Un recorrido por Clawpack:
Breve teoría y ejemplos.

Javier de Jesús Cortés Aguirre.
Seminario del Laboratorio de Cómputo Científico.
Facultad de Ciencias, UNAM.

14 de mayo del 2009.

Introducción.

CLAWPACK (Conservation LAWs PACKage) es un paquete de rutinas de Fortran para calcular soluciones numéricas de ecuaciones (o sistemas de ecuaciones) diferenciales parciales hiperbólicas dependientes del tiempo en 1, 2 o 3 dimensiones usando una aproximación mediante propagación de ondas y métodos de elemento o volumen finito.

El programa no posee una interfaz gráfica propia, la mayoría de los cálculos se hacen en Fortran para luego hacer uso de Matlab para visualizar los resultados obtenidos por el programa.

Los ejemplos que se ilustran en esta presentación fueron obtenidos usando la Version 4.3 lanzada en abril del 2006.

Introducción.

Existen además varias extensiones del sistema Clawpack:

* CLAWMAN: para resolver problemas sobre “curved manifolds” (colectores curvos).

* TsunamiClaw: para resolver propagaciones de ondas en shallow waters y problemas de inundaciones.

* ChomboClaw: Modulo para refinamiento adaptivo de mallas.

* WENOCLAW: Algoritmos de alta precisión en la propagación de ondas.

* SphereCLAW: Código multibloque para mallas cúbicas y esféricas.

* MHDCLAW: Algoritmo de transporte con restricciones para MHD (magnetohidrodinámica, disciplina que hace referencia a los principios de movimiento de un fluido afectado por un campo magnético.)

Conceptos básicos.

Una EDP hiperbólica es una ecuación diferencial parcial de segundo orden del tipo

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}+2\mathrm{b}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+c\frac{\partial^2 u}{\partial^2 y}+2\mathrm{d}\frac{\partial u}{\partial x}+2e\frac{\partial u}{\partial y}+fu=0$$

donde $ac-b^2<0$.

Un ejemplo es la ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t}=c^2\Delta u$$

donde c es una constante equivalente a la velocidad de propagación de la onda.

Conceptos básicos.

En una dimensión, un sistema de EDP homógeneo de primer orden en x y t tiene la forma

$$q_t(x, t) + Aq_x(x, t) = 0 \qquad (2)$$

Aqui $q:\mathbb{R}\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^m$ es un vector con m componentes que representan a las funciones incógnita (presión, velocidad, etc) que queremos determinar, y A es una matriz de constantes reales de dimensión m × m.

En 2D un ejemplo para modelar la propagación acústica de ondas está dada por el sistema

$$p_t(x, t) + K\, u_x(x, t) = 0, \qquad (3)$$

$$u_t(x, t) + (1/\rho)\, p_x(x, t) = 0,$$

Conceptos básicos.

Donde p(x,t), la presión ejercida y u(x, t), la velocidad de la partícula son las funciones a determinar. K es una constante de compresibilidad y ρ la densidad. El sistema (3) puede escribirse de la forma $q_t + Aq_x = 0$, donde

$$q = \begin{bmatrix} p \\ u \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} 0 & K \\ 1/\rho & 0 \end{bmatrix}$$

Diremos que un sistema de EDP con coeficientes constantes de EDP es hiperbólico si la matriz A tiene valores propios reales y un conjunto de m vectores propios linealmente independientes, es decir, cualquier vector en $\mathbb{R}^m$ puede ser expresado de manera única como una combinación lineal de estos vectores propios, esto es importante ya que provee la descomposición en diferentes ondas.

Leyes de conservación.

Algunos de los ejemplos que ilustraremos son parte de una clase importante de ecuaciones hiperbólicas homogéneas llamadas leyes de conservación.

El ejemplo más simple de una ley de conservación unidimensional es la EDP

$$q_t(x, t) + f(q(x, t))_x = 0,$$

donde $f(q)$ es la función de flujo. Rescribiendola en su forma cuasilineal

$$q_t + f'(q)q_x = 0,$$

sugiere que la ecuación es hiperbólica si la matriz Jacobiana de flujo $f'(q)$ satisface la condición prevía dada para A. De hecho el problema lineal (2) es una ley de conservación con función de flujo $f(q) = Aq$.

Leyes de conservación.

En el caso general consideraremos sistemas de leyes de conservación, es decir, EDP's de primer orden de la forma

$$\partial t\, q + \nabla \cdot f(q) = 0,$$

con condiciones iniciales dadas para q.

Así, un método de volumen finito puede ser aplicado sobre cualquier volumen de control C usando la integral

$$\frac{d}{dt}\int_C q\,dx = -\int_{\partial C} f(q)\cdot n\,ds\,,$$

Leyes de conservación.

donde n es el vector unitario normal a ∂C y $f \cdot n$ es el flujo normal a la frontera. Así es posible utilizar un método de volumen finito de la forma

$$Q^{n+1} = Q^n - \frac{\Delta t}{|C|} \sum_{j=1}^{N} h_j F_j^n,$$

aquí F_j^n representa una aproximación numérica al flujo promedio normal a lo largo del j-ésimo lado de la celda de la malla, N es el número de lados, y h_j es la longitud del j-ésimo lado (en dos dimensiones) o el área de la intersección de celdas (en tres dimensiones) medida en el espacio físico.

Ejemplo 1: Advección 1D.

El programa en claw/clawpack/1d/example1 resuelve la ecuación de advección

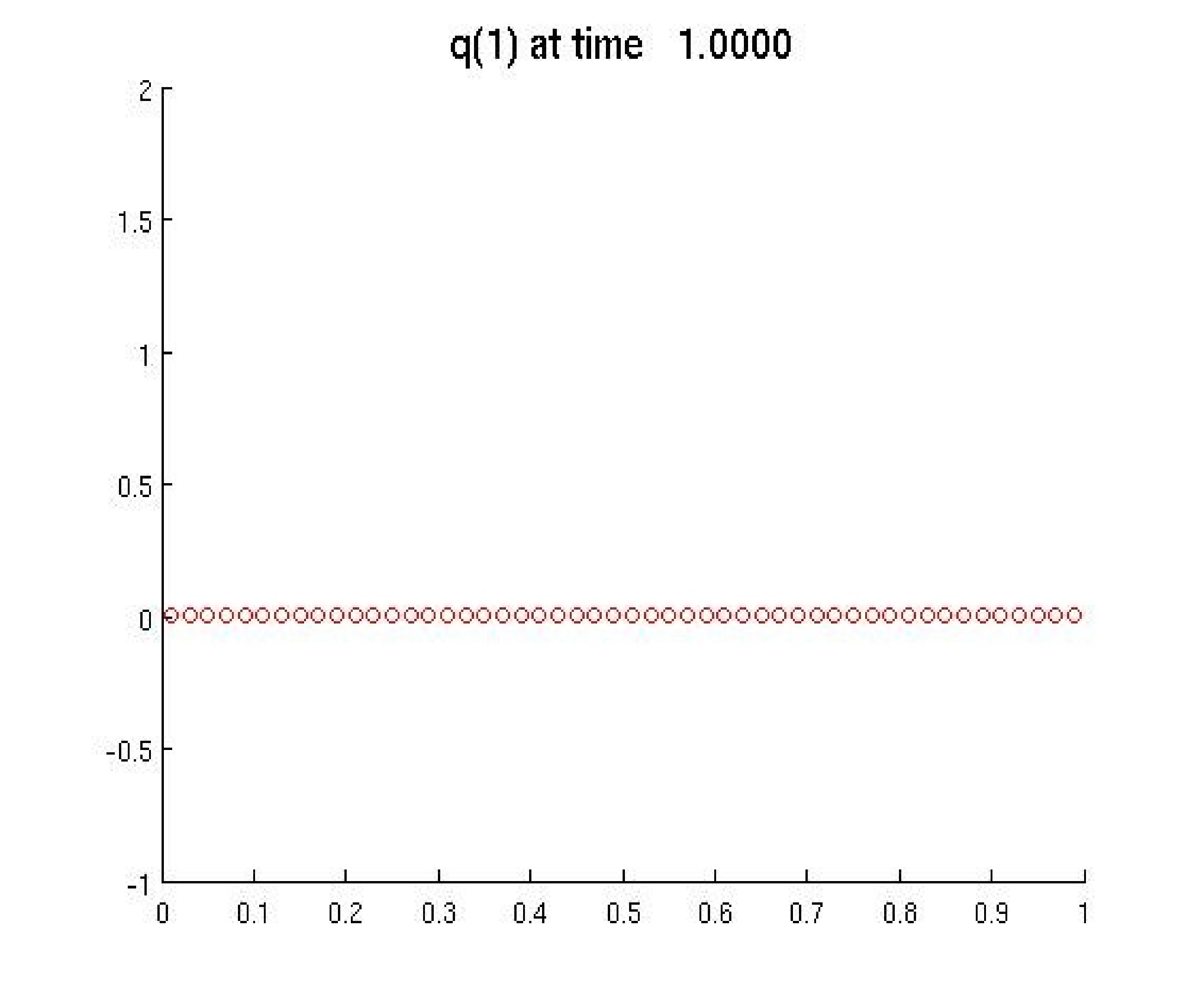
$$q_t + v q_x = 0$$

con velocidad constante v = 1, y una condición inicial que consiste de una curva Gaussiana

$$q(x, 0) = \exp(-\beta(x - 0.3)2).$$

En este caso utilizamos $\beta = 200$.

Ejemplo 1: Advección 1D.



Ejemplo 2: Advección 2D.

El programa en claw/clawpack/2d/example1 es una generalización a dos dimensiones de la ecuación de advección

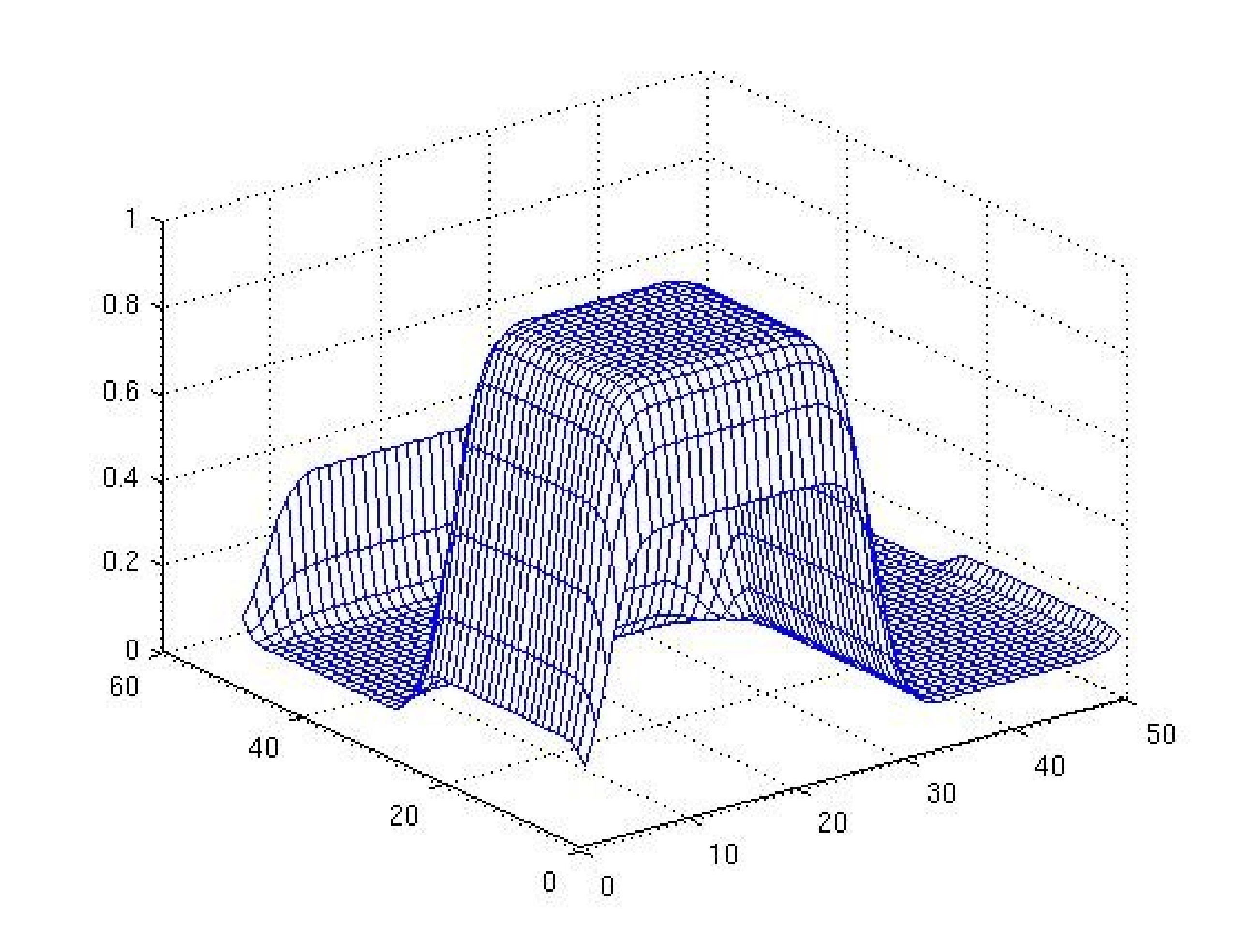
$$q_t + 0.5\, q_x + q_y = 0$$

con condición inicial

$q(x, y, 0) = 1$, si $0.1 < x < 0.6$, $0.1 < y < 0.6$

$q(x, y, 0) = 0.1$, de otra forma

Ejemplo 2: Advección 2D.



Ejemplo 3. Ondas de choque.

Las ecuaciones de Euler para un gas compresible son dadas en la forma estándar de conservación con

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \rho u & \rho v & \rho w \\ \rho u^2 + p & \rho v u & \rho w u \\ \rho u v & \rho v^2 + p & \rho w v \\ \rho u w & \rho v w & \rho w^2 + p \\ u(E+p) & v(E+p) & w(E+p) \end{pmatrix}$$

Aquí las cantidades conservativas son la densidad ρ, el momento ρ · u = (ρu, ρv, ρw), y la energía total E. Además debemos añadir una ecuación de estado que relacione la presión p a las cantidades conservativas.

Ejemplo 3. Ondas de choque.

Para el gas en cuestión, la ecuación de estado está dada por

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2 + w^2),$$

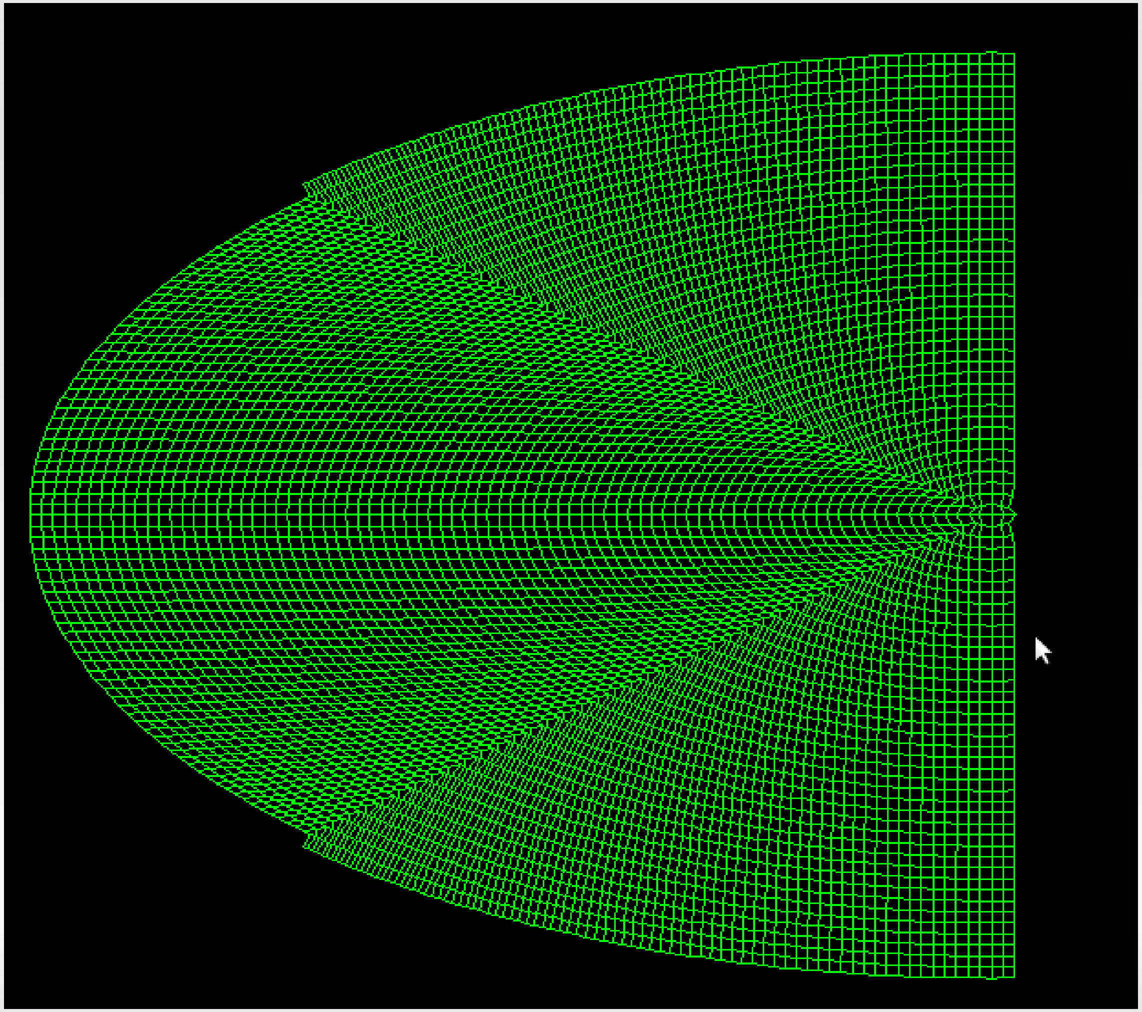
donde Υ es la constante de un gas adiabático. Aquí usamos el valor para el aire de $\Upsilon = 1.4$.

Ilustraremos un ejemplo en 2D tomando diversas mallas de la circunferencia y las siguientes condiciones:

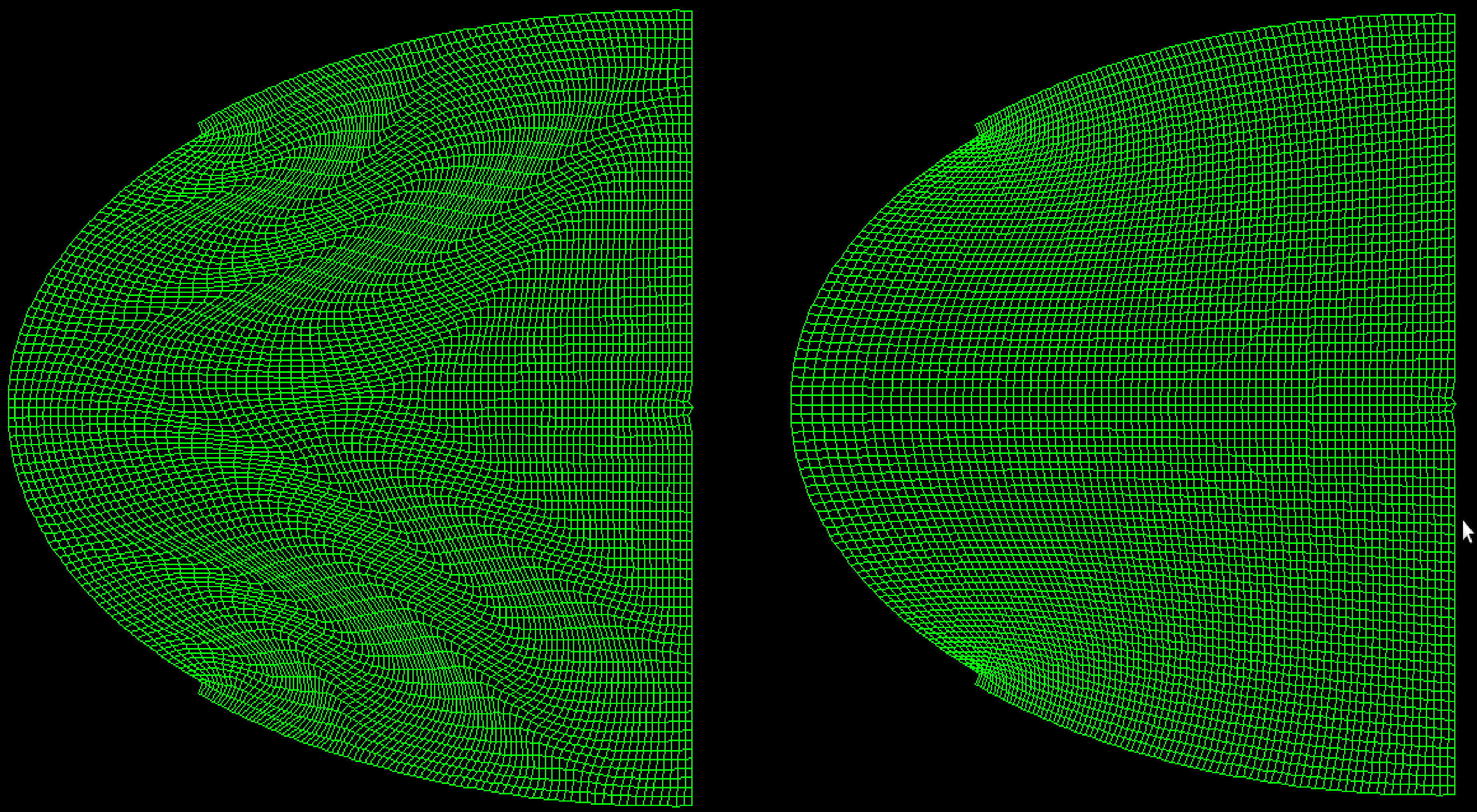
- Una presión igual a 5 dentro de una circunferencia de radio 0.2 centrada en x = y = 0.
- Fuera de esta circunferencia, una presión igual a 1.
- La densidad y velocidades iniciales son igual a 1 y 0 respectivamente.

Ejemplo 3. Ondas de choque.

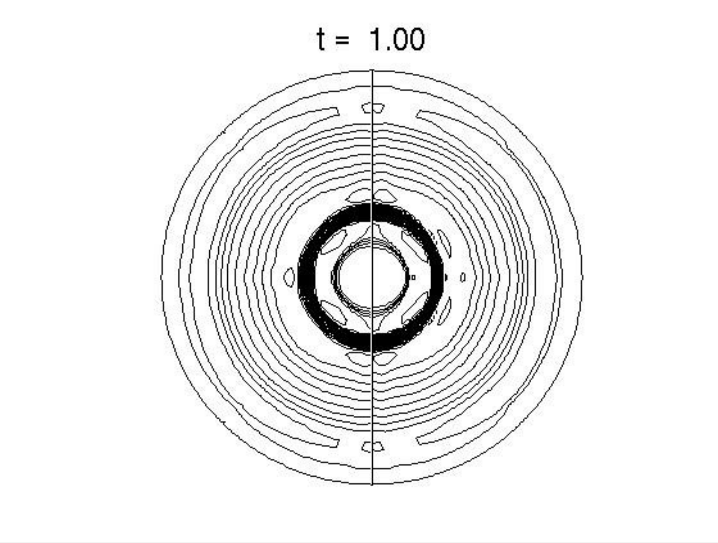
Las mallas que tomaremos son las siguientes:

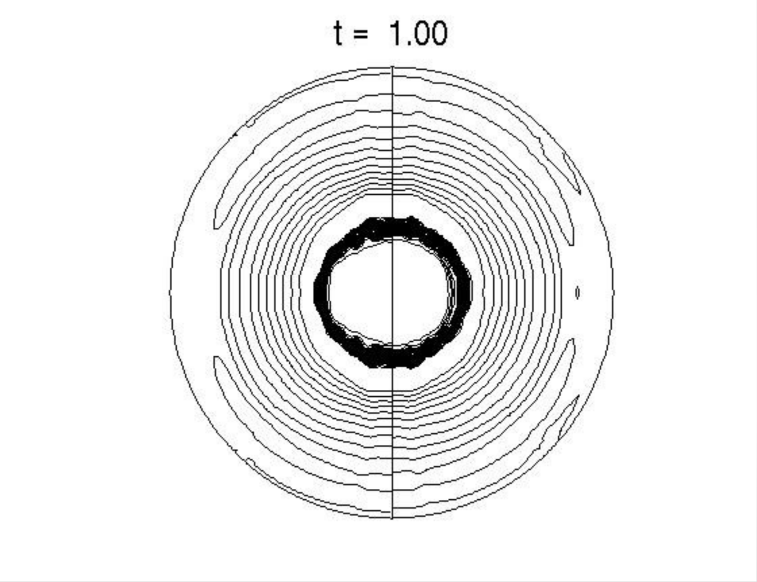


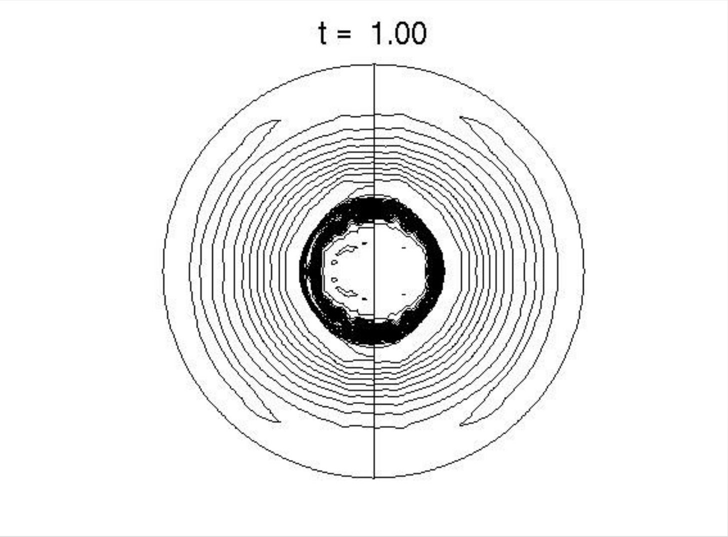
Ejemplo 3. Ondas de choque.



Ejemplo 3. Ondas de choque en 2D.





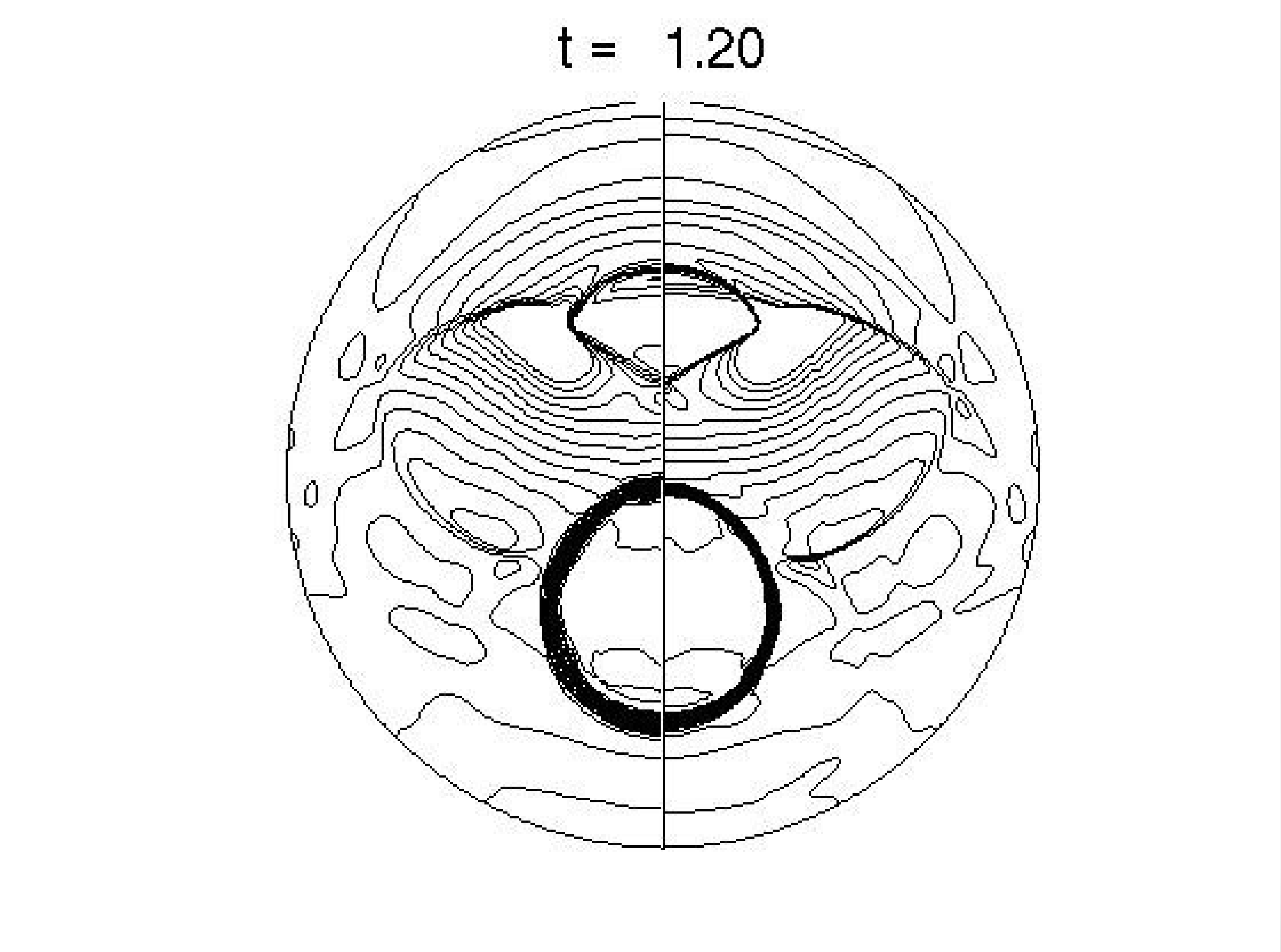


Ejemplo 3. Ondas de choque.

Para el ejemplo en 3D se toma una malla de la esfera unitaria y las siguientes condiciones:

- Una presión igual a 5 dentro de una esfera de radio 0.2 centrada en $x = y = 0$, $z = -0.4$,
- Fuera de esta esfera, una presión igual a 1.
- La densidad y velocidades iniciales son igual a 1 y 0 respectivamente.

Ejemplo 3. Ondas de choque.



Ejemplo 4. Shallow water en la superficie de una esfera.

Las shallow water equations (ecuaciones de aguas bajas) son usadas frecuentemente para modelar el comportamiento global de la atmósfera o de las corrientes en los océanos, mares, etc.

Las ecuaciones pueden ser formuladas en coordenadas cartesianas tridimensionales como

$$\partial_t q + \nabla \cdot f(q) = s(x, q),$$

donde $q = (h, hu, hv, hw)^t$ representa al vector de estado, compuesto de la profundidad h y las tres componentes cartesianas de la velocidad $u = (u, v, w)^t$, todas funciones del espacio y tiempo.

Ejemplo 4. Shallow water en la superficie de una esfera.

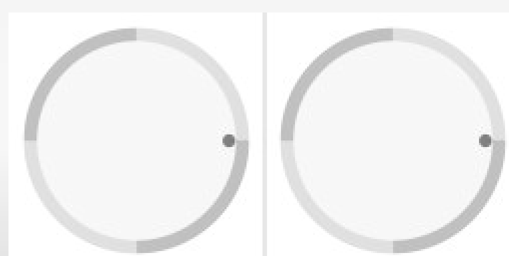
La matriz de flujo tiene la forma

$$\mathbf{f}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} hu & hv & hw \\ hu^2 + \frac{1}{2}gh^2 & huv & huw \\ huv & hv^2 + \frac{1}{2}gh^2 & hvw \\ huw & hvw & hw^2 + \frac{1}{2}gh^2 \end{pmatrix}.$$

y el término de la fuente s(x, q), tiene la forma

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}, \mathbf{q}) = -\frac{2\Omega}{a} z\,(\mathbf{x} \times h\mathbf{u}) + \left(\mathbf{x} \cdot (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{f}})\right)\mathbf{x}.$$

donde el primer del lado derecho es la fuerza de Coriolis causada por la rotación de la Tierra. Aquí Ω y a son el radio de rotación y el radio de la Tierra respectivamente.



Ejemplo 4. Shallow water en la superficie de una esfera.

El segundo término es un término de fuerza que garantiza que la velocidad del fluido se conserva sobre la superficie de la esfera, es decir, perpendicular a la posición del x = (x,y,z) sobre la esfera.

Además $\tilde{f}$ consta de la parte de la matriz de flujo que es asociada con las ecuaciones de momento.

Consideremos, para el ejemplo, una esfera unitaria con datos iniciales que parten de un fluido estacionario (velocidades cero) y con profundidad inicial

$$h(x,y,z)=1+2\exp(-40(1-(a1\,x+a2\,y+a3\,z))^2),$$

donde (x, y, z) es un punto de la esfera y (a1 , a2 , a3) es un vector unitario que determina un eje de la simetría.

Ejemplo 4. Shallow water en la superficie de una esfera.