



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
DOCTORADO EN CIENCIAS (FÍSICA)
CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

**UNA APROXIMACIÓN DE VOLUMEN FINITO PARA LA SIMULACIÓN DE PROPAGACIÓN
ACÚSTICA NO LINEAL Y DISIPATIVA**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
ROBERTO VELASCO SEGURA

DIRECTOR DE TESIS:
DR. PABLO L. RENDÓN GARRIDO
CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL:
DR. ALEJANDRO C. RAGA RASMUSSEN
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL:
DRA. CATALINA E. STERN FORGACH
FACULTAD DE CIENCIAS

MÉXICO, D. F. SEPTIEMBRE 2015.



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Una aproximación de volumen finito para la simulación de propagación acústica no lineal y disipativa

Roberto Velasco Segura

17 de noviembre de 2015

Con amor,
para Emilio y su bella mamá,
para K y su hermoso crío.

RESUMEN

Se presenta una versión de las ecuaciones de conservación en un fluido levemente termoviscoso, correspondientes a acústica no lineal, que ha sido obtenida usando hipótesis ligeramente menos restrictivas que las necesarias para obtener la ecuación de Westervelt. Esta formulación describe difracción de onda completa, distorsión por no linealidad, y efectos disipativos termoviscosos. Para obtener numéricamente la solución de las ecuaciones propuestas ha sido implementado un método de volumen finito, en dos dimensiones, usando paso fraccionado, y linealización de Roe. Para validar el código, dos diferentes pruebas se han realizado: una contra una solución analítica del tipo choque de Taylor, y la otra contra resultados publicados en un sistema HIFU (High Intensity Focused Ultrasound), ambos con resultados satisfactorios. El código, disponible bajo una licencia de código abierto, está escrito para ejecución en paralelo sobre una unidad GPU (Graphics Processing Unit), mejorando así su desempeño en un factor de 60 cuando se compara con un código estándar de volumen finito CLAWPACK 4.6.1, que además ha sido utilizado también como referencia para la lógica de nuestro código.

A form of the conservation equations for fluid dynamics is presented, deduced using slightly less restrictive hypothesis than those necessary to obtain the Westervelt equation. This formulation accounts for full wave diffraction, nonlinearity, and thermoviscous dissipative effects. A two-dimensional finite volume method using the Roe linearization was implemented to obtain numerically the solution of the proposed equations. In order to validate the code, two different tests have been performed: one against a special Taylor shock-like analytic solution, the other against published results on a High Intensity Focused Ultrasound (HIFU) system, both with satisfactory results. The code, available under an open source license, is written for parallel execution on a Graphics Processing Unit (GPU), thus improving performance by a factor of over 60 when compared to the standard serial execution finite volume code CLAWPACK 4.6.1, which has been used as reference for the implementation logic as well.

AGRADECIMIENTOS

Muchas personas han apoyado la realización de este proyecto, lo que tan generosamente me han ofrecido, ha significado para mí además de una estupenda base: una guía, una crítica, y un sistema de reconstrucción, también en cuestiones tan pragmáticas como fundamentales. Algunas de estas personas han apoyado abiertamente, con plena convicción y sacrificio, otras tantas lo han hecho sin saberlo, y me he venido convenciendo cada vez más de que no pocas lo han hecho sin que yo me diera cuenta, incluso cuando yo torpemente lo dificulto. A cada una, muchas gracias, sinceramente, y espero los frutos hagan que todo esto valga la pena, para todos sus grandes o pequeños participantes.

De manera particular, agradezco al Dr. Pablo Rendón por sus innumerables apoyos en cada uno de los ámbitos donde este trabajo ha tropezado. Así también, al Dr. Felipe Orduña y al Dr. Carlos Málaga por sus muy útiles comentarios, al proyecto CLAWPACK [LeVeque *et al.* 2010] por compartir su código fuente, al Dr. Randall LeVeque por la información suministrada, al Dr. Oscar P. Bruno, el Dr. Nathan Albin y colaboradores por los datos para realizar la comparación. Este trabajo ha sido financiado por PAPIIT IN109214, PAEP UNAM 2011-2014, y Conacyt México.

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	11
2. MARCO TEÓRICO	13
2.1. Ley de conservación	13
2.2. Escala mesoscópica	15
2.3. Conservación de masa en un fluido	16
2.4. Conservación de momento en un fluido	17
2.5. Conservación de energía en un fluido	19
2.6. Ecuaciones de estado	21
2.7. Restricción acústica	22
2.8. Fluido levemente termoviscoso	23
2.9. Acústica lineal no termoviscosa	24
2.10. Ecuación de Westervelt	25
2.11. Reformulación	34
3. MÉTODO NUMÉRICO	39
3.1. Problema de Riemann	39
3.2. Método de Godunov	45
3.3. Caso lineal	47
3.4. Métodos de volumen finito	49
3.5. Adimensionalización	51
3.6. Método de paso fraccionado	52
3.7. Método de volumen finito escogido	53
3.8. Linealización de Roe	55
4. IMPLEMENTACIÓN Y VALIDACIÓN DEL MÉTODO NUMÉRICO	59
4.1. Validación contra una solución analítica de onda plana	60
4.2. Validación contra resultados numéricos de onda completa	64
4.3. Desempeño	69
4.4. Aplicaciones actualmente en desarrollo	71
4.4.1. Interacción oblicua	71
4.4.2. Tubo con extremo abierto	71
4.4.3. Linterna acústica	72
5. DISCUSIÓN, CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS	75
5.1. Marco teórico	75
5.2. Aplicaciones	77
5.3. Validación	77
5.4. Desempeño	78
5.5. Métodos numéricos	78
APÉNDICES	79
A. ESQUEMA DE DIFERENCIAS FINITAS PARA LA ECUACIÓN DE WESTERVELT	81
BIBLIOGRAFÍA	83

ACRÓNIMOS

ecuación KZK	ecuación de Khokhlov, Zabolotskaya y Kuznetsov
HIFU	High Intensity Focused Ultrasound
EOS	Equation of State
número CFL	número de Courant, Friedrichs y Lewy
TV	Total Variation
TVD	Total Variation Diminishing
FFT	Fast Fourier Transform
CLAWPACK	Conservation LAW PACKAge
GPU	Graphics Processing Unit
CPU	Central Processing Unit
CUDA	Compute Unified Device Architecture
FOSS	Free and Open Source Software
FiVoNAGI	Finite Volume Nonlinear Acoustics GPU Implementation

INTRODUCCIÓN

La ecuación de Westervelt es un modelo clásico de propagación acústica no lineal. Fue originalmente obtenido por Westervelt [1963] y describe propagación acústica tomando en cuenta los efectos contrapuestos de no-linealidad y atenuación. Este y otros modelos de acústica no lineal pueden ser obtenidos añadiendo hipótesis, comúnmente en la forma de restricciones, a los principios de conservación de masa, momento y energía. Otros dos modelos clásicos de acústica no lineal son la ecuación KZK (Khokhlov, Zabolotskaya y Kuznetsov) y la ecuación de Burgers; ambas pueden ser obtenidas añadiendo restricciones a la ecuación de Westervelt: a propagación en ángulos pequeños con respecto a un cierto eje (propagación cuasi plana) en el caso de la ecuación KZK, y a propagación estrictamente sobre un eje y en una sola dirección (propagación plana) para la ecuación de Burgers [Hamilton y Morfey 1998].

Con algunas notables excepciones, las soluciones para estas ecuaciones no lineales, cuando son conocidas, pueden ser expresadas solamente de maneras no triviales, y herramientas tales como los métodos numéricos son a menudo necesarias para investigar su naturaleza. Los métodos numéricos, y los medios requeridos para implementarlos, han estado en constante desarrollo durante los últimos años. Inicialmente, muchas de las publicaciones fueron dedicadas a la descripción de los modelos más restringidos, como la ecuación plana de Burgers [Crighton y Scott 1979], cuya solución exacta cuenta con algunas expresiones analíticas conocidas [Crighton y Scott 1979; Blackstock 1966; Jordan 2004]. Aún así, en este caso los métodos numéricos ciertamente han jugado un papel importante [Yang y Przekwas 1992]. Posteriormente, la ecuación KZK se convirtió en un modelo ampliamente usado para aplicaciones médicas terapéuticas y de diagnóstico [Duck 2002], y la mayoría de las soluciones conocidas han sido obtenidas mediante herramientas numéricas [Khokhlova *et al.* 2001], incluyendo algunas recientes ampliaciones del modelo donde las restricciones en la dirección de propagación han sido parcialmente relajadas [Yuldashev y Khokhlova 2011; Dagrau *et al.* 2011; Varray *et al.* 2011a; Varslot y Taraldsen 2005]. Las aplicaciones modernas de medicina, tales como la terapia extracorpórea por ondas de choque [Fagnan *et al.* 2008], el control de focalización de ultrasonido focalizado del alta intensidad (HIFU) en medios heterogéneos [Okita *et al.* 2011], y la ecografía (ultrasound imaging) [Huijssen y Verweij 2010], demandan actualmente soluciones más sofisticadas para describir sistemas donde la complejidad geométrica del campo acústico no lineal es importante. En consecuencia, durante los últimos años, se han producido muchos para implementar métodos que no están limitados en términos de la dirección de la propagación [Christopher y Parker 1991; Albin *et al.* 2012; Demi *et al.* 2011; Okita *et al.* 2011; Huijssen y Verweij 2010; Karamalis *et al.* 2010; Hallaj y Cleveland 1999; Pinton *et al.* 2009; Jing *et al.* 2012; Lemoine *et al.* 2013], como es requerido para resolver las ecuaciones de Westervelt y Kuznetsov, esta última siendo un modelo aún menos restrictivo que la ecuación de Westervelt [Clason *et al.* 2009]. Estos métodos numéricos se denominan algunas veces *métodos de onda completa* (full

wave methods) [Hallaj y Cleveland 1999]. Según la revisión bibliográfica hecha para el presente trabajo, no se conocen soluciones analíticas generales en el caso de onda completa para las ecuaciones de Kuznetsov ni de Westervelt. En el presente trabajo el objetivo es brindar una solución numérica de onda completa para un juego de leyes de conservación, obtenido mediante hipótesis ligeramente menos restrictivas que las necesarias para obtener la ecuación de Westervelt.

Un gran número de métodos numéricos han sido utilizados para resolver el campo acústico no lineal, algunos de ellos operando sobre el dominio del tiempo [Karamalis *et al.* 2010; Hallaj y Cleveland 1999; Okita *et al.* 2011; Pinton *et al.* 2009; Lemoine *et al.* 2013], mientras que otros involucran cálculos en el dominio de la frecuencia [Christopher y Parker 1991; Albin *et al.* 2012; Varray *et al.* 2011b,a; Demi *et al.* 2011; Jing *et al.* 2012]. El método numérico implementado en el presente trabajo es un método de volumen finito, que opera en el dominio del tiempo. Este tipo de métodos están basados en leyes de conservación, lo que brinda desde el inicio una relación intrínseca con las ecuaciones que son base de los modelos acústicos. En el presente trabajo, recientemente publicado en [Velasco-Segura y Rendón 2015a], el código serial CLAWPACK [LeVeque *et al.* 2010] 4.6.1, que constituye un estándar para esquemas de volumen finito, ha sido usado como una referencia para la lógica de la implementación del código C++/CUDA que se presenta, mismo que ejecuta el método de volumen finito en una tarjeta GPU, y de este modo mejora el desempeño comparado con esquemas seriales. Mientras que en la literatura se encuentra comúnmente el uso de código paralelizado para este tipo de simulación, dicho código se ejecuta principalmente en clusters [Albin *et al.* 2012; Huijssen y Verweij 2010; Yuldashev y Khokhlova 2011; Okita *et al.* 2011; Varslot y Måsøy 2006; Pinton *et al.* 2009; Terrel y Mandli 2012], y la ejecución sobre GPU está apenas comenzando a ser utilizada [Varray *et al.* 2011b; Stuart *et al.* 2011; Karamalis *et al.* 2010; Terrel y Mandli 2012].

Este documento está organizado como sigue: el marco teórico sobre dinámica de fluidos y acústica no lineal está descrito en la sección 2; el procedimiento numérico se describe en la sección 3; las pruebas de validación para el método numérico, y los detalles de su implementación se dan en la sección 4; finalmente, discusión y conclusiones se presentan en la sección 5. Adicionalmente, un método numérico sencillo de diferencias finitas, directamente para la ecuación de Westervelt, se encuentra en el apéndice A.

MARCO TEÓRICO

A continuación se describen algunos aspectos físicos como base del presente trabajo. En términos generales se busca describir los fundamentos de la ecuación de Westervelt, y su reformulación en términos de leyes de conservación.

2.1 LEY DE CONSERVACIÓN

Supongamos que existe un campo $q(\vec{x}, t)$, que representa la densidad de algo que se conserva, a lo cual llamaremos *carga*, un campo $\mathcal{B}(\vec{x}, t)$ que llamamos *fente*, y una función de flujo \vec{f} . Esta función \vec{f} es tal que para una superficie infinitesimal de magnitud dS , normal al vector \vec{n} , el flujo de carga que le atraviesa es $\vec{f} \cdot \vec{n} dS$. Es importante observar que la función \vec{f} bien puede depender de las coordenadas espaciales y temporales, de las particularidades de la carga, y del estado de movimiento de la superficie dS . El campo fuente \mathcal{B} , es tal que para un volumen infinitesimal de magnitud dV , la cantidad de carga que aparece por unidad de tiempo es $\mathcal{B} dV$. Entonces, aplicando estos supuestos a un volumen V tenemos la expresión integral de la *ley de conservación*

$$\frac{d}{dt} \int_V q dV = - \int_{\partial V} \vec{f} \cdot \vec{n} dS + \int_V \mathcal{B} dV . \quad (1)$$

Es decir, lo que cambia la cantidad de carga q contenida en V , es igual a lo que fluye a través de la superficie ∂V que lo delimita, con un signo que es convencional [Lax 1973], más lo que pudiera generarse dentro.

Aplicamos ahora el teorema de la divergencia y tenemos

$$\frac{d}{dt} \int_V q dV = \int_V \left(-\nabla \cdot \vec{f} + \mathcal{B} \right) dV , \quad (2)$$

lo que nos indica que el flujo, actuando sobre ∂V , tiene un efecto equivalente al de un campo fuente, actuando sobre V . Esta observación nos permitirá más adelante interpretar ciertos términos como flujos o como fuentes, según resulte más conveniente.

Aprovechamos luego una generalización de la regla de Leibniz, [Flanders 1973] p. 620, que indica

$$\frac{d}{dt} \int_V q dV = \int_V \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}q \right) dV, \quad (3)$$

donde $\vec{v}(\vec{x}, t)$ es un campo de velocidad que determina el movimiento de cada uno de los puntos contenidos en V , entre ellos su superficie ∂V . Aplicando este resultado sobre la expresión (2), se obtiene

$$\int_V \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}q \right) dV = \int_V \left(-\nabla \cdot \vec{f} + \mathcal{B} \right) dV,$$

o bien

$$\int_V \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}q + \nabla \cdot \vec{f} - \mathcal{B} \right) dV = 0.$$

Como esto se cumple para cualquier volumen V , estático o en movimiento, entonces

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}q + \vec{f}) = \mathcal{B}, \quad (4)$$

que es la expresión diferencial correspondiente a la ley de conservación, y comúnmente se usa como punto de partida para desarrollos teóricos y métodos numéricos. Sin embargo, estrictamente hablando, la expresión integral (1) es un poco más general, debido a que las derivadas en (4) presentan problemas en puntos de discontinuidad. Como se mostrará más adelante, incluso si la condición inicial no presenta discontinuidades, éstas podrían aparecer en la solución de dichas ecuaciones para tiempos posteriores.

Una contribución al flujo, que llamamos *advección*, puede asociarse con un campo de velocidad $\vec{u}(\vec{x}, t)$ que transporta la carga. Para este caso, dada una superficie infinitesimal de magnitud dS , normal al vector \vec{n} , moviéndose a una velocidad \vec{v} , la función de flujo correspondiente es

$$\vec{f}_a = (\vec{u} - \vec{v})q, \quad (5)$$

siendo el flujo total

$$\vec{f} = \vec{f}_a + \vec{f}_o,$$

donde \vec{f}_o denota flujos de otra naturaleza. La expresión diferencial de la ley de conservación entonces resulta ser

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}q + \vec{f}_o) = \mathcal{B}, \quad (6)$$

donde es notable que se ha eliminado el término correspondiente a \vec{v} aún cuando la expresión ha sido obtenida suponiendo movimiento arbitrario de V , es decir, la expresión diferencial correspondiente a flujo advectivo no depende del movimiento \vec{v} de ninguna superficie dada. Por otro lado, la expresión integral queda

$$\frac{d}{dt} \int_V q dV = - \int_{\partial V} ((\vec{u} - \vec{v})q + \vec{f}_o) \cdot \vec{n} dS + \int_V \mathcal{B} dV,$$

donde en general aparece explícitamente el término advectivo. Sin embargo, supongamos un volumen que se mueve junto con la carga, $\vec{v} = \vec{u}$, que denotaremos como *elemento de fluido* V_E ;

por lo tanto la carga no es transportada a través de la superficie ∂V_E , y la expresión anterior toma la forma

$$\frac{d}{dt} \int_{V_E} q dV = - \int_{\partial V_E} \vec{f}_o \cdot \vec{n} dS + \int_{V_E} \mathcal{B} dV. \quad (7)$$

Este volumen es una entidad bien definida. Dada su posición inicial, conociendo \vec{u} es posible determinar para tiempos posteriores su posición, su deformación, y usando (7) se puede determinar la cantidad de carga que contiene.

En los medios que nos interesa estudiar, comúnmente hay varias cargas, para denotarlo usaremos un superíndice $k = 1, \dots, m$, como q^k . Entonces, tendremos un sistema de leyes de conservación, en general acoplado. Es decir, los flujos y las fuentes son funciones de varias cargas, e incluso de las derivadas de dichas cargas.

2.2 ESCALA MESOSCÓPICA

Los fluidos físicos que nos interesa estudiar están compuestos de moléculas, por lo tanto a escala nanoscópica hay espacios vacíos entre las moléculas, lo que genera cambios abruptos en los campos que usamos para describir el fluido. Por lo tanto definimos *un punto* de nuestro sistema en una escala *mesoscópica*, el valor $\psi(\vec{x}, t)$, resultado de evaluar la magnitud ψ en un punto \vec{x} al tiempo t . Está definido cuando

$$\frac{1}{V} \int_V \psi(\vec{x}, t) dV = \frac{1}{V'} \int_{V'} \psi(\vec{x}, t) dV \quad (8a)$$

para cualesquiera V, V' de escala mesoscópica tales que $V \ll V'$, donde $\vec{x} \in V, V'$, y su valor es

$$\frac{1}{V} \int_V \psi(\vec{x}, t) dV. \quad (8b)$$

Una discusión muy semejante puede encontrarse en [Blackstock 2000] p. 27, y [Batchelor 2000] p. 5. La existencia de esta escala mesoscópica es un mero supuesto, que puede cumplirse, o no, según el sistema que se estudie. Afortunadamente, para los sistemas que nos interesan este supuesto se cumple con muy buena aproximación para longitudes que son: algunos órdenes de magnitud más grandes que el camino libre medio entre partículas, [Temkin 1981] p. 7, para agua o aire en condiciones típicas, menor a 10^{-7} m [Denny 1993] p. 90; y algunos órdenes de magnitud más chicos que nuestra escala macroscópica, digamos 10^{-3} m.

Bajo esta definición, habiendo eludido la fluctuaciones moleculares, los campos que describen al fluido son continuos. En textos de acústica y dinámica de fluidos, es común encontrar la formulación de esta *hipótesis del continuo* directamente.

Ahora supongamos un elemento de fluido, ec. (7), mesoscópico, ecs. (8), que llamaremos *partícula de fluido* V_e . Bajo estas definiciones todas las magnitudes ψ que describen al fluido son constantes dentro de V_e con respecto a coordenadas espaciales, pero varían con respecto al tiempo, y su derivada resulta ser

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla\psi.$$

Al operador $\frac{D}{Dt}$ le llamamos *derivada material*. Observe que es posible incluso medir el cambio de volumen en una partícula de fluido, y se simplemente del cambio de la magnitud V_e . Esto se usará en desarrollos posteriores al aplicar relaciones termodinámicas que involucran el volumen del sistema termodinámico, en un determinado punto.

Cabe señalar que el término *mesoscópico* literalmente denota “escala intermedia”, y en otras áreas de la física la escala intermedia que resulta relevante no es la misma que hemos descrito aquí. Particularmente, el término se usa en textos de semiconductores para denotar sistemas que son suficientemente grandes para ser descritos en términos de conductividad y densidad, pero suficientemente chicos para exhibir propiedades cuánticas. Es más fácil encontrar el término usado en estas áreas que en dinámica de fluidos, aunque últimamente hay una corriente de métodos numéricos, para dinámica de fluidos, basados en escala mesoscópicas [Krafczyk y Luo 2008].

2.3 CONSERVACIÓN DE MASA EN UN FLUIDO

Para el caso de conservación de masa en un fluido, suponemos que el flujo es solamente advectivo, por lo que, de acuerdo con la ec. (5),

$$\vec{f} = (\vec{u} - \vec{v})\rho,$$

donde ρ es la densidad de masa. Suponemos también que no hay fuentes $\mathcal{B} = 0$, e integrando sobre una partícula de fluido V_e , tenemos la ley de conservación correspondiente, en forma integral

$$\frac{d}{dt} \int_{V_e} \rho dV = 0, \quad (9)$$

y en forma diferencial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0. \quad (10)$$

Luego, desarrollando tenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \vec{u} + \nabla \rho \cdot \vec{u} = 0$$

y en términos de la derivada material

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (11)$$

La ecuación (9) indica que en una partícula fluido V_e siempre habrá la misma cantidad de masa, digamos M_e . Naturalmente, la densidad promedio del elemento de fluido será M_e/V_e , pero como este volumen es mesoscópico, el valor de la densidad, en el punto donde se encuentre V_e , será precisamente

$$\rho = \frac{M_e}{V_e}. \quad (12)$$

Con esta observación podemos reescribir la ecuación de conservación de masa en una forma diferente

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{M_e}{V_e} \right) + \frac{M_e}{V_e} \nabla \cdot \vec{u} = 0 ,$$

es decir,

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{V_e} \frac{DV_e}{Dt} , \quad (13)$$

la divergencia de la velocidad es igual a la razón con que cambia el volumen de una partícula de fluido, por unidad de volumen.

Adicionalmente, utilizando la conservación de masa y la derivada material se puede hacer una manipulación que resulta útil para otras magnitudes ψ . Desarrollemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \rho \psi) &= \rho \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla (\rho \psi) + \rho \psi (\nabla \cdot \vec{u}) \\ &= \rho \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot (\rho \nabla \psi + \psi \nabla \rho) + \rho \psi (\nabla \cdot \vec{u}) \\ &= \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \psi \right) + \psi \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho (\nabla \cdot \vec{u}) + \vec{u} \cdot \nabla \rho \right) \\ &= \rho \frac{D\psi}{Dt} + \psi \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) \right) . \end{aligned}$$

Ahora, lo que está en el último paréntesis es nulo por la conservación de masa, de modo que para estos casos

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \rho \psi) = \rho \frac{D\psi}{Dt} . \quad (14)$$

De hecho, esta expresión (14), junto con (3), aplicado sobre un elemento de fluido V_E , equivalen al *teorema de transporte de Reynolds*, [Chorin y Marsden 1993] p. 10, [Pierce 1989] p. 10,

$$\frac{d}{dt} \int_{V_E} \rho \psi dV = \int_{V_E} \rho \frac{D\psi}{Dt} dV .$$

2.4 CONSERVACIÓN DE MOMENTO EN UN FLUIDO

La conservación de momento lineal se puede expresar como

$$\frac{d}{dt} \int_{V_e} \rho \vec{u} dV = \int_{\partial V_e} \sigma \cdot \vec{n} dS + \int_{V_e} \vec{B} dV \quad (15)$$

donde $\rho \vec{u}$ es la densidad de momento lineal, y se ha escogido integrar sobre una partícula de fluido V_e . Por lo tanto, el flujo de momento que describe el primer término de la derecha no es advectivo, corresponde al momento que se transfiere a V_e a través de las fuerzas que le imprimen sus vecinos. El tensor de esfuerzos σ es tal que la fuerza por unidad de área en una superficie normal a \vec{n} es $\sigma \cdot \vec{n}$, una magnitud vectorial, que tiene componentes tanto normal como tangencial a la superficie. En el segundo término de lado derecho \vec{B} denota fuerzas externas, que en este trabajo se han supuesto nulas, las cuales podrían corresponder, por ejemplo, al campo gravitatorio.

La expresión diferencial correspondiente es entonces

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} - \sigma) = 0 \quad (16)$$

donde se observa explícitamente el término advectivo $\rho \vec{u} \otimes \vec{u}$, cuya forma ahora contiene un producto exterior \otimes , consecuencia sólo del carácter vectorial de la carga $\rho \vec{u}$. Si se desarrolla por componentes se obtiene lo mismo que en los casos escalares. O bien

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \nabla \cdot \sigma, \quad (17)$$

donde se ha hecho uso de la identidad expresada en la ecuación (14), para cada una de las componentes de \vec{u} . Observamos ahora que \vec{u} es la velocidad de V_e , entonces, su aceleración es

$$\vec{a} = \frac{D\vec{u}}{Dt},$$

y usando nuevamente la ecuación (12), reescribimos (17) como

$$V_e \nabla \cdot \sigma = M_e \vec{a}.$$

Esta expresión es justamente la segunda ley de Newton aplicada a una partícula de fluido, $\vec{F} = m\vec{a}$, lo cual facilita la interpretación de $\nabla \cdot \sigma$, que es la fuerza por unidad de volumen que el fluido aplica sobre una partícula de fluido V_e .

El siguiente paso es escribir σ en términos de las cargas, de cantidades conocidas o medibles. Para ello tomamos las siguientes consideraciones:

- σ es la suma de dos contribuciones, una viscosa y otra no viscosa.
- En ausencia de viscosidad la fuerza correspondiente es $-\nabla p$, [Chorin y Marsden 1993] p. 6, donde p es presión. Además observamos que $\nabla \cdot \mathbf{I}p = \nabla p$, donde \mathbf{I} es una matriz identidad de 3×3 , y por lo tanto el valor de σ correspondiente al caso no viscoso es $\sigma = -\mathbf{I}p$.
- La relación entre σ_{ij} y $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ se asume lineal, es decir, cada una de las entradas de σ debe expresarse como una combinación lineal de las derivadas de las componentes de \vec{u} con respecto a las componentes de \vec{x} . Esta es la hipótesis de fluido newtoniano, y en palabras llanas señala que, la fuerza viscosa entre dos elementos de fluido vecinos es proporcional a la diferencia de sus velocidades. Si los gradientes de velocidad no son pequeños, la dependencia de σ en derivadas y potencias de orden más alto podría ser no despreciable, [Landau y Lifshitz 1987] p. 45, así pues, la hipótesis aquí usada es una serie de Taylor truncada a primer orden.

$$\sigma_{ij} = T_{ij} + \sum_{kl} T_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$$

- La fuerza viscosa entre partículas de fluido que se mueven con la misma velocidad es nula.
- La fuerza viscosa entre partículas de fluido que se encuentran en movimiento rotacional uniforme es nula.

La solución más general, [Landau y Lifshitz 1987] p. 45, para tales restricciones es:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla \cdot \vec{u} \right) + \mu_B \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} , \quad (18)$$

donde μ y μ_B son dos parámetros positivos, independientes de \vec{u} que se conocen como viscosidad dinámica y viscosidad volumétrica. Suponiendo que dichos parámetros son constantes, se reescribe (17) como

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \left(\mu_B + \frac{1}{3}\mu \right) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) , \quad (19)$$

donde ∇^2 es el operador lagrangiano. Para facilitar la interpretación física usemos la identidad

$$\nabla (\nabla \cdot \vec{u}') = \nabla^2 \vec{u}' + \nabla \times (\nabla \times \vec{u}') , \quad (20)$$

aplicada sobre el tercer término del lado derecho nos deja

$$\rho \frac{D\vec{u}'}{Dt} = -\nabla p + \left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu \right) \nabla^2 \vec{u}' + \left(\mu_B + \frac{1}{3}\mu \right) \nabla \times (\nabla \times \vec{u}') . \quad (21)$$

Esta ecuación nos indica las contribuciones a la aceleración de una partícula de fluido, en el lado derecho. El primer término apunta en la dirección hacia donde la presión es menor, y el tercer término depende de la vorticidad $\nabla \times \vec{u}$, que como se mostrará más adelante, en este trabajo es despreciada. Con el segundo término nos detenemos un poco, ya que es posible demostrar que el laplaciano de una función ψ en el punto \vec{x} , es proporcional al promedio $\bar{\psi}$ de ψ en una vecindad de \vec{x} menos el valor de $\psi(\vec{x})$, [Davis 1989] p. 264,

$$\bar{\psi} - \psi(\vec{x}) = K \nabla^2 \psi(\vec{x}) + O(\xi^3)$$

donde ξ es el tamaño de la vecindad. Esta interpretación tiene sentido dentro de la ecuación (21), donde el segundo término de la derecha apuntará en la dirección de la diferencia entre el promedio de \vec{u} en la vecindad de la partícula de fluido y \vec{u} en la partícula de fluido, y la magnitud de este término queda determinada por los parámetros de viscosidad.

2.5 CONSERVACIÓN DE ENERGÍA EN UN FLUIDO

La conservación de energía podemos expresarla como

$$\frac{d}{dt} \int_{V_e} \rho E_T dV = \int_{\partial V_e} (\sigma \cdot \vec{n}) \cdot \vec{u} dS - \int_{\partial V_e} \vec{\eta} \cdot \vec{n} dS , \quad (22)$$

donde la integración está realizada nuevamente sobre una partícula de fluido. En el lado derecho de esta expresión no hay fuentes, y tenemos dos términos superficiales, uno debido a la transferencia de calor $\vec{\eta}$, y otro debido a la transferencia de energía en forma de trabajo, donde σ está dada por la expresión (18). Del lado izquierdo tenemos la energía total por unidad de masa E_T , lo

cual implica que el producto ρE_T describe energía total por unidad de volumen, de la siguiente forma:

$$\rho E_T = \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho E_p + \rho E .$$

En esta expresión el primer término de la derecha corresponde a la energía cinética por unidad de volumen, del centro de masa de las partículas de fluido, la energía cinética de las moléculas con respecto al centro de masa está contemplada dentro del término de energía interna (por unidad de volumen), ρE . Supondremos nulo el término de energía potencial ρE_p , que nuevamente podría corresponder al campo gravitatorio. Entonces, en magnitudes por unidad de masa

$$E_T = \frac{1}{2} u^2 + E . \quad (23)$$

Adicionalmente, es posible demostrar que

$$(\sigma \cdot \vec{n}) \cdot \vec{u} = (\sigma \cdot \vec{u}) \cdot \vec{n} ,$$

de manera que la expresión diferencial correspondiente tiene la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_T) + \nabla \cdot (\vec{u} \rho E_T - \sigma \cdot \vec{u} + \vec{\eta}) = 0 . \quad (24)$$

donde se observa el término advectivo explícitamente, $\vec{u} \rho E_T$. O bien, utilizando la expresión (14)

$$\rho \frac{DE_T}{Dt} = \nabla \cdot (\sigma \cdot \vec{u} - \vec{\eta}) . \quad (25)$$

Por otra parte, tenemos la identidad termodinámica

$$dU = TdS - pdV , \quad (26)$$

donde T es temperatura, U es energía interna, y S entropía. Al aplicarla a una partícula de fluido V_e , de masa M_e , las variables de la expresión anterior toman la forma

$$\begin{aligned} V &= V_e , \\ U &= M_e E , \\ S &= M_e s , \end{aligned}$$

donde s es entropía por unidad de masa. Entonces,

$$dE = Tds - \frac{p}{M_e} dV_e ,$$

y la razón de estos cambios con respecto al tiempo es

$$\frac{DE}{Dt} = T \frac{Ds}{Dt} - \frac{p}{M_e} \frac{DV_e}{Dt} .$$

Sustituyamos esta expresión, junto con (23), y (12) en (25), y tenemos

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} M_e u^2 \right) - p \frac{DV_e}{Dt} + M_e T \frac{Ds}{Dt} = V_e \nabla \cdot (\sigma \cdot \vec{u} - \vec{\eta}) . \quad (27)$$

Del lado izquierdo, la derivada de la energía de la partícula de fluido se ha descompuesto en tres términos: el primero es el cambio en su energía cinética, y el segundo y el tercero son los flujos de energía que el elemento de fluido intercambia en forma de trabajo y calor, respectivamente, [Callen 1985] p. 19. Desarrollemos ahora $V_e \nabla \cdot (\sigma \cdot \vec{u})$, haciendo uso de la conservación de momento (17). Luego de un poco de álgebra es posible obtener

$$\begin{aligned} V_e \nabla \cdot (\sigma \cdot \vec{u}) &= \mu_B (\nabla \cdot \vec{u})^2 + \frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} \right)^2 \\ &+ \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} M_e u^2 \right) - p \frac{DV_e}{Dt}. \end{aligned} \quad (28)$$

Se observa que al sustituir (28) en (27), el término de energía cinética $\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} M_e u^2 \right)$ y el de trabajo $-p \frac{DV_e}{Dt}$ se cancelan. Esto podía esperarse, ya que $V_e \nabla \cdot (\sigma \cdot \vec{u})$ corresponde a la fuerza aplicada en las paredes de la partícula de fluido, y dicha fuerza afectará la traslación y la deformación de la partícula. Pero hay dos términos que permanecen, primero y segundo en la derecha de (28), y éstos contribuyen al cambio de la entropía de la partícula de fluido. Este detalle es menos evidente, ya que tales términos también corresponden a fuerzas aplicadas sobre la superficie ∂V_e y son independientes de la temperatura. El efecto de estos términos es semejante al proceso de calentar un fluido dentro de un recipiente adiabático y rígido, sólo haciendo vibrar el recipiente.

Para la conducción térmica utilizamos la ley de Fourier,

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T.$$

Esta también es una aproximación, [Landau y Lifshitz 1987] p. 192, que pudiera ser el primer término de una serie de potencias de ∇T . Suponiendo además que κ es constante, tenemos

$$\nabla \cdot \vec{q} = -\kappa \nabla^2 T. \quad (29)$$

Finalmente, sustituyendo (29) y (28) en (27), se obtiene

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = \kappa \nabla^2 T + \mu_B (\nabla \cdot \vec{u})^2 + \frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} \right)^2. \quad (30)$$

Como se ha dicho, esta expresión indica cómo cambia la entropía correspondiente a una partícula de fluido, y esto tiene dos contribuciones: una térmica, primer término del lado derecho; y una mecánica, términos restantes del lado derecho.

2.6 ECUACIONES DE ESTADO

Observamos que las ecuaciones de conservación descritas hasta ahora son cinco: la primera es la ecuación (11), luego hay tres correspondientes a la expresión (19), y la quinta es la ecuación (30). En estas cinco expresiones aparecen siete variables: ρ , p , T , s y las tres componentes de \vec{u} , por lo que para encontrar una solución son necesarias otras relaciones. Obtendremos estas relaciones de la termodinámica del fluido: si suponemos que cada partícula de fluido se encuentra todo el tiempo en equilibrio termodinámico, entonces ahí dentro podemos usar las ecuaciones de estado,

que son expresiones de las variables intensivas como función de las variables extensivas, [Callen 1985] p. 37. En este caso usaremos

$$\begin{aligned} p &= p(V, S) , \\ T &= T(V, S) , \end{aligned}$$

escribiendo los argumentos mediante sus respectivas variables por unidad de masa

$$p = p(\rho, s) , \quad (31a)$$

$$T = T(\rho, s) , \quad (31b)$$

que desarrollaremos como series de Taylor, a un orden conveniente, en las secciones 2.10 y 2.11.

2.7 RESTRICCIÓN ACÚSTICA

Las ecuaciones planteadas hasta ahora describen un rango muy amplio de fenómenos en dinámica de fluidos. Un tipo especial de soluciones corresponden a pequeños desviaciones, *perturbaciones*, sobre un estado conocido del fluido. En este trabajo dicho estado será considerado homogéneo y estático, y lo llamamos *estado de equilibrio*. Todos los campos que describen al fluido son constantes, y particularmente, la velocidad \vec{u} es nula. A este estado en ocasiones se le denomina *quiescente*, [Pierce 1989] p. 14. En tal reposo los elementos de fluido están en equilibrio termodinámico entre sí.

Una perturbación local puede romper el equilibrio termodinámico entre los elementos de fluido. Estos, entonces, intercambiarán cargas —masa, momento y energía—, y en general darán lugar a ondas en el fluido que es posible reconocer y estudiar. Éste es el fenómeno, *acústico*, que se pretende reproducir en este trabajo.

Denotemos entonces nuestros estados de equilibrio con un subíndice 0, los asumimos constantes y reescribimos las variables p , T , ρ y s como

$$p = p_0 + p' , \quad (32a)$$

$$T = T_0 + T' , \quad (32b)$$

$$\rho = \rho_0 + \rho' , \quad (32c)$$

$$s = s_0 + s' , \quad (32d)$$

donde aquellas primadas son las perturbaciones. Para tener más precisión en las magnitudes, tomemos el número de Mach

$$\epsilon = \frac{u}{c_0}$$

donde $u = |\vec{u}|$, y c_0 es una constante que será precisada en la sección 2.9. Supongamos que ϵ es pequeño, y que los cocientes de las perturbaciones de las otras variables (excepto s) con respecto a sus estados de equilibrio son del mismo orden, es decir,

$$\frac{\rho'}{\rho_0}, \frac{p'}{p_0}, \frac{T'}{T_0} = O(\epsilon) \quad \epsilon \ll 1 . \quad (33)$$

El uso del parámetro ϵ permite determinar el orden de cada término en las ecuaciones de conservación. Por ejemplo, para el caso de la conservación de masa (10), al usar (32) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) &= 0, \\ \frac{\partial(\rho_0 + \rho')}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho_0 + \rho')\vec{u}) &= 0, \\ \underbrace{\frac{\partial \rho'}{\partial t}}_{\epsilon} + \underbrace{\rho_0 \nabla \cdot \vec{u}'}_{\epsilon} + \underbrace{\vec{u}' \cdot \nabla \rho'}_{\epsilon^2} + \underbrace{\rho' \nabla \cdot \vec{u}'}_{\epsilon^2} &= 0, \end{aligned} \quad (34)$$

donde $\vec{u}' = \vec{u}$ dado que $\vec{u}_0 = 0$. Lo que se encuentra debajo corresponde al orden de cada término, que reconocemos por medio de la cantidad de variables primadas que aparecen, [Pierce 1989] p. 14, incluso tomando en cuenta que éstas aparezcan derivadas [Blackstock 2000] p. 37. En este caso tenemos términos de primero y segundo orden.

2.8 FLUIDO LEVEMENTE TERMOVISCOSO

La entropía por unidad de masa, s , es diferente a los parámetros que aparecen en (33), en principio, porque no es sencillo medir el valor de s_0 . Sin embargo, efectivamente resulta importante que s' sea pequeño. Observando la ecuación (30) es posible inferir el orden de s' con respecto a ϵ . Al usar (32) en el lado izquierdo de (30)

$$\begin{aligned} \rho T \frac{Ds}{Dt} &= (\rho_0 + \rho')(T_0 + T') \frac{Ds_0 + s'}{Dt} \\ &= \underbrace{\rho_0 T_0 \frac{Ds'}{Dt}}_{s'} + \underbrace{\rho_0 T' \frac{Ds'}{Dt}}_{\epsilon s'} + \underbrace{\rho' T_0 \frac{Ds'}{Dt}}_{\epsilon s'} + \underbrace{\rho' T' \frac{Ds'}{Dt}}_{\epsilon^2 s'}, \end{aligned}$$

sin importar el orden de s' con respecto a ϵ , el término más importante aquí es el primero. En el lado derecho, como todas las variables se encuentran dentro de derivadas, se tiene simplemente

$$\begin{aligned} \kappa \nabla^2 T + \mu_B (\nabla \cdot \vec{u})^2 + \frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} \right)^2 \\ = \underbrace{\kappa \nabla^2 T'}_{\epsilon} + \underbrace{\mu_B (\nabla \cdot \vec{u}')^2}_{\epsilon^2} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u'_k}{\partial x_k} \right)^2}_{\epsilon^2}. \end{aligned} \quad (35)$$

Esto nos indica, bajo el criterio que se ha establecido, que el cambio en la entropía de una partícula de fluido es de orden ϵ

$$\frac{Ds'}{Dt} = O(\epsilon), \quad \text{es decir,} \quad s' = O(\epsilon).$$

Sin embargo, en todos los términos de (35) hay coeficientes, constantes, que también afectan el tamaño del término. Por ejemplo, veamos el término correspondiente a $\nabla^2 T$. Si con la adimensionalización adecuada, sucediera que su coeficiente fueran aproximadamente 10^{-6} , entonces para $\epsilon \approx 10^{-6}$ el término resulta de orden ϵ^2 ; para $\epsilon \approx 10^{-3}$ resulta de orden ϵ^3 ; y solamente para ϵ

mucho más pequeño el término resulta eventualmente de orden ϵ . Con los otros dos términos del lado derecho se puede hacer un análisis análogo.

Entonces añadimos otra hipótesis: nos restringiremos a estudiar un *fluido levemente termoviscoso*, donde los coeficientes μ, μ_B, κ son suficientemente pequeños para que

$$s' = O(\epsilon^2) . \quad (36)$$

Debe señalarse que es posible demostrar, [Hamilton y Morfey 1998] p. 51, que cerca de paredes rígidas esta hipótesis pierde validez, por lo tanto, las ecuaciones que derivaremos usando (36) no describen adecuadamente esta pequeña región.

2.9 ACÚSTICA LINEAL NO TERMOVISCOSA

Si expresamos las ecuaciones de conservación (11), (19), (30), en su versión sin pérdidas $\kappa = \mu = \mu_B = 0$, y las ecuaciones de estado (31), en términos de las variables primadas, y conservamos solamente los términos a orden ϵ , después de un poco de manipulación algebraica, resulta que

$$\frac{Ds}{Dt} = 0 , \quad (37)$$

y tenemos la bien conocida ecuación de onda lineal

$$\square^2 p' = 0 . \quad (38)$$

En esta expresión

$$\square^2 = \nabla^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

es el operador de D'Alembert, y

$$c_0^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq}} , \quad (39)$$

donde los subíndices en la derecha indican que la derivación se hace a entropía constante, y luego se evalúa en el estado de equilibrio, $\rho = \rho_0, s = s_0$. Es bien conocido que las soluciones de (38) viajan con una velocidad característica cuya magnitud es c_0 , y sin deformarse en el caso de ondas planas.

Es importante señalar que, como se ha hecho notar en la sección 2.8, la expresión (37) no resulta solamente de suponer ϵ suficientemente pequeño, sino de fijar, a mano, los parámetros termoviscosos como nulos. Es decir, la ecuación (38) no es una descripción que se cumple para señales suficientemente pequeñas, sino una simplificación útil cuando la atenuación no es relevante.

2.10 ECUACIÓN DE WESTERVELT

La ecuación de onda descrita en la sección 2.9 ha sido obtenida con dos supuestos. Primero, se desprecia la atenuación termoviscosa. Y segundo, se busca una solución a primer orden sobre un estado de equilibrio quiescente, es decir, una perturbación pequeña sobre el fluido en reposo. Debido a esto último, dicho modelo debe dejar de ser válido para una perturbación suficientemente grande. Efectivamente, en los sistemas experimentales, en ondas con suficiente amplitud, se observan fenómenos que no es posible describir mediante la ecuación de onda lineal. Entonces, para poder describirlos es natural buscar una ecuación que tome en cuenta términos de orden superior. Del mismo modo, quisiéramos incorporar también en esta ecuación una primera aproximación a la atenuación termoviscosa, antes despreciada. Como se muestra a continuación, un modelo con tales características es la ecuación de Westervelt.

En su forma estándar, la ecuación de Westervelt está dada por Hamilton y Morfey [1998]

$$\square^2 p' + \frac{\delta}{c_0^4} \frac{\partial^3 p'}{\partial t^3} = \frac{-\beta}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2}, \quad (40)$$

donde p' es la perturbación acústica de presión, c_0 es la velocidad del sonido correspondiente a la ecuación (38), y a la que en ocasiones se le llama de *señales pequeñas*, β es el coeficiente de no linealidad [Beyer 1998], cuya definición y cualidades se describen al final de esta sección, y donde

$$\delta = \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{4}{3} \mu + \mu_B \right) + \frac{\kappa}{\rho_0} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \quad (41)$$

se denomina difusividad del sonido [Lighthill 1956], c_v es calor específico a volumen constante, y c_p es calor específico a presión constante.

A continuación será expuesto un desarrollo para obtener esta ecuación, basado en Hamilton y Morfey [1998] p. 49-55. Se han resaltado los detalles porque constituyen la base del planteamiento expuesto en la sección 2.11. En la figura 1 se muestra un esquema que ilustra este desarrollo. En la parte superior se denotan las leyes de conservación y las ecuaciones de estado, mismas que al ser afectadas por las hipótesis en los costados, se van modificando hasta que en la parte inferior del esquema se llega al resultado deseado.

Partimos de las ecuaciones de conservación: de masa (10), de momento (21), de energía (30) y las ecuaciones de estado (31). Primero reescribiremos las ecuaciones en términos de las perturbaciones, expresiones (32), para luego desarrollar, reconocer el orden de cada término y conservar solamente algunos. En principio se conservarán solamente los términos de orden menor o igual a ϵ^2 , aunque esto no siempre es inmediato, por lo que se ofrece una discusión en los casos que lo requieren.

La ecuación de conservación de masa ya se ha desarrollado de esta manera, en la sección 2.7, ecuación (34). Se observa entonces que los términos son de orden ϵ y ϵ^2 , y en este caso los conservamos todos,

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}' = -\rho' \nabla \cdot \vec{u}' - \vec{u}' \cdot \nabla \rho'. \quad (42)$$

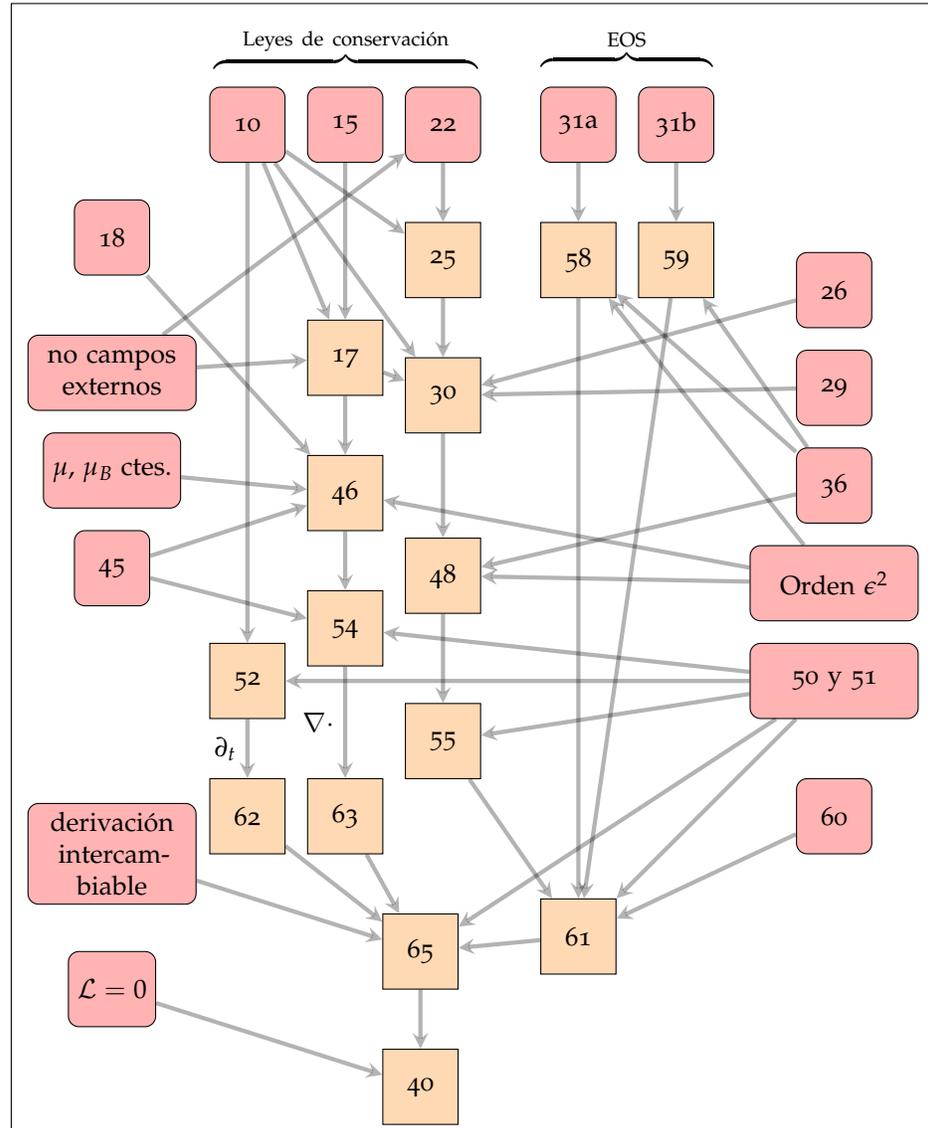


Figura 1. Obtención de la ecuación de Westervelt.

Para (21), al usar (32), tenemos

$$\begin{aligned} \left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu\right) \nabla^2 \vec{u}' + \left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu\right) \nabla \times (\nabla \times \vec{u}') &= \rho \frac{D\vec{u}'}{Dt} + \nabla p, \\ &= (\rho_0 + \rho') \left(\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \vec{u}' \cdot \nabla \vec{u}' \right) + \nabla(p_0 + p'), \\ &= \rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \rho_0 \vec{u}' \cdot \nabla \vec{u}' + \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \rho' \vec{u}' \cdot \nabla \vec{u}' + \nabla p'. \end{aligned}$$

Usando ahora la identidad

$$\vec{u}' \cdot \nabla \vec{u}' = \frac{1}{2} \nabla |u'|^2 - \vec{u}' \times (\nabla \times \vec{u}'),$$

al desarrollar podemos reconocer el orden de cada término

$$\begin{aligned} 0 &= \underbrace{\rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t}}_{\epsilon} + \underbrace{\rho_0 \frac{1}{2} \nabla |u'|^2}_{\epsilon^2} - \underbrace{\rho_0 \vec{u}' \times (\nabla \times \vec{u}')}_{\epsilon^2} \\ &\quad + \underbrace{\rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t}}_{\epsilon^2} + \underbrace{\rho' \frac{1}{2} \nabla |u'|^2}_{\epsilon^3} - \underbrace{\rho' \vec{u}' \times (\nabla \times \vec{u}')}_{\epsilon^3} + \underbrace{\nabla p'}_{\epsilon} \\ &\quad - \underbrace{\left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu\right) \nabla^2 \vec{u}'}_{\epsilon} - \underbrace{\left(\mu_B + \frac{1}{3}\mu\right) \nabla \times (\nabla \times \vec{u}')}_{\epsilon}. \end{aligned} \quad (43)$$

Mediciones experimentales, [Pierce 1989] p. 513, indican que los valores μ y μ_B son variables, cuya variación con respecto a su valor en el estado de equilibrio es de orden ϵ , del mismo modo en que lo expresa la ecuación (33). Si se quisiera tomar esto en cuenta, para el desarrollo que se ha mostrado, debería ser desde la ecuación (19). De cualquier modo, en tal caso los dos últimos términos de la expresión (43) tendrían una contribución de segundo orden, que como μ y μ_B se consideran constantes, se ha despreciado. Entonces, salvo este detalle, a orden ϵ^2 tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \rho_0 \frac{1}{2} \nabla |u'|^2 - \rho_0 \vec{u}' \times (\nabla \times \vec{u}') + \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \nabla p' \\ &\quad - \left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu\right) \nabla^2 \vec{u}' - \left(\mu_B + \frac{1}{3}\mu\right) \nabla \times (\nabla \times \vec{u}'). \end{aligned} \quad (44)$$

Ahora, dado que nos hemos restringido a un fluido levemente termoviscoso, sección 2.8, se puede considerar

$$\nabla \times \vec{u} = 0 \quad (45)$$

en regiones separadas al menos del orden de una longitud de onda de las superficies sólidas, [Hamilton y Morfey 1998] p. 50. Por lo tanto, para estas regiones (44) queda

$$0 = \rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \rho_0 \frac{1}{2} \nabla |u'|^2 + \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + \nabla p' - \left(\mu_B + \frac{4}{3}\mu\right) \nabla^2 \vec{u}'. \quad (46)$$

Observe finalmente que, de acuerdo a la discusión que da lugar a la ecuación (36), el último término de la expresión (46) sería de segundo orden y no de primero, pero esto no plantea ninguna diferencia, ya que lo hubiéramos conservado de todos modos.

La ecuación de conservación de energía (30), también ha sido desarrollada ya, sección 2.8, pero vayamos un poco más lejos. Al aplicar (32) del lado izquierdo tenemos

$$\begin{aligned}
 \rho T \frac{Ds}{Dt} &= (\rho_0 + \rho')(T_0 + T') \frac{Ds_0 + s'}{Dt} \\
 &= (\rho_0 + \rho')(T_0 + T') \left(\frac{\partial s_0 + s'}{\partial t} + \vec{u}' \cdot \nabla(s_0 + s') \right) \\
 &= \underbrace{\rho_0 T_0 \frac{\partial s'}{\partial t}}_{\epsilon^2} + \underbrace{\rho_0 T_0 \vec{u}' \cdot \nabla s'}_{\epsilon^3} + \underbrace{\rho_0 T' \frac{\partial s'}{\partial t}}_{\epsilon^3} + \underbrace{\rho_0 T' \vec{u}' \cdot \nabla s'}_{\epsilon^4} \\
 &\quad + \underbrace{\rho' T_0 \frac{\partial s'}{\partial t}}_{\epsilon^3} + \underbrace{\rho' T_0 \vec{u}' \cdot \nabla s'}_{\epsilon^4} + \underbrace{\rho' T' \frac{\partial s'}{\partial t}}_{\epsilon^4} + \underbrace{\rho' T' \vec{u}' \cdot \nabla s'}_{\epsilon^5},
 \end{aligned}$$

donde el orden de los términos se ha ajustado usando el supuesto expresado en (36). Se reconoce ahora de manera más precisa que el término dominante en este caso es el primero, y solamente éste conservaremos. En el lado derecho, como se ha dicho, tenemos

$$\begin{aligned}
 \kappa \nabla^2 T + \mu_B (\nabla \cdot \vec{u})^2 + \frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} \right)^2 \\
 = \underbrace{\kappa \nabla^2 T'}_{\epsilon^2} + \underbrace{\mu_B (\nabla \cdot \vec{u}')^2}_{\epsilon^3} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \sum_{ij} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u'_k}{\partial x_k} \right)^2}_{\epsilon^3}. \tag{47}
 \end{aligned}$$

También aquí el orden de los términos se ha corregido de acuerdo a la discusión que da lugar a la expresión (36). En esta expresión se observan la contribución térmica y las contribuciones mecánicas al aumento de la entropía de una partícula de fluido, de segundo y tercer orden, respectivamente. Nos quedaremos solamente con el primer término, la contribución térmica. Entonces la aproximación de (30) que usaremos es

$$\rho_0 T_0 \frac{\partial s'}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T'. \tag{48}$$

Note que al igual que lo escogido para la conservación de masa y momento, la ecuación (48) es de orden ϵ^2 , pero en este caso sólo a través del supuesto de fluido levemente termoviscoso.

Por otra parte, con el fin de ilustrar una herramienta que se usará en desarrollos posteriores, tomemos la ecuación de conservación de masa, escrita a orden ϵ

$$\nabla \cdot \vec{u}' = \frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + O(\epsilon^2)$$

y la sustituimos en un término de orden ϵ^2 , de la ecuación de conservación de masa (42) completa, es decir, a segundo orden

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}' &= -\rho' \nabla \cdot \vec{u}' - \vec{u}' \cdot \nabla \rho' \\
&= -\rho' \left(\frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + O(\epsilon^2) \right) - \vec{u}' \cdot \nabla \rho' \\
&= -\left(\rho' \frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + O(\epsilon^3) \right) - \vec{u}' \cdot \nabla \rho' \\
&= \frac{\rho'}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t} - \vec{u}' \cdot \nabla \rho'.
\end{aligned} \tag{49}$$

Lo que se obtiene es un término de orden ϵ^2 diferente y un término de orden ϵ^3 . Si se desprecia este último se obtiene una ecuación diferente, pero que es igualmente válida a orden ϵ^2 . Esto es una ilustración de lo que usaremos repetidamente

Al sustituir expresiones a primer orden en términos a segundo orden, de ecuaciones a segundo orden, se obtienen expresiones igualmente válidas a segundo orden. (50)

Y de manera análoga puede verse que

Al sustituir expresiones a primer orden en términos a primer orden, de ecuaciones a primer orden, se obtienen expresiones igualmente válidas a primer orden. (51)

Entonces, en la ecuación (42), el primer término de la derecha, al sustituir $p' = c_0^2 \rho'$ y $\nabla \cdot \vec{u}' = \frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t}$, queda como

$$\begin{aligned}
-\rho' \nabla \cdot \vec{u}' &= -\left(\frac{p'}{c_0^2} \right) \left(\frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t} \right) \\
&= \frac{p'}{\rho_0 c_0^2} \left(\frac{1}{c_0^2} \frac{\partial p'}{\partial t} \right) \\
&= \frac{p'}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial p'}{\partial t} \\
&= \frac{1}{2\rho_0 c_0^4} \frac{\partial (p')^2}{\partial t},
\end{aligned}$$

y el segundo término de la derecha se desarrolla de manera análoga con $p' = c_0^2 \rho'$, pero usando la relación $\rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} = -\nabla p'$, que además de ser de primer orden corresponde al caso no viscoso,

$$\begin{aligned}
-\vec{u}' \cdot \nabla \rho' &= -\frac{\vec{u}'}{c_0^2} \cdot \nabla p' \\
&= \frac{\vec{u}'}{c_0^2} \cdot \left(\rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} \right) \\
&= \frac{\rho_0}{2c_0^2} \frac{\partial (u')^2}{\partial t}.
\end{aligned}$$

Entonces reescribimos (42) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}' &= -\rho' \nabla \cdot \vec{u}' - \vec{u}' \cdot \nabla \rho' \\ &= \frac{1}{2\rho_0 c_0^4} \frac{\partial (p')^2}{\partial t} + \frac{\rho_0}{2c_0^2} \frac{\partial (u')^2}{\partial t} \\ &= \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial (p')^2}{\partial t} - \frac{1}{2\rho_0 c_0^4} \frac{\partial (p')^2}{\partial t} + \frac{\rho_0}{2c_0^2} \frac{\partial (u')^2}{\partial t}, \end{aligned}$$

es decir,

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}' = \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial (p')^2}{\partial t} + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}, \quad (52)$$

donde al factor \mathcal{L} se le llama *densidad lagrangiana de segundo orden*, [Hamilton y Morfey 1998] p. 53,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho_0 (u')^2 - \frac{(p')^2}{2\rho_0 c_0^2}. \quad (53)$$

En la expresión (46) la aproximación correspondiente a $\nabla^2 \vec{u}'$ podemos obtenerla usando (51)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{u}' &= \frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t}, \\ \nabla(\nabla \cdot \vec{u}') &= \frac{-1}{\rho_0} \nabla \frac{\partial \rho'}{\partial t}, \\ \nabla^2 \vec{u}' + \nabla \times (\nabla \times \vec{u}') &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \nabla \frac{\partial \rho'}{\partial t}, \\ \nabla^2 \vec{u}' &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \nabla \frac{\partial \rho'}{\partial t}. \end{aligned}$$

Usando nuevamente (51), desarrollamos también

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} &= -\nabla p', \\ \rho_0 p' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} &= -p' \nabla p', \\ \rho_0 c_0^2 \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \nabla (p')^2, \\ \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} &= -\frac{1}{2c_0^2 \rho_0} \nabla (p')^2. \end{aligned}$$

Luego lo usamos junto con (53), como

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{L} &= \nabla \left(\frac{1}{2} \rho_0 (u')^2 - \frac{(p')^2}{2\rho_0 c_0^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \rho_0 \nabla (u')^2 - \frac{1}{2\rho_0 c_0^2} \nabla (p')^2 \\ &= \frac{1}{2} \rho_0 \nabla (u')^2 + \rho' \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t}. \end{aligned}$$

Al sustituir estos resultados en (46), usando (50), obtenemos

$$\rho_0 \frac{\partial \bar{u}'}{\partial t} + \nabla p' = \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla \frac{\partial p'}{\partial t} - \nabla \mathcal{L}. \quad (54)$$

Análogamente, sustituyendo $\nabla^2 T' = c_0^{-2} \frac{\partial^2 T'}{\partial t^2}$ en (48) tenemos

$$\begin{aligned} \rho_0 T_0 \frac{\partial s'}{\partial t} &= \frac{\kappa}{c_0^2} \frac{\partial^2 T'}{\partial t^2}, \\ \rho_0 T_0 s' &= \frac{\kappa}{c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t}, \\ s' &= \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t}. \end{aligned} \quad (55)$$

Ahora hagamos uso de la ecuación de estado

$$p = p(\rho, s),$$

cuyo desarrollo de Taylor a segundo orden es

$$\begin{aligned} p &= p(\rho_0, s_0) + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \rho' + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} s' \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} \right)_{s, \text{eq.}} (\rho')^2 + \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho} \right)_{s, \text{eq.}} s' \rho' + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial s^2} \right)_{\rho, \text{eq.}} (s')^2 + \dots \end{aligned}$$

donde los subíndices indican que la derivación se hace a entropía s , o densidad ρ , constante, y luego se evalúa en el estado de equilibrio, $\rho = \rho_0$, $s = s_0$. Tomando en cuenta la expresión (36), a orden ϵ^2 esta ecuación queda como

$$p = p_0 + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \rho' + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} s' + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} \right)_{s, \text{eq.}} (\rho')^2, \quad (56)$$

y mediante las definiciones usuales [Beyer 1997],

$$A = \rho_0 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}}, \quad B = \rho_0^2 \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} \right)_{s, \text{eq.}}, \quad (57)$$

y la expresión (39), reescribimos (56) como

$$p' = c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} s'.$$

Al sustituir (55) tenemos

$$p' = c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t}. \quad (58)$$

Ahora usemos la otra ecuación de estado

$$T = T(\rho, s) ,$$

que desarrollaremos en serie de Taylor a primer orden

$$T = T_0 + \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \rho' + \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} s' ,$$

y conservamos solamente los términos a orden ϵ , tomando en cuenta (36),

$$T' = \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \rho' . \quad (59)$$

Descartar los términos a orden ϵ^2 podría parecer una inconsistencia, pero no lo es, porque después será sustituido al modo que lo indica (50).

Luego, usando además $\rho' = p'/c_0^2$, y despejando ρ' de la expresión (58), tenemos

$$\rho' = \frac{1}{c_0^2} p' - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^6} \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) .$$

Ahora usando las siguientes propiedades termodinámicas [Callen 1985],

$$c_v - c_p = \frac{TV\alpha^2}{N\kappa} , \quad (60a)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial s'}{\partial V} \right)_T , \quad (60b)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial s'} \right)_V = - \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_{s'} , \quad (60c)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = - \left(\frac{\partial s'}{\partial p} \right)_T . \quad (60d)$$

donde α es el coeficiente de expansión térmica, tenemos

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{1}{c_0^2} p' - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^6} \rho_0^2 \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) \\ &= \frac{1}{c_0^2} p' - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^6} \rho_0^2 \frac{RT_0 c_0^2}{c_v c_p \rho_0^2} \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) \\ &= \frac{p'}{c_0^2} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 c_0^4} \left(\frac{c_p - c_v}{c_p c_v} \right) \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) \\ &= \frac{p'}{c_0^2} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 c_0^4} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) . \end{aligned} \quad (61)$$

Derivando (52) con respecto a t , tenemos

$$\frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} + \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \vec{u}' = \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial t^2} , \quad (62)$$

y tomando la divergencia de (54), tenemos

$$\rho_0 \nabla \cdot \frac{\partial \bar{u}'}{\partial t} + \nabla^2 p' = \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \frac{\partial p'}{\partial t} - \nabla^2 \mathcal{L}. \quad (63)$$

Si suponemos que

$$\nabla \cdot \frac{\partial \bar{u}'}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \bar{u}',$$

lo cual se cumple siempre que \bar{u}' sea una función suave, al tomar la diferencia de (62) y (63) se obtiene

$$\begin{aligned} \nabla^2 p' - \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \frac{\partial p'}{\partial t} - \nabla^2 \mathcal{L} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial t^2} \\ &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \frac{\partial p'}{\partial t} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \left(\nabla^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{L}, \end{aligned}$$

y usando (61) tenemos

$$\begin{aligned} \nabla^2 p' - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{c_0^2} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} (p')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0 c_0^4} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \left(\frac{\partial p'}{\partial t} \right) \right) \\ &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \frac{\partial p'}{\partial t} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \left(\nabla^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{L}, \\ \nabla^2 p' - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} + \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{B}{2A} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} + \frac{\kappa}{\rho_0 c_0^4} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \left(\frac{\partial^3 p'}{\partial t^3} \right) \\ &= \frac{-1}{\rho_0 c_0^2} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \frac{\partial p'}{\partial t} - \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \left(\nabla^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{L}. \end{aligned}$$

Usando ahora

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{\partial^2 p'}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 p', \\ \nabla^2 p' &= \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2}, \end{aligned}$$

tenemos

$$\begin{aligned} \square^2 p' &= - \left(\frac{1}{\rho_0 c_0^4} \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) + \frac{\kappa}{\rho_0 c_0^4} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \right) \frac{\partial^3 p'}{\partial t^3} \\ &\quad - \left(1 + \frac{B}{2A} \right) \frac{1}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \left(\nabla^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{L}. \end{aligned}$$

Luego, usando la definición para δ , expresión (41), y la definición

$$\beta = 1 + \frac{B}{2A}, \quad (64)$$

[Beyer 1998] p. 29, tenemos

$$\square^2 p' = -\frac{\delta}{c_0^4} \frac{\partial^3 p'}{\partial t^3} - \frac{\beta}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2} - \left(\nabla^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{L}. \quad (65)$$

Aanonsen *et al.* [1984] p.752, indica que la contribución de \mathcal{L} es local, mientras que el resto de los términos no lineales corresponden a efectos acumulativos. Si despreciamos los primeros frente a los segundos obtenemos la ecuación de Westervelt (40)

$$\square^2 p' + \frac{\delta}{c_0^4} \frac{\partial^3 p'}{\partial t^3} = \frac{-\beta}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2 (p')^2}{\partial t^2}.$$

Como se ha mencionado, esta es una ecuación de onda con dos términos adicionales, observamos que la magnitud de cada uno de estos términos está determinada por un coeficiente. En el primer término adicional aparece la difusividad del sonido δ , que incluye los factores termoviscosos. En el segundo término nuevo aparece el parámetro de no linealidad β , que es adimensional, y cuya naturaleza puede observarse en las expresiones (56), (57) y (58): es un número que describe qué tan importante es el segundo término, frente al primero, de la serie de Taylor de p' con respecto a ρ' , es decir, qué tan importante es esa no linealidad. En lo que concierne a β , el caso lineal se da cuando el segundo término de dicha serie de Taylor es nulo, es decir $\beta = 1$. Sin embargo, en este caso no desaparece el término no lineal de la ecuación de Westervelt, lo que indica que el caso lineal se tendrá solamente cuando, además de $\beta = 1$, la amplitud de la perturbación sea muy baja.

Finalmente, el carácter acumulativo de la propagación no lineal implica que, para valores moderados de amplitud y parámetro de no linealidad, la no linealidad podría no ser aparente sino hasta que la señal haya recorrido una distancia larga.

2.11 REFORMULACIÓN

En la sección 2.10 se ha descrito la ecuación de Westervelt y se ha expuesto un desarrollo para obtenerla. Con el fin de aplicar métodos numéricos de volumen finito es necesaria su reformulación en términos de leyes de conservación, o más precisamente, es necesario un conjunto de leyes de conservación tan consistente como sea posible con la ecuación de Westervelt.

Tomemos como punto de partida las leyes de conservación de masa, momento y energía. Escritas en una forma que enfatiza su carácter de leyes de conservación

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} - \sigma) = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_T) + \nabla \cdot (\vec{u} \rho E_T - \sigma \cdot \vec{u} + \vec{q}) = 0. \quad (24)$$

Como se mencionó previamente, para resolver estas ecuaciones, incluso de manera numérica, algunas suposiciones son necesarias, en este caso como consecuencia de que el número de variables

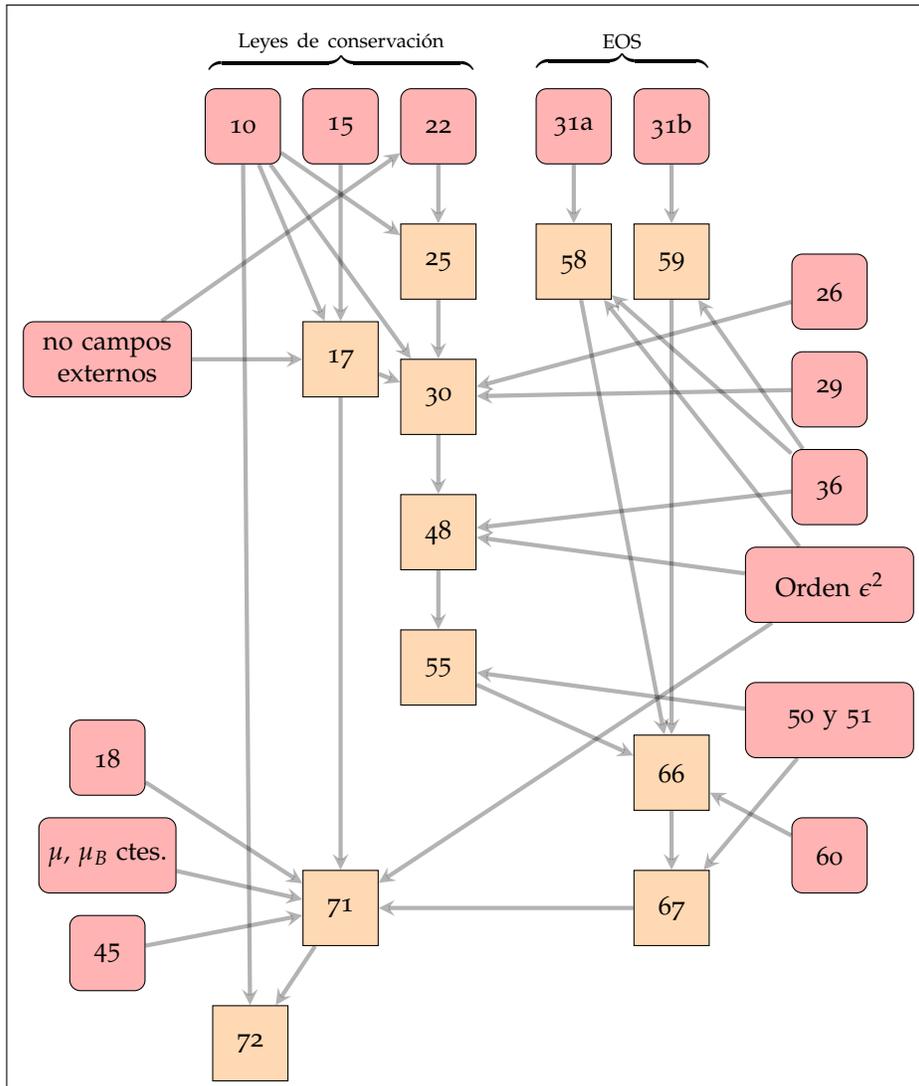


Figura 2. Reformulación de la ecuación de Westervelt como leyes de conservación.

es mayor que el número de relaciones entre ellas. Entonces, buscaremos eliminar variables de forma explícita y consistente con las hipótesis usadas para obtener la ecuación de Westervelt.

Primero observamos el desarrollo realizado para la ecuación de conservación de energía, expresada en términos de s' . En este caso bajo el supuesto de fluido levemente termoviscoso, sección 2.8, a segundo orden se tiene

$$s' = \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t}. \quad (55)$$

Por otro lado, tomemos directamente los desarrollos hechos para las ecuaciones de estado,

$$p' = c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \text{eq.}} \frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t}. \quad (58)$$

$$T' = \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \rho'. \quad (59)$$

donde aparecen algunos factores que no conocemos, y que eliminaremos sustituyendo las expresiones (55) y (60), junto con (59), en (58). Entonces tenemos

$$\begin{aligned} p' &= c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \rho_0^2 \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}} \left(\frac{\kappa}{\rho_0 T_0 c_0^2} \frac{\partial T'}{\partial t} \right) \\ &= c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \frac{\kappa \rho_0}{T_0 c_0^2} \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{s, \text{eq.}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \frac{\kappa \rho_0}{T_0 c_0^2} \frac{RT_0 c_0^2}{c_v c_p \rho_0^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \frac{\kappa R}{c_v c_p \rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 + \frac{\kappa}{\rho_0} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \frac{\partial \rho}{\partial t}. \end{aligned} \quad (66)$$

Esta es una expresión de p' como función de ρ' y de hecho, si se usa en (16), permite obtener un sistema de cuatro ecuaciones, (10) y (16), en cuatro incógnitas, ρ y \vec{u} . Sin embargo, se escoge no usarlas en esta forma por dos razones. Primero, los parámetros que definen cuantitativamente el carácter termoviscoso del medio, μ , μ_B , κ , c_v y c_p , no están completamente agrupados en un solo factor, se necesitaría conocer el valor de algunos de ellos de manera independiente. Y segundo, la presencia de derivadas dentro de los flujos, por ejemplo $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ en la ecuación (66), dificulta la implementación de un método de volumen finito. Una manera de resolver el segundo punto, que de manera fortuita también resuelve el primero, es reinterpretar las partes conflictivas del flujo como fuentes, [LeVeque 2002] p. 377. Esta posibilidad ha sido discutida, al respecto de la ecuación (2), en la sección 2.1.

Con este fin manipulemos un poco la ecuación (66), usando (50) mediante la relación a primer orden $\nabla \cdot \vec{u}' = \frac{-1}{\rho_0} \frac{\partial \rho'}{\partial t}$, para obtener

$$p = p_0 + c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 - \frac{\kappa}{\rho_0} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}', \quad (67)$$

que de hecho es equivalente a la ec. (40) en [Hamilton y Morfey 1998].

Procedemos del mismo modo con respecto a la ecuación (16). Para el término advectivo tenemos

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) &= \nabla \cdot ((\rho_0 + \rho') \vec{u} \otimes \vec{u}) \\ &= \nabla \cdot (\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho' \vec{u} \otimes \vec{u}) \\ &= \nabla \cdot (\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u}) + O(\epsilon^3),\end{aligned}\tag{68}$$

por lo que a orden ϵ^2 conservaremos sólo el primer término de la derecha. Para el otro término de flujo en (16), sabemos que cuando μ y μ_B son constantes, ec. (19), tenemos

$$\nabla \cdot \sigma = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \left(\mu_B + \frac{1}{3} \mu \right) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}).$$

Usando ahora la identidad (20) y la hipótesis $\nabla \times \vec{u} = 0$, ec. (45), tenemos

$$\nabla \cdot \sigma = -\nabla p + \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \vec{u}.\tag{69}$$

Sustituyamos (67), (68), y (69), en (16) y a orden ϵ^2 tenemos*

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u} + \mathbf{I} \left(p_0 + c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 \right) \right) \\ = \left(\mu_B + \frac{4}{3} \mu \right) \nabla^2 \vec{u} + \kappa \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}).\end{aligned}\tag{70}$$

Utilizando nuevamente la hipótesis $\nabla \times \vec{u} = 0$ en la identidad (20), y tomando en cuenta que $\nabla \cdot p_0 = 0$, reescribimos (70) como

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u} + \mathbf{I} \left(c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 \right) \right) = \rho_0 \delta \nabla^2 \vec{u}.\tag{71}$$

Luego de estas sustituciones, en la ecuación (71), además del término con derivada temporal, encontramos tres tipos de términos: un término lineal, dos no lineales, y un término disipativo que completa el coeficiente de difusividad del sonido δ , que tiene unidades de viscosidad cinemática, tal como lo presenta Lighthill [1956], dado por la expresión (41)

$$\delta = \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{4}{3} \mu + \mu_B \right) + \frac{\kappa}{\rho_0} \left(\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right).$$

Esto resuelve los dos problemas arriba planteados. Por un lado, todos los parámetros relacionados con el carácter termoviscoso del medio quedan agrupados en un solo factor δ . Y por otro lado, no aparecen términos con derivadas en el flujo, en lugar de eso aparece un término fuente del lado derecho.

* Este resultado también puede obtenerse haciendo manipulaciones sobre la expresión (46), usando la conservación de masa y el hecho de que $\nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) = \vec{u}(\nabla \cdot \vec{u}) + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}$.

Entonces, las ecuaciones que constituyen la reformulación de la ecuación de Westervelt (40) en leyes de conservación, y la base de la implementación de volumen finito presentada en este trabajo, son

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (72a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u} + \mathbf{I} \left(c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 \right) \right) = \rho_0 \delta \nabla^2 \vec{u}. \quad (72b)$$

Se observa que en la obtención de las ecuaciones (72) no fue necesario despreciar el término de densidad lagrangiana de segundo orden \mathcal{L} como lo hacen Hamilton y Morfey [1998] en su derivación de la ecuación de Westervelt. Como resultado, podemos considerar que las ecuaciones (72) constituyen un modelo ligeramente más general que la ecuación de Westervelt, que de hecho podría ser usado para evaluar la importancia de ese término, señalado como una contribución local [Aanonsen *et al.* 1984] p. 752, en condiciones apropiadas. Una segunda hipótesis que tampoco se ha usado en la obtención de (72), y sí en la obtención de la ecuación de Westervelt, es que no se ha intercambiado el orden en que se aplican segundas derivadas parciales. La hipótesis subyacente en esta manipulación es que tanto la función como sus derivadas —primera y segunda— sean continuas. Sin embargo, dada la presencia de viscosidad, que impide la formación de discontinuidades, no se espera que esta diferencia sea reflejada en resultados numéricos. La investigación de estos puntos se deja para trabajo futuro.

Observamos también que el caso sin pérdidas, donde

$$\mu = \mu_B = \kappa = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta = 0$$

al cual podemos llamar la versión homogénea del caso general, se expresa como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u} + \mathbf{I} \left(c_0^2 \rho' + c_0^2 \frac{1}{\rho_0} \frac{B}{2A} (\rho')^2 \right) \right) = 0,$$

que es, desde luego, una versión a segundo orden de las ecuaciones de Euler.

Dado que las únicas variables físicas que aparecen en las ecuaciones (72) son ρ y \vec{u} , y que la presión p en acústica es una variable importante, resultaría natural usar alguna versión de la ecuación de estado correspondiente a p , para recuperar su valor. Sin embargo, tanto en (56), en (66), como en el resto de las versiones, aparece algún factor que está ausente en (72), y por lo tanto su valor debería conocerse de manera independiente. En este trabajo se ha optado por usar la relación lineal

$$p' = c_0^2 \rho', \quad (73)$$

cuyo resultado contiene la distorsión no lineal del perfil generada acumulativamente en ρ , y no la relación no lineal local entre ρ y p . Como se ha mencionado en la discusión inmediatamente posterior a la ecuación (65), se espera que los efectos locales sean menores a los efectos acumulativos.

MÉTODO NUMÉRICO

Se comienza este capítulo con breves descripciones del problema de Riemann y el método de Godunov, lo que a su vez permite describir algunos aspectos generales de los métodos de volumen finito, en la sección 3.4. En las secciones posteriores se describen los particulares de la implementación correspondiente a las ecuaciones (72).

3.1 PROBLEMA DE RIEMANN

El problema de Riemann consiste en un sistema de leyes de conservación, sujeto a una condición inicial tipo Heaviside, [Sharma 2010] p. 44. Típicamente dicho sistema se encuentra en una, dos, o tres dimensiones espaciales, y su condición inicial se encuentra centrada en el origen de coordenadas. En el presente trabajo, como se ha usado un método de paso fraccionado, descritos en la sección 3.6, es suficiente considerarlo en una dimensión espacial

$$\frac{dq}{dt} + \frac{df(q)}{dx} = 0,$$

donde q y f son matrices columna de m entradas, con condición inicial

$$q(x, 0) = \begin{cases} q_l & \text{si } x < 0 \\ q_r & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

Este problema es una simplificación considerable del problema de condiciones iniciales general para leyes de conservación. Aún así, a través de sus soluciones se pueden conocer, al menos cualitativamente, los comportamientos esperados de las soluciones generales. Sin embargo, la solución general del problema de Riemann no es trivial de obtener, e incluso pueden encontrarse casos donde es demostrable que dicha solución no existe, [Sharma 2010] p. 48.

Por lo tanto, abordaremos el problema de Riemann primero en un caso muy sencillo, cuando se tiene solamente una ley de conservación (caso escalar), donde además $f(q)$ es tal que $\frac{df}{dq}$ no cambia de signo, siendo entonces bien creciente, o decreciente, es decir, monótona. Bajo esta última restricción decimos que f es *convexa*, aunque algunas veces se le llama así sólo cuando es creciente, y *cóncava* cuando es decreciente, [LeVeque 2002] p. 203. En la parte final de la sección,

será mostrado como algunos aspectos del caso escalar se pueden aplicar a un sistema que ha sido diagonalizado, y cuales son las limitaciones de este procedimiento.

Entonces, para un caso escalar y convexo, sea $X(t)$ una trayectoria que llamaremos curva característica. Ahora derivemos q con respecto a t sobre esta trayectoria

$$\frac{d q(X(t), t)}{d t} = \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{d X}{d t} \frac{\partial q}{\partial x},$$

y comparemos este resultado con la expresión cuasilineal de la ley de conservación

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{d f}{d q} \frac{\partial q}{\partial x} = 0.$$

Observamos que si se cumple que

$$\frac{d X}{d t} = \left. \frac{d f}{d q} \right|_{q(X(t), t)} \quad \forall t$$

entonces la derivada de q sobre la trayectoria es cero, es decir q es una constante sobre esta curva, que de hecho es recta porque

$$\frac{d X}{d t} = \left. \frac{d f}{d q} \right|_{q(X(t), t)} = \left. \frac{d f}{d q} \right|_{q(X(0), 0)}$$

es una constante, [Witham 1974] p. 20.

Entonces, sobre el plano (x, t) podemos trazar líneas rectas, cuya pendiente depende sólo de la condición inicial y sobre las cuales sabemos que q es constante. Dado que nuestra condición inicial es del tipo Heaviside pueden presentarse tres casos.

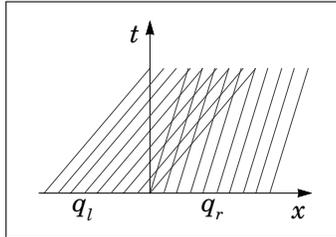


Figura 3. Curvas características del problema de Riemann, caso multivaluado.

El primero de ellos es

$$\left. \frac{d f}{d q} \right|_{q_l} > \left. \frac{d f}{d q} \right|_{q_r},$$

lo cual implica que las curvas características se cruzan, lo que significa que en un mismo punto la solución tendría más de un valor, figura 3. Como físicamente tal condición no es aceptable, se introduce una discontinuidad sobre la trayectoria $x_{sh}(t)$, a la izquierda de la cual las soluciones corresponden a q_l y a su derecha a q_r , figura 4. Dicha trayectoria puede encontrarse desarrollando la versión integral de la ley de conservación

$$\frac{d}{d t} \int_{x_1}^{x_2} q(x, t) dx = f(q(x_1, t)) - f(q(x_2, t)),$$

donde

$$x_1 < x_{sh} < x_2 ,$$

y entonces

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_{sh}} q(x, t) dx + \frac{d}{dt} \int_{x_{sh}}^{x_2} q(x, t) dx = f(q(x_1, t)) - f(q(x_2, t)) .$$

Ahora aplicamos la regla de Leibniz y obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{dx_{sh}}{dt} q_- + \int_{x_1}^{x_{sh}} \frac{\partial}{\partial t} q(x, t) dx - \frac{dx_{sh}}{dt} q_+ + \int_{x_{sh}}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} q(x, t) dx \\ = f(q(x_1, t)) - f(q(x_2, t)) , \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} q_- &= \lim_{x \rightarrow x_{sh}^-} q(x, t) , \\ q_+ &= \lim_{x \rightarrow x_{sh}^+} q(x, t) . \end{aligned}$$

Si ahora tomamos el límite de esta expresión cuando

$$x_1, x_2 \rightarrow x_{sh} ,$$

obtenemos

$$\frac{dx_{sh}}{dt} q_- + 0 - \frac{dx_{sh}}{dt} q_+ + 0 = f(q_-) - f(q_+) ,$$

y tenemos finalmente una expresión que se conoce como la condición de Rankine-Hugoniot, [Lax 2006] p. 167,

$$(q_+ - q_-) \frac{dx_{sh}}{dt} = f(q_+) - f(q_-) . \tag{74}$$

Este tipo de comportamiento da lugar a estructuras conocidas como *ondas de choque*, que se propagan sobre la trayectoria $x_{sh}(t)$.

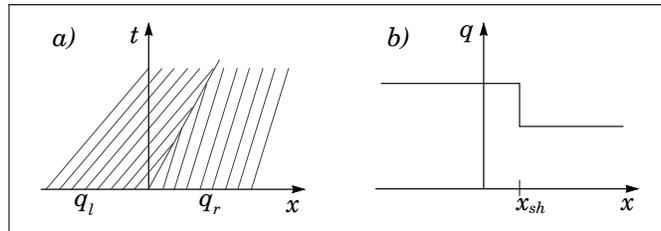


Figura 4. a) Curvas características del problema de Riemann, donde se muestra una onda de choque. b) Perfil de la onda de choque para un tiempo $t > 0$.

Es importante notar que esta definición de onda de choque es una idealización de lo que ocurre en los sistemas físicos. En dicho contexto se entiende onda de choque como un cambio abrupto, generado por la evolución no lineal del sistema, cercano a una discontinuidad, pero que no llega a formarse por la presencia de la difusividad. En el resto del documento se ha manejado el concepto onda de choque en este sentido.

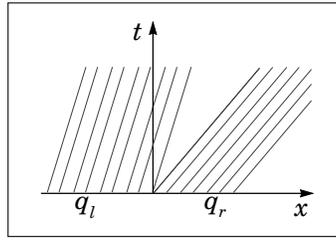


Figura 5. Curvas características del problema de Riemann, zona vacía.

El caso opuesto ocurre cuando

$$\left. \frac{df}{dq} \right|_{q_l} < \left. \frac{df}{dq} \right|_{q_r},$$

en cuya circunstancia aparece una zona donde aparentemente no pasa ninguna característica, figura 5. Lo que se hace en este caso es buscar curvas características que satisfagan la ley de conservación en esta zona. El problema es que hay varias soluciones matemáticamente válidas. Una de ellas es completamente análoga al caso de la onda de choque, es decir, se introduce una discontinuidad sobre una trayectoria que cumple con la expresión (74), a su izquierda se colocan características con pendiente $\left. \frac{df}{dq} \right|_{q_l}$ y a su derecha con pendiente $\left. \frac{df}{dq} \right|_{q_r}$, figura 6. Físicamente este tipo de solución no es aceptable, ya que si se aplica al caso de ecuaciones de Euler indicaría que una zona de menor presión avanza sobre una zona de mayor presión. Esto sería como observar el problema de expansión libre evolucionando en sentido inverso: violaría la segunda ley de la termodinámica. Con un criterio de causalidad es posible demostrar que la solución físicamente adecuada, que se denomina *entrópicamente correcta*, cumple con la llamada *condición entrópica de Lax*, [Sharma 2010] p. 22,

$$\left. \frac{df}{dq} \right|_{q_l} > \frac{dx_{sh}}{dt} > \left. \frac{df}{dq} \right|_{q_r}.$$

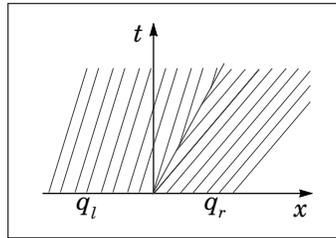


Figura 6. Curvas características del problema de Riemann, donde se muestra una solución entrópicamente incorrecta.

Esta solución entrópicamente correcta es única, y corresponde a características donde

$$\frac{df}{dq} = \frac{x}{t},$$

lo cual también determina el valor de q sobre dichas características. A este tipo de solución se le llama *onda de rarefacción*. Se ve como un abanico en el plano (x, t) , y como una rampa en el plano (x, q) , figura 7.

El tercer caso,

$$\left. \frac{df}{dq} \right|_{q_l} = \left. \frac{df}{dq} \right|_{q_r} ,$$

se presenta cuando f depende linealmente de q , entonces $\frac{df}{dq} = c_0$ es una constante, es decir, la ley de conservación es simplemente una ecuación de advección. Así pues, la discontinuidad presente en la condición inicial será propagada a velocidad c_0 , pero no la denominamos onda de choque, sino *discontinuidad de contacto*.

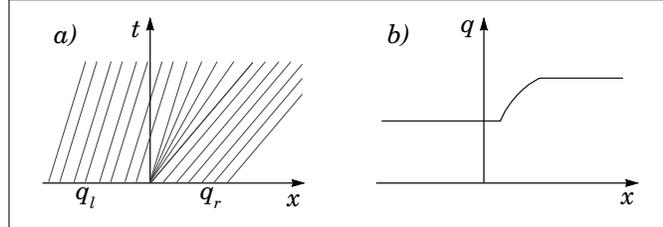


Figura 7. a) Curvas características del problema de Riemann, donde se muestra una onda de rarefacción. b) Perfil de la onda de rarefacción para un tiempo $t > 0$.

Como se ha mencionado antes, en el presente trabajo no será detallada la solución general del problema de Riemann (para sistemas no lineales de leyes de conservación). Sin embargo, para los desarrollos posteriores es importante observar su carácter autosimilar. Decimos que una función $q(x, t)$ es autosimilar, [Sharma 2010] p. 23, si puede ser expresada mediante alguna función ψ en la forma

$$q(x, t) = \psi(x/t) .$$

Dicha cualidad implica que la solución a un cierto tiempo, es solamente un cambio de escala sobre la solución a cualquier otro tiempo. Otra manera de ver esta propiedad es observando que q es constante sobre cualquier trayectoria $x = ct$, con c una constante arbitraria

$$q(ct, t) = \psi(ct/t) = \psi(c) .$$

Podemos ver que la solución $q(x, t)$ del problema de Riemann, incluso en el caso de sistemas no lineales, es autosimilar haciendo un cambio de escala

$$\xi = cx ,$$

$$\tau = ct ,$$

donde c es una constante arbitraria, y observando que se recupera el problema original tanto en el sistema de leyes de conservación

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} &= 0 , \\ \frac{1}{c} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial x} &= 0 , \\ \frac{\partial q}{\partial(ct)} + \frac{\partial f}{\partial(cx)} &= 0 , \\ \frac{\partial q}{\partial \tau} + \frac{\partial f}{\partial \xi} &= 0 , \end{aligned}$$

como en la condición inicial

$$\begin{aligned} q(x, 0) &= \begin{cases} q_l & \text{si } x < 0 \\ q_r & \text{si } x > 0, \end{cases} \\ q(cx, 0) &= \begin{cases} q_l & \text{si } cx < 0 \\ q_r & \text{si } cx > 0, \end{cases} \\ q(\xi, 0) &= \begin{cases} q_l & \text{si } \xi < 0 \\ q_r & \text{si } \xi > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Un primer paso que puede darse para encontrar la solución general del problema de Riemann es diagonalizar el sistema. Supongamos que existe un cambio de coordenadas $w = w(q)$ invertible, que diagonaliza el sistema, es decir, tal que el jacobiano $\frac{dq}{dw}$ cumple con

$$\frac{dq}{dw} = R,$$

donde R es tal que

$$\frac{df}{dq} = R\Lambda R^{-1},$$

y donde Λ es una matriz diagonal, con elementos s^p , donde el superíndice es solamente una numeración, y no denota potenciación. En estas nuevas variables el sistema se expresa como

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} = 0,$$

es decir

$$\frac{\partial w^p}{\partial t} + s^p \frac{\partial w^p}{\partial x} = 0, \quad p = 1, \dots, m,$$

que es un conjunto de m leyes de conservación en forma cuasilineal, con la ventaja de que s^p es un escalar, no una matriz jacobiana. Este sistema estaría desacoplado a no ser porque cada s^p es una función de todas las entradas de q . Además del problema de encontrar la diagonalización, este acoplamiento es lo que añade una dificultad al caso general con respecto al caso escalar.

Finalmente enunciaremos el teorema de Lax, [Sharma 2010] p. 48, con el cual podemos darnos una idea del panorama de la solución general

Suppose that each characteristic field is either genuinely nonlinear or linearly degenerate. Then the Riemann problem has a unique solution consisting of at most $(n + 1)$ constant states separated by elementary waves provided that the states q_l and q_r are sufficiently closed.

A grandes rasgos, la primera parte del enunciado requiere que s^p sea convexa, en un sentido semejante al que arriba hemos mencionado para $\frac{df}{dq}$ del caso escalar, o bien, que s^p sea una constante sobre ciertas curvas. Y la segunda parte indica que, para q_l y q_r no muy lejanos entre sí, la solución estará constituida por regiones donde q es constante separadas por ondas elementales, que son: ondas de choque, ondas de rarefacción, o discontinuidades de contacto.

3.2 MÉTODO DE GODUNOV

Partimos de un sistema de ecuaciones diferenciales en una dimensión espacial

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0,$$

donde q es el vector de cargas, con una condición inicial $q(x, t_n)$ para $t = t_n$.

Definimos celdas

$$\mathcal{C}_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2}),$$

y discretizamos la condición inicial. Esto quiere decir que definimos una $\tilde{q}^n(x, t)$ que, al tiempo t_n , es constante en cada una de las celdas \mathcal{C}_i , e igual al promedio de q en dicha celda,

$$\tilde{q}^n(x, t_n) = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} q(\xi, t_n) d\xi \quad \forall x \in \mathcal{C}_i, \quad (75)$$

donde $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$.

Ahora, se reescribe la ecuación original, integrando en x sobre \mathcal{C}_i y en t sobre (t_n, t_{n+1})

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} q(x, t_{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} q(x, t_n) dx \\ &- \frac{1}{\Delta x_i} \left(\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(q(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(q(x_{i-1/2}, t)) dt \right), \end{aligned} \quad (76)$$

y la aplicamos sobre la discretización

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} \tilde{q}^n(x, t_{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} \tilde{q}^n(x, t_n) dx \\ &- \frac{1}{\Delta x_i} \left(\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i-1/2}, t)) dt \right). \end{aligned} \quad (77)$$

Observamos ahora que el primer término de la derecha es fácil de resolver porque el integrando es constante, definamos entonces un juego de valores $\{Q_i^n\}$, como

$$Q_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} \tilde{q}^n(\xi, t_n) d\xi = \tilde{q}^n(x, t_n) \quad \forall x \in \mathcal{C}_i.$$

Análogamente, definamos otro juego de valores $\{Q_i^{n+1}\}$,

$$Q_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} \tilde{q}^n(\xi, t_{n+1}) d\xi. \quad (78)$$

Entonces, podemos reescribir (77) como

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{1}{\Delta x_i} \left(\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i-1/2}, t)) dt \right).$$

Ahora notamos que, en cada uno de los puntos $x_{i\pm 1/2}$ (s.p.g. tomemos $x_{i+1/2}$) hay una discontinuidad de \tilde{q}^n de manera que esta condición inicial, junto con la ecuación diferencial, define un problema de Riemann en cada punto $x_{i+1/2}$.

Como se ha señalado en la sección 3.1, la solución del problema de Riemann (en este caso con discontinuidad en $x_{i+1/2}$) es autosimilar, por lo tanto es constante sobre rectas del plano (x, t) que pasan por el punto $(x_{i+1/2}, t_n)$, en particular para la recta donde el valor de x no cambia, $x = x_{i+1/2}$, y solamente varía t . Entonces las integrales temporales pueden resolverse porque el integrando es constante

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i+1/2}, t)) dt = \Delta t f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)) ,$$

donde \check{q} es un valor que no depende de t , y se puede determinar, de manera exacta o aproximada, conociendo los valores Q_i^n y Q_{i+1}^n . Análogamente

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{q}^n(x_{i-1/2}, t)) dt = \Delta t f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n)) .$$

Entonces, finalmente, el método de Godunov, descrito originalmente en 1959 por S. K. Godunov, [LeVeque 2002] p. 77, puede expresarse como

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)) - f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n))) . \quad (79)$$

Con esta ecuación se obtienen los valores Q_i^{n+1} . Para poder aplicar iterativamente el método se necesita una función que sea constante dentro de las celdas, y tenga discontinuidades en sus fronteras. La función $\tilde{q}^n(x, t_{n+1})$ no cumple con dichos requisitos, por lo que se obtiene una nueva discretización, análoga a (75),

$$\tilde{q}^{n+1}(x, t_{n+1}) = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{C_i} \tilde{q}^n(\xi, t_{n+1}) d\xi \quad \forall x \in C_i , \quad (80)$$

y sobre esta función es que se aplica el método en el siguiente paso temporal.

Un aspecto notable del método de Godunov es que si se pudiera conocer de manera exacta la solución de cada uno de los problemas de Riemann, la única aproximación sería el proceso de promediado, que se realiza en cada paso temporal, ecuación (80). Sin embargo, incluso así se observa que los valores Q_i^n son una descripción aproximada de la solución exacta $q(x, t)$, o de su promedio dentro de una celda

$$Q_i^n \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{C_i} q(x, t_n) dx .$$

Para encontrar otra manera de expresar el método de Godunov, observemos qué pasaría para una condición inicial homogénea. En este caso los valores Q_i^n serían iguales para todo i , los problemas de Riemann se reducen al caso trivial y por lo tanto

$$\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n) = Q_i^n \quad \forall i ,$$

con lo que los flujos son constantes,

$$f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)) = f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n)) = f(Q_i^n) = \text{cte.}$$

y como podía esperarse, la expresión (79) se reduce a

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n,$$

pero no es debido a que no haya flujo, el flujo bien podría ser no nulo,

$$f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n)) \neq 0,$$

sino que lo mismo que entra a cada celda por un lado, sale por el otro.

Entonces, para condiciones iniciales arbitrarias, salvo un factor $-\frac{\Delta t}{\Delta x_i}$, lo que cambia Q_i entre el tiempo t_n y el tiempo t_{n+1} por virtud de su diferencia con Q_{i+1} no es

$$f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)),$$

sino

$$f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)) - f(Q_i^n);$$

es decir, el flujo actual menos el flujo que habría si ambas celdas estuvieran en el mismo estado. Siguiendo la notación de LeVeque [2002], p. 229, llamemos a dicha cantidad con el signo $\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}^n$, donde \mathcal{A}^- no denota una operación, todo es un solo signo, al cual también se denomina *fluctuación*

$$\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}^n = f(\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)) - f(Q_i^n).$$

Y de manera análoga, salvo el factor $\frac{\Delta t}{\Delta x_i}$, lo que cambia Q_i entre t_n y t_{n+1} en virtud de su diferencia con Q_{i-1} es

$$\mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2}^n = f(Q_i^n) - f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n)).$$

Estas definiciones permiten reescribir la expresión (79), el método de Godunov, como

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}^n + \mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2}^n). \quad (81)$$

3.3 CASO LINEAL

Cuando los flujos varían linealmente con las cargas, la ley de conservación

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0,$$

puede expresarse como

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{df}{dq} \frac{\partial q}{\partial x} = 0,$$

donde $\frac{df}{dq}$ es una matriz jacobiana cuyas entradas no dependen de q .

En este caso un problema de Riemann es fácil de resolver porque la diagonalización desacopla completamente el sistema. Sea w un vector de m coordenadas y R una matriz $m \times m$, tales que

$$\begin{aligned} q &= R w , \\ \frac{df}{dq} &= R \Lambda R^{-1} , \end{aligned}$$

donde Λ es una matriz diagonal con entradas s^p , es decir, valores propios de $\frac{df}{dq}$, y donde las columnas de la matriz R son r^p , es decir, vectores propios de $\frac{df}{dq}$. Los superíndices aquí nuevamente son sólo una indexación. Entonces

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} = 0 ,$$

denota m ecuaciones de advección.

Por lo tanto para una condición inicial correspondiente al problema de Riemann

$$q(x, 0) = \begin{cases} q_l & \text{si } x < x_{i-1/2} \\ q_r & \text{si } x > x_{i-1/2} \end{cases}$$

tenemos la correspondiente condición inicial

$$w(x, 0) = R^{-1} q(x, 0) ,$$

cuya solución es

$$w^p(x, t) = w^p(x - s^p t, 0) ,$$

es decir, una función tipo Heaviside que se mueve con velocidad constante s^p . Por lo tanto la solución para q es

$$q(x, t) = \sum_p r^p w^p(x, t) = \sum_p r^p w^p(x - s^p t, 0) , \quad (82)$$

es decir, una suma de escalones que se desplazan a velocidades constantes.

Con este resultado podemos analizar cuánto cambia Q_i de t_n a t_{n+1} debido al problema de Riemann en $x_{i+1/2}$. Primero escribamos el escalón de la condición inicial en términos de los vectores propios

$$q_r - q_l = \sum_p \alpha^p r^p ,$$

lo cual en este caso podría escribirse como

$$Q_{i+1} - Q_i = \sum_p \alpha^p r^p , \quad (83)$$

para ciertos escalares α^p que pueden ser calculados.

Como indica (82), la evolución tendrá lugar con m escalones moviéndose con velocidades s^p , donde aquellos con $s^p > 0$ no afectan a Q_i , porque corresponden a escalones que entran en la

celda C_{i+1} . Por el contrario, aquellos con $s^p < 0$ entran en la celda C_i y recorren una distancia $|s^p|\Delta t$. Como consecuencia el cambio en Q_i es

$$(-s^p \Delta t) \frac{1}{\Delta x} (\alpha^p r^p),$$

que puede leerse como la distancia recorrida por el escalón, dividida entre el tamaño total de la celda, multiplicada por la magnitud del escalón. El signo aparece por el hecho de que s^p es negativa y el factor $\frac{1}{\Delta x}$ por el hecho de que Q_i representa un promedio sobre la celda C_i .

Entonces, atendiendo las definiciones para fluctuación hechas en la sección 3.2, tenemos que $\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}^n$ es la suma de las contribuciones de todos los casos de valores propios negativos

$$\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}^n = \sum_{s^p < 0} s^p \alpha^p r^p, \quad (84a)$$

omitiendo el factor $\frac{-\Delta t}{\Delta x}$. Con un desarrollo completamente análogo es posible mostrar que

$$\mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2}^n = \sum_{s^p > 0} s^p \alpha^p r^p. \quad (84b)$$

Al sustituir estas expresiones en (81) se obtiene una expresión del método de Godunov para el caso lineal. La expresión resultante coincide con el conocido método de diferencias finitas llamado *upwind*, del cual se sabe que introduce una buena cantidad de difusividad numérica y tiene una convergencia a primer orden, [LeVeque 2002] p. 77.

3.4 MÉTODOS DE VOLUMEN FINITO

Los métodos de volumen finito son también llamados métodos de tipo Godunov, en el sentido de que son una extensión al método que se ha presentado en las secciones 3.2 y 3.3. De cierta manera podría decirse que el método de Godunov es un método de volumen finito, [LeVeque 2002], p. 78. Uno de los aspectos principales que diferencian a los métodos de volumen finito entre sí es el manejo de los valores $\check{q}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)$. Si se pueden calcular de manera exacta, tendremos *estrictamente* un método de Godunov. Esto implicaría resolver los problemas de Riemann para sistemas posiblemente no lineales, lo cual se ha mostrado en la sección 3.1 no es tarea fácil. Genéricamente, un método de volumen finito tendrá alguna expresión algebraica $F_{i-1/2}^n$, tal que

$$F_{i-1/2}^n \approx f(\check{q}(Q_{i-1}^n, Q_i^n))$$

siendo entonces expresado como

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n). \quad (85)$$

Esta ecuación permite observar por qué a los métodos de volumen finito, se les llama *conservativos*. Independientemente de la calidad de $F_{i+1/2}^n$, si se realiza una suma sobre el índice espacial, para obtener el total de las cargas en el dominio,

$$\sum_i Q_i^{n+1},$$

los flujos correspondientes a una celda cancelan a los de su vecina, debido a lo que sale en la una es lo mismo que entra en la otra, así finalmente, sólo queda la contribución de los extremos. Es decir, la expresión (85) es un análogo discreto de la ley de conservación (6), para el caso en ausencia de fuentes.

Por otro lado, muchos sistemas de leyes de conservación —a los cuales se busca aplicar un método de volumen finito— son no lineales, pero hasta ahora se han descrito herramientas que aplican solamente a sistemas lineales. Una manera de abordar el problema no lineal es considerar que el sistema se comporta localmente como si fuera lineal, aprovechando así las expresiones desarrolladas para este caso. A esto se le llama *linealización*, y se puede realizar mediante diferentes técnicas; la que se ha usado en este trabajo se describe en la sección 3.8. Sin embargo, como se ha señalado al final de la sección 3.3, aplicando directamente un método de Godunov para el caso lineal se obtiene un esquema sólo de primer orden.

Se pueden encontrar métodos de volumen finito con un orden de convergencia mayor a 1; una manera es usando el desarrollo correspondiente al método de Lax-Wendroff, que es un método de diferencias finitas muchas veces expresado a segundo orden, [LeVeque 2002], p. 101. Este desarrollo supone un sistema lineal

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{df}{dq} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 ,$$

y por lo tanto, con un jacobiano $\frac{df}{dq}$ constante. Luego, se expresa un desarrollo de Taylor para q con respecto al tiempo

$$q(x, t_{n+1}) = q(x, t_n) + \Delta t \left. \frac{\partial q}{\partial t} \right|_{(x, t_n)} + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left. \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} \right|_{(x, t_n)} + \dots ,$$

donde se sustituyen las derivadas temporales del lado derecho aprovechando la ley de conservación; por ejemplo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} &= -\frac{df}{dq} \frac{\partial q}{\partial x} , \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= -\frac{df}{dq} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = \left(\frac{df}{dq} \right)^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} , \end{aligned}$$

donde se ha usado intercambio en el orden de derivación, por lo tanto, suponiendo una solución q suave. Finalmente, se trunca al orden deseado, en este caso segundo orden, y se aproximan las derivadas espaciales usando diferencias finitas centradas, para obtener

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \left(\frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) \left(\frac{df}{dq} \right) (Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n) + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \left(\frac{df}{dq} \right)^2 (Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n) .$$

Se puede verificar directamente que este método es de la forma (85), con

$$F_{i-1/2}^n = \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dq} \right) (Q_{i-1}^n + Q_i^n) - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \left(\frac{df}{dq} \right)^2 (Q_i^n - Q_{i-1}^n) \quad (86)$$

y de segundo orden, por construcción.

Se conoce que, efectivamente, el método de volumen finito correspondiente a la ecuación (86) mejora el desempeño y los resultados con respecto al método de Godunov en la regiones suaves, pero en las regiones con cambios abruptos introduce oscilaciones espurias, [LeVeque 2002] p. 101.

Por esta razón es necesaria otra herramienta conocida como *limitadores de flujo*, brevemente descrita al final de la sección 3.7, que esencialmente introduce un coeficiente ϕ que depende de θ , una medida de qué tan suave es la solución localmente. El valor de ϕ hace que el método se comporte como Lax-Wendroff —a segundo orden— en regiones suaves, y como Godunov —a primer orden— en regiones con cambios abruptos.

Para valorar si el limitador de flujo está eliminando efectivamente las oscilaciones espurias, se usa el concepto de *variación total*, definido para el caso discreto como

$$TV(Q) = \sum_i |Q_i - Q_{i-1}| ,$$

La condición inicial tiene una cierta variación total, que físicamente no tendría por qué aumentar*. Entonces, aumentará sólo si el método numérico introduce oscilaciones. Por lo tanto se buscan métodos donde la variación total no aumente, a los cuales se les conoce como *total variation diminishing*, o simplemente *TVD*, [LeVeque 2002], p. 109.

Los métodos de volumen finito que incorporan limitadores de flujo, ciertamente tienen una convergencia mejor que primer orden, pero no se puede decir que sean estrictamente de segundo orden, y por esta razón se les llama *high resolution methods*. En la práctica, como se muestra en la secciones 4.1 y 4.2, la convergencia observada en resultados numéricos puede ser muy cercana a segundo orden. El método de volumen finito usado en este trabajo es de este tipo, de alta resolución, y se encuentra descrito en la sección 3.7.

3.5 ADIMENSIONALIZACIÓN

En la sección 2 se han presentado ecuaciones para tres dimensiones espaciales. Sin embargo, con el fin de hacer simulaciones en dominios suficientemente grandes, en la implementación final del código, así como en el resto de las secciones de este trabajo, se han considerado solamente dos.

Con el fin de aplicar un método numérico del tipo descrito, adimensionalizamos el sistema de ecuaciones (72), usando la renormalización

$$\frac{tc_0}{L} \mapsto t, \quad \frac{x_j}{L} \mapsto x_j, \quad \text{con } j = 1, 2 \quad (87)$$

donde L es una distancia típica en el sistema. Se obtiene entonces, un sistema de leyes de conservación no dimensional [Sharma 2010],

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = \psi, \quad (88)$$

* Al menos no en el caso de una dimensión espacial, donde no es posible que una onda se focalice. El método numérico aquí presentado aplica a una sola dimensión espacial a la vez, como se describe en la sección 3.6.

donde q es el vector de cantidades conservadas, f_j son vectores que contienen sus flujos (en la dirección x_j), y ψ es un término fuente. Estos vectores se escriben de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} q &= \begin{pmatrix} q^1 \\ q^2 \\ q^3 \end{pmatrix} = \frac{\rho}{\rho_0} \begin{pmatrix} 1 \\ u^1/c_0 \\ u^2/c_0 \end{pmatrix}, \\ f_j &= \frac{q^{j+1}}{(q^1)^2} \begin{pmatrix} (q^1)^2 \\ q^2 \\ q^3 \end{pmatrix} + \phi \begin{pmatrix} 0 \\ \delta_{1j} \\ \delta_{2j} \end{pmatrix}, \\ \phi &= q^1 + (\beta - 1)(q^1 - 1)^2, \\ \psi &= \tilde{\delta} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla^2 q^2 / q^1 \\ \nabla^2 q^3 / q^1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{89}$$

donde δ_{ij} es una delta de Kronecker. Siguiendo a LeVeque [2002], los superíndices han sido usados para denotar componentes vectoriales; cuando es necesario usar potencias para estas variables, se añade un par extra de paréntesis, *e.g.* $(q^1)^2$. El coeficiente

$$\tilde{\delta} = \frac{\delta}{c_0 L} \tag{90}$$

es una forma adimensional de la difusividad del sonido δ , y el parámetro β es el coeficiente de no linealidad.

En estas nuevas variables el estado de equilibrio es

$$q^1 = 1, \quad q^2 = q^3 = 0.$$

Por lo tanto, en estas variables la restricción de orden para q es

$$q^1 - 1, \frac{q^2}{q^1}, \frac{q^3}{q^1} = O(\epsilon).$$

3.6 MÉTODO DE PASO FRACCIONADO

La ecuación (88) indica que al avanzar el tiempo, lo que cambia q tiene tres componentes, una correspondiente a los flujos en el eje x_1 , otra a los flujos en el eje x_2 , y otra a la atenuación termoviscosa. Una manera de aproximar numéricamente este problema es descomponiendo (88) en tres ecuaciones, correspondientes a dichas contribuciones [Crandall y Majda 1980],

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{df_1}{dq} \frac{\partial q}{\partial x_1} = 0, \tag{91a}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{df_2}{dq} \frac{\partial q}{\partial x_2} = 0, \tag{91b}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \psi. \tag{91c}$$

Con esta descomposición separamos el problema difusivo de múltiples dimensiones, en problemas homogéneos de una sola dimensión, y un problema difusivo.

El método de paso fraccionado en este caso consiste en aplicar esquemas numéricos consecutivamente para cada una de las ecuaciones (91). Sin embargo, como (91a) y (91b) son esencialmente la misma ecuación, intercambiando las posiciones 2 y 3 de cada vector, éstas se pueden resolver numéricamente con el mismo esquema. Por esta razón, se ha omitido el subíndice j en las secciones siguientes, y hemos trabajado únicamente con la ecuación (91a).

Para obtener una solución numérica de la expresión (91c), la parte difusiva del esquema, se usó un método estándar de diferencias finitas, centrado a segundo orden, correspondiente a $\nabla^2(q_2/q_1)$ y a $\nabla^2(q_3/q_1)$ y cuya implementación finalmente toma la forma

$$\begin{aligned} Q_{2,i,j}^{n+1} &= Q_{2,i,j}^n + \frac{\tilde{\delta}\Delta t}{\Delta x_1} \left(\frac{Q_{2,i+1,j}^n}{Q_{1,i+1,j}^n} - 2 \frac{Q_{2,i,j}^n}{Q_{1,i,j}^n} + \frac{Q_{2,i-1,j}^n}{Q_{1,i-1,j}^n} \right) \\ &\quad + \frac{\tilde{\delta}\Delta t}{\Delta x_2} \left(\frac{Q_{2,i,j+1}^n}{Q_{1,i,j+1}^n} - 2 \frac{Q_{2,i,j}^n}{Q_{1,i,j}^n} + \frac{Q_{2,i,j-1}^n}{Q_{1,i,j-1}^n} \right) \\ Q_{3,i,j}^{n+1} &= Q_{3,i,j}^n + \frac{\tilde{\delta}\Delta t}{\Delta x_1} \left(\frac{Q_{3,i+1,j}^n}{Q_{1,i+1,j}^n} - 2 \frac{Q_{3,i,j}^n}{Q_{1,i,j}^n} + \frac{Q_{3,i-1,j}^n}{Q_{1,i-1,j}^n} \right) \\ &\quad + \frac{\tilde{\delta}\Delta t}{\Delta x_2} \left(\frac{Q_{3,i,j+1}^n}{Q_{1,i,j+1}^n} - 2 \frac{Q_{3,i,j}^n}{Q_{1,i,j}^n} + \frac{Q_{3,i,j-1}^n}{Q_{1,i,j-1}^n} \right), \end{aligned}$$

donde el primer subíndice de Q indica el número de componente dentro del vector de cantidades conservadas, el segundo subíndice indica posición sobre el eje x_1 , y el tercero posición sobre el eje x_2 .

3.7 MÉTODO DE VOLUMEN FINITO ESCOGIDO

El método de volumen finito que se escogió usar para la ecuación (91a) es de la forma

$$\begin{aligned} Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2} + \mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2}) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}). \end{aligned} \quad (92)$$

Como se ha dicho en la sección 3.4, éste es un método de alta resolución que, en principio, está formulado para un sistema de leyes de conservación lineal. Su aplicación al sistema no lineal (72) se describe brevemente en esta sección y en la próxima, 3.8.

La expresión (92) aproxima los nuevos valores de q en la celda i , esto es Q_i^{n+1} , como función de los valores viejos Q_i^n y sus flujos con las celdas vecinas. Estos flujos están descritos por la matriz $\frac{df(q)}{dq}$, que es dependiente de q debido al carácter no lineal de la ecuación (88), y en consecuencia es dependiente de la posición. Esta matriz es evaluada, por ejemplo, en $i - 1/2$ para determinar el flujo entre la celda i y la celda $i - 1$, mediante una linealización de Roe, [Roe 1981], [LeVeque 2002] p. 317, descrita en la sección 3.8, y tanto sus valores propios $s_{i-1/2}^p$ como sus vectores propios $r_{i-1/2}^p$ son obtenidos. Los superíndices p nuevamente denotan sólo una indexación.

Por lo pronto, asumiendo que se dispone de esta aproximación, el segundo término de la derecha en la expresión (92) consta de las fluctuaciones, escritas de manera correspondiente al caso lineal, expresiones (84),

$$\mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2} = \sum_{p=1}^3 (s_{i+1/2}^p)^- \mathcal{W}_{i+1/2}^p, \quad (93a)$$

$$\mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2} = \sum_{p=1}^3 (s_{i-1/2}^p)^+ \mathcal{W}_{i-1/2}^p, \quad (93b)$$

donde el superíndice \pm en el paréntesis está definido por

$$(a)^+ = \begin{cases} a & \text{si } a > 0, \\ 0 & \text{si } a \leq 0, \end{cases} \quad (a)^- = \begin{cases} a & \text{si } a < 0, \\ 0 & \text{si } a \geq 0, \end{cases}$$

esto es, es igual a su argumento, o nulo, dependiendo del signo del argumento. Así también,

$$\mathcal{W}_{i-1/2}^p = \alpha_{i-1/2}^p r_{i-1/2}^p$$

donde $\alpha_{i-1/2}^p$ representa solamente una normalización de los vectores propios $r_{i-1/2}^p$ con el fin de satisfacer

$$Q_i - Q_{i-1} = \sum_{p=1}^3 \alpha_{i-1/2}^p r_{i-1/2}^p.$$

Las definiciones en las ecuaciones (93) corresponden a un método de Godunov de un sistema lineal, descrito en las secciones 3.2 y 3.3. Lo que esto significa es que si el tercer término de la ecuación (92) estuviera ausente —y como se muestra abajo esto eventualmente podría suceder—, entonces la ecuación (92), debido a su segundo término del lado derecho, tendría la forma de un método de Godunov, expresión (81).

El tercer término del lado derecho de la expresión (92) es un término de corrección de alta resolución [LeVeque 2002], de la forma

$$\tilde{F}_{i-1/2} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^3 |s_{i-1/2}^p| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |s_{i-1/2}^p| \right) \tilde{\mathcal{W}}_{i-1/2}^p, \quad (94)$$

donde

$$\tilde{\mathcal{W}}_{i-1/2}^p = \tilde{\alpha}_{i-1/2}^p r_{i-1/2}^p, \quad (95a)$$

$$\tilde{\alpha}_{i-1/2}^p = \alpha_{i-1/2}^p \phi(\theta_{i-1/2}^p), \quad (95b)$$

$$\phi(\theta_{i-1/2}^p) = \max(0, \min((1 + \theta_{i-1/2}^p)/2, 2, 2\theta_{i-1/2}^p)), \quad (95c)$$

$$\theta_{i-1/2}^p = \frac{\mathcal{W}_{i-1/2}^p \cdot \mathcal{W}_{i-1/2}^p}{\mathcal{W}_{i-1/2}^p \cdot \mathcal{W}_{i-1/2}^p}, \quad (95d)$$

$$I = \begin{cases} i-1 & \text{if } s_{i-1/2}^p > 0, \\ i+1 & \text{if } s_{i-1/2}^p < 0. \end{cases} \quad (95e)$$

Cuando las expresiones (93), y (94) son substituidas en la ecuación (92), es notable que la ecuación (92) es una suma sobre familias de ondas indexadas con p . Esta descomposición es solamente una representación del sistema en términos de sus vectores propios.

En el caso $\phi = 1$, la ecuación (94) corresponde a un método de Lax-Wendroff, que como se ha dicho en la sección 3.4, es un método de segundo orden, pero presenta oscilaciones espurias cerca de los bordes abruptos [LeVeque 2002], p. 101. La definición (95c), corresponde a un limitador de flujo ϕ del tipo *monotonized central-difference* [LeVeque 2002], p. 112. Este limitador puede tomar valores entre 0 y 2, y se aproxima a 1 cuando la solución correspondiente a la familia p es suave. Como en este caso el limitador ϕ es del tipo TVD, evita las oscilaciones espurias y conserva, en buena medida, la precisión propia del método a segundo orden en las regiones suaves. La suavidad arriba mencionada se evalúa a través del coeficiente $\theta_{i-1/2}^p$, que es una proyección normalizada de $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$ sobre $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$. Si éstos se encuentran cerca uno del otro, entonces $\theta_{i-1/2}^p \approx 1$, puesto que tendrán aproximadamente el mismo tamaño y dirección.

3.8 LINEALIZACIÓN DE ROE

Como se ha dicho previamente, se necesita una matriz $\hat{A}_{i-1/2}$ que aproxime $\frac{df}{dq}$ en el punto intermedio entre i e $i-1$, para cualquier i dado. Puesto que f es una función no lineal de q , se espera que $\hat{A}_{i-1/2}$ sea también una función de Q_i y Q_{i-1} . Para propósitos de la linealización esta matriz se considera constante en un método de volumen finito construido para el caso lineal, como en la expresión (92).

Dos propiedades son esperadas de tales aproximaciones [LeVeque 2002]:

- (I) consistencia, *i.e.* convergencia a $\frac{df}{dq}$ cuando $Q_i \rightarrow Q_{i-1}$; y
- (II) que sea diagonalizable.

La diagonalización de Roe es un técnica diseñada para encontrar una matriz $\hat{A}_{i-1/2}$ que además de las propiedades anteriores, satisface

$$f(Q_i) - f(Q_{i-1}) = \hat{A}_{i-1/2}(Q_i - Q_{i-1}), \quad (96)$$

que es una propiedad útil puesto que asegura que el método sea conservativo. Además, para los casos de las ondas de choque, donde hay una región con un gran cambio en una familia de ondas p , *i.e.* más grande que los cambios en las otras familias de ondas, la expresión (96) implica que esta p -onda es (en el límite) un vector propio de $\hat{A}_{i-1/2}$, y este es el caso exceptuando las pequeñas regiones donde dos choques coinciden [LeVeque 2002].

Ahora, usando un cambio de variable $z = z(q)$, que fortuitamente coincide con las variables primitivas adimensionalizadas,

$$\begin{pmatrix} z^1 \\ z^2 \\ z^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^1 \\ q^2/q^1 \\ q^3/q^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho/\rho_0 \\ u^1/c_0 \\ u^2/c_0 \end{pmatrix},$$

para definir una trayectoria

$$\hat{z}(\xi) = Z_{i-1} + (Z_i - Z_{i-1})\xi, \quad \text{donde} \quad Z_i = z(Q_i),$$

y realizando las integrales [LeVeque 2002],

$$\int_0^1 \frac{f(q(\hat{z}))}{d\hat{z}} d\xi, \quad \int_0^1 \frac{q(\hat{z})}{d\hat{z}} d\xi,$$

la matriz deseada, que satisface todas las propiedades mencionadas arriba, es encontrada:

$$\hat{A}_{i-1/2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -2\frac{(\bar{Z}^2)^2}{\bar{Z}^1} + \Phi & 2\frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^1} & 0 \\ -2\frac{\bar{Z}^2\bar{Z}^3}{\bar{Z}^1} & \frac{\bar{Z}^3}{\bar{Z}^1} & \frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^1} \end{pmatrix}$$

donde

$$\bar{Z}^p = \frac{1}{2} (Z_i^p + Z_{i-1}^p) \quad \text{y} \quad \Phi = 1 + 2(\beta - 1)(\bar{Z}^1 - 1).$$

Nuevamente, los superíndices de z , Z , \bar{Z} , s , q y u , son solamente índices, las potencias de estas variables se denotan con un par extra de paréntesis. Los valores propios de esta matriz son

$$s_{i-1/2}^1 = \frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^1} + \sqrt{\frac{(\bar{Z}^2)^2}{(\bar{Z}^1)^2} - 2\frac{(\bar{Z}^2)^2}{\bar{Z}^1} + \Phi}, \quad (97a)$$

$$s_{i-1/2}^2 = \frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^1} - \sqrt{\frac{(\bar{Z}^2)^2}{(\bar{Z}^1)^2} - 2\frac{(\bar{Z}^2)^2}{\bar{Z}^1} + \Phi}, \quad (97b)$$

$$s_{i-1/2}^3 = \frac{\bar{Z}^2}{\bar{Z}^1} \quad (97c)$$

y sus respectivos vectores propios pueden ser obtenidos de manera directa. Cuando

$$Q_i = Q_{i-1} \approx q \quad (98)$$

se usa, y estos valores propios se expanden en serie de Taylor a primer orden, se obtienen expresiones más familiares,

$$s_{i-1/2}^1 = \frac{u^1 + c}{c_0} + O(\epsilon^2), \quad (99a)$$

$$s_{i-1/2}^2 = \frac{u^1 - c}{c_0} + O(\epsilon^2), \quad (99b)$$

$$s_{i-1/2}^3 = \frac{u^1}{c_0} + O(\epsilon^2), \quad (99c)$$

donde la velocidad del sonido c ha sido calculada de la ecuación (67) como

$$c = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} = c_0 \left(1 + \frac{\rho'}{\rho_0} (\beta - 1) \right) + O(\epsilon^2).$$

Considerando el carácter no dimensional de las variables aquí utilizadas, las expresiones (99), son consistentes con otros métodos de volumen finito para ecuaciones de Euler [LeVeque 2002].

Se hace evidente una limitación de este método mediante el análisis de las expresiones (97a) y (97b): si el argumento de la raíz cuadrada se hace negativo, los valores propios dejarán de ser reales. Sin embargo, el argumento de la raíz cuadrada permanecerá positivo en tanto $\rho/\rho_0 < 0.5$ y $(u/c_0)^2 > S(\rho/\rho_0)$, o $\rho/\rho_0 > 0.5$ y $(u/c_0)^2 < S(\rho/\rho_0)$, donde se ha usado (98), y

$$S(\rho/\rho_0) = \text{máx} \left\{ 0, \frac{1 + 2(\beta - 1)((\rho/\rho_0) - 1)}{2(\rho/\rho_0) - 1} (\rho/\rho_0)^2 \right\} .$$

Esto se ilustra para algunos valores representativos de β en la figura 8. Las regiones permitidas se encuentran por arriba de las líneas para $\rho/\rho_0 < 0.5$, y por debajo de ellas para $\rho/\rho_0 > 0.5$. La región relevante para este trabajo se encuentra alrededor del estado de equilibrio $\rho/\rho_0 = 1$, $u/c_0 = 0$, donde los valores propios permanecerán reales siempre que las perturbaciones sean pequeñas. De este modo, perturbaciones tan grandes como 10% pueden ser usadas para valores típicos $\beta \approx 5$ (vea por ejemplo [Beyer 1998]). Observe que algunas de las regiones permitidas para $\rho/\rho_0 < 0.5$, e.g. en el caso $\beta = 4.8$, no son alcanzables mediante una trayectoria continua desde el estado de equilibrio.

Esta región limitada para los valores permitidos de las variables es consistente con las hipótesis perturbativas usadas para obtener las ecuaciones (72). Por lo tanto, refleja los límites del modelo mismo, y no del método numérico como tal. De hecho, los valores propios de $\frac{df}{dq}$ presentan el mismo problema.

Como se ha señalado, este método numérico corresponde a la ecuación (91a), pero puede ser usado para (91b) también, siempre que la segunda y tercera componentes de sus vectores sean intercambiadas; siendo así, \bar{Z}^3 aparece en sus correspondientes valores propios en lugar de \bar{Z}^2 .

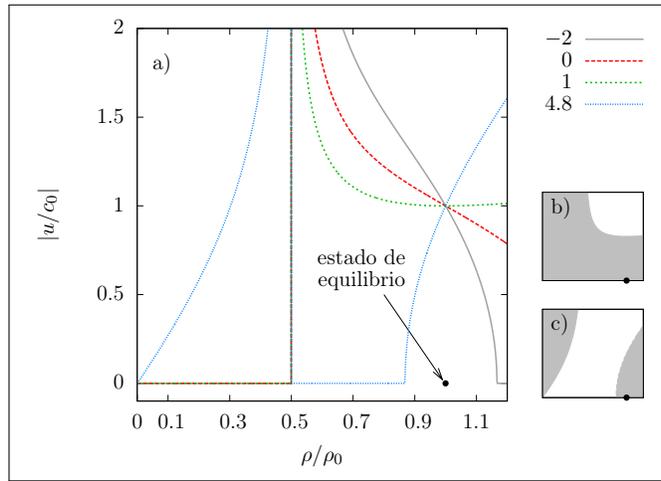


Figura 8. a) Contornos $|u/c_0| = \sqrt{S(\rho/\rho_0)}$ que delimitan regiones donde los valores propios dados por (97a) y (97b) son reales. Los números en las etiquetas corresponden a valores de β . Los recuadros b) y c) son ejemplos de zonas sombreadas donde los valores propios son reales, para $\beta = 1$ y $\beta = 4.8$, respectivamente.

IMPLEMENTACIÓN Y VALIDACIÓN DEL MÉTODO NUMÉRICO

A continuación se describen las simulaciones realizadas en este trabajo, y los resultados obtenidos. Como un primer paso, se hicieron simulaciones con la finalidad de mostrar la validez del método, midiendo diferentes parámetros de error, con respecto a referencias cuya validez se puede establecer por otras vías. La primera de ellas, sección 4.1, contra una solución del tipo choque de Taylor [Jordan 2004], que es una solución analítica de onda plana. Esto constituye una prueba para no-linealidad y difusividad, pero no para difracción de onda completa, debido a la naturaleza plana de la onda. Como se mencionó previamente, según la revisión bibliográfica hecha para el presente trabajo, no se conocen soluciones analíticas que presenten difracción de onda completa. Entonces, una segunda prueba de validación, sección 4.2, se realizó contra resultados de otra simulación numérica en un sistema *HIFU* (high intensity focused ultrasound), obtenidos por Albin *et al.* [2012], mediante un método numérico diferente, llamado *Fourier continuation*. Por otra parte, en la sección 4.3 se ofrece una prueba de desempeño del código, cuyo objetivo es mostrar la diferencia en tiempo de ejecución que tiene el código presentado —de ejecución paralelizada en GPU—, contra un código estándar —de ejecución secuencial en CPU—. Finalmente, en la sección 4.4, se presentan resultados numéricos preliminares de aplicaciones que actualmente se están desarrollando, para fases posteriores de este trabajo.

La malla usada en todas las simulaciones es cartesiana, con $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x$; por lo tanto, en adelante se denota simplemente Δx . El valor de Δt , en cada paso temporal, depende del número *CFL*,

$$v = \frac{\Delta t}{\Delta x} \max\{s_{i-1/2}^p\},$$

donde el máximo se toma sobre la malla completa, en ambas direcciones, y sobre los tres posibles valores de p . Se ejecuta el método numérico con un cierto Δt , si el valor de v resulta mayor a 1 se reduce el valor de Δt y se ejecuta todo nuevamente; en caso contrario se acepta el resultado y se calcula un $\Delta t'$ para ser usado en el próximo paso temporal,

$$\Delta t' = \frac{v_d}{v} \Delta t.$$

De esta manera, como se muestra en la secciones 4.1 y 4.2, se logra que el valor efectivo de v esté muy próximo al valor deseado v_d , [LeVeque 2002] p. 95.

	Error	Razón de convergencia			Peor valor de R^2	Error en $\eta = 82$	
		Mejor	Peor	Media		Mejor	Peor
$\theta_T = 0$	E_1	2.0027	1.6288	1.7637	0.9821	2.36e-05	2.91e-04
	E_∞	1.9043	1.4900	1.6252	0.9727	2.96e-04	3.58e-03
$\theta_T = \pi/32$	E_1	1.7435	1.1967	1.5366	0.9892	2.70e-04	3.78e-04
	E_∞	1.4553	1.2140	1.3652	0.9865	3.56e-03	5.98e-03
$\theta_T = \pi/16$	E_1	1.5695	1.1518	1.3994	0.9860	4.62e-04	7.00e-04
	E_∞	1.3170	1.1840	1.2508	0.9868	6.73e-03	8.71e-03
$\theta_T = \pi/8$	E_1	1.3772	1.2776	1.3145	0.9848	7.97e-04	1.24e-03
	E_∞	1.2136	1.1419	1.1862	0.9820	1.06e-02	1.30e-02
$\theta_T = \pi/4$	E_1	1.3652	1.2220	1.2855	0.9902	1.31e-03	2.14e-03
	E_∞	1.2925	1.2478	1.2682	0.9940	1.12e-02	1.78e-02

Cuadro 1. Choque de Taylor, análisis de convergencia.

Dado que algunas de las simulaciones presentadas en este trabajo usan paquetes de ondas —secciones 4.1, 4.2, 4.4.3—, es posible ahorrar recursos computacionales mediante un dominio móvil. Siguiendo a Albin *et al.* [2012], se implementó la simulación en dos etapas: en la primera, de $t = t_0 < 0$ a $t = t_1 > 0$, el dominio permanece inmóvil y la condición de frontera introduce la onda que ha de propagarse hasta que ésta llega al centro del dominio para cierto $t = t_1$; en la segunda etapa el dominio se mueve junto con la propagación. Adicionalmente, la escala de tiempo se ajusta de manera que se tenga $t = 0$ cuando el centro del paquete se encuentra precisamente sobre la frontera izquierda del dominio, y el valor t_0 fue escogido de manera que al comenzar la simulación la amplitud de la perturbación fuera equivalente a cero hasta la precisión alcanzada por la computadora. Usando esta técnica, las simulaciones fueron realizadas en dominios de 100 longitudes de onda de largo.

El código está escrito en C++/CUDA v6.0, y fue ejecutado en una tarjeta Tesla C2075 (de 448 núcleos y 6GB en RAM), en todos los casos ejecutando bloques de 16×16 hilos, *threads*, instalada en una PC i3-550 estándar, con 16GB en RAM, corriendo Debian/jessie. El código de volumen finito usado para comparación de desempeño, descrito en la sección 4.3, se ejecutó en la misma computadora. Todas las simulaciones presentadas se ejecutaron en precisión doble.

4.1 VALIDACIÓN CONTRA UNA SOLUCIÓN ANALÍTICA DE ONDA PLANA

Es posible verificar directamente que

$$\frac{p'}{p_0} = \frac{-\tilde{\delta}}{\beta} \tanh(x - t),$$

el llamado algunas veces choque de Taylor [Jordan 2004], es una solución de onda viajera de la versión adimensional de la ecuación de Westervelt (40),

$$\nabla^2 \left(\frac{p'}{p_0} \right) - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) + \tilde{\delta} \frac{\partial^3}{\partial t^3} \left(\frac{p'}{p_0} \right) = -\beta \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right)^2, \quad (100)$$

donde se han usado (87) y (90). Es entonces razonable esperar que una expresión equivalente sea solución para las ecuaciones (88). Para encontrar esta expresión, consideremos primero una solución que viaja en la dirección x_1 sin deformarse $q^1 = q^1(x-t)$, $q^2 = q^2(x-t)$, $q^3 = 0$. Entonces, las ecuaciones (88) se reducen a $N[q^1] = 0$, donde el operador N está definido como

$$N[q^1] = \frac{\partial q^1}{\partial t} - \tilde{\delta} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\frac{q^1 - 1}{q^1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\left(\frac{q^1 - 1}{q^1} \right)^2 + q^1 + (\beta - 1)(q^1 - 1)^2 \right).$$

Por otro lado, una solución aproximada \tilde{q}^1 no satisface dicha ecuación, pero resulta en $N[\tilde{q}^1] \simeq 0$. Después de algo de álgebra se puede mostrar que

$$\tilde{q}^1 = 1 - \frac{\tilde{\delta}}{\beta} \tanh(x-t) \quad (101)$$

es tal que

$$N[\tilde{q}^1] = O(\epsilon^3).$$

Observe que, en este caso $\tilde{\delta}/\beta = O(\epsilon)$. Entonces, para averiguar que tan lejos se encuentra esta aproximación \tilde{q}^1 de la solución exacta q^1 , consideremos otra solución aproximada, añadiendo una constante γ a la solución real q^1 , tal que $\gamma = O(\epsilon^n)$, con $n > 1$, y $1 \simeq q^1 = O(\epsilon^0)$. En este caso

$$\tilde{q}^1 = q^1 + \gamma \quad \text{implica que} \quad N[\tilde{q}^1] = O(\epsilon^{n+1}).$$

Ahora, asumiendo que la solución aproximada es tan suave como la solución exacta, en otras palabras, que puede ser considerada localmente como la suma de la solución exacta y una constante, para el caso correspondiente a la ecuación (101) esta constante es $O(\epsilon^2)$, es decir,

$$q^1 = 1 - \frac{\tilde{\delta}}{\beta} \tanh(x-t) + O(\epsilon^2). \quad (102)$$

En este caso hemos usado la expresión analítica (102) para medir la diferencia entre el resultado numérico y la solución exacta, lo cual es válido puesto que esta diferencia es al menos un orden de magnitud mayor que $O(\epsilon^2) \simeq 10^{-14}$, como se muestra abajo.

Para las simulaciones en esta sección, todas las condiciones de frontera (izquierda, derecha, arriba y abajo) fueron tomadas de la forma

$$q^1 = 1 - \frac{\tilde{\delta}}{\beta} \tanh(x-t), \quad q^2 = q^1 - 1, \quad q^3 = 0, \quad (103)$$

en ambas etapas, como han sido descritas al principio de la sección 4. Como se puede ver de la ecuación (103), en este caso los valores independientes de β y $\tilde{\delta}$ no son importantes, solamente lo es el cociente de ellos, que determina $O(\epsilon)$. Para todas las simulaciones siguientes, hemos escogido $\tilde{\delta}/\beta = 10^{-7}$, de manera que $O(\epsilon^2) \simeq 10^{-14}$.

Puesto que, visto a la escala de las celdas de la malla, los flujos son horizontales o verticales pero no diagonales, se espera que los resultados de la simulación dependan de la dirección de propagación [Huijssen y Verweij 2010; Pinton *et al.* 2009; Lemoine *et al.* 2013]. Para apreciar si esto es un problema en el código presentado en este trabajo, se hicieron pruebas a varios ángulos de propagación θ_T , medidos desde el eje x_1 : $0, \pi/32, \pi/16, \pi/8, \pi/4$. Se piensa que estos ángulos son representativos de las posibilidades relevantes. Las ecuaciones (103), como están, corresponden a $\theta_T = 0$; para usarlas con un valor diferente de θ_T , hemos aplicado un cambio de variables estándar de rotación.

Otros parámetros importantes con respecto a la calidad de los resultados son ν_d y $(\Delta x)^{-1}$. Con respecto al primero, ν_d , como ha sido introducido al comienzo de la sección 4, recordamos que su valor es sólo una aproximación del valor del número CFL real ν . Para valorar la diferencia entre ambos, se midió su desviación estándar, y esta última resultó ser siempre menor que 2×10^{-7} . Con respecto a $(\Delta x)^{-1}$, al cual denotamos con la letra η , el valor de L , de la ecuación (87), fue escogido como la distancia entre puntos de la onda tales que la amplitud a estos puntos es 10% y 90% de la amplitud máxima, este es el criterio de Taylor para ancho de una onda de choque, [Blackstock 1998] p. 18. En variables adimensionales esta distancia es igual a 1, lo cual coincide con la longitud total ocupada por η segmentos de longitud Δx ,

$$\eta \Delta x = 1$$

entonces en este caso η representa el número de celdas a través de la onda de choque.

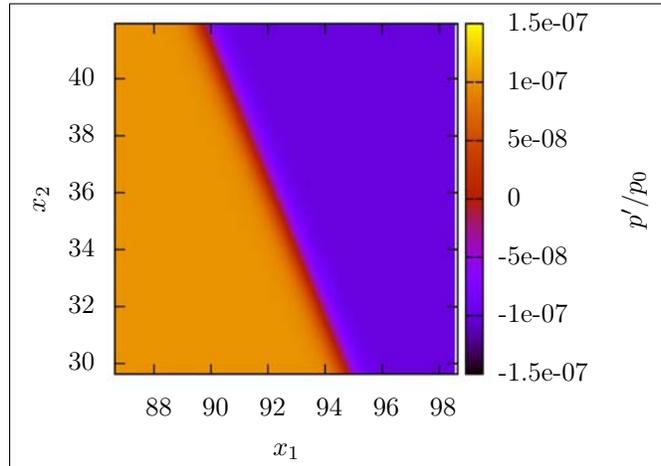


Figura 9. Choque de Taylor, vista superior, solución numérica para $\theta_T = \pi/8$, $\eta = 82$ y $t = 100$.

Las simulaciones reportadas aquí fueron realizadas para los ángulos mencionados, y para las combinaciones de los siguientes valores: $\eta = 5, 10, 20, 41, 82$; $\nu_d = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 0.99$. Haciendo uso de las ecuaciones (89) y (73) para recuperar las variables físicas, la figura 9 muestra una simulación típica, en este caso para $\theta_T = \pi/8$, $\eta = 82$, y $t = 100$, esto es, después de que la onda ha viajado una distancia 100 veces mayor que su ancho.

Un análisis de error se encuentra en el cuadro 1 y en la figura 10. Los errores normalizados se calculan como

$$E_k = \frac{\|\text{solución numérica} - \text{referencia}\|_k}{\|\text{referencia}\|_k}, \quad (104)$$

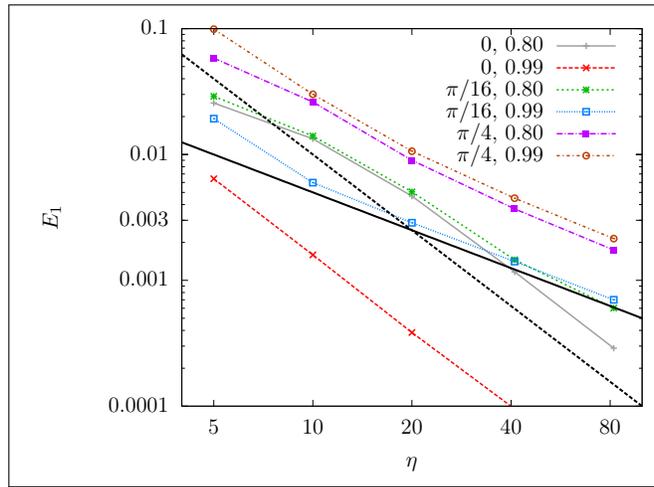


Figura 10. Choque de Taylor, error E_1 como función de η . Los números en las etiquetas corresponden a valores de θ_T, v_d . Como referencia, las razones de convergencia η^{-1} y η^{-2} se indican mediante líneas gruesas, continua y discontinua, respectivamente.

donde la referencia está dada por la expresión (103), y donde el subíndice $k = 1, \infty$ se refiere a una de las dos normas usadas,

$$L_1 : \quad \|\mathbf{Q}\|_1 = \sum_i |Q_i| ,$$

$$L_\infty : \quad \|\mathbf{Q}\|_\infty = \max_i |Q_i| ,$$

en este caso evaluadas sobre una línea normal a la dirección de propagación, de diez unidades de longitud. Las razones de convergencia fueron calculadas usando la pendiente de una regresión lineal de $\log(E_k)$ como una función de $\log(\eta)$. Observe que los valores de E_∞ en el cuadro 1 confirman la validez del uso de la ecuación (102): dado que $\|\text{referencia}\|_\infty = O(\epsilon) = 10^{-7}$ y el mejor valor presentado de E_∞ es de orden 10^{-4} , entonces la diferencia entre la solución analítica y la numérica es más grande que 10^{-11} , lo cual a su vez es más grande que $O(\epsilon^2) = 10^{-14}$. También se puede observar que las razones de convergencia son de segundo orden en los mejores casos, como se esperaba, y de un orden mayor a uno en todos los casos. Es posible que estas razones de convergencia pudieran mejorarse modificando la parte difusiva del método numérico. En resultados no reportados aquí, hemos observado que las razones de convergencia disminuyen para valores $\tilde{\delta}/\beta$ más grandes, lo cual es consistente con el hecho de que la ecuación (102) es válida solamente para amplitudes pequeñas. El comportamiento de los errores como funciones de η es monótonamente decreciente conforme se refina la malla ($\eta \rightarrow \infty$), alcanzando, cuando $\eta = 82$, valores por debajo de 0.3% para E_1 , y por debajo de 2% para E_∞ .

La dependencia de los errores en v_d no es la misma en todos los casos: hemos observado comportamientos crecientes y decrecientes, dependiendo de los valores de θ_T y η . Esto no es del todo extraño puesto que cuando el paso temporal decrece, más pasos son necesarios para alcanzar $t = 100$. De hecho, se sabe que la mejor elección para el número CFL depende de las circunstancias específicas [Laney 1998]. En todos los casos se observa que esta dependencia disminuye conforme la malla se refina. De cualquier manera, $v_d \approx 1$ es preferido puesto que a menudo brinda mejores resultados [LeVeque 2002], y los pasos serán más grandes, y esto implica que los tiempos de ejecución serán menores. Se realizaron también pruebas para $v_d > 1$, pero siempre se encontraron resultados inestables.

	Error	Razón de convergencia			Peor valor de R^2	Error en $\eta = 82$	
		Mejor	Peor	Media		Mejor	Peor
$a = 10$	E_1	2.9841	0.3887	2.0830	0.9663	0.0057	0.0241
	E_∞	2.6415	0.5946	2.0304	0.9653	0.0103	0.0269
$a = 20$	E_1	2.5039	1.0729	2.0515	0.9790	0.0075	0.0315
	E_∞	2.4766	1.3016	2.0568	0.9810	0.0109	0.0381
$a = 30$	E_1	2.3531	1.0381	1.9283	0.9868	0.0093	0.0361
	E_∞	2.2553	1.4884	1.9648	0.9787	0.0180	0.0338

Cuadro 2. Onda enfocada, análisis de convergencia.

Los resultados en la figura 10 ilustran también cómo los errores disminuyen cuando la propagación está alineada con la malla. Esto también podía esperarse puesto que en esta circunstancia los flujos numéricos apuntan en la misma dirección que los flujos físicos. Esta dependencia se reduce cuando la malla es refinada, y para los casos con $\eta = 82$ no excede el 2 %.

4.2 VALIDACIÓN CONTRA RESULTADOS NUMÉRICOS DE ONDA COMPLETA

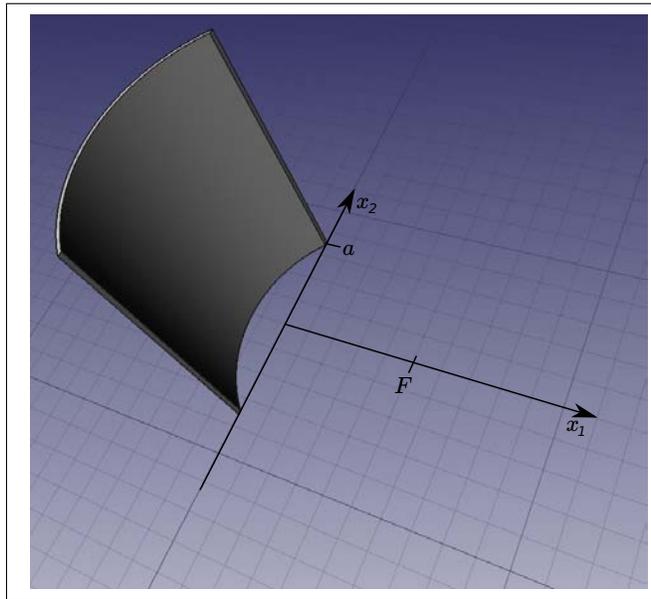


Figura 11. Diagrama del dominio para simulación de onda enfocada, con transductor.

Para esta segunda prueba se buscaron en la literatura resultados numéricos que pudieran ser usados como referencia, dadas las características del código que se presenta. Se buscó que: fueran en dos dimensiones espaciales cartesianas (no en simetría cilíndrica), que presentaran difracción de onda completa, que tuvieran atenuación termoviscosa y distorsión por no-linealidad. El aspecto que resultó más difícil de encontrar fue la ausencia de simetría cilíndrica, casi todos los esquemas numéricos reportados trabajan con simetría cilíndrica. Finalmente se decidió usar como

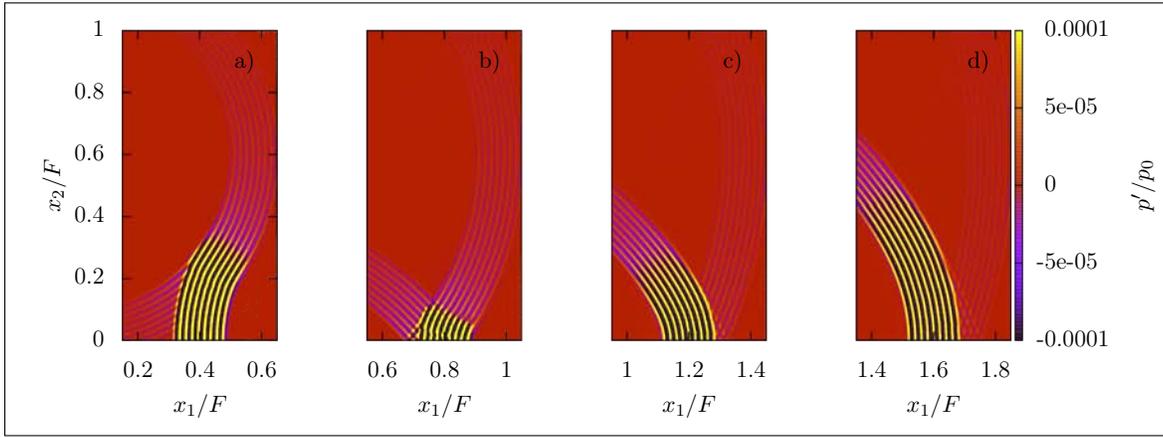


Figura 12. Onda enfocada, vista superior de los resultados numéricos para p'/p_0 , con $a = 30$, y a) $t = 20$, b) $t = 40$, c) $t = 60$, d) $t = 80$. La escala para p'/p_0 está comprimida para hacer más fáciles de ver las ondas difractadas en las orillas.

referencia los resultados de Albin *et al.* [2012], por lo tanto, se hizo una simulación reproduciendo las condiciones reportadas por Albin *et al.* [2012] tanto como fue posible.

El sistema estudiado en este caso, visto como dominio de dos dimensiones espaciales, es una aproximación al caso donde un transductor con forma de arco de círculo produce un paquete de ondas que se enfoca. Visto como un sistema de tres dimensiones espaciales, esto corresponde a un transductor que resulta de un corte longitudinal de la capa exterior de un cilindro infinitamente largo, y no de una esfera, figura 11. El centro del círculo mencionado está ubicado en el punto $x_1 = F$, $x_2 = 0$, siendo F la distancia focal, y $R = \sqrt{F^2 + a^2}$ su radio. Entonces los extremos del transductor se encuentran en $x_1 = 0$, $x_2 = \pm a$.

Las condiciones de frontera de esta simulación varían con respecto a la región: para la primera etapa, cuando el dominio está fijo, y para $x_1 = 0$ y $0 \leq x_2 \leq a$, las condiciones de frontera son

$$q_1(0, x_2, t) = 1 + g, \quad (105a)$$

$$q_2(0, x_2, t) = \frac{Fg}{\sqrt{x_2^2 + F^2}}, \quad (105b)$$

$$q_3(0, x_2, t) = \frac{-x_2g}{\sqrt{x_2^2 + F^2}}, \quad (105c)$$

$$g(x_2, t) = A \sin(2\pi\tau) e^{-\left(\frac{1}{4}\tau\right)^{10}}, \quad (105d)$$

donde $\tau = t + \frac{x_2^2}{2F}$. Estas condiciones corresponde a una vibración de transductor esquematizado en la figura 11, e implícitamente asumen propagación lineal en la pequeña región entre el transductor y $x_1 = 0$. Para el resto de la frontera izquierda ($x_1 = 0$, $a < x_2$), y las fronteras superior y derecha, se usa una extrapolación a orden cero, que es una versión simple de fronteras absorbentes [LeVeque 2002]. La frontera inferior, que se trata de manera reflectiva, hace uso de la simetría del problema y reduce la cantidad de cálculos a la mitad. En la segunda etapa, cuando el dominio es móvil, se usó la extrapolación de orden cero para la frontera izquierda completa y el resto de las fronteras fue usado como se hizo en la primera etapa.

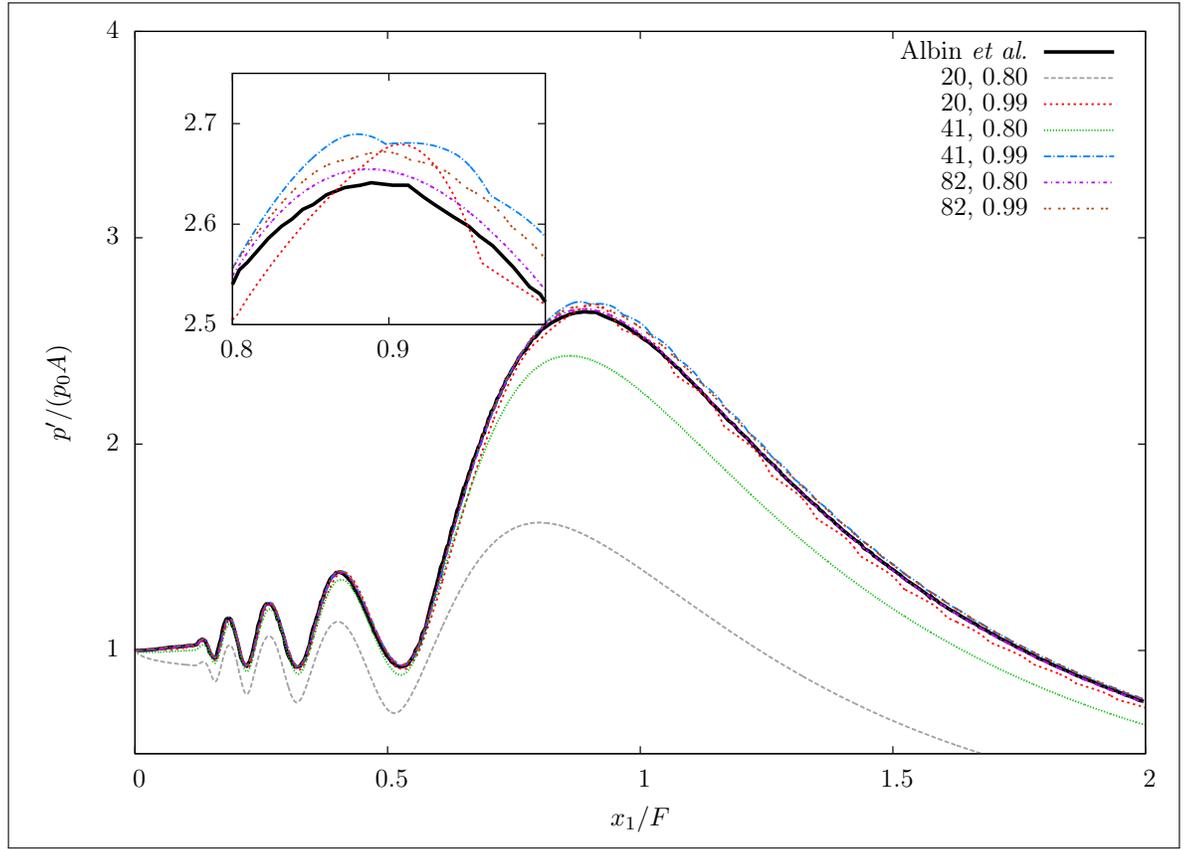


Figura 13. Onda enfocada, máximo de presión sobre el eje de propagación, para $a = 10$. Los números en las etiquetas corresponden a valores de η, ν_d . Los valores de referencia han sido tomados de [Albin *et al.* 2012], figura 10(c) serie de datos DNS (Direct Numerical Simulation).

El valor de L , en la ecuación (87), se escogió igual a la longitud de onda, así pues en variables adimensionales la longitud de onda es igual a 1, y η es el número de celdas por longitud de onda. El resto de los parámetros toman valores

$$F = 50, \quad A = 4.217 \times 10^{-4}, \\ \tilde{\delta} = 2.974 \times 10^{-4}, \quad \beta = 4.8,$$

que han sido adimensionalizados con los mismos valores que se usaron para producir los resultados de referencia [Albin *et al.* 2012]: $\delta = 6.4117 \times 10^{-4}$, $c_0 = 1540 \text{ m/s}$, $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$, y frecuencia $f_0 = 1.1 \text{ MHz}$.

Fueron realizadas simulaciones para las combinaciones de los siguientes valores: $a = 10, 20, 30$; $\eta = 20, 41, 82$; y $\nu_d = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 0.99$. Como fue señalado antes, el valor ν_d no es exactamente igual al número CFL, por lo tanto se midió la desviación estándar entre ambos, y resultó siempre menor que 2.5×10^{-4} . Todas las simulaciones fueron ejecutadas hasta alcanzar un valor de tiempo $t = 100$, esto es, hasta que el paquete de ondas hubo viajado una distancia 100 veces mayor que la longitud de onda. En la figura 12 se muestra la vista superior de una simulación típica, donde se han usado las ecuaciones (89) y (73) para recuperar las variables físicas.

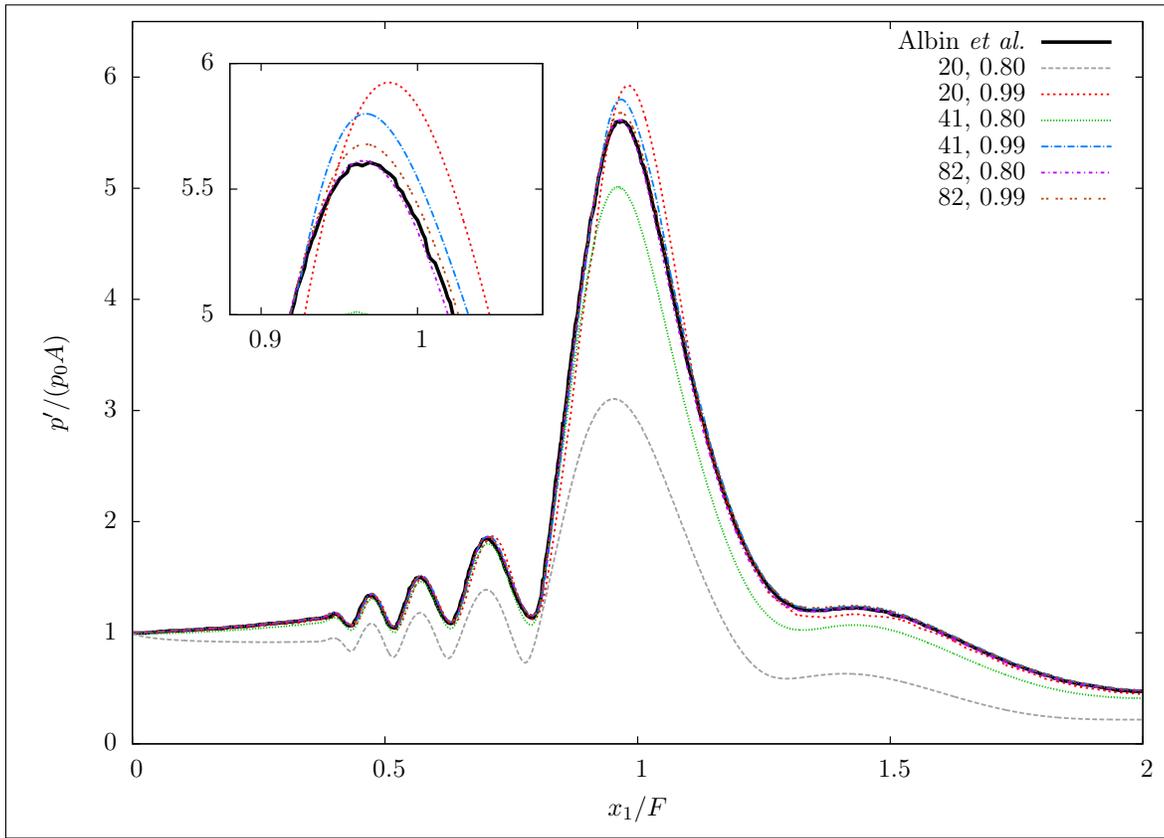


Figura 14. Onda enfocada, máximo de presión sobre el eje de propagación, para $a = 20$. Los números en las etiquetas corresponden a valores de η, ν_d . Los valores de referencia han sido tomados de [Albin *et al.* 2012], figura 10(c) serie de datos DNS (Direct Numerical Simulation).

El valor reportado por Albin *et al.* [2012], que se usó para hacer comparaciones en el presente trabajo, es la presión máxima sobre el eje de propagación, en este caso $x_2 = 0$. Para eludir un estado transitorio, la presión máxima fue medida usando el pico central del paquete de ondas.

En las figuras 13, 14 y 15, se ilustra la comparación entre esquemas para presión máxima sobre el eje de propagación. La estructura de lóbulos en dichas figuras, *e.g.* desde $x_1 = 0.5$ hasta $x_1 = 0.8$ en el caso $a = 30$ (figura 15), es una consecuencia de la interacción del paquete de ondas que es introducido, y que puede ser identificado en la figura 12 como los patrones de líneas de alto contraste, con una onda formada por difracción en la orilla $x_1 = 0, x_2 = \pm a$, y que es visible en la figura 12 como una serie de patrones de líneas tenues.

El análisis de convergencia que se muestra en el cuadro 2 y en la figura 16 ha sido calculado del mismo modo que se ha descrito en la sección 4.1, pero en este caso la expresión (104) ha sido evaluada para el máximo de presión sobre el eje x_1 . En este caso, las razones de convergencia son de segundo orden y ambos errores decrecen monótonamente cuando se refina la malla, y se encuentran por debajo de 4% para todos los casos correspondientes a la malla más fina, $\eta = 82$. Por el contrario, los errores tienen un comportamiento no monótono como función de ν_d , pero, como se ha señalado al final de la sección anterior, esto no representa un problema, y se prefieren los valores de ν_d más próximos a 1.

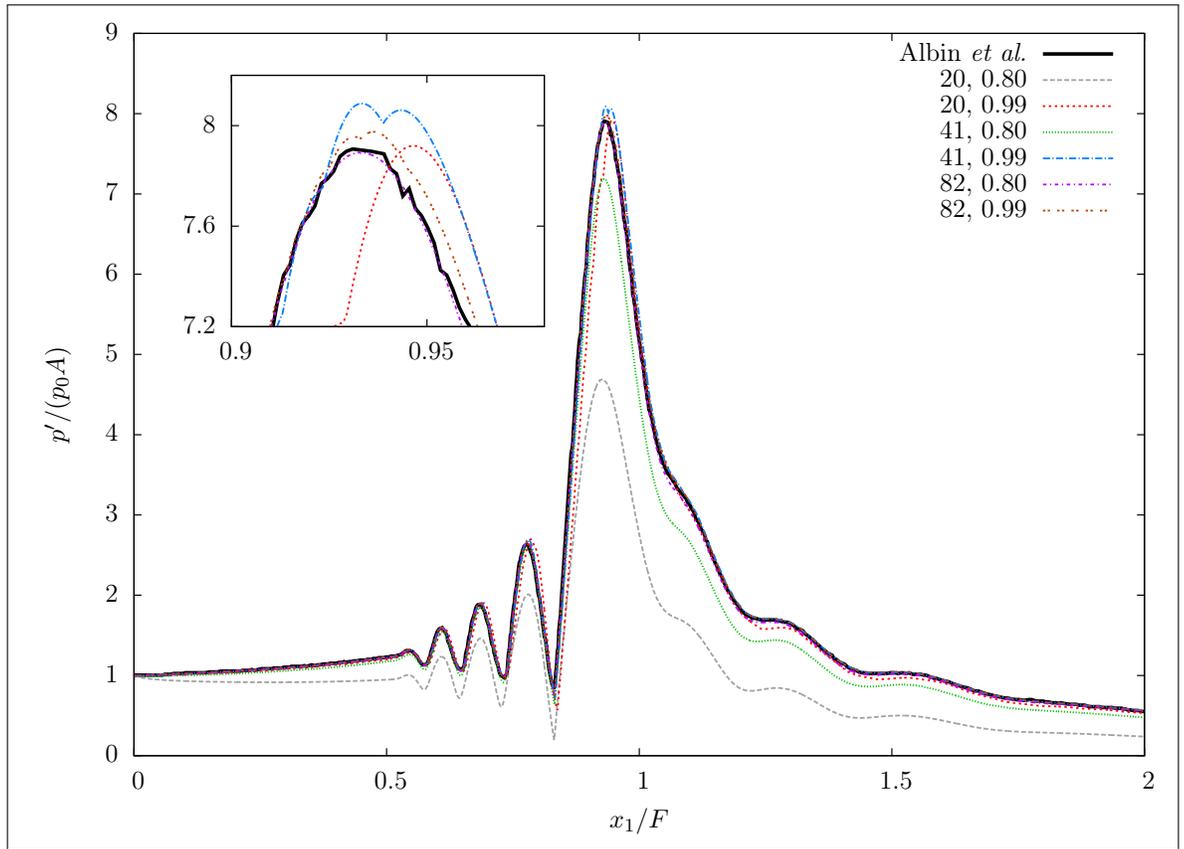


Figura 15. Onda enfocada, máximo de presión sobre el eje de propagación, para $a = 30$. Los números en las etiquetas corresponden a valores de η , ν_d . Los valores de referencia han sido tomados de [Albin *et al.* 2012], figura 10(c) serie de datos DNS (Direct Numerical Simulation).

En la figura 17 se ilustra el espectro de frecuencia para el caso $a = 30$. Se ha calculado usando una FFT estándar sobre una serie de tiempo tomada en el punto $x_1 = 1$, $x_2 = 0$. Observe que debido a la adimensionalización en la ec. (87), y la forma de la señal, particularmente la ecuación (105d), la frecuencia fundamental en este caso es igual a 1. En esta figura podemos ver que los casos con $\nu_d = 0.99$ describen de manera precisa las amplitudes de los primeros cinco armónicos, aun cuando para esta frecuencia el caso $\eta = 20$ cuenta solamente con 4 celdas por longitud de onda. Por otro lado, es notable que en la figura 16 el caso $\nu_d = 0.99$, $\eta = 20$, el error es cerca de 10%, debido a un ligero corrimiento, observable en la figura 15. Para valores más bajos de ν_d , como se ilustra en la misma figura, por ejemplo para $\nu_d = 0.80$, el caso $\eta = 20$ presenta problemas comenzando desde el segundo armónico, del mismo modo que el caso $\eta = 41$ comenzando desde el cuarto armónico, donde ambos tienen 10 celdas por longitud de onda. Esto sugiere que el caso $\eta = 82$ tiene una descripción adecuada de la amplitud hasta el octavo armónico. Las observaciones correspondientes a armónicos superiores no son confiables, porque tienen amplitudes significativamente menores que el error estimado para el mejor caso presentado en este trabajo, en el orden de 1%.

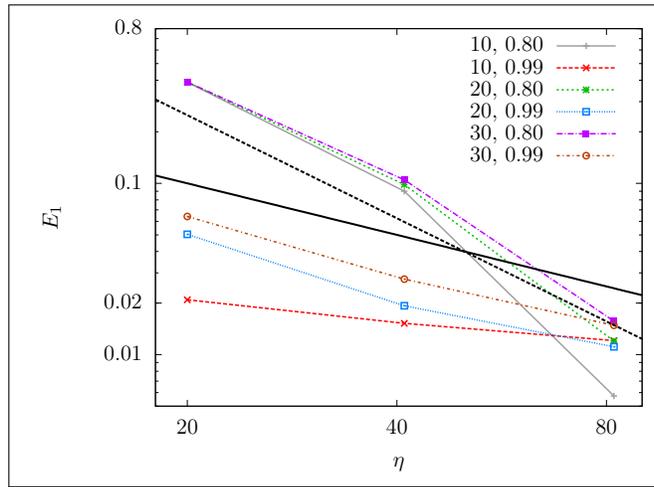


Figura 16. Onda enfocada, error E_1 como función de η . Los números en las etiquetas corresponden a valores de a , v_d . Como referencia, las razones de convergencia η^{-1} y η^{-2} se indican mediante líneas gruesas, continua y discontinua, respectivamente.

		η	v_d	tiempo de ejecución
Choque de Taylor, sec. 4.1	más corto	5	0.99	4s
	más largo	82	0.6	6min
HIFU, sec. 4.2	más corto	20	0.99	55s
	más largo	82	0.6	47min

Cuadro 3. Tiempos de ejecución más cortos y más largos.

4.3 DESEMPEÑO

Para hacer una comparación de desempeño, se hizo una simulación con un código estándar CLAWPACK [LeVeque *et al.* 2010] 4.6.1 escrito en fortran, y con el código C++/CUDA descrito arriba. Se usó una malla de 256×256 , solamente en la primera etapa del código —es decir, con un dominio fijo—, y con parámetros

$$\beta = 4, \quad \tilde{\delta} = 10^{-7}, \quad L = \lambda, \quad \eta = 20.$$

En el caso donde los datos no fueron escritos a disco y ninguna gráfica fue generada, el factor de mejora de tiempo de ejecución, *speedup*, estuvo en el orden de 60. En la práctica, sin embargo, se necesita todo el tiempo almacenar en disco y graficar algunos de los resultados parciales. Tomando esto en cuenta, este factor puede cambiar dependiendo de las gráficas que se quieran y la herramienta que se use para generarlas, que en ambos casos es una herramienta externa. De todos modos, en el caso de computación en GPU es ventajoso que se puede realizar una visualización directa de la malla mientras la simulación se ejecuta, y que esto no añade prácticamente nada al tiempo de ejecución. Una implementación diferente de volumen finito escrita en CUDA, CUDACLAW [Stuart *et al.* 2011], ha reportado un factor de mejora en tiempo de ejecución de 30, para ejecución en CUDA sobre ejecución en fortran. La discrepancia con respecto al presente trabajo pudiera deberse al hecho de que se han usado diferentes equipos, CPU i7-950 contra

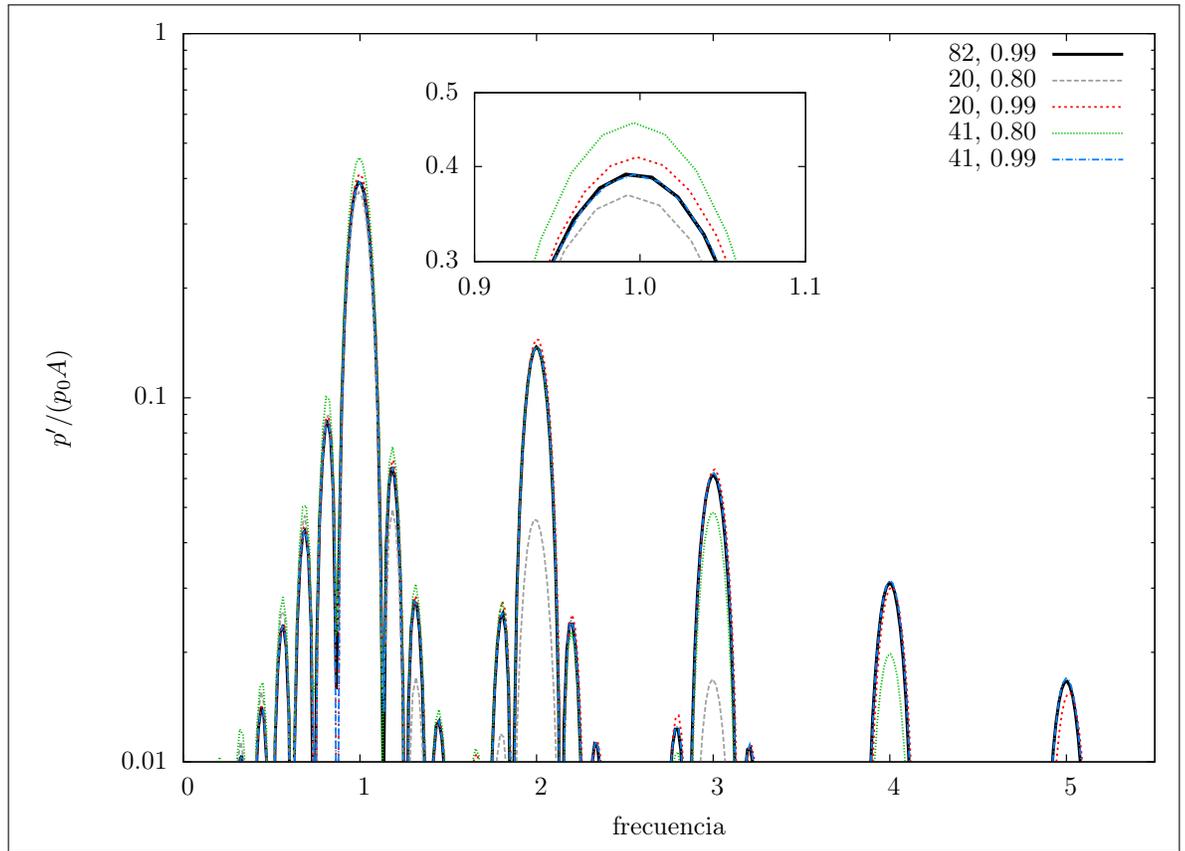


Figura 17. Onda enfocada, espectro de frecuencias, $a = 30$. Los números en las etiquetas corresponden a valores de ν_d, η .

una tarjeta gráfica GTX 460 en su caso, CPU i3-550 contra una tarjeta gráfica Tesla C2075 en este caso. Un proyecto de ejecución paralela en volumen finito más ambicioso, ManyClaw [Terrel y Mandli 2012], actualmente en estado de desarrollo, implementa la paralelización en más niveles, incluyendo múltiples unidades CPU y GPU.

En el cuadro 3 se encuentran tiempos más cortos y más largos de las simulaciones descritas en las secciones anteriores. Aun cuando estos tiempos de ejecución no son demasiado grandes, no fue posible usar mallas más finas debido a limitaciones de memoria del GPU.

En relación a los resultados que en la sección 4.2 fueron usados como referencia [Albin *et al.* 2012], los autores reportan que han usado mallas aproximadamente con 21 puntos por longitud de onda y valores CFL de $1/40$ en la primera etapa, y de $1/10$ en la segunda etapa. Una comparación gruesa con el método presentado en este trabajo, usando $\eta = 82$, $\nu_d = 0.99$, con valores de los errores por debajo de 2%, la cantidad total de puntos espacio-temporales para dos dimensiones espaciales es solamente 1.5 y 6 veces mayor en este caso, para la primera y segunda etapa, respectivamente. Albin *et al.* [2012] reportan para este caso un tiempo de ejecución de 14 min., en un sistema de computación distribuida *cluster* de 128 núcleos, que es aproximadamente la mitad del tiempo de ejecución que aquí se presenta, 31 min., que ha sido ejecutado en un solo equipo.

En resultados que no se reportan aquí, se ha visto que cálculos en precisión sencilla algunas veces ofrecen resultados tan buenos como los que se obtienen con cálculo en precisión doble.

El factor de mejora en tiempo de ejecución en esos casos, para el código y equipo descrito, es aproximadamente de 1.5, pero puede ser mayor en un equipo diferente.

4.4 APLICACIONES ACTUALMENTE EN DESARROLLO

A continuación se muestran algunas simulaciones para sistemas con situaciones geométricas especiales, con los cuales se aprecia el carácter de onda completa del método presentado. Estas simulaciones son resultados parciales de trabajo a desarrollarse en el futuro, y han sido presentados en [Velasco-Segura y Rendón 2015b].

4.4.1 Interacción oblicua

En la figura 18 se observa un medio sin atenuación, donde el valor del parámetro de no linealidad es suficientemente alto para que una onda senoidal desarrolle un perfil de onda de choque casi de manera inmediata, que puede observarse en la figura 18a. En el lado izquierdo del dominio se encuentran dos fuentes senoidales a frecuencias diferentes, es por esto que no son rectas las líneas de interferencia, figura 18b.

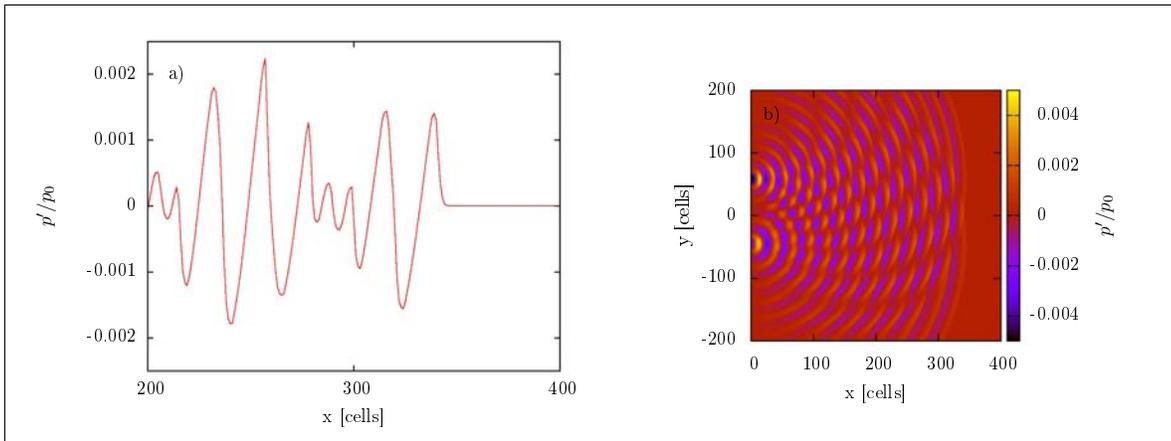


Figura 18. Interacción oblicua. Dos fuentes senoidales con amplitud $p'/p_0 = 0.005$ y frecuencias f_1, f_2 , tales que $f_1/f_2 = 3/4$ en un medio altamente no lineal, $\beta = 6$, y no disipativo, $\delta = 0$. Corte sobre el eje x , a, plano x - y , b.

4.4.2 Tubo con extremo abierto

En las figura 19 y 20 se observa la emisión ocasionada por un pulso gaussiano de amplitud extremadamente alta, con perfil de onda de choque completamente desarrollado, en el extremo abierto de un tubo, en un medio que presenta un comportamiento levemente no lineal, equivalente al del aire. La simulación reproduce cualitativamente algunos fenómenos que se conocen experimentalmente, entre ellos: la reflexión invertida del pulso en el extremo abierto, la emisión de otro

pulso más corto con amplitud notablemente menor, y la difracción que da lugar a propagación prácticamente circular con dependencia angular en la amplitud.

Este tipo de simulación es un primer paso para el tratamiento de sistemas correspondientes a instrumentos musicales metálicos de viento, como el trombón.

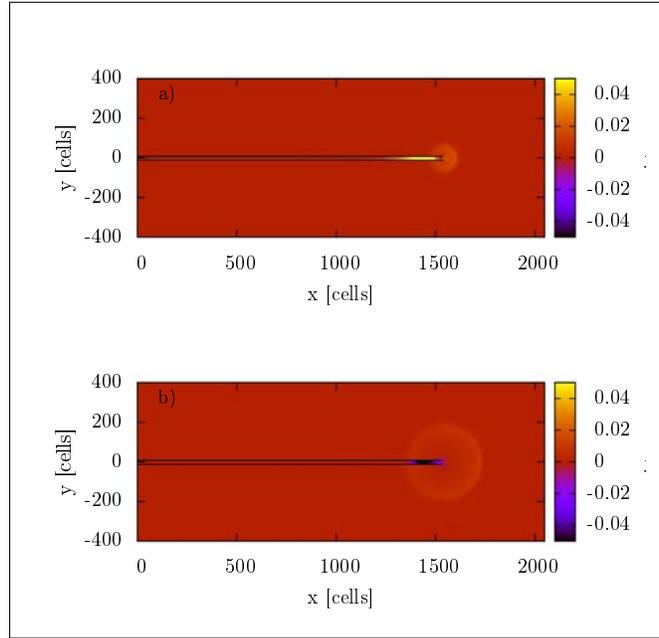


Figura 19. Emisión desde un tubo. Un pulso gaussiano de amplitud $p'/p_0 = 0.1$, propagándose en aire, $\beta = 1.2$, al interior de un tubo momentos antes, a, y después, b, de reflejarse en un extremo abierto del tubo.

4.4.3 *Linterna acústica*

La figura 21 muestra los resultados correspondientes a la propagación de un paquete de ondas del tipo

$$p'/p_0 = 8 \times 10^{-4} \sin(\omega t)(0.7 + 0.3 \sin((\omega/4)t)) \exp(-(2t/40)^{10});$$

esto es, una señal senoidal de frecuencia ω , cuya amplitud es modulada al 30% con una frecuencia $\omega/4$, y restringida a una ventana de 40 longitudes de onda. El paquete de ondas es introducido mediante una condición de frontera, y propagado en dos etapas, del mismo modo que se hecho en las secciones 4.1 y 4.2. La condición de frontera que introduce el paquete de ondas tiene 20 longitudes de onda de ancho, por lo tanto, tomando en cuenta que la frontera inferior es reflejante, esto corresponde a un haz de 40 longitudes de onda de ancho. Adicionalmente, se ha usado una versión del código, aún no validada, correspondiente a simetría cilíndrica, donde el centro del cilindro es el eje x .

Se observa en la figura 21a la propagación del paquete de ondas después de que su centro ha recorrido 30 longitudes de onda. Aquí es claro el carácter direccional de la propagación generado por la relación entre la longitud de onda y el ancho del haz.

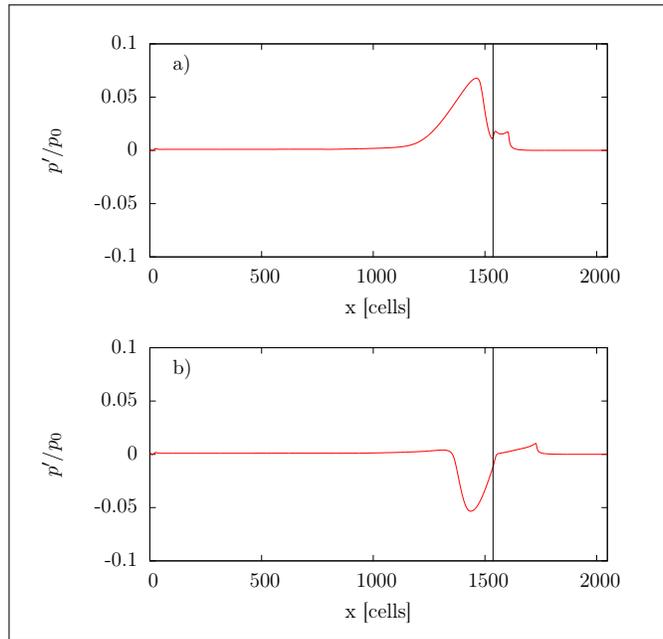


Figura 20. Emisión desde un tubo, corte transversal. Corte sobre el eje x de las figuras 19a y 19b, respectivamente.

La figura 21b muestra lo mismo, pero después de haber aplicado un filtro pasa bajo, con frecuencia de corte $\omega/2$. Esto devela la presencia de una señal demodulada, con frecuencia $\omega/4$, y con un carácter direccional semejante la de la señal de alta frecuencia, este es uno de los aspectos que caracteriza al llamado “parametric acoustic array”.

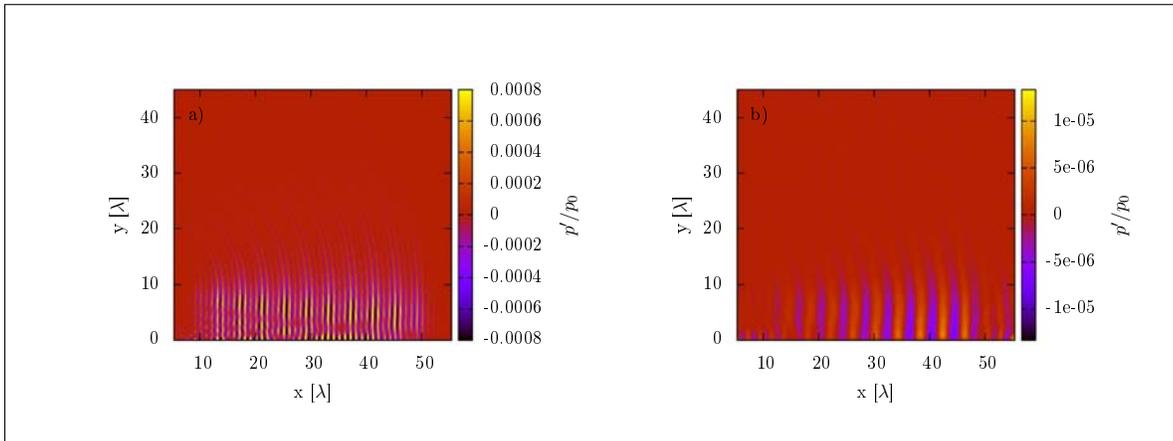


Figura 21. Parametric acoustic array. Paquete de ondas modulado propagándose en aire, $\beta = 1.2$, después de haber recorrido 30 longitudes de onda, a. Señal filtrada con pasa bajo $\omega/2$, b.

DISCUSIÓN, CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En síntesis, las aportaciones de este trabajo, mismas que han sido recientemente publicadas por Velasco-Segura y Rendón [2015a], se consideran las siguientes. Se ha presentado un sistema de leyes de balance, que constituye un modelo de onda completa para propagación acústica, al menos tan general como la ecuación de Westervelt, derivando de primeros principios, para propagación no lineal y atenuación termoviscosa. Se mostró que este sistema de leyes de balance es apropiado para su uso en un método de volumen finito. Se produjo una implementación del método de volumen finito, en dos dimensiones espaciales, mediante un esquema de paso fraccionado, una linealización de Roe, y ejecución paralelizada en GPU. Se analizaron las limitaciones del modelo, acotando la región donde la solución deja de ser puramente real, y como consecuencia el método numérico deja de ser aplicable. Se encontró una solución analítica particular de las ecuaciones propuestas, en una aproximación que se demostró suficiente, misma que sirvió como referencia para validar los resultados numéricos. Se hizo una segunda validación del método, más general que la anterior en cuanto a difracción de onda completa, contra resultados obtenidos numéricamente por un método diferente, [Albin *et al.* 2012]. Se mostró el aumento en desempeño, propio de una ejecución paralelizada en GPU, en comparación con una ejecución secuencial de CPU.

A continuación se discuten algunos de estos puntos con mayor amplitud, así como, perspectivas sobre trabajo que actualmente se está desarrollando, o podría desarrollarse posteriormente.

5.1 MARCO TEÓRICO

Como se ha mostrado en la sección 2, hay un buen número de supuestos detrás de un planteamiento de primeros principios para la ecuación de onda lineal, la ecuación de Westervelt, o la reformulación propuesta (72). Muchos de estos supuestos tienen relación con un parámetro de orden, es decir, con el tamaño relativo de los términos dentro de las ecuaciones. El manejo de las ecuaciones con respecto a este orden tiene algunos aspectos especiales, como (50). Así también, este orden depende de las propiedades particulares del fluido en cuestión, por ejemplo, como se ha discutido en la sección 2.8 al respecto de qué tan importante es la viscosidad, claramente un aceite no tendría que comportarse igual que un gas diluido.

Pero incluso en un mismo fluido el orden de los términos puede variar dependiendo del estado del fluido. Por ejemplo, Blackstock discute el orden de los términos con derivadas, [Blackstock 2000] p. 37, y concluye que, adimensionalizando con valores característicos de tiempo y distancia, el orden es el mismo que el de la variable que se deriva. Pero en el caso de una onda de choque, aún cuando el orden asociado a las variables de las cargas no cambie, los valores de las derivadas típicamente crecen hasta que la atenuación del medio las detiene, pudiendo incluso ir a infinito cuando el medio es no disipativo. El problema con la presencia de choques es que aparecen tiempos característicos nuevos, los asociados al ancho del choque, espacial y temporalmente. Entonces surgen nuevamente preguntas como ¿de qué orden son los términos con derivadas?, ¿cuáles deberían ser conservados?, o ¿en todo momento se deberían conservar los mismos términos?.

Desde otro punto de vista, termodinámicamente, las ondas de choque son procesos irreversibles, a diferencia de las ondas lineales. No se puede ver una onda de choque viajando en sentido contrario: si se toma un estado del fluido donde hay una onda de choque viajando y se invierte la dirección de la variable temporal, lo que se genera es una onda de rarefacción. Por lo tanto, el cambio de entropía es uno de los puntos que se debe observar con atención.

Cuando se usa la ecuación (30) en la obtención de la ecuación de Westervelt, el término de transferencia térmica de calor es conservado, y otros dos términos mecánicos son despreciados, ec. (47). Esto tiene sentido en la mayoría de las circunstancias: en general es más fácil calentar un recipiente por contacto con algo caliente, que agitándolo. Pero en el caso de la onda de choque el movimiento es especialmente brusco, entonces, tal vez, la aportación de estos términos mecánicos sea incluso mayor que la aportación térmica.

Pero además, uno de los aspectos importantes de las ondas de choque en las aplicaciones médicas es justamente la cantidad de energía que depositan [Duck 2002], es decir, qué tanto calientan al medio en una cierta región. Por lo tanto, para tener un modelo que refleje el aumento en la entropía —y temperatura— de las partículas de fluido, como consecuencia del paso de ondas de choque, bien valdría la pena preguntarse si se deberían conservar los dos términos que se han despreciado en la ecuación de conservación de energía (30).

Por otra parte, un punto importante de la formulación presentada, ecuaciones (72), es que la densidad lagrangiana no ha sido descartada, como lo es en la derivación de la ecuación de Westervelt. Cuando esta cantidad es despreciable, se espera que el sistema de leyes de conservación presentado sea equivalente a la ecuación de Westervelt. Como señalan Hamilton y Morfey [1998], y se verifica por sustitución directa, el término de densidad lagrangiana (53) se anula exactamente para una onda plana, donde $p' = \rho_0 c_0 u$, lo cual coincide con la condición de campo lejano para una fuente puntual, y deja de ser válido en su campo cercano. Por lo tanto, puede esperarse que el término de densidad lagrangiana sea no nulo en haces focalizados, convergentes o divergentes, cerca del foco. En este tipo de sistemas podría esperarse que los resultados de la formulación presentada difieran de los correspondientes a la ecuación de Westervelt.

Existen otros modelos de propagación acústica no lineal en fluidos, con cualidades semejantes a las descritas para la ecuación de Westervelt, particularmente la ecuación de Kuznetsov, escrita en términos de un potencial de velocidad, [Clason *et al.* 2009; Enflo y Hedberg 2002]. Una comparación de la formulación de primeros principios, necesaria para obtener esta ecuación, con la formulación presentada para obtener (72), resultaría interesante. Particularmente, de nuevo, en cuanto si se descarta o no el término de densidad lagrangiana. Un planteamiento semejante para el caso no viscoso ha sido realizado por Christov *et al.* [2007].

5.2 APLICACIONES

Tomando en cuenta las restricciones del modelo descritas en la sección 2, el método presentado puede ser aplicado a una variedad de sistemas donde se observa propagación no lineal, entre ellos: ultrasonido focalizado de alta intensidad *HIFU*, ecografía *ultrasound imaging*, linterna acústica *parametric acoustic array*, interacción oblicua de ondas de choque, propagación en guías de onda, y acústica subacuática. Algunas de estas aplicaciones están actualmente en desarrollo y se han descrito brevemente en la sección 4.4.

Particularmente, al respecto de propagación en guías de onda, un aspecto del sonido de los instrumentos musicales metálicos de viento, como el trombón, que se manifiesta más fácilmente en aquellos de conducto más largo, se denomina sonido “brassy”. Esto se relaciona con un fenómeno de propagación no lineal dentro del instrumento, por la alta intensidad al interior del tubo, y ha sido descrito mediante un sistema de ecuaciones tipo de Burgers —que están restringidas a una sola dirección—, [Gilbert *et al.* 2008; Menguy y Gilbert 2000; Rendón *et al.* 2010]. Con el esquema numérico presentado en este trabajo, podría modelarse la propagación completa dentro del instrumento, e incluso su radiación de sonido. Un avance en el desarrollo de esta aplicación se ha descrito en la sección 4.4.2.

Aplicaciones recientes que hacen uso de ecografía [Pinton *et al.* 2009; Okita *et al.* 2011] muestran que la visualización es una herramienta importante para la comprensión de fenómenos complejos, y la implementación mediante sistemas GPU permite una visualización rápida del campo acústico, ya sea lineal o no lineal. En este sentido, la implementación de métodos numéricos en GPU, como el que se presenta aquí, podrían constituir una herramienta importante para la comprensión de una variedad de fenómenos acústicos. Por ejemplo, la presencia de una estructura de lóbulos en la figura 15 puede ser visualmente entendida como la interferencia de las ondas presentes en la figura 12.

En el presente trabajo se ha considerado que δ y β son constantes, lo que corresponde a un medio homogéneo. Dicha hipótesis se ha usado para la obtención, tanto de la ecuación de Westervelt, como de la reformulación (72). Si se quisiera simular propagación en un medio heterogéneo, sería necesario analizar el orden de los términos que surgen de considerarlas variables, y conservar los que fueran consistentes con el modelo. Sin embargo, es posible que con el modelo actual pudieran obtenerse buenos resultados en dos circunstancias. Primero, si el cambio fuera suficientemente suave como para que en un ámbito local, medido en longitudes características del sistema —que pudieran ser longitudes de onda—, no violente la hipótesis mencionada. O bien, si δ y β son constantes por regiones bien delimitadas, en cuyo caso las fronteras deberían ser analizadas para encontrar un manejo adecuado.

5.3 VALIDACIÓN

Las pruebas de validación realizadas para el método numérico muestran una muy buena correspondencia con las referencias usadas, particularmente con la malla más fina ($\eta = 82$), y pasos temporales largos $v_d = 0.99$. En el caso de una solución analítica de onda plana, el error E_1 resultó menor a 0.3%, y en el caso de propagación de onda completa fue menor a 1.5%. Las razones de convergencia resultaron de segundo orden para la onda enfocada, y entre primero y segundo

orden para el choque de Taylor. Es posible que la convergencia pudiera ser mejorada mediante un cambio en el tratamiento numérico usado para la parte difusiva del método.

5.4 DESEMPEÑO

Si se toma en cuenta que los datos usados como referencia han sido obtenidos ejecutando en un sistema de computación distribuida, de múltiples equipos, el desempeño del esquema presentado es comparable, ya que el tiempo de ejecución no es mucho mayor, y el esquema aquí presentado ha sido ejecutado en una sola computadora, equipada con un GPU.

Comparaciones entre los resultados numéricos sugieren que el método presentado usa 10 celdas por longitud de onda para el armónico más alto que es simulado correctamente, lo cual es 5 veces mayor que lo requerido por otros métodos, [Jing *et al.* 2012]. Ésta y otras publicaciones recientes, al respecto de métodos en el dominio de la frecuencia, señalan que una de sus ventajas es la optimización del tiempo de ejecución, debido a que la separación entre los puntos de sus mallas puede ser mayor [Albin *et al.* 2012; Huijssen y Verweij 2010]. Sin embargo, incluso en tales casos, tener múltiples herramientas para modelar el mismo sistema es ventajoso porque permite la validación de resultados numéricos, como se ha hecho en este trabajo.

5.5 MÉTODOS NUMÉRICOS

Las ecuaciones presentadas en la sección 2.11 están planteadas en tres dimensiones espaciales; por lo tanto, extender el método numérico en este sentido es posible. Aunque, como se ha señalado, esto requeriría una cantidad de operaciones mucho mayor, y limitaría así el tamaño de los dominios en que se realizan las simulaciones.

Comparado con otros métodos de volumen finito, el presentado en este trabajo es sencillo, y se ha hecho de este modo como un primer paso. Sobre esta base, diferentes mejoras podrían incorporarse. Así mismo, es notable que las ecuaciones (72) también pueden ser implementadas usando otros métodos numéricos, no necesariamente de volumen finito, ya sea en dominio del tiempo, o de la frecuencia.

Este código está disponible públicamente bajo una licencia de código abierto, FOSS, en la dirección <https://github.com/rvelseg/FiVoNAGI/tree/1311.3004>. El nombre del repositorio se refiere a *Finite Volume Nonlinear Acoustics GPU Implementation*. Esta versión del código es capaz de reproducir los resultados reportados en este documento. Como un precedente, existen otros códigos de acústica no lineal publicados bajo licencias FOSS [Frijlink *et al.* 2008; Anderson 2000].

APÉNDICES



ESQUEMA DE DIFERENCIAS FINITAS PARA LA ECUACIÓN DE WESTERVELT

De manera adicional al código descrito en la secciones 3 y 4, se realizó una implementación de diferencias finitas directamente para la ecuación de Westervelt, adimensionalizada (100),

$$\nabla^2 \left(\frac{p'}{p_0} \right) - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) + \delta \frac{\partial^3}{\partial t^3} \left(\frac{p'}{p_0} \right) = -\beta \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right)^2 .$$

Primero, tomando en cuenta sólo dos dimensiones espaciales, la desarrollamos como

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \left(\beta \frac{p'}{p_0} - 1 \right) \right) + \delta \frac{\partial^3}{\partial t^3} \left(\frac{p'}{p_0} \right) .$$

Usando ahora aproximaciones de diferencias finitas centrales,

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) \simeq \frac{P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n}{\Delta x_1^2} + O((\Delta x_1)^2) , \quad (106a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) \simeq \frac{P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n}{\Delta x_2^2} + O((\Delta x_2)^2) , \quad (106b)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right) \simeq \frac{P_{i,j}^{n-1} - 2P_{i,j}^n + P_{i,j}^{n+1}}{\Delta t^2} + O((\Delta t)^2) , \quad (106c)$$

$$\frac{\partial^3}{\partial t^3} \left(\frac{p'}{p_0} \right) \simeq \frac{-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n + P_{i,j}^{n+1}}{\Delta t^3} + O(\Delta t) , \quad (106d)$$

donde $P_{i,j}^n$ es una aproximación de $p'(i\Delta x_1, j\Delta x_2, n\Delta t)/p_0$, obtenemos

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n}{\Delta x_1^2} + \frac{P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n}{\Delta x_2^2} \\
 &\quad + \frac{P_{i,j}^{n-1}(\beta P_{i,j}^{n-1} - 1) - 2P_{i,j}^n(\beta P_{i,j}^n - 1) + P_{i,j}^{n+1}(\beta P_{i,j}^{n+1} - 1)}{\Delta t^2} \\
 &\quad + \tilde{\delta} \frac{-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n + P_{i,j}^{n+1}}{\Delta t^3} \\
 &= C_1^2 \left(P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n \right) + C_2^2 \left(P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n \right) \\
 &\quad + \left(P_{i,j}^{n-1}(\beta P_{i,j}^{n-1} - 1) - 2P_{i,j}^n(\beta P_{i,j}^n - 1) + P_{i,j}^{n+1}(\beta P_{i,j}^{n+1} - 1) \right) \\
 &\quad + \frac{\tilde{\delta}}{\Delta t} \left(-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n + P_{i,j}^{n+1} \right) \\
 &= \beta (P_{i,j}^{n+1})^2 + K_1 P_{i,j}^{n+1} + K_0,
 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \frac{\Delta t}{\Delta x_1}, \quad C_2 = \frac{\Delta t}{\Delta x_2}, \quad K_1 = \frac{\delta}{\Delta t} - 1, \\
 K_0 &= C_1^2 \left(P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n \right) + C_2^2 \left(P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n \right) \\
 &\quad + \left(P_{i,j}^{n-1}(\beta P_{i,j}^{n-1} - 1) - 2P_{i,j}^n(\beta P_{i,j}^n - 1) \right) + \frac{\tilde{\delta}}{\Delta t} \left(-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n \right).
 \end{aligned}$$

La idea de haberlo escrito así es que K_0 y K_1 no dependen de ningún valor P correspondiente al nivel temporal $n + 1$. Por lo tanto, al despejar obtenemos

$$P_{i,j}^{n+1} = \frac{-K_1 \pm \sqrt{K_1^2 - 4\beta K_0}}{2\beta}.$$

En esta expresión aparece una raíz cuadrada, lo cual es consecuencia de la presencia del término no lineal, originalmente

$$\beta \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{p'}{p_0} \right)^2.$$

Esta raíz cuadrada nos enfrenta con dos problemas. Primero, la solución será compleja cuando $K_1^2 - 4\beta K_0 < 0$, en cuyo caso no es posible aplicar el método numérico. Y segundo, hay dos soluciones, una correspondiente a la raíz positiva, y otra a la negativa, cuando desde luego se espera que el método numérico sea univaluado, no multivaluado.

El primer problema puede evitarse tomando un valor Δt suficientemente chico. Esto podemos observarlo desarrollando

$$\begin{aligned}
 K_1^2 - 4\beta K_0 &= \left(\frac{\delta}{\Delta t} - 1\right)^2 - 4\beta \left(\frac{\Delta t}{\Delta x_1}\right)^2 \left(P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n\right) \\
 &\quad - 4\beta \left(\frac{\Delta t}{\Delta x_2}\right)^2 \left(P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n\right) \\
 &\quad - 4\beta \left(P_{i,j}^{n-1}(\beta P_{i,j}^{n-1} - 1) - 2P_{i,j}^n(\beta P_{i,j}^n - 1)\right) \\
 &\quad - 4\beta \frac{\delta}{\Delta t} \left(-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n\right) \\
 &= \left(\frac{\delta}{\Delta t}\right)^2 - \left(\frac{\delta}{\Delta t}\right) \left(2 + 4\beta \left(-P_{i,j}^{n-2} + 3P_{i,j}^{n-1} - 3P_{i,j}^n\right)\right) \\
 &\quad - 4\beta \left(P_{i,j}^{n-1}(\beta P_{i,j}^{n-1} - 1) - 2P_{i,j}^n(\beta P_{i,j}^n - 1)\right) + 1 \\
 &\quad - 4\beta \left(\frac{\Delta t}{\Delta x_1}\right)^2 \left(P_{i-1,j}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i+1,j}^n\right) \\
 &\quad - 4\beta \left(\frac{\Delta t}{\Delta x_2}\right)^2 \left(P_{i,j-1}^n - 2P_{i,j}^n + P_{i,j+1}^n\right) ;
 \end{aligned}$$

cuando Δt es suficientemente chico el primer término es dominante y por lo tanto debe cumplirse

$$K_1^2 - 4\beta K_0 > 0.$$

La solución adecuada al segundo problema es la raíz positiva. Esto lo podemos observar reduciendo este esquema numérico al caso lineal, y comparando el resultado con un esquema numérico construido a partir de la ecuación (100) linealizada.

Entonces la expresión correcta para este método numérico es

$$P_{i,j}^{n+1} = \frac{-K_1 + \sqrt{K_1^2 - 4\beta K_0}}{2\beta}.$$

Éste es un método numérico a segundo orden en el espacio y a primer orden en el tiempo, lo cual puede observarse de las ecuaciones (106).

Este código se implementó en GPU, y fue usado solamente para pruebas preliminares. Una comparación exhaustiva entre este esquema y el esquema de volumen finito presentado en secciones 3 y 4 sería interesante, en cuanto a viscosidad y dispersión numérica, que se conoce son importantes en esquemas de diferencias finitas [Velasco-Segura 2007], y están ligadas a las leyes de conservación que se han discutido a lo largo del trabajo.

Un trabajo semejante, basado en diferencias finitas sobre la ecuación de Westervelt, implementado en GPU, ha sido presentado por Karamalis *et al.* [2010].

BIBLIOGRAFÍA

- R. J. LeVeque, M. J. Berger, et al. Clawpack software 4.6.1. www.clawpack.org, 2010. last visited: november 2014.
- P. J. Westervelt. Parametric acoustic array. *J. Acoust. Soc. Am.*, 35:535, 1963.
- M. F. Hamilton and C. L. Morfey. Model equations. In *Nonlinear acoustics*, chapter 3. Academic press, San Diego, 1998.
- D. G. Crighton and J. F. Scott. Asymptotic solutions of model equations in nonlinear acoustics. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 292(1389):101–134, 1979.
- D. T. Blackstock. Connection between the Fay and Fubini solutions for plane sound waves of finite amplitude. *J. Acoust. Soc. Am.*, 39:1019, 1966.
- P. M. Jordan. An analytical study of Kuznetsov’s equation: diffusive solitons, shock formation, and solution bifurcation. *Phys. Lett. A*, 326(1):77–84, 2004.
- H. Q. Yang and A. J. Przekwas. A comparative study of advanced shock-capturing schemes applied to Burgers’ equation. *J. Comput. Phys.*, 102(1):139–159, 1992.
- F. A. Duck. Nonlinear acoustics in diagnostic ultrasound. *Ultrasound Med. Biol.*, 28(1):1–18, 2002.
- V. A. Khokhlova, R. Souchon, J. Tavakkoli, O. A. Sapozhnikov, and D. Cathignol. Numerical modeling of finite-amplitude sound beams: Shock formation in the near field of a cw plane piston source. *J. Acoust. Soc. Am.*, 110:95, 2001.
- P. V. Yuldashev and V. A. Khokhlova. Simulation of three-dimensional nonlinear fields of ultrasound therapeutic arrays. *Acoust. Phys.*, 57(3):334–343, 2011.
- F. Dagrau, M. Rénier, R. Marchiano, and F. Coulouvrat. Acoustic shock wave propagation in a heterogeneous medium: A numerical simulation beyond the parabolic approximation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 130:20, 2011.
- F. Varray, A. Ramalli, C. Cachard, P. Tortoli, and O. Basset. Fundamental and second-harmonic ultrasound field computation of inhomogeneous nonlinear medium with a generalized angular spectrum method. *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelectr., Freq. Control*, 58(7):1366–1376, 2011a.
- T. Varslot and G. Taraldsen. Computer simulation of forward wave propagation in soft tissue. *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelectr., Freq. Control*, 52(9):1473–1482, 2005.
- K. Fagnan, R. J. LeVeque, T. J. Matula, and B. MacConaghy. High-resolution finite volume methods for extracorporeal shock wave therapy. In *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*, pages 503–510. Springer, New York, 2008.
- K. Okita, K. Ono, S. Takagi, and Y. Matsumoto. Development of high intensity focused ultrasound simulator for large-scale computing. *Int. J. Numer. Meth. Fluids.*, 65(1-3):43–66, 2011.
- J. Huijssen and M. D. Verweij. An iterative method for the computation of nonlinear, wide-angle, pulsed acoustic fields of medical diagnostic transducers. *J. Acoust. Soc. Am.*, 127:33, 2010.

Bibliografía

- P. T. Christopher and K. J. Parker. New approaches to nonlinear diffractive field propagation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 90:488, 1991.
- N. Albin, O. P. Bruno, T. Y. Cheung, and R. O. Cleveland. Fourier continuation methods for high-fidelity simulation of nonlinear acoustic beams. *J. Acoust. Soc. Am.*, 132:2371, 2012.
- L. Demi, K. W. A. Van Dongen, and M. D. Verweij. A contrast source method for nonlinear acoustic wave fields in media with spatially inhomogeneous attenuation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 129:1221, 2011.
- A. Karamalis, W. Wein, and N. Navab. Fast ultrasound image simulation using the Westervelt equation. In *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention—MICCAI 2010*, pages 243–250. Springer, New York, 2010.
- I. M. Hallaj and R. O. Cleveland. FDTD simulation of finite-amplitude pressure and temperature fields for biomedical ultrasound. *J. Acoust. Soc. Am.*, 105:L7, 1999.
- G. Pinton, J. Dahl, S. Rosenzweig, and G. Trahey. A heterogeneous nonlinear attenuating full-wave model of ultrasound. *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelectr., Freq. Control*, 56(3):474–488, 2009.
- Y. Jing, T. Wang, and G. T. Clement. A k-space method for moderately nonlinear wave propagation. *Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, IEEE Transactions on*, 59(8):1664–1673, 2012.
- G. I. Lemoine, M. Y. Ou, and R. J. LeVeque. High-resolution finite volume modeling of wave propagation in orthotropic poroelastic media. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(1):B176–B206, 2013.
- C. Clason, B. Kaltenbacher, and S. Veljović. Boundary optimal control of the Westervelt and the Kuznetsov equations. *J. Math. Anal. Appl.*, 356(2):738–751, 2009.
- F. Varray, C. Cachard, A. Ramalli, P. Tortoli, O. Basset, et al. Simulation of ultrasound nonlinear propagation on gpu using a generalized angular spectrum method. *EURASIP journal on Image and Video Processing*, 1(2011):17, 2011b.
- R. Velasco-Segura and P. L. Rendón. A finite volume approach for the simulation of nonlinear dissipative acoustic wave propagation. *Wave Motion*, 58:180–195, 2015a.
- T. Varslot and S.-E. Måsøy. Forward propagation of acoustic pressure pulses in 3D soft biological tissue. *Model. Ident. Control*, 27(3):181–200, 2006.
- A. R. Terrel and K. T. Mandli. Manyclaw: Implementation and comparison of intra-node parallelism of clawpack. In *AGU Fall Meeting Abstracts*, volume 1, page 1521, 2012.
- J. A. Stuart, H. Gorune Ohannessian, K. Mandli, G. Turkiyyah, J. D. Owens, and D. Ketcheson. CUDACLAW: An interactive data-parallel hyperbolic PDE. SC11 poster, <http://db.tt/QNScBVfz>, 2011. last visited: november 2013.
- P. D. Lax. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, volume 11. SIAM, 1973.
- H. Flanders. Differentiation under the integral sign. *The American Mathematical Monthly*, 80(6):615–627, 1973.
- D. T. Blackstock. *Fundamentals of physical acoustics*. John Wiley & Sons, 2000.
- G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000.
- S. Temkin. *Elements of acoustics*. Wiley New York, 1981.

- M. W. Denny. *Air and Water: The Biology and Physics of Life's Media*. Princeton University Press, 1993. ISBN 9780691025186.
- M. Krafczyk and L.-S. Luo. Mesoscopic methods and their applications to cfd. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, pages 441–442, 2008.
- A. J. Chorin and J. E. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*, volume 4. Springer, 1993.
- A. D. Pierce. *Acoustics: an introduction to its physical principles and applications*. Acoust. Soc. Am., 1989.
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *A Course in Theoretical Physics-Fluid Mechanics*. Pergamon Press Ltd., 1987.
- H. F. Davis. *Fourier series and orthogonal functions*. Courier Corporation, 1989.
- H. B. Callen. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. Wiley & Sons, New York, 2nd edition, 1985.
- R. T. Beyer. The parameter B/A. In *Nonlinear acoustics*, chapter 2. Academic press, San Diego, 1998.
- M. J. Lighthill. Viscosity effects in sound waves of finite amplitude. In *Surveys in mechanics*, pages 250–351. Cambridge University Press, Cambridge, 1956.
- R. T. Beyer. *Nonlinear acoustics*. Acoustical Society of America, New York, 1997.
- S. I. Aanonsen, T. Barkve, J. N. Tjøtta, and S. Tjøtta. Distortion and harmonic generation in the nearfield of a finite amplitude sound beam. *J. Acoust. Soc. Am.*, 75:749, 1984.
- R. J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 31. Cambridge university press, Cambridge, 2002.
- V. D. Sharma. *Quasilinear hyperbolic systems, compressible flows, and waves*. Chemical Rubber Company Press, Boca Raton, 2010.
- G. B. Witham. *Linear and Nonlinear Waves*. Wiley, New York, 1974.
- P. D. Lax. *Hyperbolic partial differential equations*, volume 14. American Mathematical Society, 2006.
- M. Crandall and A. Majda. The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik*, 34(3):285–314, 1980.
- P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 43(2):357–372, 1981.
- D. T. Blackstock. History of nonlinear acoustics: 1750s–1930s. In *Nonlinear acoustics*, chapter 1. Academic press, San Diego, 1998.
- Culbert B. Laney. *Computational gas dynamics*. Cambridge University Press, 1998.
- R. Velasco-Segura and P. L. Rendón. Numerical modelling of nonlinear full-wave acoustic propagation. In *AIP Conf. Proc.* 1685, 2015b. ISBN 978-0-7354-1332-0. 070002.
- B. O. Enflo and C. M. Hedberg. *Theory of nonlinear acoustics in fluids*, volume 67. Springer, 2002.
- I. Christov, C. I. Christov, and P. M. Jordan. Modeling weakly nonlinear acoustic wave propagation. *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, 60(4):473–495, 2007.

Bibliografía

- J. Gilbert, L. Menguy, and M. Campbell. A simulation tool for brassiness studies. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 123:1854, 2008.
- L. Menguy and J. Gilbert. Weakly nonlinear gas oscillations in air-filled tubes; solutions and experiments. *Acta Acustica united with Acustica*, 86(5):798–810, 2000.
- P. L. Rendón, F. Orduña-Bustamante, D. Narezo, A. Pérez-López, and J. Sorrentini. Nonlinear progressive waves in a slide trombone resonator. *J. Acoust. Soc. Am.*, 127:1096, 2010.
- M. E. Frijlink, H. Kaupang, T. Varslot, and S.-E. Måsøy. Abersim: a simulation program for 3D nonlinear acoustic wave propagation for arbitrary pulses and arbitrary transducer geometries. In *Ultrasonics Symposium, 2008. IUS 2008. IEEE*, pages 1282–1285, Beijing, 2008. IEEE.
- M. E. Anderson. A 2D nonlinear wave propagation solver written in open-source matlab code. In *Ultrasonics Symposium, 2000 IEEE*, volume 2, pages 1351–1354, San Juan, Puerto Rico, 2000. IEEE.
- R. Velasco-Segura. Simulación numérica de propagación lineal y no lineal de ondas acústicas. Tesis de licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 2007.

This page [is] intentionally left blank.