

МАТЕМАТИЧКА ГИМНАЗИЈА

МАТУРСКИ РАД

из предмета

Физика

на тему

Нумеричко моделирање течења помоћу методе
засноване на праћењу флуидних честица

Ученик:

Уна Јаћимовић, 4а

Ментор:

др Никола Росић

Београд, јун 2021.

Садржај

1 Увод	2
2 SPH метода	5
2.1 Кернел апроксимација	6
2.2 Апроксимација честицама	8
2.3 Кернел функција	10
2.4 Радијус области интерполације	12
2.5 Конзистенција у SPH методи	13
3 Једначине кретања флуида	15
3.1 Закон одржања масе	15
3.2 Закон одржања количине кретања	17
4 Једначине одржања у SPH методи	18
4.1 Закон одржања масе	18
4.2 Једначина стања	18
4.3 Закон одржања количине кретања	19
4.4 Кретање честица и њихове брзине	20
4.5 Имплементација	20
4.6 Гранични услови	22
5 Проблем рушења бране	23
6 Закључак	25
6.1 Даљи рад	25
6.2 Захвалност	25
Литература	26

1 Увод

Нумеричке симулације су моћно средство за решавање научних и инжењерских проблема. Имају значајну улогу у многим истраживањима и њихова примена у инжењерским наукама је веома широка. Њихова основа састоји се у нумеричким методама, развијеним како би, колико је то могуће, одговориле на захтеве проблема. Развојем технологије, рачунска динамика флуида постаје неизоставни део решавања практичних, а компликованих проблема. Она пружа прилику да се испитају одређене теорије, даје увид у комплексну физику и од помоћи је приликом тумачења, па чак и откривања нових феномена. Њихов развој је, због свега наведеног, вредан истраживања.

Приликом нумеричког моделирања у хидротехници, углавном се користе нумерички модели који захтевају унапред дефинисану геометријску рачунску мрежу. Она представља одређен, фиксан број тачака, којима се дискретизује континум флуида и прате промене физичких величина. Релације између изабраних тачака морају бити унапред дефинисане, пре апроксимације за решавање парцијалних диференцијалних једначина. На основу правилно постављене мреже, могуће је да се водеће једначине преведу у алгебарске једначине са непознатим варијаблама поља. Овакве методе, засноване на Ојлеровом приступу, постигле су значајне успехе, и тренутно представљају доминантне методе за решавање практичних проблема у науци и инжењерству.

Упркос великим успеху, коришћењем оваквих метода трпе се велике потешкоће у одређеним аспектима, чиме се умањује њихова применљивост у компликованим ситуацијама. Формирање рачунске мреже постаје изузетно захтевно када су у питању случајеви са променама граница струјања (слободне површине, чврсте контуре, границе између две флуидне фазе итд.) у току нумеричких симулација. Проблеми настају и због тога што мора бити задовољено да је нумеричка компатибилност једнака физичкој, односно рачунске тачке не прате кретање делића флуида. У таквим ситуацијама се рачунске мреже морају регенересати и постављене тачке морају да се померају. Тиме се рачун додатно компликује. Овакве методе такође нису погодне када се ради о скупу дискретних физичких честица, а не о континуму. Симулирање дискретних система као што су кретање атома у равнотежном или не-

равнотежном стању и динамично понашање протеинских молекула, коришћењем рачунске мреже не представља најбољу опцију.

Други приступ у проучавању јесте да се промене физичких величина прате на ограниченом броју флуидних делића, односно Лагранжов приступ. Овакве методе не захтевају рачунску мрежу, и постале су фокус истраживања ка следећој генерацији ефикасних рачунарских метода за сложеније проблеме. Оно што одликује овакве методе јесте то да се пружају тачна и стабилна нумеричка решења за интегралне једначине са свим могућим граничним условима помоћу скупа флуидних делића који су носиоци низа променљивих: маса, количина кретања, положај...

Процедура код метода Лагранжеовог приступа састоји се из четири основна корака. То су репрезентација домена, апроксимација функције, формирање једначина система и решавање глобалних једначина. Међутим, иако су алгоритамски лакше, методе које не захтевају рачунске мреже захтевају веће ангажовање рачунара. Верује се да ће развој рачунарских техника и графичких картица употребити такав недостатак.

Као најпознатији представник горепоменутих метода, које не захтевају рачунску мрежу, у овом раду биће представљена SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) метода. Основа нумеричког дела методе је теорија интерполације која се заснива на две апроксимације. Функције интерполације се користе у великом броју ситуација где је циљ да се закључци о читавом пољу доносе на основу коначног броја запажања. Улога интерполације јесте да представи непрекидан ток материје, што је управо случај код SPH методе. У овој методи се одређена функција користи за интерполацију вредности дискретних честица да би се добила континуална функција која представља ток флуида. Физичке карактеристике дате честице рачунају се као пондерисана вредност физичких својстава честица у њеном окружењу.

У SPH методи се стање система описује скупом честица које међусобно интерагују у опсегу, контролисаном тежинском функцијом. Дискретизација једначина струјања, ондосно једначина одржавања, заснива се на дискретним честицама и помоћу различитих формулатија је могуће израчунати локалне физичке вредности. Притисак флуида рачуна се из густине, преко једначине стања, док се убрзање рачуна из градијента притиска и густине. Својом формулатијом, SPH метода поштује закон одржања масе, закон одржања импулса и закон одржања енергије.

Алгоритам методе задовољава принцип релативности. Такође,

правилним распоређивањем честица на одређеним положајима у почетној фази, слободне површине и покретне границе могу се природно пратити у симулацији, без обзира на сложеност крећања, где се управо огледа значајна предност у односу на методе Ојлеровог приступа. Употреба рачунске мреже није потребна, чиме је омогућено да се директно рукује са великим деформацијама, јер се повезаност између честица генерише као део прорачуна, те се стога може и мењати. Због тога је SPH метода нашла своју примену у ситуацијама као што су подводна експлозија и удари великих брзина. Погодна је и у ситуацијама где предмет посматрања није континум. Такви примери се посебно могу пронаћи у био-инжењерингу и нано-инжењерингу на микро и нано скали, као и у астрофизици. Уопштено, у СПХ методи је нумеричка имплементација лакша и природније је симулирати тродимензионалне моделе од метода са захтеваном рачунском мрежом.

У овом раду биће теоријски објашњена SPH метода, апроксијације из којих се састоји, као и њене водеће једначине, након чега ће бити кратко представљена примена методе помоћу јавно доступног кода као проблем рушења бране.

2 SPH метода

Иако је SPH метода првобитно развијена од стране астрофизичарске заједнице како би се решили проблеми у тродимензионалном отвореном простору, пронашла је своју употребу у много ширем спектру области. Првобитни алгоритми су били изведени из тероије вероватноће, а статистичка механика се користила за нумеричку процену. Ти алгоритми нису били у складу са законом одржања импулса, али су давали добре резултате за многе астрофизичке појаве. У случају механике флуида и чврстих тела, теже је верно задовољити парцијалне диференцијалне једначине, главне у описивању поменутих проблема.

У SPH методи флуид је дискретизован честицама, и свака од њих има своја физичка својства: масу, густину, притисак, положај и брзину. Та својства се преписују центру сваке честице. Као такве оне су расуте у простору и могу се кретати независно једна од друге. Оно што је главна идеја у методи је да се уз помоћ тежинске функције добије непрекидно интерполационо поље физичких својстава од информација које добијамо од дискретних честица. Заменом флуида флуидним делићима односно честицама, у методи се добијају приближне нумеричке вредности решења једначина динамике флуида. За математичаре честице представљају чврове интерполације, преко којих можемо израчунати физичка својства флуида. За физичаре, те честице представљају честице материјала које се могу третирати као било који други систем честица. Тако, уколико имамо две различите супстанце, свака је описана скупом својих честица, па проблеми где се супстанце мешију постају тривијални за SPH методу.

У SPH методи користе се две апроксимације. Прва апроксимација, позната као кернел апроксимација, користи тежинску функцију помоћу које функцију представљамо у непрекидном облику. У другој апроксимацији, која се назива апроксимација честицама, домен функције дискретизујемо помоћу скупа материјалних честица којима представљамо рачунску област. Таквим обликом, вредност функције и њених извода у одређеној тачки можемо израчунати на основу вредности функције и њених извода у околним тачкама простора.

2.1 Кернел апроксимација

Тежинска кернел функција директно утиче на резултат SPH анализе. Различите кернел функције могу довести до различитих резултата у виду тачности и стабилности, иако све оне задовољавају критеријуме SPH кернел функције.

Вредност произвољне функције f у тачки простора са положајем $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$ може се представити помоћу вредности функције у „околним“ тачкама простора, са вектором положаја \mathbf{r} . То омогућава запремински интеграл у области Ω :

$$f(\mathbf{r}_0) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) dV \quad (1)$$

где је $\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})$ Диракова делта функција, која се дефинише:

$$\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) = \begin{cases} \infty & \text{за } r = r_0 \\ 0 & \text{за } r \neq r_0 \end{cases} \quad (2)$$

Тако дефинисана, Диракова делта функција се не може просторно дискретизовати. Уколико се она замени непрекидном функцијом W , добија се прва апроксимација SPH методе:

$$\langle f(\mathbf{r}_0) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}) W(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}, h) dV \quad (3)$$

Тежинска функција W назива се кернел функција. Величина h представља параметар датог модела и одређује радијус области интерполације тако да је:

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r}, h) = \delta(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Обично се узима да је тежинска функција парна, због разлога који ће бити наведени касније. Такође кернел функција мора да задовољава следеће једнакости:

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}, h) dV = 1 \quad (5)$$

$$\int_{\Omega} (\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) W(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}, h) dV = 0 \quad (6)$$

$$W(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}, h) = 0 \text{ за } |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}| \geq kh \quad (7)$$

Како је кернел функција увек ненегативна, из услова (5) следи да она представља тежинску функцију и ради задовољавања услова (6) она мора бити симетрична. Услов (7) мора бити задовољен како би апроксимација била локалног карактера. Услови (5) и (6) су такође услови за тачност првог и другог реда кернел апроксимације у односу на параметар h што се може видети када се f из израза (3) развије у Тejлоров ред:

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}_0) \rangle &= \int_{\Omega} [f(\mathbf{r}_0) + f_x(\mathbf{r}_0)\Delta x_0 + f_y(\mathbf{r}_0)\Delta y_0 + f_z(\mathbf{r}_0)\Delta z_0 + O(h^2)] \\ &\quad \cdot W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV = f(\mathbf{r}_0) \int_{\Omega} W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV + f_x(\mathbf{r}_0) \int_{\Omega} \Delta x_0 \\ &\quad \cdot W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV + f_y(\mathbf{r}_0) \int_{\Omega} \Delta y_0 W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV + f_z(\mathbf{r}_0) \int_{\Omega} \Delta z_0 \\ &\quad W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV + O(h^2) \end{aligned} \quad (8)$$

Уколико су услови (5) и (6) задовољени добијамо:

$$\langle f(\mathbf{r}_0) \rangle = f(\mathbf{r}_0) + O(h^2) \quad (9)$$

Апроксимацију градијента функције добијамо када у изразу (3) саму функцију $f(\mathbf{r})$ заменимо њеним градијентом $\nabla f(\mathbf{r})$:

$$\langle \nabla f(\mathbf{r}_0) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla(f(\mathbf{r}_0)) W(\Delta\mathbf{r}_0, h) - f(\mathbf{r}_0) \nabla W(\Delta\mathbf{r}_0, h)]dV \quad (10)$$

Услови за тачност градијента кернел функције аналогни су условима (5) и (6):

$$\int_{\Omega} \nabla W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV = 0 \quad (11)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{r}_0 \nabla W(\Delta\mathbf{r}_0, h)dV = 1 \quad (12)$$

Израз (11) је потребан улов како би кернел апроксимација била првог реда тачности и задовољен је када су изводи кернел функције по просторним променљивим асиметричне функције, док је израз (12) потребан услов како би кернел апроксимација била другог реда тачности. Ако је V подскуп од R^N , (случају да је $N = 3$, V представља тродимензионални простор) који је компактан и има дискретну глатку границу V која се такође обележава са

∂V , а \mathbf{F} континуирано диференцијабилно векторско поље дефинисано у околини V , онда нам Гаусова тероема даје везу између запреминског и површинског интеграла на следећи начин:

$$\iiint_V (\nabla \mathbf{F}) dV = \iint_S (\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS \quad (13)$$

Лева страна једнакости представља запремински интеграл преко запремине V , десна страна површински интеграл преко границе запремине V , а \mathbf{n} јединични вектор, усмерен споља и нормалан на сваку тачку границе ∂V .

Тако, користећи израз (13) у изразу (10), добијамо следећи идентитет:

$$\langle \nabla f(\mathbf{r}_0) \rangle = \int_S f(\mathbf{r}) W(\Delta \mathbf{r}_0, h) \cdot \vec{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{r}_0) \nabla W(\Delta \mathbf{r}_0, h) dV \quad (14)$$

За тачке на растојању већем од S због услова (7) први члан апроксимације је нула па добијамо:

$$\langle \nabla f(\mathbf{r}_0) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{r}_0) \nabla W(\Delta \mathbf{r}_0, h) dV \quad (15)$$

2.2 Апроксимација честицама

У другој апроксимацији SPH методе дискретизујемо флуидну средину на коначан број честица, од којих свака има масу m_i и густину ρ_i . У наставку текста подразумеваће се да се индекс i односи на честицу у којој се апроксимира функција, односно рачунају зависне променљиве, док ће се индекс j односити на честице које су у домену честице i , односно на растојању мањем од h од дате честице. Коначан израз за апроксимацију функције и њеног извода добијамо када дискретизујемо изразе (3) и (15):

$$\langle f(\mathbf{r}_i) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{r}_j) W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (16)$$

$$\langle \nabla f(\mathbf{r}_i) \rangle = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{r}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (17)$$

где је N укупан број честица, а $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. У наставку биће нам потребно да имамо симетричан и асиметричан облик апроксимације градијента функције. За добијање таквих израза користићемо следеће математичке једнакости:

$$\nabla(f\rho) = \rho\nabla f + f\nabla\rho \Rightarrow \nabla f = \frac{1}{\rho}[\nabla(\rho f) - f \cdot \nabla\rho] \quad (18)$$

$$\nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) = \frac{\nabla f \rho - f \nabla \rho}{\rho^2} \Rightarrow \nabla f = \rho \cdot [\nabla\left(\frac{f}{\rho}\right) + \frac{f}{\rho^2} \cdot \nabla \rho] \quad (19)$$

Заменом следећих једнакости у изразу (18):

$$\nabla(\rho_i f(\mathbf{r}_i)) = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j f(\mathbf{r}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (20)$$

$$f(\mathbf{r}_i) \cdot \nabla \rho_i = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{r}_i) \rho_j \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (21)$$

добијамо асиметричан облик апроксимације:

$$\boxed{\langle \nabla f(\mathbf{r}_i) \rangle = \frac{1}{\rho_i} \left[\sum_{j=1}^N m_j [f(\mathbf{r}_i) - f(\mathbf{r}_j)] \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right]} \quad (22)$$

Док заменом следећих једнакости у изразу (19):

$$\nabla\left(\frac{f(\mathbf{r}_i)}{\rho_i}\right) = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j f(\mathbf{r}_j)}{\rho_j^2} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (23)$$

$$\frac{f(\mathbf{r}_i)}{\rho_i^2} \cdot \nabla \rho_i = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \frac{f(\mathbf{r}_i) \rho_j}{\rho_i^2} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (24)$$

добијамо симетричан облик апроксимације:

$$\boxed{\langle \nabla f(\mathbf{r}_i) \rangle = \rho_i \cdot \left[\sum_{j=1}^N m_j \left[\frac{f(\mathbf{r}_i)}{\rho_i^2} + \frac{f(\mathbf{r}_j)}{\rho_j^2} \right] \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right]} \quad (25)$$

Једна од добрих карактеристика које имају два добијена идентитета је то да се функција $f(x)$ појављује у пару и укључује асиметричне и симетричне SPH формулације. Ове асиметричне и симетричне формулације могу допринети тачности SPH методе. Поред горе поменута два идентитета, још нека правила могу бити погодна у раду са SPH формулацијама у сложеним системским јединчинама.

За две произвољне функције поља f_1 и f_2 важи следеће:

$$\begin{aligned}\langle f_1 \pm f_2 \rangle &= \langle f_1 \rangle \pm \langle f_2 \rangle \\ \langle f_1 f_2 \rangle &= \langle f_1 \rangle \langle f_2 \rangle \\ \langle f_1 + f_2 \rangle &= \langle f_2 + f_1 \rangle \\ \langle f_1 f_2 \rangle &= \langle f_2 f_1 \rangle \\ \langle c f_2 \rangle &= c \langle f_2 \rangle\end{aligned}$$

Након апроксимације честицама, услови за конзистенцију (5), (6), (11), (12) су следећи:

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_{ij}, h) = 1 \quad (26)$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{r}_{ij} W(\mathbf{r}_{ij}, h) = 0 \quad (27)$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \Delta W(\mathbf{r}_{ij}, h) = 0 \quad (28)$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{r}_{ij} \Delta W(\mathbf{r}_{ij}, h) = 1 \quad (29)$$

2.3 Кернел функција

Једно од централних питања код метода које не користе рачунске мреже је како ефикасно извршити апроксимацију функције на основу скупа чворова расутих на произвољан начин без коришћења унапред дефинисане мреже и мреже која обезбеђује повезаност чворова. У SPH методи се тежинска функција користи у кернел апроксимацији и апроксимацији честицама. Она је од највеће важности методе јер одређује образац за интерполацију и дефинише граничну удаљеност утицајног подручја честице. Избор тежинске функције као и радијуса области интерполације битно утиче на тачност и брзину.

Главни услови за тежинску функцију су:

1. Функција мора бити нормализована на свом домену, што представља услов (5), наведен у претходној секцији.

2. Функција мора бити „компактно подржана“, што представља услов (7) у претходној секцији. Димензија „подршке“ дефинисана је параметром h и фактором скалирања k . Носећи домен честице је дефинисан са $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq kh$. Ова компактна особина трансформише SPH апроксимацију од глобалне до локалне операције.
3. Тежинска функција мора бити ненегативна на целом свом домену. Овај услов није математички неопходан, али је важан како би се осигурала смислена представа неких физичких појава. У хидродинамичким симулацијама негативне вредности могу довести до не-реалних вредности као што су негативна густина и енергија, што није прихватљиво.
4. Тежинска функција треба да достиже максимум кад је $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 0$, а нулу када је $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = kh$. Између тих вредности, функција треба да монотоно опада. Ово својство је интерпретација физичког разматрања да се сила интеракције смањује повећањем растојања две честице. Честице које су ближе једна другој, морају имати међусобно већи утицај него честице које су на већој међусобној удаљености.
5. Функција треба да буде парна, како би честице које су на истој удаљености од честице i , а које су на различитим позицијама, имале исти утицај на честицу i . Тако важи: $W(r_{ij}, h_i) = W(r_{ji}, h_i)$. У случају градијента претходна замена није могућа јер се ради о асиметричној функцији, па важи да је $\Delta W(r_{ij}, h_i) = -\Delta W(r_{ji}, h_i)$ где је:
- $$\Delta W(r_{ij}, h_i) = \frac{dW}{dr_{ij}}\left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial x_j}, \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_j}, \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_j}\right) \quad (30)$$
6. Треба да задовољава услов Диракове делта функције, услов (4). Ово својство обезбеђује да се приближна вредност функције приближава стварној вредности функцији, када се параметар h приближава нули.
7. Тежинска функција треба бити довољно глатка, у циљу постизања боље тачности и како функција не би била осетљива на распоред честица, и да би грешке у апроксимацији интегралних интерполаната биле мале.

Било која функција која задовољава наведене услове може се користити у методи. Кернел функција која се често користи у пракси је следећа кубна кернел функција:

$$W(\mathbf{r}_{ij}, h) = \alpha_D \cdot \begin{cases} \frac{2}{3} - r_{ij}^2 + \frac{1}{2}r_{ij}^3, & \text{ако је } 0 \leq r_{ij} < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - r_{ij})^3, & \text{ако је } 1 \leq r_{ij} \leq 2 \end{cases} \quad (31)$$

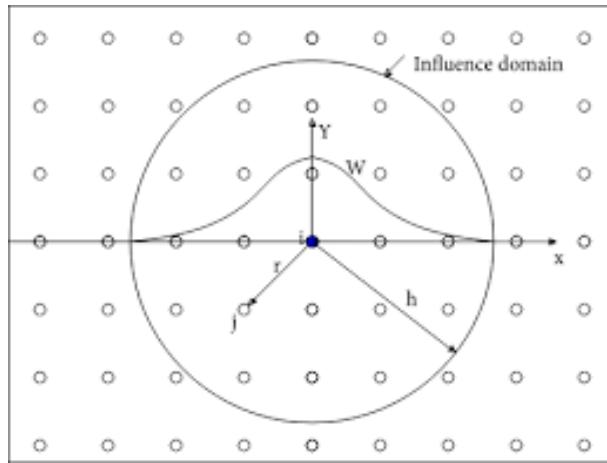
где је α_D у линијским проблемима $1/h$, у раванским $15/(7\pi h^2)$, а у просторним $3/(2\pi h^3)$, док је r_{ij} бездимензионо растојање које се рачуна на следећи начин:

$$r_{ij} = \frac{|r_{ij}|}{h} = \frac{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}}{h} \quad (32)$$

2.4 Радијус области интерполације

Из услова (7) се види да нема интеракције уколико је $r_{ij}/h > k$ јер је $W_{ij} = 0$ и $\frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = 0$. Избор дужине h одређује број интеракција за сваку честицу. Ако је h сувише мало, нема доволно честица окојом дата честица може да интерагује, што за последицу даје јако слабу тачност методе. А уколико је h сувише велико, локалне карактеристике се мешају, што опет доводи до лоше тачности и спорог прорачуна.

Када је дужина h приближно $1.4\Delta r$, где је Δr почетно растојање између честица, пречник утицаја је $2.8\Delta r$. На слици 1 се види да са таквом дужином свака честица има 20 честица у свом домену утицаја у две димензије, што је често добар компромис када се узимају у обзир тачност и брзина симулација. Због чињењенице да честице теже да задрже своје суседне честице на растојању Δr , током симулације број суседних честица приближно остаје исти.



Слика 1: Радијус интерполације

2.5 Конзистенција у SPH методи

Услови за конзистентност SPH методе нису задовољени за честице које су на растојању мањем од kh од честица границе. Такође, за честице на доволној удаљености од границе струјања услови од (26) до (29) нису нужно задовољени. Оно што је могући узрок томе јесте неуформан распоред или недовољан број честица. Зарад остварења козистенције поступка, прорачун се мора кориговати.

Како би се задовољио услов тачности у изразима се уместо W може користити коригована вредност:

$$\tilde{W}_{ij} = \frac{W(r_{ij}, h)}{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_{ij}, h)} \quad (33)$$

Док се за корекцију градијента уводи матрица:

$$\mathbf{L}_i = \left(\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \Delta W(\mathbf{r}_{ij}, h) \otimes \mathbf{r}_{ij} \right)^{-1} \quad (34)$$

уз помоћ које добијамо кориговану вредност:

$$\tilde{\Delta} W(r_{ij}, h) = \mathbf{L}_i \Delta W(r_{ij}, h) \quad (35)$$

која задовољава услов (12). У пракси се показало да се корекцијом градијента не добијају тачнији резултати, за разлику од

корекције кернел функције (33), у односу на резултате стандардног SPH модела. Такође, овим корекцијама се нарушава конзервативност шеме, јер конзервативност количине кретања није директно задовољена. Стога се сматра и наводи да је приликом моделовања SPH методом конзервативност важнија од конзистенције.

3 Једначине кретања флуида

Кретање флуида описује се са три закона одржања. То су закон одржања масе(једначина континуитета), закон одржања количине кретања и закон одржања енергије. Ови закони су формулисани под претпоставком да је флуид континуирани медијум. У овом раду за моделирање биће разматрани закон о одржању масе и импулса, односно количине кретања. У наставку ће подебљана слова представљати векторе, док ће нормална слова представљати скаларе. Материјални извод променљиве ϕ означен је са $\frac{D\phi}{Dt}$. Материјални извод је промена одређеног својства када се прати одређена честица. и може се изразити као:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \quad (36)$$

3.1 Закон одржања масе

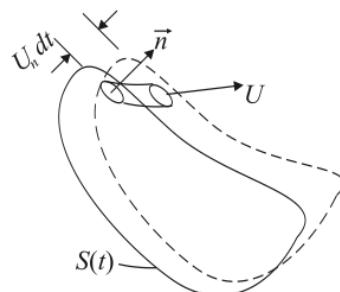
Како у запремини флуида $V(t)$ нема промене у маси важи индентитет:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0 \quad (37)$$

Рејнолдсова теорема о транспорту нам обезбеђује да уколико имамо запремину $V(t)$ ограничenu површином $S(t)$ важи следеће:

$$\frac{d}{dt} \int_V G dV = \int_V \frac{\partial G}{\partial t} dV + \int_S G \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (38)$$

где је U_n нормална компонента брзине тачке на S и $U_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$.



Слика 2: Део запремине флуида

Комбинујући изразе (37) и (38) добијамо:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0 \quad (39)$$

Како ово важи за сваку запремину $V(t)$ подинтегрални израз мора бити нула, па имамо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0 \longrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \longrightarrow \\ \frac{D\rho}{Dt} &= -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \end{aligned} \quad (40)$$

Варијације у густини воде су мале. Углавном се вода и посматра као потпуно нестишлив флуид, из разлога што су једначине за потпуно нестишљиве флуиде лакше за решавање. Код потпуно нестишљивих флуида густина сваке честице остаје константна.

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (41)$$

Долазимо до закључка да потпуно нестишљиви флуиди немају дивергенцију, с обзиром да је због израза (41), израз $\nabla \cdot \mathbf{v}$ једнак нули. Такође, код потпуно нестишљивих флуида нема корелације између густине и притиска, јер густина остаје константна док притисак варира. За SPH методу не постоји једноставан начин за експлицитно рачунање притиска, зато се вода у методи не посматра као потпуно нестишљив флуид, већ благо стишљив.

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \quad (42)$$

Ако би се увела веза имзеђу притиска и густине, не би било потребно да се притисак имплицитно рачуна. Зато се користи једначина стања. Занемарујући атмосферски притисак имамо:

$$p = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (43)$$

где је p притисак изражен у Pa , $\gamma = 7$, $B = c^2 \rho_0 / \gamma$. Величина B се рачуна преко референтне густине, која на слободној површини износи $\rho_0 = 1000 \frac{kg}{m^3}$, док је c брзина простирања звука. Када се користи стварна брзина звука у води која износи $1480 \frac{m}{s}$ испоставља да се резултати слажу у малом проценту. Када је брзина c велика временски корак у прорачуну мора бити мали, због стабилности,

што нас доводи до временски захтевног рачуна. Стога се у пракси углавном користи вештачка брзина звука, приближно десет пута већа од највеће брзине која се јавља у прорачуну $c \approx 10v_{max}$.

Предложена промена у густини је:

$$\frac{\nabla \rho}{\rho} \sim \frac{v^2}{c^2} = M^2 \quad (44)$$

где M представља Махов број, v представља уобичајену брзину флуида док је c предложена вредност за брзину звука. Узимајући да је $c \approx 10v_{max}$ максималне разлике релативне густине су мале, реда 1%. Тако добијамо прихватљиво време за прорачун, док је вода у методи благо стишљива.

3.2 Закон одржања количине кретања

Оно што налаже закон одржања количине кретања је да је промена импулса масе материје једнака укупној сили која делује на тај део масе. Укупна сила се састоји од површинских и запреминских сила.

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{v} dV = \int_{S(t)} f_s dS + \int_{V(t)} \rho f_t dV \quad (45)$$

Површински напон можемо представити преко тензора тангенцијалних напона T и нормалног вектора \mathbf{n} , и употребом Гаусове теореме добијамо:

$$\int_{S(t)} f_s dS = \int_{S(t)} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{T} dV \quad (46)$$

Трансформацијом леве стране у изразу (45) и комбинујући изразе (45) и (46) добијамо:

$$\int_{V(t)} \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dV = \int_{V(t)} (\nabla \cdot \mathbf{T} + \rho f_t) dV \quad (47)$$

Како израз (47) важи за свако $V(t)$, добијамо:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho f_t \quad (48)$$

Из Навјер-Стоксовых једначина имамо:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}_b \quad (49)$$

4 Једначине одржања у SPH методи

Комбинујући апроксимације из SPH методе са законима одржања наведеним у секцији 2, можемо моделовати флуид.

4.1 Закон одржања масе

У секцији 2 поменут је израз:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \quad (50)$$

Користећи израз (22), добијамо:

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (51)$$

У разматраној варијанти методе сматра се да је маса честице m_i константна, док мења густину када се креће заједно са осталим честицама због промене међусобног положаја између честица. Може се приметити да се густина може рачунати и преко формуле (16), али у том случају честице које су близу слободне површине не би имале утицај честица изнад њих, па би густина била сувише мала.

4.2 Једначина стања

Како се густина рачуна за сваку честицу, притисак можемо наћи преко једначине стања:

$$p_i = B \left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^7 - 1 \right] \quad (52)$$

где је $B = c^2 \rho_0 / 7$, $\rho_0 = 1000 \frac{kg}{m^3}$, а c је предложена вредност која је приближно десет пута већа од највеће брзине која се може јавити током прорачуна. На почетку симулације густина се поставља да помоћу једначине стања даје одговарајући хидростатички притисак. Како бисмо то добили, почетна густина се треба рачунати као:

$$\rho_i = \rho_0 \left(1 + \frac{\rho g (d - y_i)}{B} \right)^{\frac{1}{7}} \quad (53)$$

где је d дубина воде, а y_i координата честице по y оси.

4.3 Закон одржања количине кретања

Како бисмо апроксимирали Навиер-Стоксове једначине за флуид, посматраћемо прво Ојлерове једначине које ћемо касније убацити у израз (49). Дакле прво посматрамо градијент притиска, којег дискретизујемо на следећи начин:

$$\begin{aligned}\frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -\frac{1}{\rho}\nabla p \longrightarrow \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i \\ \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} p_j \nabla_i W_{ij}\end{aligned}\quad (54)$$

Како је сила која делује на честицу $F_i = m_i a_i$, не важи да је $F_i = -F_j$ јер $p_i \neq p_j$ па имамо:

$$-\frac{m_i m_j}{\rho_i \rho_j} p_j \nabla_i W_{ij} \neq -\frac{m_j m_i}{\rho_j \rho_i} p_j \nabla_j W_{ij} \quad (55)$$

где је:

$$\nabla_j W_{ij} = \frac{x_j - \mathbf{x}_i}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \quad (56)$$

и важи $\nabla_j W_{ij} = -\nabla_i W_{ij}$.

У изразу (55) видимо да се нарушава трећи Њутнов закон. Из овог разлога смо уводили симетричан облик апроксимације индентитета, израз (25), који ћемо применити на део израза са притиском:

$$\frac{1}{\rho} \nabla p = \nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) + \frac{p}{\rho^2} \nabla \rho \quad (57)$$

да бисмо добили:

$$\begin{aligned}\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} &= - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \left(\frac{p_j}{\rho_j} \right) \nabla_i W_{ij} - \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j \nabla_i W_{ij} \\ \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} &= - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij}\end{aligned}\quad (58)$$

Како смо апроксимацију радили над Ојеровим једначинама које не узимају у обзир вискозност, морамо увести члан преко којег ћемо је узети у обзир:

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} + \mathbf{f}_i \quad (59)$$

Сила трења по јединици масе се моделује уводећи фактор вештачке вискозности на следећи начин:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\frac{\alpha h \bar{c}_{ij} \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{\bar{\rho}_{ij} \cdot (\bar{r}_{ij}^2 + \varphi^2)}, & \text{ако је } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} < 0 \\ 0, & \text{ако је } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (60)$$

где је α коефицијент вештачке вискозности и његова вредност зависи од случаја до случаја, углавном је та вредност у опсегу $0 < \alpha < 0.01$, $\bar{\rho}_{ij} = (\rho_i + \rho_j) / 2$, $\bar{c}_{ij} = (c_i + c_j) / 2$, док је $\varphi = 0.01h^2$ коефицијент који се уводи како би се у неким ситуацијама избегло дељење са вредностима близске нули. $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, а $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$.

4.4 Кретање честица и њихове брзине

За брзину честице се узима пондерисана вредност брзине посматране честице и брзина честица у њеном домену, чиме се спречава продор честица. Треба узети у обзир да свака честица има две брзине, једну сопствену брзину којом ће се кретати коју ћемо обележавати са $\hat{\mathbf{v}}$, док је друга показатељ импулса честице и обележавамо је са \mathbf{v} :

$$\hat{\mathbf{v}}_i = \mathbf{v}_i + \varepsilon \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j}{\bar{\rho}_{ij}} \right) W_{ij} \quad (61)$$

И имамо:

$$\frac{D\mathbf{x}_i}{Dt} = \hat{\mathbf{v}}_i \quad (62)$$

где је ε константа која узима вредност између нуле и јединице, а обично узима вредност 0.5. Како би се задовољила конзистенција брзина $\hat{\mathbf{v}}_i$ се користи у закону одржања масе, док се у Навиер-Стоксовим једначинама користи брзина \mathbf{v} . Једначина (61) задовољава закон одржања импулса али не и енергије, стога је предложен следећи идентитет како би се то задовољило:

$$\hat{\mathbf{v}}_i = \mathbf{v}_i + \varepsilon \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\hat{\mathbf{v}}_i - \hat{\mathbf{v}}_j}{\bar{\rho}_{ij}} \right) W_{ij} \quad (63)$$

4.5 Имплементација

У SPH постоје само три независне променљиве, а то су густина ρ , позиција x и брзина \mathbf{v} . Притисак није независна променљива због

уведене једначине стања, помоћу које рачунамо притисак преко густине. У радовима је дат следећи израз као услов стабилности временске интеграције:

$$\Delta t \leq \min \left(0.4 \frac{h}{c + 0.6\alpha c}, \min 0.25 \left(\frac{h}{f_i} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (64)$$

где је c брзина звука, α је коефицијент вештачке вискозности, поменут у изразу за увођење вештачке вискозности, док је f_i максимална вредност сile по јединици масе за честицу, односно убрзање. Имамо три диференцијалне једначине које треба решавати, а то су:

$$\frac{D\mathbf{x}}{Dt} = \hat{\mathbf{v}} \quad (65)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = f_1(\hat{\mathbf{v}}, \mathbf{x}) \quad (66)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = f_2(\rho, \mathbf{v}, \mathbf{x}) \quad (67)$$

За решавање диференцијалних једначина користићемо методу *Leap-frog* интеграције са предиктор вредностима за брзину и густину у међукорацима:

$$\rho^{n+1/2} = \rho^{n-1/2} + \Delta t f_1(\hat{\mathbf{v}}^{*n}, \mathbf{x}^n) \quad (68)$$

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{v}^{n-1/2} + \Delta t f_2(\rho^{*n}, \mathbf{v}^{*n}, \mathbf{x}^n) \quad (69)$$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \Delta t \hat{\mathbf{v}}^{n+1/2} \quad (70)$$

Предиктор вредности за брзину и густину се рачунају на следећи начин:

$$\rho^{*n} = \rho^{n-1/2} + 1/2 \Delta t f_1(\hat{\mathbf{v}}^{*n}, \mathbf{x}^n) \quad (71)$$

$$\mathbf{v}^{*n} = \mathbf{v}^{n-1/2} 1/2 \Delta t f_2(\rho^{*n}, 1/2 \Delta t f_1(\hat{\mathbf{v}}^{*n-1}, \mathbf{x}^n)) \quad (72)$$

Док се диференцијална једначина за $\hat{\mathbf{v}}$ временски интегрише на следећи начин:

$$\hat{\mathbf{v}}_i^{n+1/2} = \mathbf{v}^{n+1/2} + \epsilon \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\hat{\mathbf{v}}_j^{*n} - \hat{\mathbf{v}}_i^{*n}}{\rho_{ij}} \right) W_{ij} \quad (73)$$

$$\hat{\mathbf{v}}^{*n} = \hat{\mathbf{v}}^{n-1/2} + 1/2 \Delta t f_2(\rho^{*n-1}, \mathbf{v}^{*n-1}, \mathbf{x}^{n-1}) \quad (74)$$

Где степен означава временски корак у коме се врши интеграција, i и j представљају индексе честица, док је $*$ предиктор вредност.

4.6 Границни услови

Код апроксимације честицама, оно што није лако имплементирати јесу гранични услови у случају затворене и отворене границе. У случају затворене границе, на пример бране или зида, чештица која удара у границу треба да буде заустављена.

Један од начина за моделирање чврсте границе јесте да се постави дупли ред честица на граници које се понашају као остале честице флуида, с тим што им је позиција фиксирана током времена. Оне стварају притисак на остале честице флуида, и тиме спречавају продирање честица. Када се користи чврста граница која се помера, ове честице учествују у прорачуну вискозних сила. Такође овако постављене, ове честице не учествују у апроксимацији брзине. Овакав метод третирања чврсте границе назива се метод граничних квази флуидних честица такозване динамичке честице.

Постоји још пар начина на који се моделирају гранични услови, али се поменути метод сматра најлакшим.

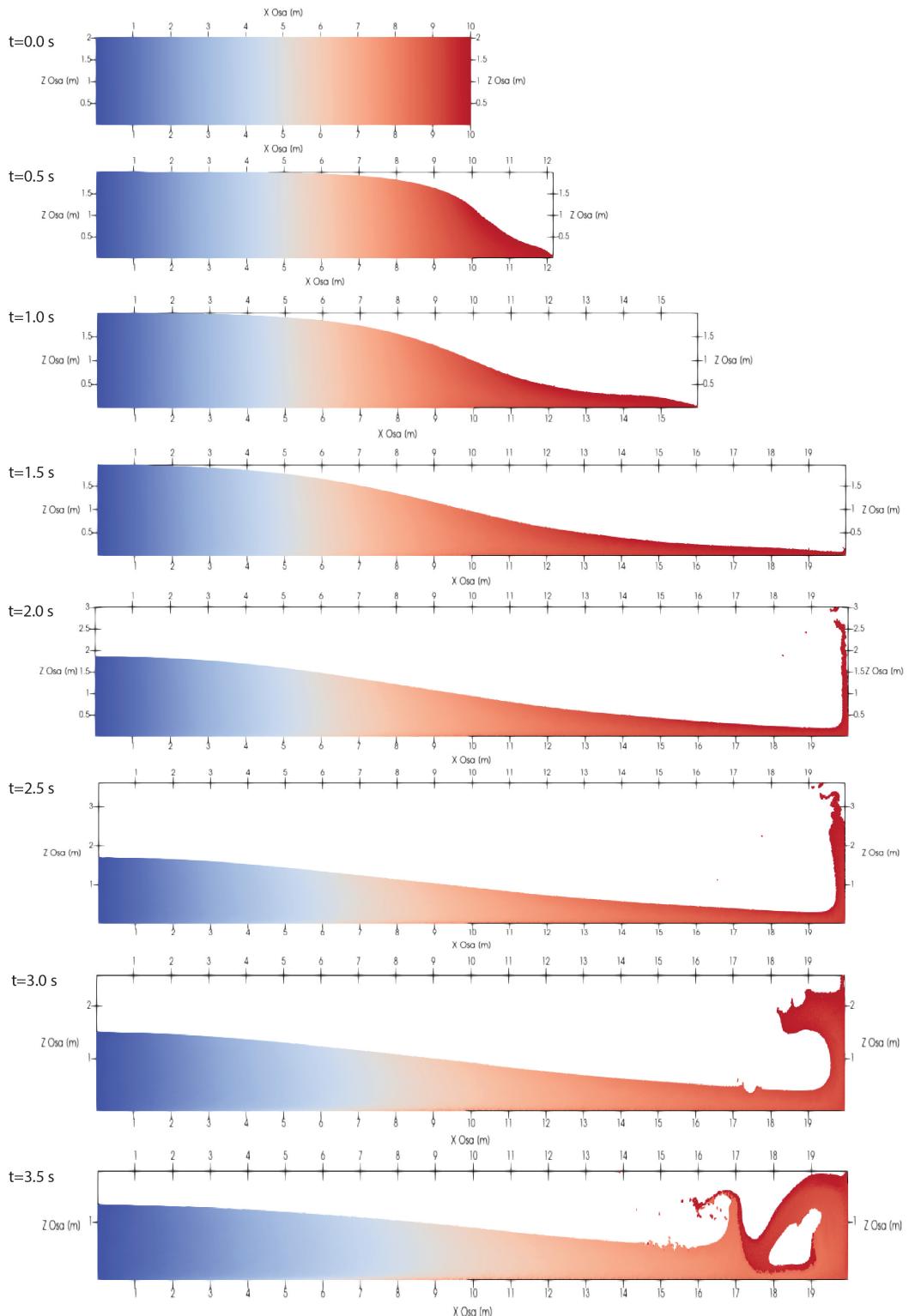
5 Проблем рушења бране

Проблем рушења бране представља ситуацију уклањања дела гравитације која је одржавала воду у стању мирувања. Тај сценарио дешава се код пролома бране. Иако се то ретко дешава, то може изазвати велике штете, како материјалне тако и у виду људских живота. Стога је овај проблем важан у инжењерингу и потребно је предвидети динамику простирања. Проблем рушења бране биће представљен као пример употребе SPH методе. У ту сврху је употребљен јавно доступан код *DualSPHysics*.

На почетку морају бити задате димензије, у којим оквирима се налази вода у тренутку $t = 0$, као и границе домена, односно докле вода може да сешири. Биће разматран проблем у две димензије. Такође задаје се и величина сваке честице. Број честица је већи са мањим пречником, а мањи са већим. Поставља се и временски корак.

У овом примеру временски корак постављен је на $0.02s$, величина честице постављена је на $0.02m$, док су димензије границе воде на почетку $10m$ по x оси и $2m$ по z оси, а границе домена $20m$ по x оси и $4.5 m$ по z оси.

Оглед рушења бране се може поделити у три фазе. У првој фази се талас простире и трансформише до наиласка на зид, односно чврсту границу. Друга фаза представља удар у чврсту границу, где се дешава и раздвајања млаза воде на два дела, један који се креће дуж границе и ломећи талас. Док је трећа фаза повратни талас и дисипације енергије до умиривања воде. Умиривање доста дуго таје, и из практичних разлога приказано је првих 3.5 секунди, где се могу уочити прве две фазе.



Слика 3: Временски корак симулације

6 Закључак

Главни циљ овог рада био је да се представе теоријске основе једне од најпознатијих нумеричких метода које се заснивају на праћењу флуидних делића, SPH методе, у чијој се позадини налази интерполација дискретизованог флуидног континума на флуидне честице које пратимо. У раду је дат теоријски увид у основне једначине механике флуида које су апроксимиране применом кернел функције. На крају, приказан је релативно једноставан пример симулације која користи алгоритам описан у раду.

Оно што треба имати у виду је то да је SPH метода и даље апроксимација реалности, и да су потребне провере у виду стандардних тестова који проверавају да ли су резултати било какве симулације физички реални и да ли се може поуздати у њих. То је могуће спровести поређењем резултата симулације са реалним, односно, физичким експериментима или поређењем симулација са директним математичким решењима која постоје за крајње поједностављене проблеме течења.

6.1 Даљи рад

Предложена теоријска основа у овом раду није имала подршку стварног експеримента. У даљем раду бих се посветила анализи и провери тачности методе, као и вредностима коефицијената који потенцијално могу утицати на тачност решења.

6.2 Захвалност

За крај бих волела да изразим захвалност, пре свега мом ментору, др Николи Росићу који је несебично одвојио време да ме уведе у области које ми претходно нису биле познате и који је увек био спреман да ми разјасни недоумице које су настала током рада.

Желим да се захвалим и професорки физике, уједно и мојој разредној, Драгици Ивковић која је једним делом одговорна за моје познавање физичких феномена и моје интересовање за исте.

Конечно, али не и мање важно, желела бих да изразим захвалност свим професорима Математичке гимназије који су утицали на стицање знања из математике, физике, али и свеукупног знања, као и свима који овде нису поменути, али су утицали на мој рад и пружали подршку током израде овог рада.

Литература

- [1] Liu M. , Liu G., Smoothed particle hydrodynamics(sph): an overview and recent developments. *Archives of computational methods in engineering* 17.
- [2] Bonet, J. , and Kulesagaram, S. Corerction and stabilization of smooth particle hydrodynamics methods with applications in metal forming simulations *Computer Methods in applied mechanics and engineering*, (1999).
- [3] Vacandio, R., Rogers , B. , and Stansby, P. Accurate particle splitting for smoothed particle hydrodynamics in shallow water with shock capturing. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 69, (2012).
- [4] Monaghan, J. Smoothed particle hydrodynamics *Reports on progress in physics* 68,(2005).
- [5] Daniel Price *Smoothed Particle Hydrodynamics*, Monash University, Melbourne, Australia(2013).
- [6] Areti Kiara, *Analysis of the Smoothed Particle Hydrodynamics method for free-surface flows*, Massachusetts Institute of Technology(2010).
- [7] Oddny H. Brun, *Improved interpolation in SPH in cases of less smooth flow*, University of Central Florida Orlando, Florida(2016).
- [8] Др Никола Росић, *Нумеричко моделирање отворених токова засновано на праћењу флуидних делића*, Грађевински факултет,(2016).
- [9] Jason Frank, Sebastian Reich, *Conservation properties of smoothed particle hydrodynamics applied to the shallow water equations*, Department of Mathematics, Imperial College.