Universidad de San Carlos de Guatemala
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Departamento de Física

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LAS ECUACIONES DE EULER DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS MEDIANTE EL ESQUEMA DE ROE

RODRIGO RAFAEL CASTILLO CHONG
Asesorado por DR. ENRIQUE PAZOS ÁVALOS

Guatemala, octubre de 2023

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA

ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LAS ECUACIONES DE EULER DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS MEDIANTE EL ESQUEMA DE ROE

PROTOCOLO DE TRABAJO DE GRADUACIÓN
PRESENTADO A LA JEFATURA DEL
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
POR

RODRIGO RAFAEL CASTILLO CHONG
ASESORADO POR DR. ENRIQUE PAZOS ÁVALOS

GUATEMALA, OCTUBRE DE 2023

ÍNDICE GENERAL

OBJETIVOS

General

Resolver las ecuaciones de Euler de la dinámica de fluidos para un gas ideal, con el método de volúmenes finitos, utilizando el esquema de Roe.

Específicos

1. Describir el método de volúmenes finitos y la motivación de su uso.
2. Describir el funcionamiento del esquema de Roe y su implementación en el lenguaje `C++`.
3. Comparar las soluciones obtenidas a través del programa implementado en `C++` con las soluciones producidas con la librería PyClaw del lenguaje Python.
4. Analizar la diferencia entre simulaciones considerando gases con distintos grados de libertad, aprovechando la solución numérica obtenida a través del programa escrito en `C++`.

INTRODUCCIÓN

El estudio de las ecuaciones diferenciales es de gran importancia en las ciencias físicas, ya que cada teoría física se sustenta en ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento a través del tiempo de cualquier sistema que dicha teoría busque explicar. La motivación del estudio de las ecuaciones diferenciales es encontrar soluciones generales de las mismas, principalmente a través de métodos analíticos que buscan soluciones exactas de las ecuaciones diferenciales. Sin embargo, no todas las ecuaciones diferenciales poseen soluciones exactas, lo cual motiva el estudio y desarrollo de métodos numéricos para la resolución de las mismas.

En el área de estudio del análisis numérico aplicado a ecuaciones diferenciales, existe una gran variedad de métodos y esquemas que se aplican para obtener una solución numérica, esto se debe a la amplia variedad de ecuaciones diferenciales de la física que carecen de solución analítica. Por otro lado, las ecuaciones diferenciales parciales son considerablemente más complejas que las ecuaciones diferenciales ordinarias, por lo que existen métodos más apropiados para resolver ecuaciones diferenciales que involucran funciones de varias variables.

Las ecuaciones de conservación tienen un papel importante en múltiples áreas de la física, de tal manera que se han desarrollado métodos numéricos apropiados para resolver este tipo de ecuaciones diferenciales parciales, siendo el método de volúmenes finitos el más utilizado. Un conjunto en particular de ecuaciones de conservación son las ecuaciones de Euler, que rigen la dinámica de un fluido compresible y no viscoso a partir de su ecuación de estado. Existen pocas soluciones analíticas conocidas a las ecuaciones de Euler, por lo que resolver este conjunto de ecuaciones de conservación con un método numérico apropiado resulta ser un problema interesante.

METODOLOGÍA

Para la realización de este trabajo de graduación se necesitarán estudiar artículos y libros que contengan información relacionada a la física computacional, en especial, la rama de la simulación numérica aplicada a ecuaciones de conservación. El artículo *Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods* de Randall J. LeVeque [3] inspiró el objetivo general y motivó la realización de este trabajo de graduación, por ende, se tomarán las ideas principales expuestas de dicho artículo para dar estructura a cada uno de los capítulos de este documento.

Para estudiar la teoría matemática necesaria para justificar los métodos numéricos utilizados es primordial darle un tratamiento especial a la explicación del problema de Riemann. Para que esta sea una explicación adecuada, se le dará una interpretación a través de una ecuación diferencial más simple, esto es, la ecuación de Burgers. Por tanto, las notas de clase *Notes on Burger's Equation* de Maria Cameron [1], profesora de la universidad de Maryland, serán estudiadas para ejemplificar algunos de los conceptos matemáticos más relevantes de la teoría de las ecuaciones de conservación.

Para conseguir la implementación del método de Roe en la simulación de las Ecuaciones de Euler, se utilizarán dos artículos de Phillip Roe, *Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors and Difference Schemes* [4] y *Characteristic-Based Schemes for the Euler Equations* [5]. Para escribir el código necesario en `C++` se hará uso de las notas de clase de Física Computacional, recibidas en 2022.

La librería *PyClaw* servirá para evaluar las simulaciones conseguidas. Se estudiará la librería en el sitio web de la misma con la documentación que se proporciona y el código fuente [2].

JUSTIFICACIÓN

Este trabajo de investigación busca determinar y estudiar la solución de las ecuaciones de Euler en forma numérica. Como se mencionó previamente, las ecuaciones de Euler tienen pocas soluciones analíticas conocidas y por tanto la solución numérica de estas ecuaciones es una forma alternativa de realizar experimentos con gases ideales. Por esta razón, se incluyó también como objetivo específico la aplicación de la solución numérica con el fin de encontrar las diferencias principales en la evolución temporal de gases con diferentes coeficientes de dilatación adiabática γ, que además, es un valor que está relacionado con los grados de libertad internos del mismo gas ideal.

Se consideró, como objetivo específico, la comparación de la solución obtenida con el programa escrito en `C++` con la solución producida a través de la librería PyClaw. Esta comparación tiene la intención de corroborar el funcionamiento adecuado del programa y determinar algunas ventajas y desventajas de la implementación numérica en el lenguaje `C++`.

Por último, cabe destacar que la aplicación del esquema de Roe y el método de volúmenes finitos en las ecuaciones de Euler es un tema importante de estudio en el área del análisis numérico ya que no solo puede aplicarse en el ya mencionado sistema de ecuaciones diferenciales, sino que se puede implementar en cualquier sistema de ecuaciones de conservación de la física y lograr modelar numéricamente otros sistemas complejos de otras áreas de la física.

CONTENIDO

A continuación se describe un breve resumen de lo que se abarcará en cada uno de los capítulos del trabajo de graduación.

1. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN Y SISTEMAS HIPERBÓLICOS DE PRIMER ORDEN

Se explica la teoría matemática de los sistemas hiperbólicos de primer orden y su relación con las ecuaciones de conservación. Se estudian conceptos fundamentales de los sistemas hiperbólicos como la solución débil de una ecuación diferencial y sus curvas características.

Se explica el problema de Riemann para una ecuación de conservación utilizando como ejemplo una ecuación diferencial parcial sencilla, la ecuación de Burgers.

2. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS Y ESQUEMA DE ROE

Se describe la estructura del método de volúmenes finitos, principalmente para resolver ecuaciones de conservación y se enfatiza su importancia al aplicarse a problemas de esta naturaleza. Se introducen los conceptos de discretización, ecuación de diferencias, esquema numérico, celda. Se comenta sobre las condiciones de estabilidad de una solución numérica.

Se exponen algunos esquemas numéricos generales aproximados. Se introduce el esquema de Roe y su relación con el problema de Riemann. Nuevamente, se utiliza como ejemplo la ecuación de Burgers para proporcionar una idea simple de la aplicación de estos esquemas.

3. ECUACIONES DE EULER Y APLICACIÓN DEL ESQUEMA DE ROE

Se explican y derivan las ecuaciones de Euler utilizando las variables generales (presión, densidad y velocidad) y variables conservadas. Se explican las ligaduras adicionales involucradas para que las ecuaciones de Euler sean aplicadas a un gas ideal poliatómico.

Se aplican los conceptos previamente descritos para una ecuación de conservación de una variable al sistema de ecuaciones de Euler. El problema de Riemann se adapta al problema de onda de choque en un tubo descrito por las ecuaciones de Euler.

Se describe el esquema de Roe implementado específicamente en la solución de las ecuaciones de Euler para un gas ideal poliatómico. Se explica la implementación del método numérico en `C++`. Se muestran los resultados obtenidos para un problema de condiciones iniciales en específico.

4. COMPARACIÓN CON PYCLAW

Se da una breve explicación del funcionamiento y diseño de la simulación del problema de condiciones iniciales del capítulo anterior con la librería PyClaw y se comparan los resultados obtenidos.

5. SIMULACIONES CON DISTINTOS COEFICIENTES DE DILATACIÓN ADIABÁTICA

Se comparan los resultados obtenidos en simulaciones del mismo problema de condición inicial pero con distinto coeficiente de dilatación adiabática γ, esto con el fin de obtener una intuición física, a través de la simulación, de cómo varía el comportamiento de un gas cuando el número de grados de libertad interno del mismo cambia.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Cameron, Maria: «Notes on Burger's Equation», 2016.
https://www.math.umd.edu/~mariakc/burgers.pdf

[2] Clawpack Development Team: «Clawpack software», 2020. doi: https://doi.org/10.5281/zenodo.4025432. Version 5.7.1.
http://www.clawpack.org

[3] LeVeque, Randall J.: *Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods*. pp. 1–159. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. ISBN 978-3-540-31632-9, 1998. doi: 10.1007/3-540-31632-9_1.
https://doi.org/10.1007/3-540-31632-9_1

[4] Roe, P.L: «Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes». *Journal of Computational Physics*, 1981, **43(2)**, pp. 357–372. ISSN 0021-9991. doi: https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90128-5.
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999181901285

[5] ——: «Characteristic-Based Schemes for the Euler Equations». *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2003, **18**, pp. 337–365. doi: 10.1146/annurev.fl.18.010186.002005.