$f(x) = f(x_i) + (x - x_i)f'(x_i) + \Theta((x - x_i)^2) \quad (\text{B.0.1})$$

despreciando los términos de orden $(x - x_i)^2$ y suponiendo que x_{i+1} es una raíz de $f(x)$, es decir $f(x_{i+1}) = 0$, se tiene

$$x_{i+1} \approx x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}. \quad (\text{B.0.2})$$

Lo que tenemos es una fórmula de recursión, para cual, dado un punto inicial x_0 cercano a la raíz de $f(x)$, obtenemos cada vez una mejor aproximación a la misma. En términos computacionales, no es posible obtener el valor exacto de la raíz, salvo en ciertos casos excepcionales, lo que se hace es definir una tolerancia sobre el valor de f hasta el cual iterar la fórmula

de recursión, es decir, el algoritmo se itera hasta que $|f(x_{i+1})| < \text{tolerancia}$, donde la tolerancia es un número muy pequeño, esto nos garantiza obtener buenas aproximaciones a la raíz de $f(x)$.

B.1. Validación de Newton-Raphson

Se implemento una subrutina en el lenguaje de programación fortran 90, la cual contiene al método de Newton-Raphson, con la finalidad de utilizarla en el cálculo de la distancia de suvizado del método SPH. Antes de utilizar el algoritmo en la implemetación de SPH, se utilizó para resolver un problema sencillo de cálculo de raíces con la finalidad de validar el código. El problema resuelto fue el de encontrar la raíz de la función

$$f(x) = e^x - 1 \quad (\text{B.1.1})$$

la cual tiene una raíz en $x = 0$. La siguiente tabla muestra los resultados de las primeras 10 iteraciones, partiendo de un valor inicial de $x = 5,0$.

No. iteración	Valor de x	Valor de f(x)
1	5.0000000000000000	147.41315910257660
2	4.0067379469990856	53.967271638716113
3	3.0249305909158641	19.592575349796242
4	2.0734917826567454	6.9525432459365115
5	1.1992377194060950	2.3175870264047935
6	0.50066161335099058	0.64981244763369572
7	0.10679111700110960	0.11270180571282506
8	5.50449633221851420E-003	5.51967390767815758E-003
9	1.51219809167149263E-005	1.51220952544495191E-005
10	1.14336572256860209E-010	1.14336540235626671E-010

Como se puede observar, en la decima iteración el valor de x es casi cero, que es el valor de la raíz de la función $f(x)$, con lo cual verificamos que el código del algoritmo funciona de manera correcta.

Bibliografía

- [1] MONAGHAN, J. J., Sep. 1985. *Extrapolating B. Splines for Interpolation. J. Comp. Phys.* 60, 253.
- [2] LUCY, L. B., Dec. 1977. *A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. Astron. J.* 82.
- [3] PRICE, D.J. Dec. 2010 *Smoothed Particle Hydrodynamics and Magnetohydrodynamics. MNRAS*
- [4] LI, S., LIU, W.K., (2004). *Meshfree Particle Methods. Springer*
- [5] BODENHEIMER, P., LAUGHLIN, G.P., (2007). *Numerical Methods in Astrophysics. Taylor and Francis*
- [6] LANDAU, L.D., LIFSHITZ, E.M., (1985). *Fluid Mechanics. Vol. VI.*