

Paweł Wróblewski*, Krzysztof Boryczko*

Implementacja równoległa, zastosowania i wyniki metody SPH w przypadku symulacji płynów nieściśliwych

1. Wprowadzenie

Istnieje wiele metod komputerowych służących do symulowania zjawisk zachodzących w świecie rzeczywistym. Wiele z tych zjawisk, istotnych dla nauki i inżynierii, dotyczy mechaniki płynów. Zjawiska te zachodzą w różnych skalach przestrzenno-czasowych, poczynając od skali mikro, poprzez skalę mezo, aż do skali makro. Dodatkowo, wiele z interesujących zjawisk, takich jak np. turbulencje, oddziaływania płyn-ścianki, zachowanie się powierzchni swobodnej płynu, zachodzi na styku poszczególnych skal. Niestety nie są jeszcze dostępne poprawne i efektywne metody do symulowania wielu z tych zjawisk.

Metoda SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) [14] należy do metod symulacji z wykorzystaniem oddziałujących cząstek. Przez pojęcie „cząstki” w tej metodzie rozumie się pewną objętość płynu, z której środkiem masy kojarzy się jej parametry fizyczne. Zbiór cząstek reprezentujących interesujący fragment materii tworzy układ zamknięty w umownym, izolowanym od świata zewnętrznego pudle obliczeniowym. Symulacja polega na obserwacji parametrów ewoluującego układu od pewnego stanu początkowego przez zadaną z góry liczbę kroków. W każdym kroku symulacji obliczane są siły oddziaływań międzycząstkowych i na ich podstawie rozwiązywane są równania ruchu, dzięki czemu wyznaczone są położenia i prędkości cząstek w kolejnym kroku symulacji.

Najbardziej złożonym obliczeniowo fragmentem symulacji jest wyznaczanie cząstek sąsiednich dla każdej cząstki układu. W zależności od zastosowanego potencjału oddziaływania cząstek stosuje się kilka metod. W przypadku potencjału krótkozasięgowego stosuje się tak zwany promień obcięcia polegający na tym, iż uwzględniamy oddziaływania pochodzące jedynie od cząstek zawartych w kuli o promieniu równym promieniowi obcięcia i środku w danej cząstce. Dla tak wprowadzonego uproszczenia istnieje kilka efektywnych algorytmów wyszukiwania sąsiadów, z których jeden został zaimplementowany w opisywanych symulacjach. Klasyczna metoda SPH zakłada obliczenia, gdzie każda cząstka ma stałą liczbę sąsiadów.

* Katedra Informatyki, Wydział EAIiE, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

Symulowanie złożonych układów z wykorzystaniem metod cząstek wymaga stosowania systemów komputerowych o dużych mocach obliczeniowych. Duża złożoność pamięciowa wymusza, aby systemy te posiadały odpowiednio duże zasoby pamięci operacyjnej. Stąd powszechne stosowanie architektur wieloprocesorowych z pamięcią rozproszoną lub współdzieloną. Pierwsze charakteryzują się niską ceną, lecz dominujący na nich paradygmat programowania oparty na przesyłaniu komunikatów wymaga dużego doświadczenia programistycznego i nakładu czasowego. Drugie z wymienionych architektur są obecnie stosunkowo drogie, lecz dostępne środowiska programistyczne pozwalają osiągać porównywalne wartości parametrów obliczenia równoległego (przyspieszenie, efektywność) przy znacznie mniejszym nakładzie pracy.

2. Metoda SPH

2.1. Wiadomości podstawowe

Metoda SPH powstała w celu symulowania zjawisk astrofizycznych [5, 11]. Jej główną ideą jest aproksymacja pola dowolnej wielkości fizycznej w wybranych punktach przestrzeni. Siły hydrodynamiczne spełniające równanie Naviera–Stokesa obliczane są w tych punktach – cząstkach SPH – i na ich podstawie rozwiązywane są równania ruchu. Do aproksymacji wykorzystuje się funkcję jądra, nazywaną inaczej funkcją wagową, funkcją rozmycia lub *kernel*em. Cechuje ją zerowa wartość w nieskończoności oraz to, że całka z niej po całej dziedzinie jest równa jedności. W teorii taką funkcją mogłaby być funkcja gaussowska. Jednak w praktyce korzysta się z funkcji sklepanych, posiadających zwartą dziedzinę. W niniejszej pracy przedstawione są wyniki, do których wykorzystywana była funkcja jądra zaproponowana w [12].

Aproksymacja w metodzie SPH dotyczy nie tylko sił, ale i innych wielkości związanych z modelowanym zjawiskiem. Przykładowo, poniżej znajduje się wzór aproksymacyjny dla gęstości [12]:

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij} \quad (1)$$

gdzie:

m_j – masa cząstki j ,

$W_{ij} = W(r_{ij}, h_{ij})$ – funkcja jądra działająca pomiędzy cząstkami i oraz j ,

r_{ij} – odległość pomiędzy cząstkami i oraz j ,

h_{ij} – tzw. *smoothing length* – odległość rozmycia, która równa się połowie promienia obcięcia dla cząstek i oraz j .

Suma w powyższym wzorze przebiega po wszystkich cząstkach SPH symulowanego układu. W praktyce jednak, jeśli dziedzina funkcji jądra jest zwarta, wystarczy w powyż-

szej sumie uwzględnić jedynie te cząstki SPH, dla których funkcja jądra jest niezerowa. Przy zastosowaniu funkcji jądra, która znika dla odległości pomiędzy dwoma cząstkami większych niż zadany promień obcięcia, możliwe jest skorzystanie dla wyznaczania cząstek sąsiednich z metody cel połączonych [2].

Przyspieszenie, jakiemu podlega cząstka przez działanie na nią siły SPH obliczane jest według wzoru:

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \vec{\nabla} W_{ij} \quad (2)$$

gdzie:

P_i – ciśnienie w punkcie i ,

ρ_i – gęstość w punkcie i ,

Π_{ij} – składowa pochodząca od lepkości działająca pomiędzy cząstkami i oraz j .

Dokładne wyprowadzenie równania (2) można znaleźć w [9].

2.2. Lepkość w metodzie SPH

W wielu symulacjach modelujących dynamikę płynu konieczne jest uwzględnienie przemiany energii kinetycznej w energię wewnętrzną układu. W przypadku przedstawionej metody SPH, gdzie w symulacji nie jest obliczana energia wewnętrzna, konieczne jest zaimplementowanie dyssypacji energii kinetycznej cząstek za pomocą sił lepkości. Otrzymuje się to poprzez dołączenie w równaniu (2) członu oznaczonego jako Π_{ij} .

Najczęściej używanym modelem lepkości [9] w metodzie SPH jest model zaproponowany w [12]:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha c_{ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\rho_{ij}}, & \text{gdy } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} < 0 \\ 0, & \text{gdy } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (3)$$

gdzie:

$$\mu_{ij} = \frac{h_{ij} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^2 + \eta^2} \quad (4)$$

c_{ij} – wartość prędkości dźwięku zdefiniowanej dla cząstek i oraz j ,

v_{ij} – różnica prędkości pomiędzy cząstkami i oraz j ,

r_{ij} – różnica położenia cząstek i i j ,

h_{ij} – odległość rozmycia.

Monaghan sugeruje nadanie wartości $\eta^2 = (0,1h)^2$, $\alpha = 0,5$, $\beta = 1,0$. W modelu tym siły lepkości dla dwóch cząstek znikają, gdy $\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \geq 0$, co w języku interpolacji SPH ma odpowiednik: $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \geq 0$ [12]. Zgodnie z tym, siły lepkości dla dwóch cząstek występują tylko wtedy, gdy cząstki wzajemnie się zbliżają. W przypadku przeciwnym siły lepkości są równe zero.

Kolejnym modelem sztucznej lepkości jest model zaproponowany w [6]:

$$\Pi_{ij} = \frac{q_i}{\rho_i^2} + \frac{q_j}{\rho_j^2} \quad (5)$$

gdzie

$$q_i = \begin{cases} \alpha h_i \rho_i c_i |\vec{\nabla} \cdot \vec{v}|_i + \beta h_i^2 \rho_i |\vec{\nabla} \cdot \vec{v}|_i^2 & \text{gdy } \vec{\nabla} \cdot \vec{v} < 0 \\ 0 & \text{gdy } \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \geq 0 \end{cases} \quad (6)$$

$\vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ jest obliczane zgodnie z wzorem:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j \vec{v}_{ij} \cdot \frac{1}{2} \left[\vec{\nabla}_i W(r_{ij}, h_i) + \vec{\nabla}_i W(r_{ij}, h_j) \right] \quad (7)$$

Trzecim modelem lepkości, dość powszechnie występującym w literaturze jest model podany w [1]:

$$\Pi_{ij} = \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) (\alpha \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2) \quad (8)$$

gdzie

$$\mu_{ij} = \begin{cases} \frac{\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{h_{ij} \left(\frac{r_{ij}^2}{h_{ij}^2} + \eta^2 \right)} \frac{f_i + f_j}{2c_{ij}} & \text{gdy } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} < 0 \\ 0 & \text{gdy } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

$$f_i = \frac{|\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i|}{|\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i| + |\vec{\nabla} \times \vec{v}_i| + \eta' \frac{c_i}{h_i}} \quad (10)$$

Parametr η' przyjmuje się rzędu $10^{-4} \div 10^{-5}$.

Bardziej szczegółowa dyskusja dotycząca wyboru odpowiedniego modelu lepkości przedstawiona została w [10]. W zastosowaniach zaimplementowanych w niniejszej pracy autorzy wykorzystali model zaproponowany przez Monaghana. Jego zaletami są prostota oraz wynikające z niej względnie małe koszty obliczeniowe.

2.3. Płyny nieściśliwe w SPH

Standardowy wzór na obliczanie gęstości (1) jest nieprzydatny w przypadku modelowania płynów z powierzchnią swobodną. Przy zastosowaniu tego wzoru na granicy płynu gęstość zmienia się w sposób ciągły, od wartości zadanej do zera na długości $2h$, co jest sprzeczne z rzeczywistością. W takim przypadku stosuje się inny wzór wyprowadzony z aproksymacji SPH [13]:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j m_j \vec{v}_{ij} \cdot \vec{\nabla} W_{ij} \quad (11)$$

dzięki któremu w każdym kroku oblicza się jedynie zmiany gęstości. Zastosowanie tego równania wymaga nadania cząstkom gęstości początkowych, od wartości których zaczyna się ewolucja układu.

Zachowanie płynu SPH jako cieczy nieściśliwej otrzymuje się poprzez zastosowanie odpowiedniego równania stanu, z którego obliczana jest wartość ciśnienia w równaniu (2). W niniejszej pracy przyjęto postać zaproponowaną w [13]:

$$P = \frac{\rho_0 c_0^2}{7} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^7 - 1 \right) \quad (12)$$

Wartość ciśnienia i obliczonej z niego wartości siły hydrodynamicznej wynikające z przyjętego równania stanu zależą m.in. od zadanej prędkości dźwięku. Stąd też maksymalna dopuszczalna wartość kroku czasowego zależy od prędkości dźwięku c_0 . Dla rzeczywistych wartości prędkości dźwięku c_0 krok czasowy jest na tyle mały, że jedynie symulacje z małą liczbą cząstek przebiegają w akceptowalnym czasie. Stąd zastosowanie rzeczywistych wartości prędkości dźwięku jest nieprzydatne w większości symulacji. Wyjściem z tej sytuacji jest zmniejszenie wartości prędkości dźwięku o kilka rzędów wielkości, co znacznie przyspiesza wykonanie symulacji, oraz nie zaburza znacząco jej wyników [3]. Dlatego też w przedstawionych symulacjach wartość prędkości dźwięku celowo zaniżono (zamiast 1500 m/s, przyjęto 15 m/s).

3. Implementacja metody SPH

3.1. Ścianki naczynia

Oprócz oddziaływań pomiędzy cząstkami SPH, konieczne jest również wprowadzenie sił oddziałujących pomiędzy cząstkami SPH a cząstkami ścianek naczynia, w którym przebiega symulacja. W prowadzonych symulacjach zastosowano ich postać bardzo podobną do podanej w [14]:

$$\frac{dv_i}{dt} = \sum_j \left(\frac{c_0}{10} \right)^2 \frac{\Gamma(r_{ij}/r_{cut})}{r_{ij}} \frac{m_j}{m_i + m_j} \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (13)$$

gdzie

$$\Gamma(q) = \begin{cases} \frac{2}{3}, & \text{gdy } q < \frac{1}{3} \\ 2(2q - 3q^2), & \text{gdy } \frac{1}{3} \leq q < \frac{1}{2} \\ 2(1 - q)^2, & \text{gdy } \frac{1}{2} \leq q < 1 \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases} \quad (14)$$

3.2. Algorytmy znajdowania cząstek sąsiednich

W oryginalnej metodzie SPH [5] wykorzystuje się zmienny zasięg oddziaływania cząstki tak, aby oddziaływała ona w przybliżeniu z taką samą liczbą cząstek sąsiednich. Dzięki temu uzyskuje się mechanizm automatycznego dostosowywania się promienia oddziaływania do gęstości cząstek. Im sąsiednich cząstek jest więcej, a zatem gęstość cząstek jest większa, tym promień oddziaływania jest mniejszy. Jeśli natomiast cząstki są rozmieszczone rzadziej, promień oddziaływania zwiększa się. Powyższy sposób znajdowania sąsiadów został stworzony i zastosowany m.in. do symulacji kosmologicznych z wykorzystaniem modelu SPH [16]. W takich symulacjach gęstości cząstek znajdują się w bardzo dużym przedziale wartości. Wówczas zastosowanie tej metody jest uzasadnione. W przypadku symulacji płynów nieściśliwych, metoda ta niekoniecznie jest dobrym rozwiązaniem, gdyż w takich płynach gęstość cząstek, jest praktycznie stała. Warunek, aby każda cząstka miała taką samą liczbę sąsiadów, jest w zasadzie spełniony przy zastosowaniu stałego promienia oddziaływania w całym układzie. Stąd też, zamiast implementować metodę znajdowania stałej liczby sąsiadów N , można zaimplementować metodę polegającą na znajdowaniu sąsiadów bazującą na stałym promieniu obcięcia r_{cut} .

W obydwu algorytmach wykorzystana została metoda cel połączonych Hockneya [7], której złożoność obliczeniowa jest rzędu $O(N \log N)$. Umożliwia ona symulowanie dużych układów w akceptowalnym czasie.

Tabela 1
Różnice w dwóch sposobach znajdowania sąsiadów

Stałe N	Stałe r_{cut}
Tablica cząstek znajdujących się w sąsiednich 27 celach, jest sortowana względem odległości tych cząstek od bieżącej cząstki i . Ustalona liczba N cząstek znajdujących się najbliżej cząstki i jest przyjmowana jako zbiór jej sąsiadów	Dla każdej cząstki i jej sąsiadem jest taka cząstka j , dla której ich wzajemna odległość r_{ij} jest mniejsza od promienia obcięcia r_{cut}

W tabeli 1 znajduje się krótkie przedstawienie różnic pomiędzy obydwoma metodami.

W metodzie ze stałą liczbą sąsiadów, w procedurze sortowania nie jest konieczne sortowanie całej tablicy. Wystarczy, że zostanie ona podzielona na dwie części w ten sposób, że w pierwszej będzie się znajdowało N cząstek najbliższych danej cząstce, a w drugiej będą znajdowały się cząstki bardziej oddalone. Wzajemne uporządkowanie cząstek w obydwu częściach nie ma znaczenia dla algorytmu. Fakt, że w metodzie tej każda cząstka ma stałą liczbę sąsiadów powoduje, że cząstki mają różne promienie obcięcia. Dla każdej cząstki za promień obcięcia jest przyjmowana odległość do jej najdalszego N -tego sąsiada.

Dla metody ze stałym promieniem obcięcia cząstki w symulowanym układzie mają różne liczby sąsiadów. Wynika to stąd, że gęstość cząstek może się zmieniać zarówno z czasem, jak i w przestrzeni. Stąd też liczba cząstek w kuli o promieniu r_{cut} i środku w danej cząstce, czyli liczba jej sąsiadów, również będzie się zmieniała. W przypadku metody bazującej na stałym promieniu obcięcia relacja sąsiedztwa jest symetryczna. Nie jest to jednak prawdą dla metody bazującej na stałej liczbie sąsiadów. Z tego powodu w symulacji może nie zostać zachowana III zasada dynamiki Newtona. Aby tego uniknąć, stosuje się symetryzację funkcji jądra dla dwóch cząstek i oraz j w postaci:

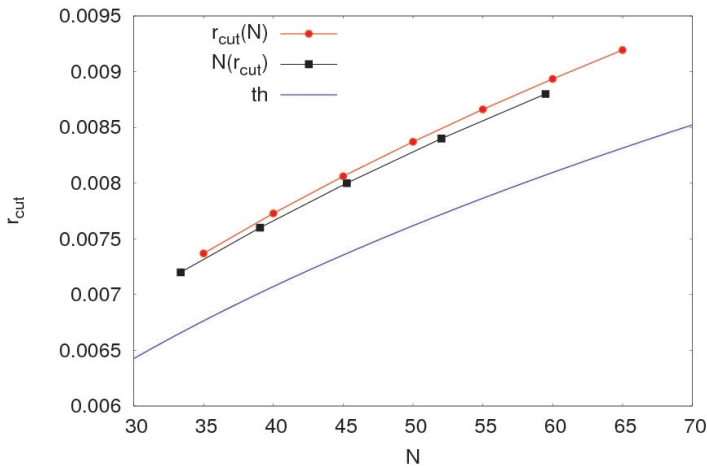
$$W_{ij} = \frac{1}{2} \left(W(r_{ij}, h_i) + W(r_{ij}, h_j) \right) \quad (15)$$

W artykule [18] przedstawiono porównanie obydwu algorytmów znajdowania sąsiadów. Aby móc porównać ze sobą obie metody, należy odpowiednio dobrać parametry symulacji, z jakimi zostaną uruchomione. W szczególności odnosi się to do liczby sąsiadów N w metodzie ze stałą liczbą sąsiadów oraz do promienia obcięcia w metodzie ze stałym pro-

mieniem obcięcia r_{cut} . Nie jest merytorycznie poprawne porównywanie czasów wykonania algorytmów, gdy zadana liczba sąsiadów w jednej metodzie nie będzie odpowiadała obliczonej liczbie sąsiadów w metodzie drugiej. Stąd też oprócz uruchomienia symulacji z takimi samymi parametrami (lepkość, krok czasowy, itd.) konieczne jest dobranie odpowiednich wartości N oraz r_{cut} . Jeśli znana jest objętość jednej cząstki SPH, oznaczona jako V_{SPH} , relacja między tymi wielkościami dana jest wzorem:

$$\frac{4}{3}\pi r_{cut}^3 = N \cdot V_{SPH} \quad (16)$$

Wzór ten można również zweryfikować doświadczalnie. Przeprowadzono szereg symulacji dla stałej liczby sąsiadów N i z każdej z nich wyznaczono średnią wartość promienia obcięcia r_{cut} . Podobnie, dla ustalonej wartości promienia obcięcia r_{cut} wyznaczono dla każdej z nich średnią wartość liczby sąsiadów N . Wyniki przedstawione są na rysunku 1.



Rys. 1. Wzajemna zależność promienia obcięcia r_{cut} od liczby sąsiadów N

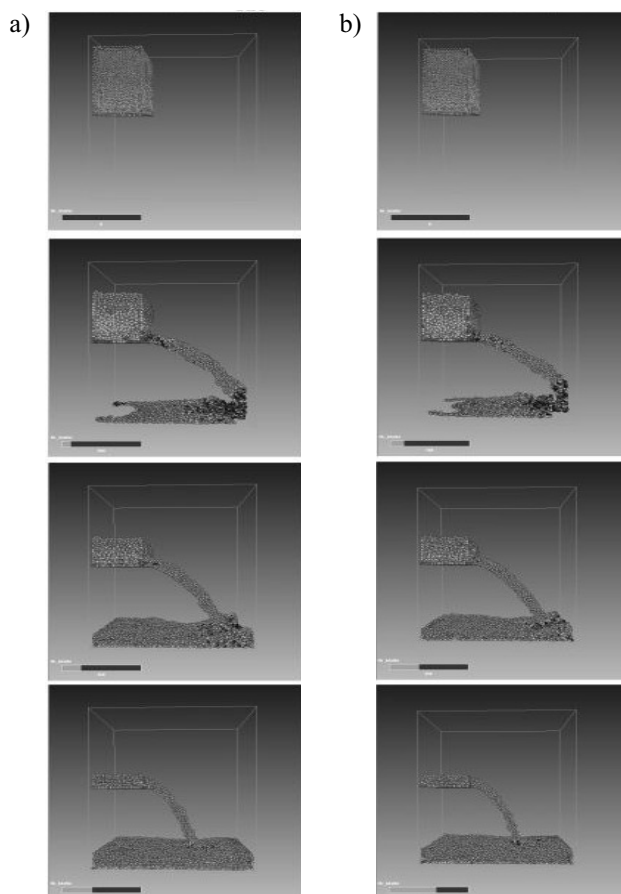
Na rysunku (1) zamieszczono trzy wykresy:

- $r_{cut}(N)$ – wykres zależności promienia obcięcia od liczby sąsiadów wyznaczony z serii symulacji z metodą dla stałej liczby sąsiadów,
- $N(r_{cut})$ – wykres zależności promienia obcięcia od liczby sąsiadów wyznaczony z serii symulacji z metodą dla promienia obcięcia,
- th – wykres zależności podanej wzorem (16).

Z wykresu wynika, że wartości wyznaczone z symulacji są praktycznie jednakowe, natomiast wartości wyznaczone z zależności teoretycznej od nich odbiegają. Jest to spowodowane nieuwzględnieniem w powyższym wzorze pewnych czynników, które występują

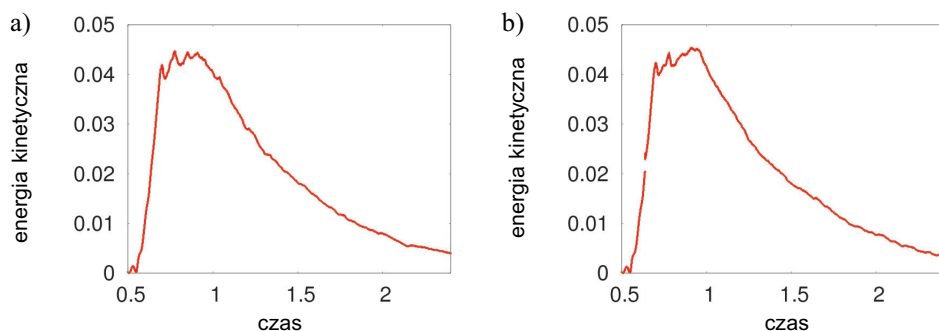
podczas symulacji. Powodem tej rozbieżności są zależności pomiędzy r_{cut} i N występujące przy powierzchni cieczy (brzegi i narożniki naczynia, powierzchnia swobodna). W tym przypadku w kuli o promieniu r_{cut} znajduje się mniej cząstek SPH, niż wynika to z wyższego wzoru. Przy porównaniu czasów wykonania algorytmów wykorzystano zależność, która najlepiej przybliża wartości uzyskane z symulacji, a zrezygnowano z zależności podanej wzorem (16).

Na rysunku 2 przedstawiono obok siebie wygląd symulowanego układu z symulacji uruchomionej dla dwóch różnych metod, z takimi samymi parametrami. Dzięki nim można porównać, jak różnią się wyniki symulacji zjawiska wypływu cieczy z naczynia dla obydwu metod. Choć występują drobne różnice, to są one nieistotne w modelowanym zjawisku.



Rys. 2. Porównanie przebiegu symulacji zjawiska wypływu cieczy przez otwór z wykorzystaniem algorytmu bazującego na stałym promieniu obcięcia (a) i stałej liczbie sąsiadów (b). Rysunki w kolejnych wierszach przedstawiają układ w tym samym kroku czasowym

Na rysunku 2 gęstości cząstek oznaczono za pomocą odcieni szarości. Im odcień szarości jest bliższy kolorowi czarnemu lub białemu, tym bardziej gęstość różni się od gęstości zadanej. Za granice gęstości przyjęto wartości: 995 kg/m^3 oraz 1005 kg/m^3 . Pomimo iż symulacja przedstawia ciecz nieściśliwą, na rysunku widoczne są wartości gęstości odbiegające od zadanej (1000 kg/m^3). Jest to spowodowane naturą metody obliczeniowej i przyjętego równania stanu, w którym siła hydrodynamiczna zależy od stosunku gęstości cząstki do gęstości zadanej. Gdyby te gęstości były sobie równe, zgodnie z przyjętym równaniem stanu siła hydrodynamiczna byłaby równa zero. Z drugiej strony, widoczne różnice to jedynie 1% wartości zadanej, co w praktyce przyjmuje się za odpowiadające płynowi nieściśliwemu w symulowanym zjawisku.



Rys. 3. Wykresy energii kinetycznej układu z symulacji cieczy wypływającej z naczynia dla dwóch metod wyszukiwania sąsiadów: a) ze stałą liczbą sąsiadów; b) ze stałym promieniem obcięcia

Na rysunku 3 przedstawiono wykresy energii kinetycznych dla obydwu porównywalnych metod. Wynika z niego, że obie metody w badanym zakresie nie różnią się.

Oprócz porównania otrzymanych wyników symulacji, obydwie metody porównano pod względem czasu obliczeń. W tym celu w kodzie źródłowym programu symulacji, w głównej pętli, umieszczono wywołania funkcji `gettimeofday()`, dzięki której zmierzono rzeczywisty czas wykonania głównych części pętli w każdym kroku obliczeniowym.

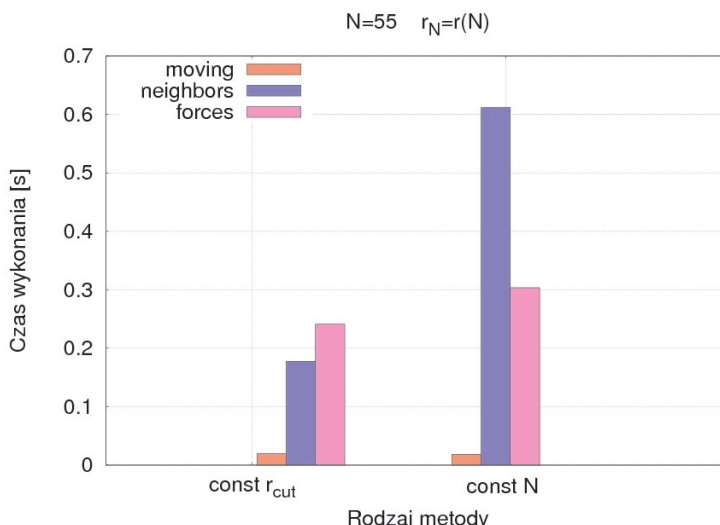
Pomiar czasu wykonania przeprowadzono dla symulacji z takimi samymi parametrami. Główną pętlę symulacji podzielono na 3 części:

1. `moving` – w tej części cząstka zmienia położenie i prędkość,
2. `neighbors` – procedura wyznaczania sąsiadów,
3. `forces` – procedura w której obliczane są przyspieszenia cząstek oraz zmiany gęstości.

Dla procedur tych zmierzono czas wykonania. Wyniki przedstawiono na rysunku 4.

Rysunek 4 przedstawia dwa pomiary. Pierwszy dla metody ze stałym promieniem obcięcia, drugi dla metody ze stałą liczbą sąsiadów. Wynika z niego, że procedura wyznaczania sąsiadów jest o wiele wydajniejsza, gdy stosuje się metodę bazującą na stałym promie-

niu obciążenia. Jest to oczywiste, gdyż w tym przypadku wykonuje się jedynie obliczanie odległości między cząstkami i ich porównywanie. W przypadku stałej liczby sąsiadów konieczne jest jeszcze posortowanie wyznaczonych odległości.



Rys. 4. Porównanie czasów wykonania poszczególnych części pętli głównej dla dwóch metod znajdowania sąsiadów

Po zsumowaniu czasów wykonania procedur widać, że czas obliczeń dla metody ze stałym promieniem obciążenia jest krótszy o ok. 1,5–2,5 raza niż dla metody ze stałą liczbą sąsiadów. Widać zatem, że przy zastosowaniu metody SPH do symulacji płynów nieściśliwych o wiele lepsza jest metoda wyszukiwania sąsiadów bazująca na stałym promieniu obciążenia. Wyniki symulacji z wykorzystaniem obu metod są praktycznie nierozróżnialne, a koszty obliczeniowe przemawiają za zastosowaniem metody ze stałym promieniem obciążenia. Metoda ze stałą liczbą sąsiadów jest natomiast lepsza przy symulowaniu płynów ściśliwych, dla których gęstości płynów, a co za tym idzie również gęstości cząstek w implementacji mogą się znacząco zmieniać.

4. Modyfikacja metody SPH do modelowania napięcia powierzchniowego

4.1. Idea modyfikacji

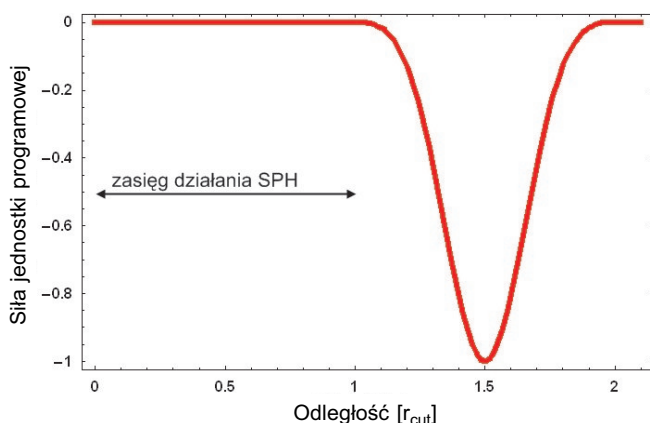
Realizacja zjawisk, w których występuje napięcie powierzchniowe płynu, wymaga dodania do sił występujących w modelu dwóch dodatkowych członów. Pierwszy z nich odpowiada za wzajemne przyciąganie się cząstek płynu SPH, drugi natomiast modeluje oddziaływanie między cząstkami płynu SPH a cząstkami ścian naczynia.

4.2. Oddziaływania płyn-płyn

Napięcie powierzchniowe jest efektem wzajemnego przyciągania się molekuł cieczy. W modelu SPH nie jest możliwe dokładne zamodelowanie oddziaływań pomiędzy molekułami, gdyż skala stosowania metody jest znacznie większa niż skala międzycząsteczkowa. Idea jednak pozostaje taka sama i polega na wprowadzeniu dodatkowych oddziaływań przyciągających pomiędzy cząstkami. Jest to dość trudne, jeśli zasięg dodatkowej siły ma być taki sam jak zasięg oddziaływań SPH. W takim przypadku dodatkowa siła przyciągająca tak modyfikuje oddziaływania SPH, że prowadzi to do artefaktów numerycznych (cząstki SPH dążyły do łączenia się w pary). Dlatego, zgodnie z sugestią zawartą w pracy [15] zwiększono zasięg tej siły dwukrotnie w porównaniu do oddziaływań SPH. W przypadku takim nie obserwuje się żadnych niepożądanych efektów, a otrzymane rezultaty są zgodne z oczekiwaniami. Wprowadzona siła jest postaci:

$$F_{ij} = -AW \left(\frac{3}{2} r_{cut} - r_{ij}, \frac{1}{4} r_{cut} \right) \quad (17)$$

gdzie A to pewna stała dodatnia, W to funkcja jądra. Wykres wartości siły w zależności od odległości między cząstkami przedstawiono na rysunku 5.



Rys. 5. Wykres dodatkowej siły działającej pomiędzy cząstkami, która modeluje napięcie powierzchniowe

4.3. Oddziaływania płyn-ścianki

Aby właściwie zamodelować zjawiska zachodzące w cieczach wykazujących charakter hydrofilowy lub hydrofobowy, konieczne jest również wprowadzenie dodatkowych oddziaływań przyciągających pomiędzy cząstkami cieczy SPH a cząstkami ścian naczynia. Dotychczas, oddziaływania ścianki-płyn były modelowane jedynie jako odpychające. Dodatkowe oddziaływania wprowadzono w postaci podanej wzorem (17), czyli dokładnie takiej samej, jak w przypadku oddziaływań płyn-płyn, jednak z inną wartością stałej A .

4.4. Wyniki

Przedstawione powyżej modyfikacje metody SPH zastosowano do symulacji dwóch zjawisk.

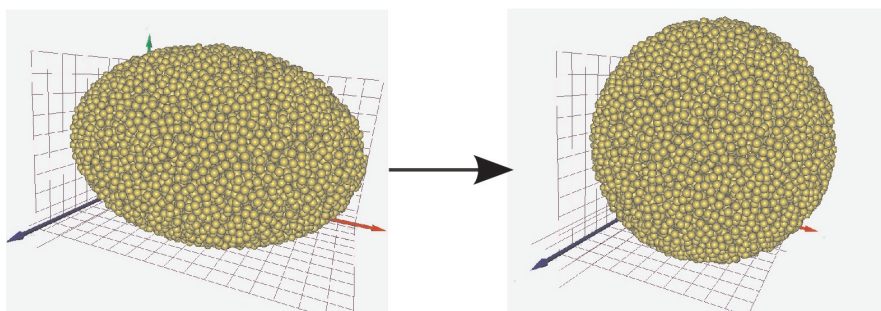
1) Oscylacje kropli płynu w stanie nieważkości

Pierwszym zjawiskiem, w którym zastosowano zmodyfikowaną metodę SPH jest symulacja oscylacji kulistej kropli płynu w próżni w warunkach nieważkości. Zbudowanie konfiguracji początkowej polegało na utworzeniu idealnie kulistej kropli płynu i przekształceniu jej do elipsoidy zgodnie z wzorem [15]:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{\sin \varphi}} r \begin{pmatrix} \sin \frac{\varphi}{2} \sin u \\ \cos \frac{\varphi}{2} \cos u \operatorname{sgn} y \end{pmatrix} \quad (18)$$

gdzie $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\varphi = 0,63\pi$ oraz $u = \arctg(x/y)$. Współrzędna z każdej cząstki pozostaje bez zmian.

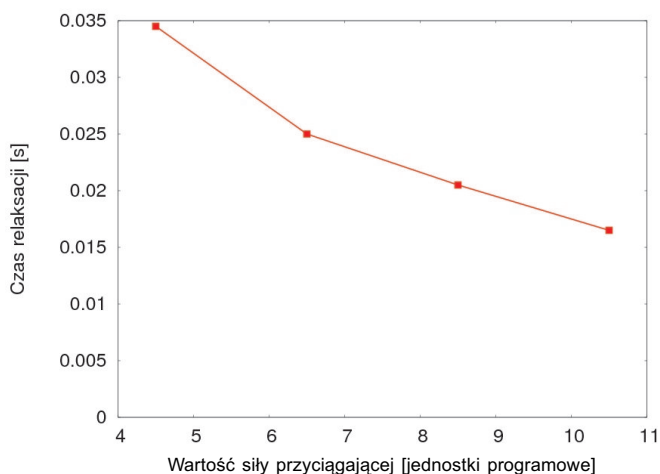
Następnie uruchomiono symulację i zmierzono czas relaksacji kropli, który zależy od wartości napięcia powierzchniowego modelowanego płynu. Przy braku sztucznej lepkości oscylacje miałyby charakter nieskończony. W symulowanym modelu wprowadzono sztuczną lepkość, która tłumila oscylacje. Mierzono zatem czas relaksacji.



Rys. 6. Przebieg relaksacji kropli płynu

Przykładowy przebieg relaksacji przedstawiono na rysunku 6. Uruchomiono cztery takie symulacje, każdą dla innej wartości sił napięcia powierzchniowego i zmierzono czasy relaksacji. Schematyczny przebieg symulacji przedstawiono na rysunku 7.

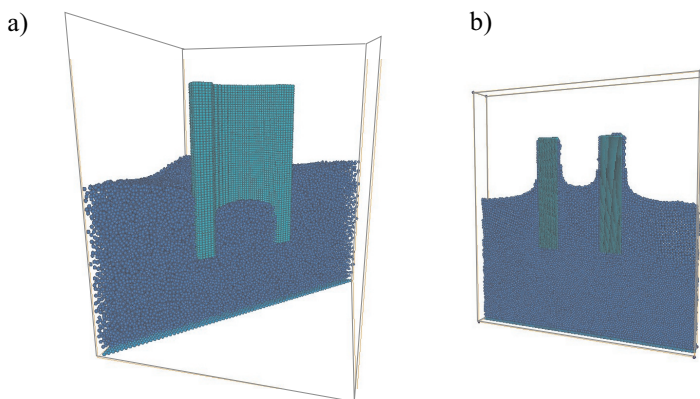
Czas relaksacji zależy od współczynnika napięcia powierzchniowego jak $\sim \gamma^{-1/2}$ [15]. Wykres na rysunku 7 pokazuje, że otrzymana zależność jest zgodna z oczekiwaniami.



Rys. 7. Zależność czasu relaksacji kulistej kuli od wartości siły przyciągającej modelującej napięcie powierzchniowe

2) Powstawanie menisków w kapilarze

Drugim zjawiskiem, w symulacji którego sprawdzono zaimplementowany model napięcia powierzchniowego w metodzie SPH, jest powstawanie menisków w kapilarze. W zależności od tego, czy wzajemne przyciąganie cząstek płynu było silniejsze czy słabsze od ich przyciągania przez cząstki ścianek, otrzymywano różne meniski. Dla przypadku, w którym przyciąganie wzajemne cząstek cieczy było silniejsze od ich przyciągania przez cząstki ścian, otrzymano menisk wypukły, przedstawiony na rysunku 8a.



Rys. 8. Otrzymane meniski dla różnych wartości napięcia powierzchniowego:
a) menisk wypukły; b) menisk wklęsły

W przypadku gdy przyciąganie cząstek SPH przez cząstki ścian było silniejsze od ich wzajemnego przyciągania, otrzymano menisk wklęsły, który przedstawiono na rysunku 8b. Obydwa rysunki pokazują, że zaproponowana postać sił modelujących napięcie powierzchniowe dobrze symuluje to zjawisko.

5. Implementacja równoległa

Środowisko OpenMP, w chwili obecnej najpopularniejsze dla architektur z pamięcią współdzieloną, pozwala na równoległą implementację algorytmów poprzez dodanie do kodu źródłowego programu odpowiednich dyrektyw. Dyrektywy te wskazują kompilatorowi, które bloki i pętle programu mają zostać wykonane w sposób równoległy. Za pomocą dyrektyw określa się także, w jaki sposób uruchamiane wątki mają współdzielić zmienne, w jakiej kolejności mają wykonywać pętle oraz wiele innych szczegółowych kwestii związanych z implementacją równoległą.

Realizacja algorytmu symulacji metodami cząstek polega na wygenerowaniu konfiguracji początkowej układu (ustalenie współrzędnych położenia i prędkości cząstek) oraz wykonaniu z góry określonej liczby przebiegów pętli symulacji.

Pętla składa się z trzech kroków:

1. obliczenia sił działających na każdą cząstkę symulowanego układu zgodnie z zadany modelem oddziaływania;
2. rozwiązywaniu układu równań ruchu, czyli wyznaczenia nowych położenia i prędkości cząstek;
3. wyznaczeniu wartości bieżących parametrów układu.

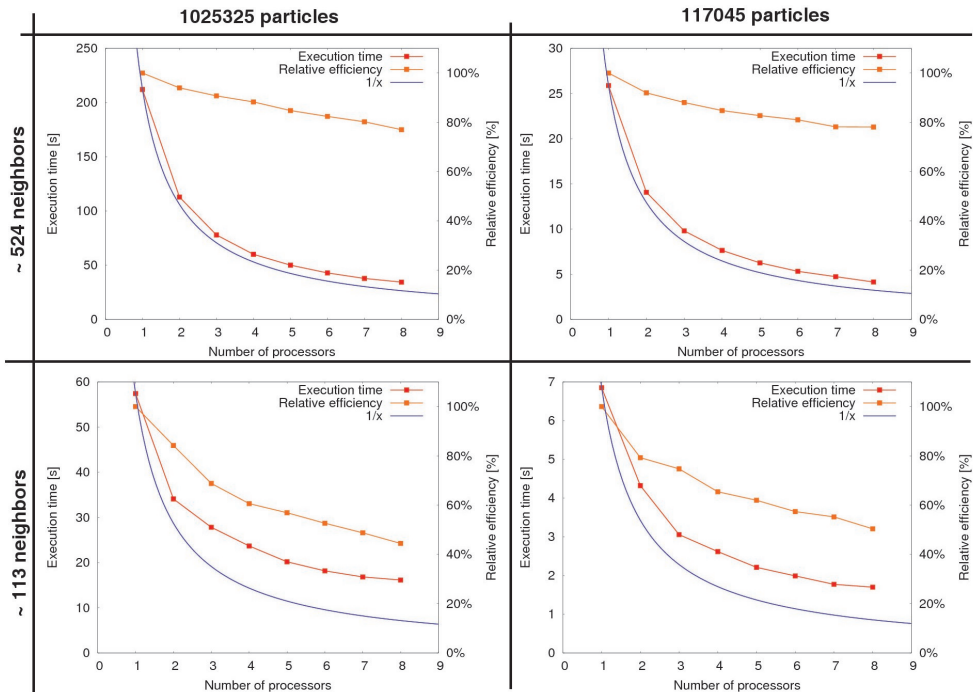
Pętla ta została podzielona na kilka bloków, z których część wykonywana jest w sposób równoległy. Poniżej zamieszczono listę tych bloków programu z pętli głównej, które wykonywane są w sposób równoległy:

- przypisywanie cząstek do cel,
- tworzenie dla każdej celi listy cząstek, które się w niej znajdują,
- obliczanie sił pomiędzy cząstkami.

W celu wyznaczenia efektywności implementacji równoległej przygotowano i przeprowadzono cztery wersje symulacji zjawiska przerwania tamy przedstawionej w pracy [19]. Wersje te różniły się między sobą: liczbą cząstek w układzie (odpowiednio: 117 045 oraz 1 025 325) oraz średnią liczbą sąsiadów dla każdej cząstki SPH (odpowiednio: 113 oraz 524). Poprzez uruchomienie każdej z nich dla różnej liczby procesorów, obliczono efektywność względną implementacji równoległej. Wyniki pomiarów czasów wykonania jednego kroku symulacji przedstawiono na rysunku 10.

Na rysunku 10 zamieszczono cztery wykresy, z których każdy przedstawia: rzeczywisty czas wykonania pętli głównej programu, obliczoną efektywność względną wykonania

symulacji oraz przypadek idealny oznaczony jako $1/x$. Z przedstawionych wykresów wynika, że efektywność względna wykonania symulacji zależy od średniej liczby sąsiadów każdej cząstki, natomiast nie zależy od wielkości modelowanego układu. W przedstawionej implementacji najbardziej czasochłonną częścią programu są obliczenia sił SPH pomiędzy cząstkami, które realizowane są w zrównoleżonym bloku programu. Wynika stąd, że gdy wartość średniej liczby cząstek sąsiednich w układzie jest duża, wtedy stosunek czasu obliczeń równoległej części programu do czasu obliczeń części sekwencyjnej jest większy niż w przypadku, gdy wartość średniej liczby cząstek w układzie jest mała. Na rysunku 10 przedstawione są wyniki zgodne z tymi oczekiwaniami. Na efektywność względną algorytmu równoległego nie ma wpływu wielkość układu. Wielkość symulowanego układu wraz ze średnią liczbą cząstek sąsiednich wpływa na czas wykonania pojedynczej pętli.



Rys. 10. Wyniki pomiarów średnich czasów wykonania jednego kroku symulacji dla różnej liczby procesorów oraz różnych parametrów wejściowych symulacji

Objaśnienia w tekście

6. Podsumowanie

W artykule przedstawiono podstawy teoretyczne oraz sposoby implementacji modelu SPH będącego jedną z metod symulacji przy pomocy metod oddziałujących cząstek. Omó-

wiono zagadnienia związane z efektywną implementacją zarówno z wykorzystaniem stałej liczby sąsiadów jak i stałego promienia obcięcia. Dokonano weryfikacji wprowadzonych zmian w sposobie obliczania oddziaływań. Przedstawione wyniki symulacji pokazują, że metoda SPH może być z powodzeniem stosowana do modelowania wielu zjawisk zachodzących w skali makroskopowej. Zaproponowano formę modyfikacji metody SPH mającej na celu umożliwienie modelowania zjawiska napięcia powierzchniowego. Zmodyfikowaną metodę SPH zastosowano do symulacji wybranych zjawisk i otrzymano zadowalające rezultaty.

Wciąż jednak dużym wyzwaniem pozostaje kwestia, w jaki sposób dobierać parametry metody, aby otrzymać pożądane wartości wielkości makroskopowych. Póki co, nie jest znana żadna metoda, analityczna bądź heurystyczna, to umożliwiająca. Zatem ilościowa interpretacja wyników jest mocno utrudniona.

Literatura

- [1] Balsara D., *Von Neumann stability analysis of smoothed particle hydrodynamics—Suggestions for optimal algorithms*. J. Comput. Phys. **121**, 1995, 357.
- [2] Boryczko K., Dzwinel W., Yuen D., *Parallel implementation of the fluid particle model for simulating complex fluids in the mesoscale*. Concurrency and computation: practice and experience, **14**, 2002, 137–161.
- [3] Colagrossi A., Landrini M., *Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics*. J. Comp. Phys. **191**, 2003, 448–475.
- [4] Gijzen F., Vosse F., Janssen J., *The influence of the non-Newtonian properties of blood on the flow in large arteries: steady flow in a carotid bifurcation model*. Journal of Biomechanics **32**, 1999, 601–608.
- [5] Gingold R.A., Monaghan J.J., *Smoothed particle hydrodynamics – Theory and application to non-spherical stars*. Mon. Not. R. Astr. Soc. **181**, 1977, 375–389.
- [6] Hernquist L., Katz N., *TREESPH: A unification of SPH with the hierarchical tree method*. The Astrophysical Journal Supplement Series **70**, 1989, 419–446.
- [7] Hockney R., Eastwood J.W., *Computer simulation using particles*. New York, Mc Graw-Hill 1981.
- [8] Hoogerbrugge P.J., Koelman J., *Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics*. Europhys. Lett. **19**, 1992, 155–160.
- [9] Liu G.R., Liu M.B., *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific 2003.
- [10] Lombardi J., Alison S., Rasio F., Shapiro S., *Tests of Spurious Transport in Smoothed Particle Hydrodynamics*. Journal of Computational Physics **152**, 1999, 687–735.
- [11] Lucy L.B., *A numerical approach to the testing of the fission hypothesis*. Astron. J. **82**, 1977, 1013–1024.
- [12] Monaghan J.J., *Smoothed Particle Hydrodynamics*. Annu. Rev. Astron. Astrophys. **30**, 1992, 543–74.
- [13] Monaghan J.J., *Simulating Free Surface Flows with SPH*. J. Comp. Phys. **110**, 1994, 399–406.
- [14] Monaghan J.J., *Smoothed particle hydrodynamics*. Rep. Prog. Phys. **68**, 2005, 1703–1759.

- [15] Nugent S., Posch H.A., *Liquid drops and surface tension with smoothed particle applied mechanics*. Phys. Rev. E **33**, 2000, 333–353.
- [16] Oxley S., *Modelling the Capture Theory for the Origin of Planetary Systems*. Rozprawa doktorska, rozdz. 2, University of York, 1999, <http://www.droxley.freeseerve.co.uk/>.
- [17] Tartakovsky A., Meakin P., *Modeling of surface tension and contact angles with smoothed particle hydrodynamics*. Phys. Rev. E **72**, 2005, 02630.
- [18] Wróblewski P., Boryczko K., Kopeć M., *SPH – a comparison of neighbor search methods based on constant number of neighbors and constant cut-off radius*. TASK Quart. **11**, 2007a, 275–285.
- [19] Wróblewski P., Boryczko K., Kopeć M., *Modeling surface tension of incompressible fluids by means of a modified SPH method*. CMS'07, Oprogramowanie Naukowo-Techniczne, 2007b, 389–394z.