

Projekt nr C.3.2

Symulacja dwuwymiarowej cieczy metodą SPH

Wprowadzenie

Podstawy hydrodynamiczne

Metody stosowane do rozwiązywania problemów hydrodynamiki oparte na opisie **Eulera** operują na stałej siatce przestrzennej, dla której elementów wyznaczane są lokalnie takie wielkości jak gęstość, prędkość czy ciśnienie (ρ, \vec{v}, p) . Równania przepływu cieczy nielepkiej, wynikające z bilansów masy i pędu, w tym ujęciu mają postać:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} = 0 \quad (\text{równanie ciągłości – bilans masy}) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \vec{v} \vec{v}] + \nabla p = 0 \quad (\text{bilans strumienia pędu}) \quad (2)$$

Powyższe zestawienie nie jest kompletne, gdyż brakuje w nim równania wynikającego z bilansu energii, a opisującego zmianę entropii lub energii wewnętrznej. Powód, dla którego zostało ono pominięte, zostanie wyjaśniony w dalszej części.

Podejście alternatywne, polegające na odniesieniu do elementu objętości poruszającego się wraz z płynącą cieczą, nazywane jest opisem **Lagrange’a**. W tym wypadku równania przepływu mają nieco inną postać:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{równanie ciągłości – bilans masy}) \quad (3)$$

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} + \nabla p = 0 \quad (\text{bilans strumienia pędu}) \quad (4)$$

Metody oparte na podejściu Lagrange’a nazywane są ogólnie metodami cząstek, gdyż w przeciwieństwie do metod Eulerowskich nie operują na stałej siatce przestrzennej, a opisują poruszające się cząstki (a w zasadzie pseudocząstki) cieczy.

Metoda SPH

Metoda SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics), zaproponowana w 1977 roku przez Gingolda i Monaghana do symulowania wielkoskalowych procesów z zakresu astrofizyki, okazała się niezwykle elastycznym narzędziem o zastosowaniu znacznie szerszym od pierwotnie zakładanego. Polega ona w ogólności na zastąpieniu ciągłych rozkładów takich parametrów elementów płynu, jak np. gęstość czy ciśnienie, odpowiednimi estymatorami, wyznaczanymi przy założonym jądrze interpolacji:

$$\langle A(\vec{r}) \rangle = \int W(|\vec{r} - \vec{r}'|, h) A(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (5)$$

gdzie:

$A(\vec{r})$ jest estymowaną funkcją,

W jest jądrem interpolacji o własności: $\lim_{h \rightarrow 0} W = \delta$ (a zatem $\lim_{h \rightarrow 0} \langle A(\vec{r}) \rangle = A(\vec{r})$)

h jest tzw. długością wygładzania (*smoothing length*) i określa promień obcięcia.

Rozważając dyskretny zbiór N cząstek płynu zlokalizowanych w punktach \vec{r}_i ($i=1\dots N$) całkowanie zastępujemy sumowaniem, a wtedy estymata wielkości A w pozycji i -tej cząstki określona będzie wzorem:

$$A_i = \sum_{j=1}^N m_j \frac{A_j}{\rho_j} W_{ij} \quad (6)$$

gdzie m_j , ρ_j i A_j to odpowiednio masa, gęstość i wielkość A j -tej cząstki, natomiast $W_{ij} = W(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|, h)$.

Estymatę gradientu wielkości A wyznaczamy w analogiczny sposób:

$$\nabla_i A_i = \sum_{j=1}^N m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla_i W_{ij} \quad (7)$$

Metoda numeryczna

Funkcja jądra interpolacji

W dalszych rozważaniach przyjmiemy funkcję jądra $W(r, h)$ w postaci zaproponowanej przez Monaghana:

$$W(r, h) = \frac{\sigma}{h^\nu} \begin{cases} 1 - 3/2u^2 + 3/4u^3 & 0 \leq u \leq 1 \\ 1/4(2-u)^3 & 1 < u \leq 2 \\ 0 & u > 2 \end{cases} \quad (8)$$

gdzie:

$$r = \vec{r}_j - \vec{r}_i,$$

ν - liczba wymiarów,

$$u = r/h,$$

σ - stała normalizacyjna wynosząca odpowiednio $2/3$, $10/7\pi$, $1/\pi$ dla jednego, dwóch i trzech wymiarów.

Gradient takiej funkcji jądra wyraża się wobec tego wzorem:

$$\nabla W(r, h) = \frac{\sigma}{h^{\nu+1}} \hat{r} \begin{cases} -3u + 9/4u^2 & 0 \leq u \leq 1 \\ -3/4(2-u)^2 & 1 < u \leq 2 \\ 0 & u > 2 \end{cases} \quad (9)$$

$$\text{gdzie } \hat{r} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i) / |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$$

Ze względu na potrzebę zachowania rozsądnej relacji pomiędzy dokładnością symulacji a czasem obliczeń, w naszym projekcie ograniczamy się do przypadków dwuwymiarowych. Wobec tego używać będziemy funkcji jądra oraz jej gradientu w postaci:

$$W(r, h) = \frac{10}{7\pi h^3} \begin{cases} 1 - 3/2u^2 + 3/4u^3 & 0 \leq u \leq 1 \\ 1/4(2-u)^3 & 1 < u \leq 2 \\ 0 & u > 2 \end{cases} \quad (10)$$

oraz

$$\nabla W(r, h) = \frac{10}{7\pi h^4} \hat{r} \begin{cases} -3u + 9/4u^2 & 0 \leq u \leq 1 \\ -3/4(2-u)^2 & 1 < u \leq 2 \\ 0 & u > 2 \end{cases} \quad (9)$$

Bilans strumienia pędu w metodzie SPH

Rozszerzając równanie (4) na ciecze lepkie oraz uwzględniając istnienie dodatkowego pola sił potencjalnych (np. grawitacyjnych) możemy zapisać, że przyspieszenie działające na cząstkę i wyraża się wzorem:

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\frac{\nabla p_i}{\rho_i} + \vec{a}_i^{visc} + \Phi_i \quad (10)$$

gdzie:

∇p_i jest gradientem ciśnienia hydrostatycznego w pozycji cząstki i ,

\vec{a}_i^{visc} jest przyspieszeniem wynikającym z istnienia sił lepkości,

Φ_i reprezentuje wpływ zewnętrznego pola (np. grawitacyjnego).

Aby posłużyć się metodą SPH musimy składniki prawej strony wzoru (10) wyrazić poprzez odpowiednie estymaty. Poniżej rozważymy kolejno wyrażenia członu ciśnieniowego oraz członu lepkościowego.

Człon ciśnieniowy

Z równania (6) zauważamy natychmiast, że:

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij} \quad (11)$$

Estymatę gradientu ciśnienia można wyznaczać bezpośrednio z równania (7) podstawiając $A_i = p_i$, jednak ze względu na pojawiające się wówczas problemy z zachowaniem pędu korzystniejsze okazuje się przyjęcie $A_i = p_i/\rho_i$ i wykorzystanie zależności:

$$\nabla \left(\frac{p_i}{\rho_i} \right) = \frac{1}{\rho_i} \nabla p_i - \frac{p_i}{\rho_i^2} \nabla \rho_i \quad (12)$$

czyli

$$\frac{\nabla p_i}{\rho_i} = \nabla \left(\frac{p_i}{\rho_i} \right) + \frac{p_i}{\rho_i^2} \nabla \rho_i \quad (13)$$

Korzystając teraz z równania (7) otrzymujemy estymatę członu ciśnieniowego wyrażoną wzorem:

$$\frac{\nabla p_i}{\rho_i} = \sum_{j=1}^N m_j \frac{p_j}{\rho_j^2} \nabla_i W_{ij} \left(\frac{p_i}{\rho_i} \right) + \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^N m_j \nabla_i W_{ij} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_i W_{ij} \quad (14)$$

Równania stanu

Wykorzystanie odpowiedniego równania stanu pozwala na pozbycie się ciśnień występujących po prawej stronie wzoru (14). Najczęściej stosuje się tu równanie Newtona-Lagrange'a na prędkość dźwięku:

$$c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \quad (15)$$

gdzie c jest prędkością dźwięku, a $\gamma = c_p / c_v$.

W przypadku cieczy, używa się też innej zależności:

$$p = p_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (16)$$

gdzie p_0 i ρ_0 są odpowiednio przyjętymi wartościami maksymalnymi, natomiast $\gamma \approx 7$.

Jeżeli założymy, że w naszym problemie fizycznym prędkość dźwięku wyznaczyć można z (15) i że jest ona stała, podstawiając (15) do (14) dostajemy człon ciśnieniowy w postaci:

$$\frac{\nabla p_i}{\rho_i} = \frac{c^2}{\gamma} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{\rho_j} \right) \nabla_i W_{ij} \quad (17)$$

Człon lepkościowy

Pomijając chwilowo zewnętrzne pole i uwzględniając (17), równanie (10) zapisujemy jako:

$$\frac{d\bar{v}_i}{dt} = -\frac{c^2}{\gamma} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{\rho_j} \right) \nabla_i W_{ij} + \bar{a}_i^{visc} \quad (18)$$

Zaproponowany przez Monaghana sposób na uwzględnienie członu lepkościowego polega na wprowadzeniu tzw. sztucznej lepkości (*artificial viscosity*) Π_{ij} w formie:

$$\frac{d\bar{v}_i}{dt} = -\frac{c^2}{\gamma} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{\rho_j} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} \quad (19)$$

przy czym

$$\Pi_{ij} = \frac{-\alpha c \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\rho_{ij}} \quad (20)$$

gdzie:

α, β - stałe; zwykle przyjmuje się $\alpha \approx 0.5, \beta \approx 1.0, \rho_{ij} = 0.5(\rho_i + \rho_j)$, natomiast

$$\mu_{ij} = \begin{cases} \frac{\bar{v}_{ij} \cdot \bar{r}_{ij}}{h(r_{ij}^2/h^2 + \eta^2)} & \text{dla } \bar{v}_{ij} \cdot \bar{r}_{ij} < 0 \\ 0 & \text{dla } \bar{v}_{ij} \cdot \bar{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (21)$$

gdzie $\bar{v}_{ij} = \bar{v}_i - \bar{v}_j, \bar{r}_{ij} = \bar{r}_i - \bar{r}_j, r_{ij} = |\bar{r}_{ij}|$, i zazwyczaj $\eta = 0.01$.

Warunki brzegowe

Symulacja nieskończonego układu prowadzona jest najczęściej przy założeniu periodycznych warunków brzegowych. Jeżeli jednak nasz układ posiada jakieś powierzchnie ograniczające (na przykład ściany rury, wewnątrz której płynie ciecz), zazwyczaj modelowane są one jako regularnie rozłożone cząstki innego rodzaju niż cząstki cieczy. Zakłada się wówczas, że cząstki te nie poruszają się, natomiast oddziałują z cząstkami cieczy potencjałem analogicznym do potencjału Lennarda-Jonesa. Uwzględniając zatem wpływ obu rodzajów cząstek, możemy zapisać:

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{a}_i = -\frac{c^2}{\gamma} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{\rho_j} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} + \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^B \vec{F}_{ij} \quad (22)$$

gdzie drugie sumowanie przebiega po cząstkach ściany, a \vec{F}_{ij} jest siłą z jaką j -ta cząstka ściany działa na i -tą cząstkę cieczy.

Całkowanie w czasie

Najprostszy schemat całkowania oparty jest na metodzie Eulera:

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n + \vec{a}_i^n \Delta t \quad (23a)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \Delta t \quad (23b)$$

Indeks górny związany jest w tym wypadku z krokiem czasowym.

Metoda ta jest szybka (nie ma tu wyznaczania prędkości czy też przyspieszeń w punktach pośrednich), jednak może okazać się niewystarczająco dokładna. Jej wariant polega na wyznaczeniu nowego położenia w oparciu o prędkość średnią:

$$\vec{v}_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\vec{v}_i^{n+1} + \vec{v}_i^n) \quad (23c)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^{n+1/2} \Delta t \quad (23d)$$

Lepsze wyniki (choć okupione pewnym zwiększeniem czasu obliczeń) daje stosowanie metod typu predyktor-korektor, np.:

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n + \vec{a}_i^n \Delta t \quad (24a)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \Delta t \quad (24b)$$

$$\vec{v}_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\vec{v}_i^{n+1} + \vec{v}_i^n) \quad (24c)$$

$$\vec{r}_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\vec{r}_i^{n+1} + \vec{r}_i^n) \quad (24d)$$

$$\vec{a}_i^{n+1/2} = a(\vec{r}_i^{n+1/2}, \vec{v}_i^{n+1/2}) \quad (24e)$$

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n + \vec{a}_i^{n+1/2} \Delta t \quad (24f)$$

Krok czasowy

Odpowiedni dobór kroku czasowego jest kluczowy dla poprawnej symulacji ewoluującego układu. Podstawowe kryterium określa warunek Couranta):

$$\Delta t \leq 0.25 \frac{h}{c} \quad (25)$$

ustalający stały krok czasowy, nie zmieniający się w trakcie symulacji.

Inna metoda, którą stosować można jako uzupełnienie poprzedniej, polega na dynamicznym kontrolowaniu kroku czasowego:

$$\Delta t \leq 0.25 \min_i \left(\sqrt{\frac{h}{a_i}} \right) \quad (25)$$

W tym wypadku dobór skali czasowej związany jest z maksymalną siłą działającą na którąś z cząstek w układzie. Należy zauważyć, że sporadyczne przekroczenie warunku (25) nie dyskwalifikuje automatycznie prowadzonych symulacji. Jeżeli jednak kryterium to nie jest spełnione w większości kroków czasowych i dla większości cząstek, to krok czasowy powinien być zmieniony.

Zadania do wykonania

Za pomocą metody SPH proszę przeprowadzić symulację zachowania dwuwymiarowej cieczy **nielepkiej**, na którą nie działają siły ciężkości.

Warunki brzegowe – periodyczne.

Brzegu naczyńia (tzn. cząstek drugiego rodzaju) nie ma.

Równanie stanu przyjąć w postaci (15) z prędkością dźwięku dobraną w ten sposób, by nasza ciecz była możliwie mało ściśliwa. W takim wypadku należy zwrócić uwagę na właściwy dobór wartości początkowych, tak, aby nie doprowadzić do zbyt dużych zmian gęstości.

Badamy ewolucję cieczy wychodząc od przyjętych warunków początkowych (położenia i prędkości cząstek cieczy). W trakcie symulacji kontrolujemy zachowanie energii i pędu.

Literatura

1. Monaghan, J.J., Smoothed Particle Hydrodynamics, Annu. Rev. Astron. Astrophys. 1992, 30, 543-74
2. Brian Schlatter, <http://www.physics.orst.edu/~rubin/CPUG/CPlab/Brian/thesis.ps>
3. Marco Del Pra, <http://dns4.pd.astro.it/~cosmo/Group/Dissertations/Delpra2003.pdf>