

SMOOTHED PARTICLE
HYDRODYNAMICS
VIRTAUSMEKANIIKAN
SIMULAATIOISSA

JOONAS KORHONEN
14. ELOKUUTA 2016



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIKAN LAITOS

PRO GRADU -TUTKIELMA

OHJAAJAT:
TOPI KÄHÄRÄ
KEIJO MATTILA

Tiivistelmä

Tässä opinnäytetyössä käsittelemme Smoothed Particle Hydrodynamics -menetelmää (SPH) virtausmekaniikan simulaatioissa. Aluksi johdamme nesteen liikettä kuvaavat differentiaaliyhtälöt. Määrittelemme SPH:n diskreetit divergenssi-, gradientti- sekä Laplace-operaattorit avaruuden diskretisoinniseksi. Lisäksi tutkimme SPH:n toimivuutta rajoitetuissa virtauksissa ja esittelemme menetelmiä rajoituksista seuraavien ongelmien korjaamiseksi tutkien erityisesti SPH:n renormalisaatiota. Lopulta käsittelemme ajan diskretisointia, simulaatiototeutuksessa tarvittavia tietorakenteita ja reunaehtoja sekä esittelemme simulaatiotuloksia sekä analyttisesti ratkeaville Couette- ja Poiseuille -virtauksille sekä vertaamme hieman monimutkaisemman putkivirtauksen simulaatiotulosta äärellisten elementtien menetelmän tulokseen.

Avainsanat: SPH, renormalisaatio, virtausmekaniikka, laskennallinen virtausmekaniikka

Abstract

In this thesis we study the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method and its applicability for solving the equations of motion of fluid dynamics. First we derive these equations of motion and then study ways to discretise the divergence, gradient and Laplace operators in them using SPH. Next we tackle the problems which are induced by introducing restrictions to the space in which the fluid flows. We study several solutions to these problems, focusing mainly on an elegant and simple solution, the renormalisation of the SPH. Finally we represent simulation results achieved using the renormalisation and compare them to analytical results and to finite element method results.

Key words: SPH, renormalisation, fluid dynamics, computational fluid dynamics, CFD

Sisältö

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Johdanto | 1 |
| 2 | Teoreettinen viitekehys | 3 |
| 2.1 | Käsitteistöä | 3 |
| 2.2 | Virtausmekaniikkaa | 4 |
| 2.2.1 | Jatkuvuusyhtälö | 4 |
| 2.2.2 | Eulerin yhtälö | 6 |
| 2.2.3 | Navier–Stokes-yhtälöt | 7 |
| 2.2.4 | Kokoonpuristumaton ja heikosti kokoonpuristuva virtaus | 10 |
| 2.3 | Reunaehdot | 11 |
| 2.4 | Analyttisesti ratkeavia tapauksia | 11 |
| 2.4.1 | Couette-virtaus | 11 |
| 2.4.2 | Poiseuille-virtaus | 12 |
| 2.4.3 | Couette- ja Poiseuille-virtausten aikakehitys | 14 |
| 2.5 | Similaarisuus, turbulenssi ja pintailmiöt | 14 |
| 2.6 | Yhteenvedo | 15 |
| 3 | Avaruuden diskretisointi | 17 |
| 3.1 | Ydinapproksimaatio | 17 |
| 3.1.1 | Esimerkkiytimiä | 21 |
| 3.2 | Hiukkasapproksimaatio | 22 |
| 3.2.1 | Hiukkasapproksimaation tarkkuus | 23 |
| 3.3 | Operaattorit | 24 |
| 3.3.1 | Variationaalisesti yhteensopivat operaattorit | 24 |
| 3.3.2 | Laplacen operaattori | 27 |
| 4 | Ytimen leikkautuminen ja reunojen käsittely | 31 |
| 4.1 | Haamuhiukkaset | 31 |
| 4.2 | Peilatut hiukkaset | 32 |
| 4.3 | Repulsiivinen potentiaali | 33 |
| 4.4 | Ytimen renormalisointi | 33 |
| 4.4.1 | Renormalisoidut jatkuvuus- ja liikeyhtälö | 34 |
| 4.4.2 | Renormalisoitu Laplacen operaattori | 38 |
| 4.5 | Semi-analyttinen reunaehto | 40 |
| 4.6 | Vapaasti liikkuvat kiinteät kappaleet | 40 |
| 5 | Erikoistyö – virtaussimulaation toteutus | 41 |
| 5.1 | Aika-askellus | 41 |
| 5.1.1 | Aika-askeleen pituus | 42 |

| | | |
|----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| 5.2 | Alustus | 43 |
| 5.3 | Linkitetyt solulistat | 43 |
| 5.4 | Periodiset reunaehdot | 45 |
| 5.5 | Simulaatiotestejä | 46 |
| 5.5.1 | Couette- ja Poiseuille-virtaukset | 46 |
| 5.5.2 | Virtaus putkessa olevan esteen ohitse | 47 |
| 6 | Johtopäätökset | 51 |
| 6.1 | Toteutus | 51 |
| 6.2 | Simulaatiotulokset | 51 |
| 6.3 | Jatkotutkimuksen kohteet | 52 |
| | Viitteet | 53 |
| | Liite A Renormalisaatiokertoimen laskeminen | 57 |
| A.1 | Analyttinen ratkaisu kaksiulotteisessa tapauksessa | 57 |
| A.2 | Approksimatiivinen ratkaisu | 60 |
| A.3 | Aikaintegrointi | 60 |
| A.4 | Hiukkas-approksimaatio | 60 |

1 Johdanto

Ranskalainen Claude–Louis Navier ja irlantilainen George Stokes johtivat tahoillaan nesteen virtausta kuvaavat liikeyhtälöt jo 1800-luvulla, mutta niiden ratkaiseminen on osoittautunut tähän mennessä ylitsepääsemättömäksi haasteeksi. Tämä on johtanut kahteen hyvin erilaiseen kehityssuuntaan. Toisaalta näiden yhtälöiden yleisen ratkaisun olemassaoloa pyritään todistamaan, ja toisaalta niille etsitään approksimatiivisia ratkaisuja. Keskitymme tässä työssä etsimään Navier–Stokes-yhtälöille diskretisoitua muotoa, jonka ratkaisut approksimoisivat niiden ratkaisuja mahdollisimman tarkasti.

Numeriikassa käytettävät koordinaatistot jaetaan tyypillisesti kahteen luokkaan, Eulerilaisiin eli laboratoriokoordinaatistoihin ja Lagrangelaisiin eli mukana liikkuviin koordinaatistoihin. Lisäksi numeerinen menetelmä voi perustua joko hilaan, jonka solmupisteissä kenttien arvoja lasketaan, tai hiukkasiin, jotka kantavat kentän suureita mukanaan. Tutkimamme menetelmä Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) on Lagrangelainen hiukkasmenetelmä. Alunperin SPH:n esittelivät vuonna 1977 kahdessa riippumattomassa tutkimuksessa Gingold ja Monaghan [1] sekä Lucy [2]. Gingold ja Monaghan tutkivat pyörivien magneettisesti vuorovaikuttavien tähtien aikakehitystä ja Lucy tutki omassa työssään prototähtien fysioteoriaa.

Aluksi SPH:ta käytettiin lähinnä simulaatioihin, joissa virtausta ei rajoiteta seinämällä, vaan neste pääsee virtaamaan vapaasti. Tähtisimulaatioissa SPH:ta onkin käytetty muun muassa mustien aukkojen kertymäkiekkojen [3, 4], tähtien muodostumisen [5] ja valkoisten kääpiöiden yhdistymisen [6] simulointeihin.

Toisaalta SPH on käyttökelpoinen myös rajoitettujen virtausten simulointeihin, kunhan vuorovaikutukset virtausta rajoittavien seinämien kanssa käsitellään huolellisesti. Virtausmekaniikassa SPH:ta on käytetty muun muassa usean faasin virtauksiin [7, 8], kokoonpuristumattomien virtauksiin [9], ultrarelativistisiin raskasioneitörmäyksiin [10–12], magnetohydrodynamiikkaan [13] ja räjähdysten simulointiin [14, 15].

Tavoitteemme on esitellä SPH johdonmukaisena kokonaisuutena, jonka pohjalta voimme kirjoittaa oman käyttökelpoisen SPH-simulaatiomme. Tämän työn laajuuden rajoissa emme kuitenkaan voi käsitellä aivan kaikkia yksityiskohtia virtausmekaniikan teoriasta emmekä myöskään SPH:n alla sijaitsevasta teoreettisesta taustasta. Tällaisia asioita ovat esimerkiksi pintajännitykset, SPH:n stabiilius aika-askelen suhteen ja ehkäpä suurimpana virtausten turbulenssi.

Kappaleessa 2 johdamme virtausmekaniikan liikeyhtälöt, esittelemme käyttämämme tilanyhtälön sekä puhumme lyhyesti reunaehdoista, similaarisuudesta, turbulenssista ja pintailmiöistä. Kappaleessa 3 käsittelemme avaruuden diskretisointia SPH:ssa. Käymme läpi tähän diskretisointiin sisältyvät ydin- ja hiukkasapproksimaatiot sekä johdamme diskreetit derivaattaoperaattorit. SPH on ongelmallinen rajoitetuissa virtauksissa, sillä siinä tehtävän konvoluution tarkkuus huononee

konvoluutioytimen leikkautuessa virtausta rajoittavan seinämän lähellä. Tämän ongelman eri ratkaisuja käsittelemme kappaleessa 4. Kappale 5 käsittelee SPH-simulaation toteuttamisen yksityiskohtia, kuten ajan diskretisointia, vuorovaikutusten laskemista ja periodisia reunaehtoja. Kappaleessa 5.5 pyrimme vahvistamaan SPH:n kyvyn toistaa virtauskenttiä sekä yksinkertaisissa analyttisesti ratkeavissa putkivirtauksissa että hieman monimutkaisemmissa virtauksissa. Kappaleessa 6 pohdimme saamiemme tulostemme merkitystä ja SPH:n sopivuutta yleiskäyttöiseksi liikeyhtälöiden ratkaisumenetelmäksi.

2 Teoreettinen viitekehys

Tässä kappaleessa käsittelemme fysiikan teorit, joiden parissa simulaatiota rakennet-
tassa toimimme. Tämä viitekehys koostuu Hamiltonin mekaniikasta ja virtausme-
kaniikan teoriasta. Klassisen mekaniikan oletamme tunnetuksi. Virtausmekaniikan
teorian puolestaan johdamme ajan ja avaruuden symmetrisyyksistä seuraavista
säilymislaeista. Aluksi kuitenkin puhumme hieman tämän työn käsitteistöstä.

2.1 Käsitteistöä

Kenttä on tämän työn puitteissa kuvaus $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$, missä $\Omega \in \mathbb{R}^d$ on yhtenäinen alue
ja $d \in \mathbb{N}$ on *avaruudellinen dimensio*. Jaamme kentät kahteen eri luokkaan: $m = 1$
tai $m = d$, jolloin puhumme vastaavasti skalaari- tai vektorikentästä. Merkitsemme
skalaarikenttää A ja vektorikenttää \mathbf{A} . Vektori- ja skalaarikentän arvoja pisteessä
 $\mathbf{x} \in \Omega$ merkitsemme $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ ja $A(\mathbf{x})$.

Koska suureet ovat yleisesti myös aikariippuvia, määrittelemme ajasta t riip-
puvat kentät $\Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$, missä m on kuten edelläkin. Tällöin kentän arvo
aika-avaruuden pisteessä on $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ tai $A(\mathbf{x}, t)$. Usein samaistamme kentän ja sen
arvon tietyssä pisteessä.

Nesteen tilan täydelliseen kuvailuun tarvitsemme ainakin paikka-, nopeus-,
paine-, tiheys-, viskositeetti- ja sisäenergiakenttiä. Varaamme tässä työssä taulukon
1 merkinnät ainoastaan näiden suureiden merkitsemiseen. Poikkeuksena tähän on
Hamiltonin mekaniikan yleistetty liikemäärä p_j .

Käytämme merkintää

$$\frac{\partial A}{\partial \mathbf{B}} = \left(\frac{\partial A}{\partial B_1}, \dots, \frac{\partial A}{\partial B_d} \right)^T \quad (2.1)$$

| Kenttä | Merkintä |
|---------------|------------------|
| paikka | \mathbf{r} |
| nopeus | \mathbf{v} |
| paine | p |
| tiheys | ρ |
| viskositeetti | μ |
| sisäenergia | E_{int} |

Taulukko 1. Tässä työssä käytettäviä kenttiä merkintöineen.

vektorin suhteen derivoinnille ja vastaavasti vektorikentälle

$$\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{B}}\right)_{jk} = \frac{\partial A_k}{\partial B_j}. \quad (2.2)$$

Joissakin tapauksissa tarvitsemme *tensorituloa*

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{jk} = A_j B_k. \quad (2.3)$$

2.2 Virtausmekaniikkaa

Ensin johdamme nesteen virtausta kuvaavat differentiaaliyhtälöt. Johdamme liikeyhtälöt kuten Landau ja Lifshitz [16]. Voisimme johtaa nämä yhtälöt myös käyttäen Reynoldsin kuljetuslausetta tai Cauchyn liikemääräyhtälöä.

Virtausmekaniikka on teoria *nesteen* virtauksesta. Tässä yhteydessä neste voi olla joko oikeaa nestettä tai kaasua. Se sitoo yhteen mekaniikan säilymislait, jatkuvan aineen sekä nestettä kuvailevat statistiset suureet. Neste on aine, joka ei pysty vastustamaan muodonmuutoksia staattisesti. Siis neste alkaa virtamaan, kun siihen kohdistetaan voima, olipa tämä voima kuinka pieni hyvänsä.

Puhumme virtausmekaniikan yhteydessä nestehiukkasista, mutta tällöin emme tarkoiteta yksittäisiä nestemolekyylejä, vaan useamman molekyylin muodostamia mesoskooppisia hiukkasia, jotka ovat tarpeeksi suuria käyttäytyäkseen klassisesti mutta tarpeeksi pieniä, että niitä voidaan käsitellä pistemäisenä. Jokainen näistä mesoskooppisista hiukkasista on sisäisesti termodynaamisessa tasapainossa, jolloin niille on määritelty tilastolliset suureet kuten paine ja lämpötila.

Osa nesteen molekyylytason ilmiöistä näyttää myös makroskooppisesti. Koska emme voi selittää molekyylytason ilmiöitä mesoskooppisilla hiukkasilla, nämä ilmiöt näyttävät meille nesteen ominaisuuksina, kuten *viskositeettina*. Siis tässä viitekehyksessä neste on mesoskooppisista hiukkasista koostuva jatkuva aine, jonka tilan kuvaamiseksi tarvitaan useita kenttiä, kuten nopeus, paine, tiheys sekä mahdollisesti lämpötila, viskositeetti ja energia.

Johdamme ensin massan säilymistä kuvaavan jatkuvuusyhtälön, sen jälkeen ideaaligesteen liikemäärän säilymistä kuvaavan Eulerin yhtälön ja viimeisenä epäideaalisen nesteen liikemäärän säilymistä kuvaavat Navier–Stokes-yhtälöt. Tämän jälkeen käsittelemme vielä tässä työssä myöhemmin tarvittavia tilanyhtälöä ja reunaehtoja.

2.2.1 Jatkuvuusyhtälö

Tarkastelemme nestetilavuutta V_0 , jonka sisältämä massa on

$$m_0 = \int_{V_0} \rho \, dV, \quad (2.4)$$

missä ρ on nesteen tiheyskenttä ja dV on tilavuusalkio. Olkoon tämän käsiteltävän tilavuuden sisään sulkeva pinta S_0 . Tällöin pinta-alkion $d\mathbf{S}$ läpi aikayksikössä virtaava massa on

$$\rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.5)$$

missä \mathbf{v} on nesteen nopeuskenttä. Pinta-alkion suuruus on alkion pinta-ala ja suunta pinnan S_0 normaali tilavuudesta poispäin. Siis tilavuudesta V_0 ulos virtaavan nesteen massa aikayksikössä on

$$\oint_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.6)$$

Toisaalta yhtälön (2.4) negatiivinen aikaderivaatta on sama

$$-\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho dV = \oint_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.7)$$

Siis saamme

$$\oint_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} \rho dV. \quad (2.8)$$

Gaussin divergenssilauseen mukaan tämän pintaintegraalin voi muuttaa tilavuusintegraaliksi, jolloin

$$\int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV = -\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} \rho dV. \quad (2.9)$$

Vaihtaessamme integroinnin ja derivoinnin järjestystä ja yhdistämällä integraalit saamme

$$\int_{V_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0. \quad (2.10)$$

Koska edellä olevan teimme mielivaltaiselle tilavuudelle V_0 , on integrandin oltava nolla, eli

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.11)$$

Tätä yhtälöä kutsumme *jatkuvuusyhtälöksi*. Huomattavaa on, ettemme tämän johtamiseksi olettaneet nesteestä mitään. Jatkuvuusyhtälö on siis voimassa kaikille nesteille.

Käyttämällä tulon derivointisääntöä

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0. \quad (2.12)$$

Mielivaltaisen kentän A aikaderivaatta on ketjusäännön mukaan

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla A. \quad (2.13)$$

Aikaderivaatta koostuu siis kahdesta osasta: kentän muuttumisesta ajassa sekä nesteen liikkeestä johtuvasta muutoksesta kentän arvossa. Liikkeestä johtuvaa muutosta kutsumme konvektiiviseksi derivaataksi. Tämän ominaisuuden vuoksi jatkuvuusyhtälö Lagrangelaisessa muodossa on

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.14)$$

Jos oletamme nesteen olevan kokoonpuristumatonta eli vakiotiheyksistä, ovat tiheyden aika- ja paikkaderivaatat nolliä. Tällöin jatkuvuusyhtälö saa muodon

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2.15)$$

Oletamme avaruuden olevan samanlainen paikasta ja tarkastelusuunnasta riippumatta. Näistä symmetriaominaisuuksista, avaruuden *homogeenisuudesta* ja *isotrooppisuudesta*, seuraavat liikemäärän ja pyörimismäärän säilyminen suljetussa systeemissä [17]. Seuraavaksi johdamme nesteen liikemäärän säilymisestä seuraavat osittaisdifferentiaaliyhtälöt, jotka yhdessä jatkuvuusyhtälön kanssa kuvaavat nesteen tilan. Oletamme ensin nesteen olevan *ideaalista*, eli sellaista, jonka sisäinen kitka on olematonta ja joka ei johda lämpöä. Ideaalinen neste on siis aina termodynaamisessa tasapainossa.

2.2.2 Eulerin yhtälö

Käsitlemme jälleen mielivaltaista nestetilavuutta V_0 . Tähän tilavuuteen kohdistuva kokonaisvoima on

$$\mathbf{F} = - \oint_{S_0} p \, d\mathbf{S}, \quad (2.16)$$

missä jälleen S_0 on tilavuuden V_0 sisäänsä sulkeva pinta. Muuttamalla tämä Gaussin lauseella tilavuusintegraaliksi voima on

$$\mathbf{F} = - \int_{V_0} \nabla p \, dV. \quad (2.17)$$

Siis yksikkötilavuuteen kohdistuva voima on

$$\nabla p = \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.18)$$

Nestehiukkaseen voi vaikuttaa myös ulkoinen eli tilavuusvoima $\rho \mathbf{g}$, missä \mathbf{g} on ulkoisen kentän aiheuttama kiihtyvyys. Lisäämällä tämän termin yhtälöön (2.18) saamme

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{g}. \quad (2.19)$$

Tarkasteltaessa reunailmiöitä ideaalineste on kykenemätön toteuttamaan ns. no-slip-reunaehto, jonka mukaan virtausta rajoittavan kappaleen reunalla nesteen virtausnopeus on nolaa. Tämän vuoksi tarkastelemme seuraavaksi nestettä, jolla on sisäisestä kitkasta aiheutuvaa hitautta, viskositeettia. Johdamme Navier–Stokes-yhtälöt, jotka kuvaavat liikemäärän säilymistä viskoottiselle nesteelle.

2.2.3 Navier–Stokes-yhtälöt

Yksikkötilavuuden liikemäärä on $\rho\mathbf{v}$. Sen muutosnopeus ajassa komponenteittain on

$$\partial_t(\rho v_k) = v_k \partial_t \rho + \rho \partial_t v_k. \quad (2.20)$$

Jatkuvuusyhtälö on tensorimuodossa

$$\partial_t \rho = -\partial_j(\rho v_j), \quad (2.21)$$

missä olemme käyttäneet Einsteinin summaussääntöä. Samoin Eulerin yhtälö on

$$\partial_t v_k = -v_j \partial_j v_k - \frac{1}{\rho} \partial_k p. \quad (2.22)$$

Kun sijoitamme nämä yhtälöön (2.20),

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho v_k) &= -v_k \partial_j(\rho v_j) - \rho v_j \partial_j v_k - \partial_k p \\ &= -\partial_j(\rho v_j v_k) - \delta_{jk} \partial_j p \\ &= -\partial_j(\rho v_j v_k + \delta_{jk} p) \\ &= -\partial_j \Pi_{jk}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

missä $\Pi_{jk} = \rho v_j v_k + \delta_{jk} p$ on liikemäärävuon tiheys. Tämä Eulerin yhtälöstä tuleva vuontiheys kuvaa siis reversiibeliä liikemäärän vaihtoa nestehiukkasten välillä ideaalinesteessä. Kun otetaan huomioon viskositeetti, on vuontiheyteen lisättävä irreversiibeliä liikemäärän vaihtoa eli kitkaa kuvaava termi. Tämän vuoksi määrittelemme nyt

$$\begin{aligned} \Pi_{jk} &= \rho v_j v_k + \delta_{jk} p - \sigma'_{jk} \\ &= \rho v_j v_k - \sigma_{jk}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

missä $\sigma_{jk} = -\delta_{jk} p + \sigma'_{jk}$ on *jännitystensori* ja σ'_{jk} on *viskoottinen jännitystensori*. Jännitystensori on liikemäärävuon tiheyden se osa, joka ei synny nestemassan liikkeen aiheuttamasta suorasta liikemääränsiirrosta.

Johdamme seuraavaksi yleisen muodon viskoottiselle jännitystensorille. Koska nesteen sisäinen kitka vaikuttaa ainoastaan nestehiukkasten liikkeessä toistensa

suhteen, on viskoottisen jännitystensorin oltava riippuvainen nopeuksien paikka-derivaatoista $\partial_j v_k$. Jos oletamme, että nopeusgradientit ovat pieniä, voimme sanoa σ'_{jk} :n riippuvan lineaarisesti nopeuden ensimmäisen kertaluokan derivaatoista eikä juurikaan korkeammista derivaatoista.

Jos kaikki nestehiukkaset liikkuvat samalla nopeudella, on nesteen sisäisen kitkan oltava nollassa ja siten myös $\sigma'_{jk} = 0$. Näin ollen σ'_{jk} voi riippua ainoastaan nopeuksien paikkaderivaatoista.

Samasta syystä on oltava $\sigma'_{jk} = 0$, kun neste on tasaisessa jäykän kappaleen pyörimisliikkeessä. Kun nestehiukkanen on paikassa \mathbf{r} ja pyörii kulmanopeudella $\boldsymbol{\Omega}$, niin $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$. Summa

$$\partial_j v_k + \partial_k v_j \quad (2.25)$$

häviää tällaisessa liikkeessä [16].

Siis yleisin nopeuden ensimmäistä derivaatoista lineaarisesti riippuva muoto viskoottiselle jännitystensorille on

$$\sigma'_{jk} = \mu (\partial_j v_k + \partial_k v_j) + \lambda \delta_{jk} \partial_l v_l, \quad (2.26)$$

missä μ ja λ ovat nopeudesta riippumattomia skalaarikenttiä. Ne ovat skalaarisia johtuen nesteen isotrooppisuudesta. Määritellemme kuitenkin käytännöllisyyden vuoksi vielä kentän

$$\zeta = \lambda + \frac{2}{3}\mu, \quad (2.27)$$

jolloin

$$\sigma'_{jk} = \mu (\partial_j v_k + \partial_k v_j - \frac{2}{3} \partial_l v_l \delta_{jk}) + \zeta \delta_{jk} \partial_l v_l. \quad (2.28)$$

Tässä muodossa sulkujen sisällä olevan lausekkeen jälki on nolla. Se vastaa nesteen puhtaita leikkausmuodonmuutoksia. Jälkimmäinen termi taas vastaa puhtaita tilavuudenmuutoksia.

Kertoimia μ ja ζ sanomme *viskoositeettikertoimiksi*, joista μ on *leikkausviskositeetti* ja ζ on *tilavuusviskositeetti*. Lisäksi määrittelemme *kinemaattisen viskositeetin*

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}. \quad (2.29)$$

Nyt lisäämällä Eulerin yhtälöön termin $\partial_k \sigma'_{jk}$ saamme

$$\begin{aligned} \rho (\partial_t v_j + v_k \partial_k v_j) &= -\partial_j p + \partial_k (\mu (\partial_j v_k + \partial_k v_j - \frac{2}{3} \partial_l v_l) + \zeta \delta_{jk} \partial_l v_l) \\ &= -\partial_j p + \partial_k (\mu (\partial_j v_k + \partial_k v_j - \frac{2}{3} \partial_l v_l)) + \partial_j (\zeta \partial_l v_l). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Johdimme näin yleisimmän oletuksiemme mukaisen muodon liikemäärän säilymislaillille nesteen virtauksessa.

Yleisesti viskositeettikertoimet riippuvat paineesta ja lämpötilasta. Kuitenkin, jos oletamme, että viskositeettikertoimet ovat vakioita, saamme ottaa ne ulos derivoinneista ja tällöin yhtälö yksinkertaistuu muotoon

$$\begin{aligned}
\rho(\partial_t v_j + v_k \partial_k v_j) &= -\partial_j p + \mu \partial_k (\partial_j v_k + \partial_k v_j - \frac{2}{3} \partial_l v_l) + \zeta \partial_j (\partial_l v_l) \\
&= -\partial_j p + \mu (\partial_k (\partial_j v_k) + \partial_k (\partial_k v_j) - \frac{2}{3} \partial_k (\partial_l v_l)) + \zeta \partial_j (\partial_l v_l) \\
&= -\partial_j p + \mu (\partial_j (\partial_k v_k) + \partial_k (\partial_k v_j) - \frac{2}{3} \partial_k (\partial_l v_l)) + \zeta \partial_j (\partial_l v_l) \\
&= -\partial_j p + \mu \nabla^2 v_j + (\zeta + \frac{1}{3} \mu) \partial_j (\nabla \cdot \mathbf{v}), \tag{2.31}
\end{aligned}$$

joka on vektorimuodossa

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + (\zeta + \frac{1}{3} \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}). \tag{2.32}$$

Tähän voimme, samoin kuin Eulerin yhtälöönkin, lisätä tilavuusvoiman aiheuttaman kiihtymisen $\rho \mathbf{g}$, jolloin

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + (\frac{\zeta}{\rho} + \frac{1}{3} \nu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{g}. \tag{2.33}$$

Yhtälö yksinkertaistuu vielä, jos neste on kokoonpuristumatonta. Tällöin jatkuvuusyhtälön mukaan $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, joten

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}. \tag{2.34}$$

Tämä yhtälöryhmä on newtonisen ja kokoonpuristumattoman nesteen *Navier–Stokes-yhtälöt*. Joitakin erityistapauksia osaamme ratkaista analyyttisesti, mutta nämä tapaukset ovat valitettavan harvassa ja kuvaavat yleensä melko yksinkertaisia virtauksia. Tämä ongelma johdattaa meidät laskennalliseen virtausmekaniikkaan, jossa pyrimme etsimään Navier–Stokes-yhtälöille approksimatiivisia ratkaisuja tai ratkaisuja yhtälöille, jotka approksimoivat Navier–Stokes-yhtälöitä.

Jatkuvuus- ja liikeyhtälöiden lisäksi voimme johtaa energian säilymistä kuvaavan *energiayhtälön*, joka sitoo nopeus- ja lämpötilakentät toisiinsa. Kokoonpuristumattomien ja newtonisten liikeyhtälöiden tapauksessa emme kuitenkaan tarvitse energiyhtälöä liikeyhtälöiden ratkaisemiseen. Nopeuskentän ratkettua saamme lämpötilakentän selville energiyhtälöstä. Tämän vuoksi emme tässä työssä käsittele energiyhtälöä.

Seuraavaksi käsittelemme Navier–Stokes-yhtälöiden numeerisen ratkaisun mahdollisuutta erilaisissa kokoonpuristuvuustilanteissa.

2.2.4 Kokoonpuristumaton ja heikosti kokoonpuristuva virtaus

Jos virtaus on täysin kokoonpuristumaton, sitä kuvaavat liikeyhtälöt (2.34) ja jatkuvuusyhtälö (2.15). Kun ratkaisemme tätä numeerisesti esimerkiksi eksplisiittisellä Eulerin menetelmällä, on

$$\mathbf{v}^{m+1} = \mathbf{v}^m + \left(\frac{d\mathbf{v}}{dm} \right)^m \delta t, \quad (2.35)$$

missä m on aika-askeleen indeksi siten, että $\mathbf{v}^m = \mathbf{v}(m\delta t)$, ja δt on aika-askeleen pituus. Sijoittaessamme tähän liikeyhtälön (2.34) on

$$\mathbf{v}^{m+1} = \mathbf{v}^m + \left(-\frac{1}{\rho} \nabla(p^m) + \nu \nabla^2(\mathbf{v}^m) + \mathbf{g} \right) \delta t. \quad (2.36)$$

Tästä emme saa ratkaistua painekenttää p , jolloin seuraavan aika-askeleen laskeminen on mahdotonta.

Tämän ongelma voimme kuitenkin kiertää. Otamme liikeyhtälöistä divergenssin puolittain, jolloin

$$\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v})) = -\frac{1}{\rho} \nabla^2 p + \nu \nabla^2(\nabla \cdot \mathbf{v}). \quad (2.37)$$

Jatkuvuusyhtälön vuoksi tämä yksinkertaistuu vielä muotoon

$$\nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v})) = -\frac{1}{\rho} \nabla^2 p. \quad (2.38)$$

Kertomalla puolittain $-\rho$:lla saamme paineelle Poissonin yhtälön

$$\nabla^2 p = -\rho \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v})). \quad (2.39)$$

Siispä ratkaisemalla Poissonin yhtälön tiedämme painekentän ja näin pystymme siirtymään aika-askeleen eteenpäin.

Tämä onkin eräs lähestymistapa virtausmekaniikan ongelmien ratkaisuun, myös käyttäen SPH:ta [18]. Emme kuitenkaan lähde kehittämään menetelmää tähän suuntaan, vaan otamme käyttöön laskennallisesti yksinkertaisemman asetelman, jossa neste ei ole täysin kokoonpuristumatonta, vaan käytämme jatkuvuusyhtälönä yhtälöä (2.11). Kokoonpuristuvuuden oletamme kuitenkin olevan niin heikkoa, ettei sitä tarvitse ottaa huomioon liikeyhtälöissä, joiksi siis valitsemme jälleen (2.34). Tämän lisäksi tarvitsemme tilanyhtälön $p = p(\rho)$ kytkemään tiheys ja paine toisiinsa.

Heikosti kokoonpuristuvalla virtauksella voimme johtaa Taitin tilanyhtälön [19]

$$p = \frac{\rho_0 c^2}{\xi} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\xi - 1 \right), \quad (2.40)$$

missä ρ_0 on referenssitiheys, c äänennopeus nesteessä ja ξ materiaalista riippuva vakio. Esimerkiksi vedelle on havaittu tomivaksi $\xi = 7$. Nyt siis äänennopeus ja vakio ξ määrittävät virtauksen kokoonpuristuvuuden. Suurempi äänennopeus tarkoittaa jyrkempää tilanyhtälöä referenssitiheyden lähettyvillä ja näin ollen myös vähemmän kokoonpuristuvaa virtausta.

2.3 Reunaehdot

Koska liikeyhtälöt ovat differentiaaliyhtälöitä, emme voi ratkaista niitä ilman alku- ja reunaehtoja. Tyypillisiä reunaehtoja ovat Dirichlet'n reunaehto, jolla kiinnitetään kentän arvo, ja Neumannin reunaehto, jolla kiinnitetään kentän derivaatan arvo. Lisäksi on muunnelmia, jotka ovat jonkinlaisia yhdistelmiä edellisistä. Cauchyn reunaehto kiinnittää sekä kentän että sen derivaatan arvon ja Robinin reunaehto on lineaarikombinaatio Dirichlet'n ja Neumannin ehdoista.

Virtausmekaniikassa asetamme yleensä reunaehdoiksi vapaille pinoille paineen Dirichlet'n reunaehdon. Virtausaluetta rajoittavien kappaleiden reunalle asettamamme reunaehto riippuu käsittelemmekö ideaalista vai viskoottista nestettä. Ideaalinesteelle asetamme nopeuskentän pinnan normaalin suuntaisen komponentin Dirichlet'n ehdon $\mathbf{v}_\perp = \mathbf{v}_{w,\perp}$ ja viskoottiselle nesteelle tiukemmin Dirichlet'n ehdon $\mathbf{v} = \mathbf{v}_w$, missä \mathbf{v}_w on seinämän nopeus.

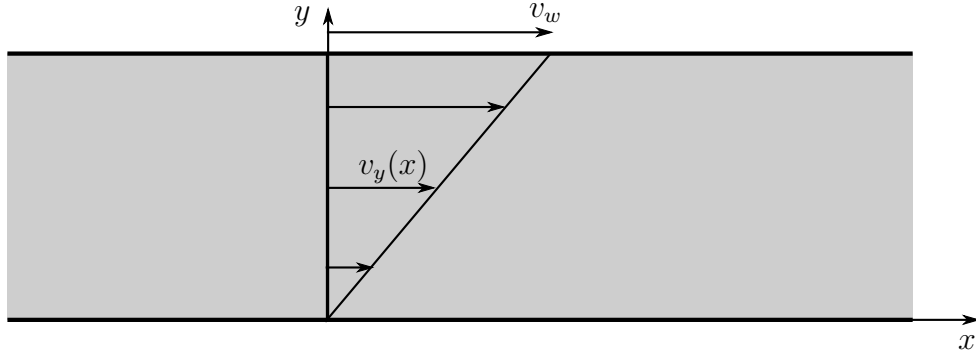
Ideaalinesteen reunaehtoa kutsumme slip-reunaehdoksi ja viskoottisen nesteen reunaehtoa no-slip-reunaehdoksi sen mukaan, pääseekö neste luistamaan pintaa pitkin vai ei. No-slip-ehto perustuu mikrotason ilmiöön. Yleensä nestemolekyylin väliset vuorovaikutukset ovat heikompia kuin neste- ja seinämolekyylin väliset [16]. Tämän ansiosta nestemolekyylit tarttuvat reunoihin kiinni pakottaen virtauskentän nopeuden reunan nopeudeksi.

2.4 Analyttisesti ratkeavia tapauksia

Navier–Stokes-yhtälöille on joitakin tunnettuja analyttisiä ratkaisuja. Vaikka nämä tapaukset kuvaavatkin yleensä vain melko yksinkertaisia virtauksia, on niiden hyöty suuri testattaessa uusia simulaatiomenetelmiä. Jos simulaatio ei kykene ratkaisemaan yksinkertaisia ongelmia suurella tarkkuudella, ei se sitä varmastikaan tee monimutkaisille tapauksille. Tällaisia virtauksia ovat muun muassa Couette- ja Poiseuille-virtaukset, joiden staattiset ratkaisut etsimme seuraavaksi.

2.4.1 Couette-virtaus

Couette-virtaus on yksinkertainen kaksikulotteinen virtaus, jossa on nestettä kahden vaakasuoran levyn välissä siten, että alempi levy on paikoillaan ja ylempi levy



Kuva 1. Havainnekuva Couette-virtauksen nopeuskentästä.

liikkuu vakionopeudella $\mathbf{v}_w = (v_w, 0)$. Levyt ovat etäisyydellä h toisistaan. Asetelma on esitetty kuvassa 1.

Oletamme tutkittavan nesteen olevan Newtonista ja kokoonpuristumatonta. Lisäksi oletamme, että virtaus on laminaarista eli neste liikkuu ainoastaan x -suuntaan eikä nesteeseen kohdistu mitään tilavuusvoimia, kuten gravitaatiota. Tällöin Navier–Stokes-yhtälöt ovat

$$\begin{cases} \partial_t v_x + (v_x \partial_x) v_x = -\frac{1}{\rho} \partial_x p + \nu (\partial_x^2 + \partial_y^2) v_x \\ \partial_y p = 0. \end{cases} \quad (2.41)$$

Koska virtauskenttä on staattinen, $\partial_t v_x = 0$. Lisäksi virtaus on invariantti translaatioissa x -suuntaan, joten $\partial_x v_x = 0$ ja $\partial_x p = 0$. Siispä

$$\begin{cases} \partial_y^2 v_x = 0 \\ p = C, \end{cases} \quad (2.42)$$

missä C on vakio. Ylemmän differentiaaliyhtälön ratkaisu on

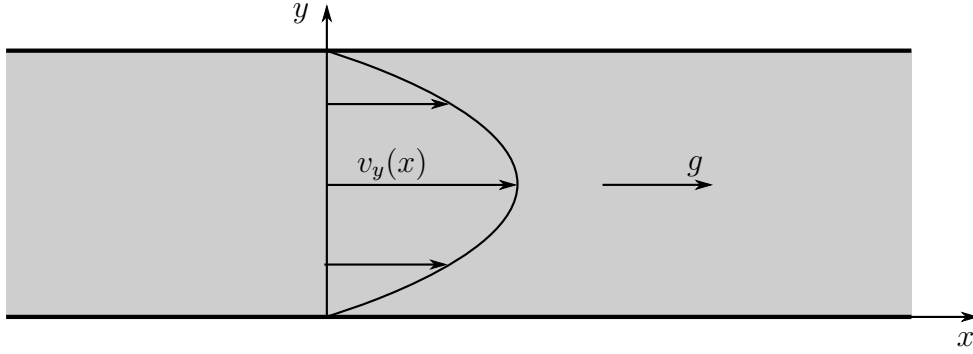
$$v_x = Ay + B, \quad (2.43)$$

missä A ja B ovat reunaehdoista riippuvia vakioita. Reunaehdot ovat kitkallisen virtauksen no-slip-reunaehdot $v_x(y = 0) = 0$ ja $v_x(y = h) = v_w$. Siispä $B = 0$ ja $A = v_w/h$, joten nopeuskenttä on

$$\mathbf{v} = \left(\frac{v_w y}{h}, 0 \right)^T. \quad (2.44)$$

2.4.2 Poiseuille-virtaus

Poiseuille-virtauksessa on poikkileikkaukseltaan ympyrän muotoisen putken sisällä virtaavaa nestettä, jonka virtausta ylläpitää joko paine-ero putken päiden välillä



Kuva 2. Havainnekuva Poiseuille-virtauksen nopeuskentästä.

tai putken suuntainen tilavuusvoima. Käsittelemme nyt tilavuusvoiman ajamaa virtausta. Kuten Couette-virtaus, myös Poiseuille-virtaus voidaan yksinkertaistaa kaksiulotteiseksi virtaukseksi, sillä poikkileikkaukseltaan ympyränmuotoinen virtaus on invariantti kierroissa putken keskiakselin ympäri.

Tilanne on esitetty kuvassa 2. Putken halkaisija on L . Oletamme jälleen virtauksen olevan laminaarista, eli nesteellä on nopeutta ainoastaan x -suuntaan. Lisäksi oletamme newtonisen ja kokoonpuristumattoman virtauksen. Nyt Navier–Stokes-yhtälöt ovat

$$\begin{cases} \partial_t v_x + v_x \partial_x v_x = -\frac{1}{\rho} \partial_x p + \nu(\partial_x^2 + \partial_y^2)v_x + g_x \\ \partial_y p = 0. \end{cases} \quad (2.45)$$

Virtaus on ajasta riippumaton, joten $\partial_t v_x = 0$. Koska virtaus on symmetrinen x -suuntaisissa siirroissa, on $\partial_x p = 0$, $\partial_x v_x = 0$. Näinpä ensimmäinen liikeyhtälö on

$$\nu \partial_y^2 v_x = -g_x, \quad (2.46)$$

josta voimme integroida ratkaisuksi

$$v_x = A + yB - \frac{y^2 g_x}{2\nu}. \quad (2.47)$$

Viskoottisen virtauksen reunaehtojen mukaan $v_x(y=0) = 0 = v_x(y=L)$, joten $A = 0$ ja $B = \frac{Lg_x}{2\nu}$. Siispä nopeuskenttä on

$$\mathbf{v} = \left((Ly - y^2) \frac{g_x}{2\nu}, 0 \right)^T \quad (2.48)$$

Toisesta liikeyhtälöstä seuraa $p = \text{vakio}$.

2.4.3 Couette- ja Poiseuille-virtausten aikakehitys

Sekä Couette- että Poiseuille-virtauksen aikakehityksen voimme myös ratkaista, jos oletamme nesteen olevan aluksi paikallaan. Tällöin molemmille virtauksille on olemassa sarjaratkaisut, jotka ovat [9]

$$v_x(y, t) = \frac{v_w}{L}y + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{2v_w}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \exp\left(-\nu \frac{n^2\pi^2}{L^2}t\right) \quad (2.49)$$

Couette-virtaukselle ja

$$v_x(y, t) = \frac{F}{2\nu}y(y-L) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4FL^2}{\nu\pi^3(2n+1)^3} \sin\left(\frac{\pi(2n+1)}{L}y\right) \exp\left(-\frac{(2n+1)^2\pi^2\nu}{L^2}t\right), \quad (2.50)$$

Poiseuille-virtaukselle, missä F on kiihtyvyyden g aiheuttama voima. Samaan tapaan voisimme ratkaista muitakin laminaarisen virtauksen virtauskenttiä.

2.5 Similaarisuus, turbulenssi ja pintailmiöt

Mainitsimme seuraavaksi lyhyesti virtausmekaniikan ilmiöitä, joita emme syvemmin käsittele tässä työssä, mutta jotka ovat olennaisia käsitellessä monimutkaisempia virtauksia.

Voimme esittää nesteen liikeyhtälöt (2.34) myös dimensiottomassa muodossa

$$St \frac{d\mathbf{v}^*}{dt^*} = -\frac{1}{Ma^2} \nabla^* p^* + \frac{1}{Re} (\nabla^*)^2 \mathbf{v}^* + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{e}_g, \quad (2.51)$$

missä $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}U$ on dimensioton nopeus, $t^* = tT$ dimensioton aika ja $p^* = pP$ dimensioton paine. Skaalat L , T , U ja P valitsemme siten, että ne kuvaavat tarkasteltavaa virtausta. Esimerkiksi L voi olla putken leveys putkivirtauksessa, T virtauksessa olevan värähtelyn jaksonaika, U virtauksen pienimmän ja suurimman vauhdin erotus ja $P = \rho c^2$, missä c on äänennopeus virtauksessa.

Lisäksi yhtälössä esiintyvät dimensiottomat luvut Stokesin luku, Reynoldsin luku, Machin luku ja Frouden luku, jotka ovat määritelty

$$St = \frac{L}{UT}, \quad Re = \frac{UL}{\nu}, \quad Ma = \frac{U}{c}, \quad Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}}. \quad (2.52)$$

Dimensiottomia lukuja vertailemalla voimme päätellä jotain liikeyhtälöiden eri komponenttien vaikutuksesta. Jos esimerkiksi Frouden luku on hyvin suuri, tiedämme ulkoisen voimakentän vaikutuksen olevan pientä nesteen hitauteen nähden, ja näin ollen voimme mahdollisesti jättää ulkoisen kentän aiheuttaman kiihtyvyyden pois liikeyhtälöstämme.

Dimensiottomissa liikeyhtälöissä Reynoldsin luku kuvaa nesteen viskositeettia, mutta se myös karakterisoi virtauksen epästabiiliutta. Jokaiselle virtausgeometrialle on olemassa kriittinen Reynoldsin luku Re_c , jota suuremmilla Reynoldsin luvuilla nopeuskenttä ei voi olla sekä stabiili että ajasta riippumaton. Tällaisia virtauksia kutsumme *turbulenteiksi*. Esimerkiksi putkivirtauksille pienen Reynoldsin luvun (0-2000) virtaukset ovat laminaarisia ja siirtymävaiheen (2000-3000) kautta suuren Reynoldsin luvun (3000-) virtaukset ovat täysin turbulenteja.

Luonnossa turbulenttien virtausten nopeuskenttä asettuu aikariippuvaiseksi stabiiliksi virtaukseksi, jossa esiintyy pyörteitä kaikissa kokoluokissa. Tämän skaalariippumattomuuden vuoksi turbulenttien virtausten numeerinen ratkaiseminen on vaikeaa, ja sitä tehdäänkin yleensä käyttämällä efektiivisiä malleja, joissa virtauksen turbulentiutta kuvataan erilaisilla kentillä.

Kun Re on kriittisen rajan alapuolella, virtaus on laminaarinen, eli neste muodostuu eri nopeuksilla liikkuvista kerroksista, aivan kuten edellä johtamamme ratkaisut Couette- ja Poiseuille-virtauksille.

Käsittelimme ainoastaan yhdestä nesteestä tai nestefaasista muodostuvia virtauksia, mutta usein virtaus koostuu kahdesta tai useammasta sekoittumattomista nesteistä. Tällöin on otettava huomioon nesteiden välisten rajapintojen vaikutus. Rajapinnat aiheuttavat nesteisiin voimia, jotka riippuvat rajapinnan kaarevuudesta ja paine-erosta rajapinnalla.

Emme käsittele näitä aiheita tämän enempää tässä työssä, mutta turbulenssista ja pintajännityksistä voi lukea esimerkiksi Landaun ja Lifshitzin kirjasta [16]. Pintajännityksistä ja turbulenssista SPH-simulaatioissa voi puolestaan lukea Violeau'n kirjasta [20].

2.6 Yhteenveto

Nesteen virtausta kuvaavat differentiaaliyhtälöt saamme johdettua massan ja liikemäärän sekä pyörimismäärän säilymisestä. Heikosti kokoonpuristuvalla newtoniselle virtaukselle jatkuvuusyhtälö on

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.53)$$

ja Navier–Stokes-yhtälöt ovat

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{g}. \quad (2.54)$$

Lisäksi käytämme Taitin tilanyhtälöä

$$p = \frac{\rho_0 c^2}{\xi} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\xi - 1 \right). \quad (2.55)$$

Tutkimme seuraavaksi differentiaaliyhtälöiden ratkaisemista SPH-menetelmällä, pitäen erityisesti virtausmekaanisten ongelmien ratkaiseminen mielessä.

3 Avaruuden diskretisointi

Smoothed Particle Hydrodynamics eli SPH on Lagrangelainen hilaton menetelmä, jossa jokainen hiukkanen kuvaa vakiomassaista nestetilavuutta. Koska jokaisen hiukkanen kantama massa on vakio, massan säilyminen on taattu ja näin ollen myös jatkuvuusyhtälö on voimassa. Arvioimme kenttien arvoja ns. *ydinapproksimaatiossa*, jossa *konvoluutioydin* tai *ydin* on eräänlainen 'leveä' δ -funktio. Lisäksi teemme ns. *hiukkasapproksimaation*, jossa muutamme integraalit ytimen peittämien alueiden yli painotetuiksi summiksi.

3.1 Ydinapproksimaatio

Määrittelemme ensin kentän $f: \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ ja funktion $g: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ konvoluution

$$(f * g)(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}', t) g(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) d^d \mathbf{x}'. \quad (3.1)$$

Nyt käyttäen Diracin delta-funktiota voimme kirjoittaa kentän f konvoluutiona

$$f(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} A(\mathbf{x}', t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) d^d \mathbf{x}' = (f * \delta)(\mathbf{x}, t). \quad (3.2)$$

Tähän ideaan perustuu SPH:ssa tehtävä jatkuva approksimaatio, jossa kenttää ei konvoluoida delta-funktiolla vaan samoja ominaisuuksia omaavalla ytimellä.

Ydin on funktio $W_h: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, joka toteuttaa seuraavat ehdot:

1. ytimellä on *kompakti tuenta*

$$W_h(\mathbf{x}) = 0, \quad \text{kun } |\mathbf{x}| \geq r_c, \quad (3.3)$$

missä rajaetäisyys $r_c = \kappa h$, κ on jokin vakio ja h ytimen leveysparametri.

2. ytimen integraali koko avaruuden yli on normitettu ykköseen, eli

$$\int_{\mathbb{R}^d} W_h(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} = 1 \quad (3.4)$$

3. ydin lähestyy Diracin delta-funktiota, eli

$$\lim_{h \rightarrow 0} W_h(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \quad (3.5)$$

4. ydin on invariantti kierroissa ja peilauksissa origon ympäri, eli

$$W_h(Q\mathbf{x}) = W_h(\mathbf{x}) \quad \forall Q \in O(d), \quad (3.6)$$

missä $O(d)$ on ortogonaalisten matriisien ryhmä. Tämä vaatimus seuraa avaruuden isotrooppisuudesta.

Kohdista 1 ja 4 seuraa 2:lle uusi muoto

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} W_h(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} = 1 \quad (3.7)$$

\mathbf{x} -keskiselle d -palloille $\Omega_{\mathbf{x}}$, jonka säde on r_c . Kohdasta 4 seuraa myös ytimen parillisuus

$$W_h(\mathbf{x}) = W_h(\|\mathbf{x}\|). \quad (3.8)$$

Kuten delta-funktion tapauksessa, arvioimme nytkin kenttää $f: \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ konvoluutiolla

$$(f * W_h)(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}', t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^d \mathbf{x}'. \quad (3.9)$$

Merkitsemme tätä *ydinapproksimaatiota* eli *jatkuvaa approksimaatiota*

$$\langle f \rangle := f * W_h. \quad (3.10)$$

Jos arvioitava kenttä f on tarpeeksi sileä, voimme tehdä Taylor-kehityksen pisteen \mathbf{x} ympärillä ydinapproksimaation tarkkuuden arvioimiseksi:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle(\mathbf{x}, t) &= \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \left(f(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t)(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) + \underbrace{O((\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2)}_{\approx r_c^2} \right) W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}' \\ &\approx f(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}' + f'(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}' \\ &\quad + O(r_c^2) \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}' \\ &= f(\mathbf{x}, t) + O(r_c^2), \end{aligned} \quad (3.11)$$

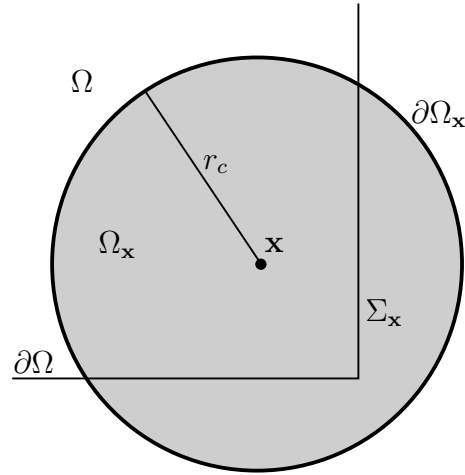
koska $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ on pariton funktio, jonka integraali on nollassa. Näemme ydinapproksimaation olevan tarkkudeltaan toista kertalukua r_c :ssä ja siten myös h :ssa.

Haluamme arvioida myös funktioiden derivaattoja. Olkoon nyt \mathbf{f} jokin derivoituva vektorikenttä ja arvioitava funktio $\nabla \cdot \mathbf{f}$. Siis

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot \mathbf{f} \rangle(\mathbf{x}, t) &= \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} (\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}', t)) W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}' \\ &= \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \nabla \cdot (\mathbf{f}(\mathbf{x}', t) W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x})) d^d \mathbf{x}' - \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{f}(\mathbf{x}', t) \nabla W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}', \end{aligned} \quad (3.12)$$

josta saamme käyttämällä Gaussin divergenssilauseetta

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \nabla \cdot \mathbf{A} = \int_{\partial \Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} d\Omega_{\mathbf{x}}, \quad (3.13)$$



Kuva 3. Havainnekuva ytimen leikkautumisesta, eli tilanteesta, jossa $\Omega_x \cap \partial\Omega = \Sigma_x \neq \emptyset$.

missä $\partial\Omega_x$ on aluetta Ω_x rajaava pinta ja \mathbf{n} on pinnan normaali, sekä sitä, että W_h häviää alueen reunalla. Tällöin

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f} \rangle(\mathbf{x}, t) = - \int_{\Omega_x} \mathbf{f}(\mathbf{x}', t) \nabla W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}'. \quad (3.14)$$

Nyt näemme reunalla katoamisen oleellisuuden. Kun leikkaus $\Omega \cap \Omega_x \neq \Omega_x$, oletus ytimen katoamisesta ei ole enää voimassa, eikä tätä algoritmin tarkkuuden kannalta tärkeää approksimaatiota voidakaan käyttää. Kuvassa 3 on kaksiulotteinen tapaus tilanteesta. Tämä *ytimen leikkautuminen* on SPH:n ongelma käytettäessä sitä rajoitettuihin virtauksiin ja erilaisia ratkaisuja tähän ongelmaan käsittelemme kappaleessa 4.

Samalla tavalla saamme esimerkiksi skalaarikentän f gradientin ∇f jatkuvan approksimaation $\langle \nabla f \rangle$.

Lisäksi voimme approksimoida korkeamman kertaluvun derivaattoja, kuten vektorikentän \mathbf{f} Laplacen operaattoria $\nabla^2 \mathbf{f} = \nabla \cdot (\nabla \otimes \mathbf{f})$, jos oletamme lisäehdon $\nabla W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = 0$, kun $\|\mathbf{x}' - \mathbf{x}\| = r_c$. Koska Navier–Stokes-yhtälöissä esiintyy tällainen termi $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$, on meidän oletettava ytimelle lisäehto

5. ytimen gradientti häviää vuorovaikutusetäisyydellä r_c , eli

$$\nabla W_h(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = 0, \quad \text{kun } |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \geq r_c. \quad (3.15)$$

Näin olemme saaneet rajattua ytimeksi sopivien funktioiden joukkoa tarkoituksiin sopivaksi. Jos ratkaistavat yhtälöt sisältäisivät korkeamman kertaluvun derivaattoja, olisi tehtävä oletuksia myös ytimen korkeammista derivaatoista. Virtausmekaniikan tapauksessa emme tarvitse korkeampia derivaattoja, joten nämä oletukset ovat riittävät.

Koska ydin on invariantti kierroissa, voimme kirjoittaa sen radiaalisessa muodossa

$$W_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = W_h(\tilde{x}), \quad (3.16)$$

missä $\tilde{x} = |\tilde{\mathbf{x}}| = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. Koska ydin riippuu ainoastaan etäisyydestä, on sen gradientti ketjusäännön mukaan

$$\nabla W_h(\tilde{x}) = \frac{\partial W_h(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}} \nabla \tilde{\mathbf{x}} = w'_h(\tilde{x}) \frac{\tilde{\mathbf{x}}}{\tilde{x}}. \quad (3.17)$$

Ainoastaan etäisyydestä riippuvan ytimen voimme esittää myös muodossa

$$W_h(\tilde{x}) = \frac{\alpha_{W,d}}{h^d} w(q), \quad (3.18)$$

missä $\alpha_{W,d}$ on ytimestä ja avaruuden dimensiosta riippuva vakio, sekä $q = |\mathbf{q}|$ ja $\mathbf{q} = \frac{\tilde{\mathbf{x}}}{h}$. Kutsumme funktiota w *dimensiottomaksi ytimeksi*. Tällöin voimme kirjoittaa normitusehdon muodossa

$$\alpha_{W,d} \int_{\Omega} w(q) d^d \mathbf{q} = 1. \quad (3.19)$$

Tästä saamme normitusvakioksi

$$\alpha_{W,d} = \left(S_d \int_0^{\kappa h} w(q) q^{n-1} dq \right)^{-1}, \quad (3.20)$$

missä S_d on d -ulotteisen pallon pinta-ala, joka on

$$S_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})}, \quad (3.21)$$

missä Γ on Eulerin gamma-funktio. 1-, 2- ja 3-ulotteisissa tapauksissa S_d on vastaavasti 2, 2π ja 4π .

Yllä olevan ja ketjusäännön mukaan ytimen gradientti on

$$\nabla W_h(\tilde{x}) = \frac{\alpha_{W,d}}{h^{d+1}} w'(q) \frac{\tilde{\mathbf{x}}}{\tilde{x}}, \quad (3.22)$$

Tästä seuraa yhtälön (3.17) mukaisesti

$$W'_h(\tilde{x}) = \frac{\alpha_{W,d}}{h^{d+1}} w'(q). \quad (3.23)$$

Induktiolla on suoraviivaista todistaa, että myös korkeamman kertaluokan derivaatoille pätee vastaava: tapauksen $k = 1$ olemme todistaneet yllä ja olettamalla tapaus $k - 1$ todeksi saamme osoitettua k :nnen derivaatan gradientille sama kuin yllä, jolloin kaikille $k \in \mathbb{N}$

$$W_h^{(k)}(\tilde{x}) = \frac{\alpha_{W,d}}{h^{d+k}} w^{(k)}(q). \quad (3.24)$$

3.1.1 Esimerkkiytimiä

Ensimmäisenä mahdollisesti käyttökelpoisena dimensiottomana ytimenä mieleemme tulee varmaankin normaalijakauma $w_G = \exp(-q^2)$, mutta se ei ole kompaktin tuennan ydin. Normaalijakaumaa voisimme muokata vähentämällä sen arvoista vakio halutun tuennan alueella ja asettamalla se muualla nolaksi:

$$w'_G(q) = \begin{cases} w_G(q) - w_G(\kappa), & 0 \leq q \leq \kappa \\ 0, & \kappa < q. \end{cases} \quad (3.25)$$

Tällä tavalla muokattu normaalijakauma olisi kyllä kompaktin tuennan ydin, mutta sen toinen derivaatta ei katoaisi κ :n etäisyydellä.

Toinen tapa muodostaa ytimiä on ottaa sopivan asteen B-splinejä. Kun lisäksi valitaan B-splini, jonka derivaatta häviää tuennan reunalla, saadaan halutut ehdot totetuttava ydin. Kolmannen kertaluvun B-splini, jolle $\kappa = 2$ on

$$w_{S3}(q) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3 & 0 \leq q \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2 - q)^3 & 1 < q \leq 2 \\ 0 & 2 < q. \end{cases} \quad (3.26)$$

Tämän ytimen kertoimet $\alpha_{S3,d}$ ovat $\frac{2}{3}$, $\frac{10}{7\pi}$ ja $\frac{1}{\pi}$, kun dimensio d on vastavasti 1,2 ja 3.

Kolmas vaihtoehto ovat Wendland-ytimet [21], joista esimerkiksi viidennen kertaluvun ydin on määritelty

$$w_{W5} = \begin{cases} \left(1 - \frac{q}{2}\right)^4 (1 + 2q), & 0 \leq q \leq 2 \\ 0, & 2 < q. \end{cases} \quad (3.27)$$

Tällöin sen derivaatta on

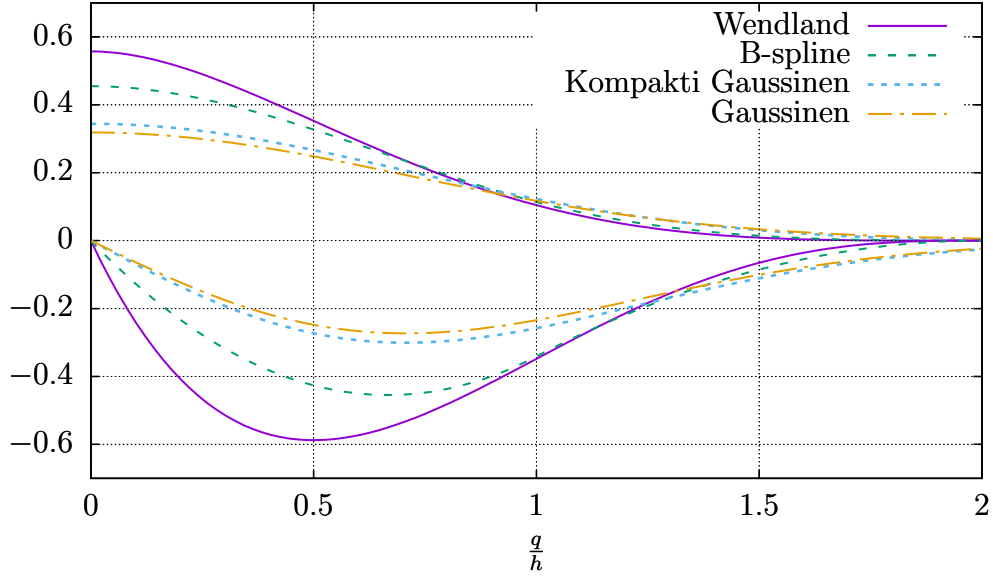
$$w'_{W5} = \begin{cases} -5q \left(1 - \frac{q}{2}\right)^3, & 0 \leq q \leq 2 \\ 0, & 2 < q. \end{cases} \quad (3.28)$$

Viidennen kertaluvun Wendland-ytimen normitusvakiot eri dimensioissa ovat

$$\alpha_{W5,d} = \begin{cases} \frac{7}{4\pi}, & d = 2 \\ \frac{21}{16\pi}, & d = 3. \end{cases} \quad (3.29)$$

Kaikkien Wendland-ytimien funktionaalinen muoto on samanlainen ja niiden etuna onkin yksinkertainen määritelmä. Tämä helpottaa hieman laskennallista taakkaa, sillä ydinfunktiota kutsutaan simulaatiossa usein ja ennalta määrittelemättömillä argumenteilla.

Edellä olevat ytimet ja niiden derivaatat kaksiulotteisessa tapauksessa etäisyyden funktioina ovat kuvassa 4.



Kuva 4. Kaksiulotteisten ytimien ja niiden derivaattojen kuvaajia. Ytimet ovat kaikkialla positiivisia ja niiden derivaatat ovat kaikkialla negatiivisia.

3.2 Hiukkasapproksimaatio

Edellisen kappaleen integraalien laskeminen analyttisesti ei ole käytännöllistä, joten arvioimme niitä Riemannin summilla. Jaamme laskenta-alueen N :ään osaan j , joihin pisteet \mathbf{x}_j kuuluvat, ja joista kullakin on tilavuus V_j . Siis

$$\langle f \rangle(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j, t) W_h(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}) V_j. \quad (3.30)$$

Kutsumme tätä SPH:n *diskreetiksi approksimaatioksi* $\langle f \rangle_d$. Virtausmekaniikan kautta saamme tilavuudelle V_j tulkinnan massan m_j ja tiheyden ρ_j suhteena, joten

$$\langle f \rangle_d(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j, t) W_h(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}). \quad (3.31)$$

Jos arvioimme kentän arvoja vain diskreeteissä pisteissä, voimme kirjoittaa

$$\langle f \rangle_d(\mathbf{x}_i, t) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j, t) W_h(\mathbf{x}_{ij}), \quad (3.32)$$

missä $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. Pisteiden \mathbf{x}_i luonnollinen valinta on tilavuuden V_i massakeskipiste. Tässä vaiheessa aikaa t ei ole diskretisoitu, vaan se on jatkuva suure.

Teemme ajan diskretisoinnin myöhemmin käsitellessämme oikeanlaista numeerista aika-askellusta.

Koska Riemannin summassa approksimoimme kentän arvon vakioksi jokaisessa tilavuudessa, voimme jatkossa tehdä laskea hiukkasapproksimaatiot näiden tilavuuksien massakeskipisteissä. Näin samaistamme tilavuudet hiukkasiksi, joita merkitsemme latinalaisen aakkoston kirjaimilla, siis hiukkaselle a kentän f approksimaatio on

$$\langle f_a \rangle_d = \sum_{b \in \mathcal{F}} \frac{m_b}{\rho_b} f_b W_{ab}, \quad (3.33)$$

missä $f_b = f(\mathbf{x}_b)$, $W_{ab} = W_h(x_{ab})$, $x_{ab} = \|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b\|$ ja \mathcal{F} on kaikkien hiukkasten joukko. Jatkossa hiukkasten summaus on aina joukon \mathcal{F} yli, jos emme mainitse toisin.

3.2.1 Hiukkasapproksimaation tarkkuus

Hiukkasapproksimaation tarkkuutta on hankalampi selvittää kuin jatkuvan approksimaation. Se kuitenkin osataan tehdä, jos hiukkaset ovat jakautuneet säännölliseen d -ulotteiseen kuutiohilaan, tai jos hiukkaset ovat täysin satunnaisissa paikoissa. Säännöllisen hilan tapauksessa approksimaation tarkkuus riippuu ytimen Fouriermuunnoksesta ja se on [20, 22]

$$O\left(\left(\frac{\delta r}{h}\right)^{\beta_w+1}\right), \quad (3.34)$$

missä δr on hilakopin hilavakio ja β_w on pienin pariton luku, jolle $W_h^{(\beta_w)}(r_c) \neq 0$, eli se on ytimestä ja r_c :stä riippuva vakio. Tällaisessa tilanteessa kannattaa siis valita ydin, jonka derivaatta on jatkuva mahdollisimman suureen kertalukuun.

Satunnaisen jakauman tapauksessa tarkkuus on samanlaista kuin Monte Carlo-menetelmissä eli $O(1/\sqrt{N})$, missä N on hiukkasten lukumäärä. Siispä satunnaisesti järjestäytyneille hiukkasille ytimen muodolla ei ole merkitystä hiukkasapproksimaation tarkkuuteen.

SPH:ssa hiukkaset eivät kuitenkaan ole täysin satunnaisessa järjestyksessä eivätkä ne ole myöskään kuutiohilassa, vaan niiden järjestys riippuu jatkuvuus- ja liikeyhtälöistä. Tällaisen järjestyksen aiheuttamaa virhettä diskreettiin approksimaatioon emme kuitenkaan osaa laskea [20, 23]. Diskreetin approksimaation tarkkuutta voisi mahdollisesti mitata laskemalla jatkuvan approksimaation integraalit analyttisesti jollekin tarpeeksi yksinkertaiselle kentälle.

3.3 Operaattorit

Seuraavaksi etsimme diskreetit muodot jatkuvuus- ja liikeyhtälöissä esiintyville divergenssi-, gradientti- ja Laplacen operaattoreille. Tavoiteltuja ominaisuuksia ovat säilymlakien toteutuminen ja tähän kytköksissä olevat operaattoreiden symmetriaominaisuudet. Tahdomme tiheydenmuutosten olevan symmetrisiä ja liikemääränmuutosten olevan antisymmetrisiä hiukkasten a ja b välillä. Tutkimme ensin ideaalinteen tapausta, jolloin emme tarvitse Laplacen operaattoria, ja jolloin mekaaninen energia säilyy.

Yksinkertaisin tapa määrittellä gradientti ja divergenssi on käyttää diskreettiä muotoa jatkuvasta approksimaatiosta (3.14). Tällä tavoin saamme

$$\begin{cases} \mathbf{G}_a \{A_b\} = \sum_b V_b A_b W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \approx (\nabla A)_a \\ D_a \{\mathbf{A}_b\} = \sum_b V_b \mathbf{A}_b \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \approx (\nabla \cdot \mathbf{A})_a. \end{cases} \quad (3.35)$$

Nämä operaattorit eivät kuitenkaan täytä edellä mainittuja symmetriaominaisuuksia.

3.3.1 Variationaalisesti yhteensopivat operaattorit

Voimme johtaa sopivat operaattorit käyttäen klassista mekaniikkaa. Vuorovaikuttavien hiukkaskokoelmien Lagrangen funktio on [20]

$$L = \sum_b \frac{1}{2} m_b v_b^2 - m_b e_{\text{int},b} - m_b \mathbf{r}_b \cdot \mathbf{g}. \quad (3.36)$$

missä $e_{\text{int},b}$ on sisäenergia massayksikköä kohden ja \mathbf{g} ulkoisen kentän aiheuttama kiihtyvyyys. Tässä siis hiukkaskokoelmat b vastaavat diskreetin approksimaation hiukkasia.

Eulerin–Lagrangen liikeyhtälöt karteesisissa koordinaateissa ovat

$$\frac{dm_a \mathbf{v}_a}{dt} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a}, \quad (3.37)$$

joissa oikeanpuoleinen termi on

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = - \sum_b m_b \left(\frac{\partial e_{\text{int}}}{\partial \rho} \right)_b \frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} + \sum_b m_b \delta_{ab} \mathbf{g}, \quad (3.38)$$

sillä voimme karakterisoida sisäenergian tiheyden funktiona. Tiheyden k :nnten potenssin SPH-approksimaatio (3.33) on

$$\rho_b^k = \sum_c \frac{m_c}{\rho_c} \rho_c^k W_{bc} \quad (3.39)$$

kaikille $k \in \mathbb{R}$, joten tiheydelle pätee

$$\rho_b = \sum_c m_c \left(\frac{\rho_c}{\rho_b} \right)^{k-1} W_{bc}. \quad (3.40)$$

Niinpä yhtälössä (3.38) esiintyvä tiheysgradientti on

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} = m_a \left(\frac{\rho_a}{\rho_b} \right)^{k-1} \nabla_a W_{ab} + \delta_{ab} \sum_c m_c \left(\frac{\rho_c}{\rho_a} \right)^{k-1} \nabla_a W_{ac}. \quad (3.41)$$

Koska voimme määritellä paineen

$$p_b = -\frac{\partial m_b e_{\text{int},b}}{\partial V_b} = -m_b \frac{\partial e_{\text{int},b}}{\partial \rho_b} \frac{\partial \rho_b}{\partial V_b} = \frac{\partial e_{\text{int},b}}{\partial \rho_b} \frac{m_b^2}{V_b^2} = \frac{\partial e_{\text{int},b}}{\partial \rho_b} \rho_b^2, \quad (3.42)$$

on

$$\frac{\partial e_{\text{int},b}}{\partial \rho_b} = \frac{p_b}{\rho_b^2}. \quad (3.43)$$

Sijoittamalla (3.41) ja (3.43) liikeyhtälön oikeaan puoleen (3.38) saamme

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = -\sum_b m_a m_b \left(\frac{p_a \rho_b^{2k} + p_b \rho_a^{2k}}{(\rho_a \rho_b)^{k+1}} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} + m_a \mathbf{g}. \quad (3.44)$$

Tällöin liikeyhtälöt (3.37) saavat muodon

$$\frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = -\sum_b m_b \left(\frac{p_a \rho_b^{2k} + p_b \rho_a^{2k}}{(\rho_a \rho_b)^{k+1}} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} + \mathbf{g}. \quad (3.45)$$

Kun vertaamme tätä Eulerin yhtälöön (2.19), voimme määritellä diskreetin gradienttioperaattorin

$$\mathbf{G}_a^k \{A_b\} := \rho_a \sum_b m_a m_b \left(\frac{A_a \rho_b^{2k} + A_b \rho_a^{2k}}{(\rho_a \rho_b)^{k+1}} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab}, \quad (3.46)$$

jolloin voimme kirjoittaa liikeyhtälöt lyhyemmin

$$\frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = -\frac{1}{\rho_a} \mathbf{G}_a^k \{p_b\} + \mathbf{g}. \quad (3.47)$$

Diskreetin jatkuvuusyhtälön saamme tiheysaprossimaation (3.40) aikaderivaattana

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b \left(\frac{\rho_b}{\rho_a} \right)^{k-1} \frac{dW_{ab}}{dt}. \quad (3.48)$$

Ydin W_{ab} on paikkavektoreiden \mathbf{r}_a ja \mathbf{r}_b funktio, joten ketjusäännön ja yhtälön (3.17) mukaan

$$\frac{dW_{ab}}{dt} = \frac{\partial W_{ab}}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \frac{d\mathbf{r}_a}{dt} + \frac{\partial W_{ab}}{\partial \mathbf{r}_b} \cdot \frac{d\mathbf{r}_b}{dt} = W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \cdot \mathbf{v}_a + W'_{ab} \mathbf{e}_{ba} \cdot \mathbf{v}_b = W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}, \quad (3.49)$$

koska $\mathbf{e}_{ba} = -\mathbf{e}_{ab}$, missä $\mathbf{v}_{ab} = \mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b$. Nyt jatkuvuusyhtälö on

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b \left(\frac{\rho_b}{\rho_a} \right)^{k-1} W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}, \quad (3.50)$$

jota hieman muokkaamalla

$$\frac{d\rho_a}{dt} = -\rho_a \left(-\frac{1}{\rho_a^{2k}} \sum_b V_b (\rho_a \rho_b)^k \mathbf{v}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \right). \quad (3.51)$$

Kuten gradientti aiemmin, nyt myös divergenssi saa diskreetin muodon

$$D_a^k \{ \mathbf{A}_b \} = -\frac{1}{\rho_a^{2k}} \sum_b V_b (\rho_a \rho_b)^k \mathbf{A}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab}. \quad (3.52)$$

Tällä tavalla diskreetti jatkuvuusyhtälö on

$$\frac{d\rho_a}{dt} = -\rho_a D_a^k \{ \mathbf{v}_b \}. \quad (3.53)$$

Koska käytimme edellä klassisen mekaniikan työkaluja, mekaaninen energia säilyy ja siksi sanomme, että operaattorit \mathbf{G}^k ja D^k ovat variationaalisesti yhteensopivat ja niiden käyttäminen takaa liikemäärän ja massan säilymisen myös diskreetissä tapauksessa. Tämä yhteensopivuus näkyy myös siten, että operaattoreiden symmetrisyysominaisuudet ovat juuri halutut.

Operaattoreissa esiintyvä k on mielivaltainen, ja valitsemalla $k = 1$ saamme operaattorit

$$\begin{cases} D_a^1 \{ \mathbf{A}_b \} = -\frac{1}{\rho_a} \sum_b m_b \mathbf{A}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} \\ \mathbf{G}_a^1 \{ A_b \} = \rho_a \sum_b m_a m_b \left(\frac{A_a}{\rho_a^2} + \frac{A_b}{\rho_b^2} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab}. \end{cases} \quad (3.54)$$

Edellä oleva tarjoaa meille siis elegantin tavan approksimoida divergenssejä ja gradientteja simulaatiossamme.

Seuraavaksi meidän on johdettava jokin muoto diskreetille Laplacen operaattorille. Dissipatiivisia vuorovaikutuksia sisältävälle systeemille emme voi kirjoittaa Lagrangen funktiota ja siten emme myöskään voi käyttää yllä olevaa proseduuria. Laplacen operaattorille onkin monta erilaista diskreettiä approksimaatiota, joista johdamme seuraavaksi yhden.

3.3.2 Laplacen operaattori

Dissipaatiot ovat simulaatioissa hyödyllisiä kahdesta syystä. Ensinnäkin, viskoottisten systeemin kuvaileminen ilman dissipaatioita on tietenkin mahdotonta, mutta toiseksi dissipaatio myös vakauttaa simulaatiota pienentämällä systeemin sisäisiä liikemääräeroja. Näin ollen systeemissä mahdollisesti esiintyvät aallot vaimenevat ajan kuluessa. Alunperin viskoottinen vuorovaikutus lisättiinkin SPH:hon juurikin vakauttamaan systeemiä, mutta voimme aivan hyvin käsitellä dissipatiivisia vuorovaikutuksia juurikin viskositeetin aiheuttamina, jolloin emme menetä fysikaalisia perusteita, mutta saavutamme samat hyödyt.

Yksinkertaisimmillaan voisimme kirjoittaa diskreetin Laplacen operaattorin muodossa

$$(\nabla^2 A)_a \approx \sum_b V_b A_b \nabla^2 W_{ab}, \quad (3.55)$$

mutta tällöin suure A ei säily, koska $A_b \nabla^2 W_{ab}$ ei ole antisymmetrinen hiukkasten a ja b vaihdossa. Lisäksi vuon merkki saattaa muuttua vääräksi, koska ytimen toinen derivaatta voi vaihtaa merkkiä. Laplacen operaattori liittyy dissipatiivisiin vuorovaikutuksiin ja niissä suureen pitää siirtyä aina korkeammasta arvosta matalampaan.

Jos taas kirjoitamme Laplacen jatkuvan muodon $\nabla^2 \mathbf{A} = \nabla \cdot (\nabla \otimes \mathbf{A})$ mukaisesti

$$(\nabla^2 \mathbf{A})_a \approx D_a^k \{ \mathbf{G}_b^k \{ A_c \} \} \quad (3.56)$$

käyttäen diskreettejä operaattoreita (3.46) ja (3.52), joudumme laskemaan aikavaativuodeltaan $\Theta(n^2)$ summan, mikä ei ole käyttökelpoinen lähestymistapa simulaation toteutuksen kannalta, koska tämä summaus suoritetaan jokaiselle hiukkaselle jokaisella aika-askeleella.

Sen sijaan approksimoimme sisempää operaattoria lineaarisesti kuten Violeau [20]. Jotta käyttämämme operaattori toimisi myös epänewtonisille nesteille, olkoon \mathbf{A} vektorikenttä ja $J_{\mathbf{A}}$ tätä kenttää vastaava diffuusiokerroin. Arvioimme vektoria

$$\nabla \cdot (J_{\mathbf{A}} \nabla \otimes \mathbf{A}) \quad (3.57)$$

pisteessä a . Tulemme käyttämään gradientille $(\nabla \otimes \mathbf{A})_a$ arviota, joka on symmetrinen. Divergenssin arvioimiseksi emme käytä edellisen kappaleen operaattoria, koska tällöin diskreetti Laplacen operaattorimme olisi symmetrinen. Antisymmetrisen divergenssin saamme approksimoimalla muotoa

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot \left(\rho^k \frac{\mathbf{A}}{\rho^k} \right) = \rho^k \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{A}}{\rho^k} \right) - \frac{\mathbf{A}}{\rho^k} \cdot \nabla (\rho^k). \quad (3.58)$$

Kun sijoitamme tähän approksimaatiot (3.35), saamme

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{A}_a &\approx \rho_a^k \sum_b V_b \frac{\mathbf{A}_b}{\rho_b^k} W'_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab} - \frac{\mathbf{A}_a}{\rho_a^k} \sum_b V_b \rho_b^k W'_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab} \\ &= \sum_b V_b \frac{\rho_a^{2k} \mathbf{A}_b - \rho_b^{2k} \mathbf{A}_a}{(\rho_a \rho_b)^k} W'_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab}.\end{aligned}\quad (3.59)$$

Tällöin

$$(\nabla \cdot (J_{\mathbf{A}} \nabla \otimes \mathbf{A}))_a \approx \sum_b V_b \frac{\rho_a^{2k} J_{\mathbf{A},b} (\nabla \otimes \mathbf{A})_b - \rho_b^{2k} J_{\mathbf{A},a} (\nabla \otimes \mathbf{A})_a}{(\rho_a \rho_b)^k} W'_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab}.\quad (3.60)$$

Arvioimme vektorikenttää \mathbf{A} sen Taylor-kehityksellä pisteen a ympäristössä

$$\mathbf{A}_b = \mathbf{A}_a - (\nabla \otimes \mathbf{A})_a \cdot \mathbf{r}_{ab} + O(r_{ab}^2),\quad (3.61)$$

missä $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$ ja $r_{ab} = \|\mathbf{r}_{ab}\|$. Tästä saamme ratkaistua

$$(\nabla \otimes \mathbf{A})_a \cdot \mathbf{e}_{ab} \approx \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}}.\quad (3.62)$$

Koska $\mathbf{e}_{ab} = -\mathbf{e}_{ba}$, niin myös

$$(\nabla \otimes \mathbf{A})_b \cdot \mathbf{e}_{ab} \approx -\frac{\mathbf{A}_{ba}}{r_{ba}} = \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}}.\quad (3.63)$$

Tämä approksimaatio gradientille on symmetrinen hiukkasten a ja b vaihdossa, joten antisymmetrinen divergenssi on todellakin tarpeen. Sijoitamme nämä yhtälöön (3.60), jolloin

$$(\nabla \cdot (J_{\mathbf{A}} \nabla \otimes \mathbf{A}))_a \approx \sum_b V_b \frac{\rho_a^{2k} J_{\mathbf{A},b} + \rho_b^{2k} J_{\mathbf{A},a}}{(\rho_a \rho_b)^k} \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} =: \mathbf{L}_a^k \{J_{\mathbf{A},b}, \mathbf{A}_b\}.\quad (3.64)$$

Näin saamme erään muodon diskreetille Laplacen operaattorille. Virtausmekaniikan tapauksessa vektorikenttä on nopeuskenttä ja sen diffuusiokerroin on viskositeetti, joten

$$\mathbf{L}_a^k \{\mu_b, \mathbf{v}_b\} = \sum_b V_b \frac{\rho_a^{2k} \mu_b + \rho_b^{2k} \mu_a}{(\rho_a \rho_b)^k} \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab},\quad (3.65)$$

joka newtonisen nesteen ja $k = 1$ tapauksessa yksinkertaistuu vielä muotoon

$$\mu \mathbf{L}_a^k \{\mathbf{v}_b\} = \rho_a \mu \sum_b m_b \left(\frac{1}{\rho_a^2} + \frac{1}{\rho_b^2} \right) \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab}.\quad (3.66)$$

Diskreetille Laplacen operaattorille on muitakin muotoja. Morris ym. [9] käyttävät Laplacen operaattorina hyvin samankaltaista

$$\mathbf{L}_a \{J_{\mathbf{A},b}, \mathbf{A}_b\} = \sum_b \frac{m_b(J_{\mathbf{A},b} + J_{\mathbf{A},a})}{\rho_b} \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} \quad (3.67)$$

ja Violeau [20] esittelee myös muodon

$$\mathbf{L}_a \{J_{\mathbf{A},b}, \mathbf{A}_b\} = \sum_b V_b \bar{J}_{\mathbf{A},ab} ((d+2)(\mathbf{v}_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab})\mathbf{e}_{ab} + \mathbf{v}_{ab}) W'_{ab}, \quad (3.68)$$

missä \bar{A}_{ab} on suureiden A_a ja A_b keskiarvo. Kokoonpuristumattomalle ja newtoniselle virtaukselle edelliset ovat

$$\mu \mathbf{L}_a \{\mathbf{v}_b\} = 2\mu \sum_b V_b \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} \quad (3.69)$$

ja

$$\mu \mathbf{L}_a \{\mathbf{v}_b\} = 2\mu(d+2) \sum_b V_b \frac{\mathbf{v}_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} \mathbf{e}_{ab}. \quad (3.70)$$

Diskreetit Laplacen operaattorit (3.66) ja (3.69) ovat kerrointa

$$\frac{\rho_a^2 + \rho_b^2}{2\rho_a\rho_b} \quad (3.71)$$

lukuunottamatta samat. Jos tiheydet ovat lähellä toisiaan, kuten heikosti kokoonpuristumattomalle nesteelle on, on tämä kerroin lähellä yhtä. Näin ollen pienillä tiheusvaihteluilla operaattorit (3.66) ja (3.69) oletettavasti antavat hyvin samanlaisia tuloksia.

4 Ytimen leikkautuminen ja reunojen käsittely

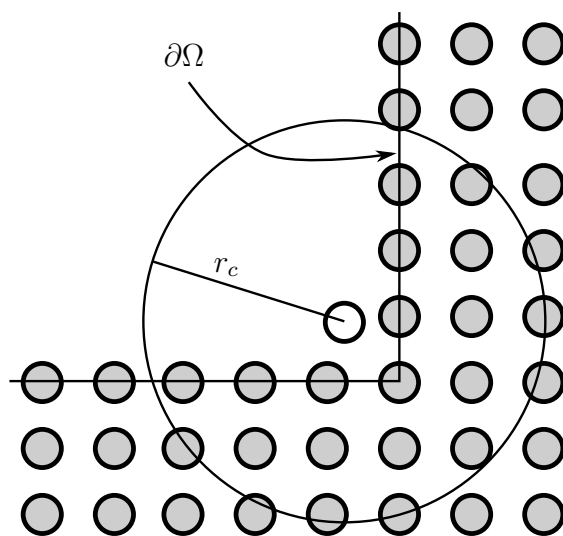
Suureiden laskemista virtausalueen reunalla, kuten putken seinämät tai jokin este, emme voi tehdä rajoittamalla laskenta-aluetta sisältämään ainoastaan alueet, joissa neste virtaa, koska tällöin tapahtuu ytimen leikkautuminen, joka huonontaa algoritmin tarkkuutta huomattavasti. Meidän on siis keksittävä tapa ottaa virtausalueen reunat huomioon siten, että saamme virtauksemme toteuttamaan kappaleen 2.3 reuna-ehdot.

Reunojen käsittely on jaettu karkeasti kahteen luokkaan. Ensimmäisen luokan ratkaisuihin laitamme virtausalueen reunoille hiukkasia, jotka estävät nestehiukkasten pääsyn reunojen sisään ja toisen luokan ratkaisuihin laskemme reunan ulkopuolelle jäävän ytimen arvon jotenkin. Tutkimme seuraavaksi molempien luokan tapauksia keskittyen erityisesti renormalisaatioon sen eleganttiuden vuoksi.

4.1 Haamuhiukkaset

Haamuhiukkaset ovat tapa käsitellä virtausalueen reunalla $\partial\Omega$ syntyvä ytimen leikkautuminen asettamalla reunan ulkopuolelle hiukkasia kuvan 5 mukaisesti. Merkitään nestehiukkasten joukkoa \mathcal{F} ja haamuhiukkasten joukkoa \mathcal{G} .

Ensimmäisessä variaatiossa reunalla olevien hiukkaset otetaan huomioon sekä jatkuvuus- että liikeyhtälössä eli summaus näissä yhtälöissä on joukon $\mathcal{F} \cup \mathcal{G}$ yli. Haamuhiukkasten omat suureet eivät lainkaan kehity ajassa. Tyypillisesti tällöin haamuhiukkasten tiheydeksi asetamme referenssitheyden ρ_0 ja paineeksi vastaavasti



Kuva 5. Reunan käsittely haamuhiukkasilla. Harmaat hiukkaset ovat reunahiukkasia ja valkoinen on nestehiukkanen.

p_0 .

Toinen variaatio on muuten samanlainen kuin ensimmäinen, mutta siinä haamuhiukkasten tiheys ja siten myös paine kehittyvät ajassa jatkuvuusyhtälön mukaisesti. Haamuhiukkasten jatkuvuusyhtälössä summaus on myös joukon $\mathcal{F} \cup \mathcal{G}$ yli.

Molemmissa variaatioissa asetamme reunoille niin monta kerrosta haamuhiukkasia, että konvoluutioydin ei leikkaudu missään tilanteessa. Jos ytimen säde on kolme kertaa hiukkasten välinen keskimääräinen etäisyys, riittää asettaa reunoille neljä kerrosta haamuhiukkasia.

Haamuhiukkaset estävät nestehiukkasten reunanläpäisyn ja niillä saadaan aikaan no-slip-reunaehto. Haamuhiukkasten myötä laskennallinen taakka ja muistinkäyttö kasvavat, joskin yleensä melko maltillisesti haamuhiukkasten määrän ollessa pienekö verrattuna nestehiukkasten määrään. Lisäksi, koska haamuhiukkasia on oltava useampi kerros, on terävien kärkien tai ohuiden kiinteiden kappaleiden, kuten kuidut, esittäminen niiden avulla hankalaa. Toisaalta taas simulaation toteutus haamuhiukkasten avulla on hyvin yksinkertaista, sillä simulaatiossa ei tarvitse olla varsinaista tietoa geometriasta, haamuhiukkasten asettelu sopiville paikoille riittää.

Haamuhiukkasista on erilaisia variaatioita, joista joissakin virtausalueen reunalla oleva kerros käyttäytyy eri tavalla kuin reunan ulkopuolella olevat hiukkaset [24], ja toisissa haamuhiukkasten suureiden päivitys ei tapahdukaan suoraan jatkuvuusyhtälöstä vaan esimerkiksi ekstrapoloimalla nestehiukkasista [25].

4.2 Peilatut hiukkaset

Hiukkasten peilaaminen perustuu samaan ideaan kuin haamuhiukkaset, mutta toteutus on hieman erilainen. Jos peilaamme jokaisella aika-askeleella reunan lähellä olevat nestehiukkaset reunan toiselle puolelle ja käännämme näiden peilattujen hiukkasten seinän normaalin suuntaisen nopeuden vastakkaiseksi, on reunan toisella puolella jokaisella aika-askeleella hiukkasia, jotka vuorovaikuttavat nestehiukkasten kanssa sekä jatkuvuus- että liikeyhtälössä. Nämä peilatut hiukkaset \mathcal{M} aiheuttavat reunan lähellä oleville nestehiukkasille tiheydenmuutoksen samaan tapaan kuin haamuhiukkaset. Tämä tiheydenmuutos estää nestehiukkasen reunanläpäisyn. Lisäksi, kun käännämme myös seinän suuntaisen nopeuskomponentin, nestehiukkasen ja peilattujen hiukkasen välinen viskoottinen vuorovaikutus antaa meille no-slip-reunaehdon. Siis peilatuille hiukkasille on asetettava $\mathbf{v}_{m,a} = -\mathbf{v}_a$.

Peilattuja hiukkasten ei kuitenkaan tarvitse simulaatiossa olla oikeasti olemassa, vaan voimme selvittää niiden vaikutuksen nestehiukkasiin ilmankin. Tämän vuoksi peilattujen hiukkasten käyttäminen on muistinkäytön kannalta tehokkaampaa. Toisin kuin haamuhiukkasten kanssa, systeemin geometria on nyt välttämätön tieto.

Jos reuna on kaareva, tulee peilattuja hiukkasia joko tiheämpään tai harvempaan kuin nestehiukkasia riippuen kaarevuuden suunnasta. Tätä virhettä voimme korjata laskemalla nestehiukkasen ja peilatun hiukkasen etäisyyden reunan tangenttitasoon ja korjaamalla vuorovaikutuksen voimakkuutta näiden etäisyyksien suhteella [9].

4.3 Repulsiivinen potentiaali

Ehkäpä intuitiivisin tapa estää nestehiukkasten reunanläpäisy on asettaa reunalle repulsiivinen potentiaali, joka työntää hiukkasia pois reunalta. Tämän potentiaali voi olla esimerkiksi Lennard-Jones-potentiaalin kaltainen [26], jolloin sen aiheuttama voima on

$$\mathbf{f}^{\text{LJ}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} D \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{P_1} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{P_2} \right) \frac{\mathbf{r}}{r^2} & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0, \end{cases} \quad (4.1)$$

missä $P_1 > P_2$, esimerkiksi $P_1 = 4$ ja $P_2 = 2$. Potentiaalin etäisyysskaalaksi voimme asettaa esimerkiksi $r_0 = \delta r$ eli nestehiukkasten keskimääräisen etäisyyden. Tällainen voima on repulsiivinen kaikilla etäisyyksillä.

Potentiaali (4.1) asettaminen reunoille estää hiukkasten reunanläpäisyn, mutta emme vielä saavuta viskoottisen virtauksen np-slip-reunaehto. Voisimme luultavasti korjata potentiaalia ottamaan huomioon nopeuseron, mutta voimme korjata tämän myös asettamalla reunalle kerros hiukkasia $e \in \mathcal{E}$, jotka kohdistavat nestehiukkasiin a potentiaalin aiheuttaman voiman $\mathbf{f}_{e \rightarrow a}^{\text{LJ}}$ ja lisäksi hiukkasten välisen viskoottisen voiman.

Parametrin D säätäminen on tämän ratkaisun ongelma. Tietämättä virtauskenttää etukäteen tämän parametrin tietäminen tarkkaan on mahdotonta, joten lähes väistämättä reunojen lähellä syntyy epäfysikaalista liikettä. Dynaamisissa tilanteissa nämä voimat voivat olla pieniä nestehiukkasten välisiin voimiin nähden, mutta hydrostaattisissa tilanteissa ne dominoivat nestehiukkasten välisten voimien ollessa pieniä.

4.4 Ytimen renormalisointi

Renormalisaatiossa korjaamme ytimen leikkautumisesta aiheutuvaa virhettä renormalisoimalla ytimen eli korjaamalla ytimen efektiivistä pinta-alaa. Tämä saa lopulta aikaan reunalle samantapaisen potentiaalin kuin ylimääräisen potentiaalin asettaminen reunalle. Renormalisaatio on kuitenkin elegantimpi tapa, sillä siinä reunan lähellä esiintyvä kontaktivoima syntyy variaatiolaskennan seurauksena ja systeemin liikemäärä säilyy ilman ylimääräistä parametria ja sen säätämistä. Ensimmäisenä renormalisaation esittelivät Kulasegaram ym. [27].

Kun olemme lähellä laskenta alueen reunaa, $\Omega_a \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, joten jatkuvan approksimaation

$$\langle A \rangle(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}} \cap \Omega} A(\mathbf{x}') W_h(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|) d^d \mathbf{x}' \quad (4.2)$$

tarkkuus kärsii, kuten osoitimme kappaleessa 3.1. Tämän vuoksi renormalisoimme ytimen, eli korjaamme jatkuvan approksimaation muotoon

$$\langle A \rangle^\gamma(\mathbf{x}) = \frac{\langle A \rangle(\mathbf{x})}{\gamma(\mathbf{x})}, \quad (4.3)$$

missä renormalisaatiokerroin

$$\gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}} \cap \Omega} W_h(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|) d^d \mathbf{x}'. \quad (4.4)$$

Näin voimme kompensoida ytimen leikkautumista, mikä näkyy selvästi kuvassa 6, jossa on sekä tavallinen että renormalisoitu jatkuva approksimaatio esimerkkiskalaarikentälle. Huomaamme, että lähellä reunaa tavallisen approksimaation tarkkuus on todella huono. Renormalisoidun ytimen tarkkuus sen sijaan on hyvä kaikkialla. Kaukana reunasta $\gamma(\mathbf{x}) = 1$ ytimen normalisoinnin vuoksi ja siis alkuperäinen ja renormalisoitu approksimaatio yhtyvät.

4.4.1 Renormalisoidut jatkuvuus- ja liikeyhtälö

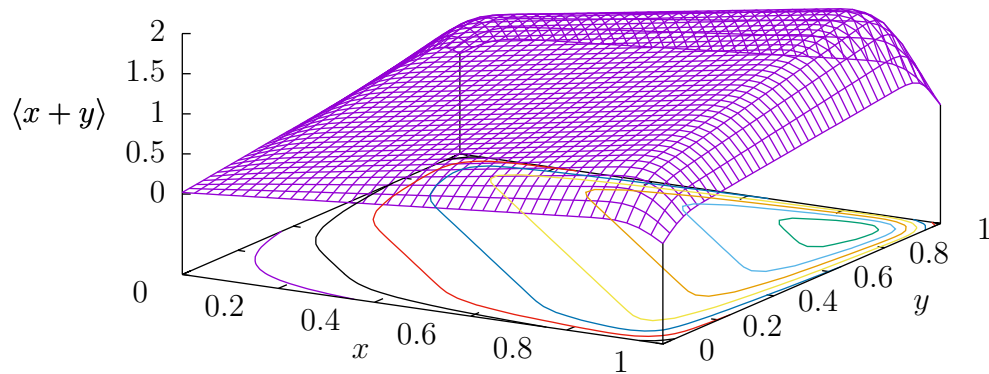
Seuraavaksi johdamme diskreetit jatkuvuus- ja liikeyhtälön renormalisoidussa skeemassa. Lähdemme liikkeelle diskreetistä approksimaatiosta

$$\langle A_b \rangle_d = \sum_b V_b A_b W_{ab}, \quad (4.5)$$

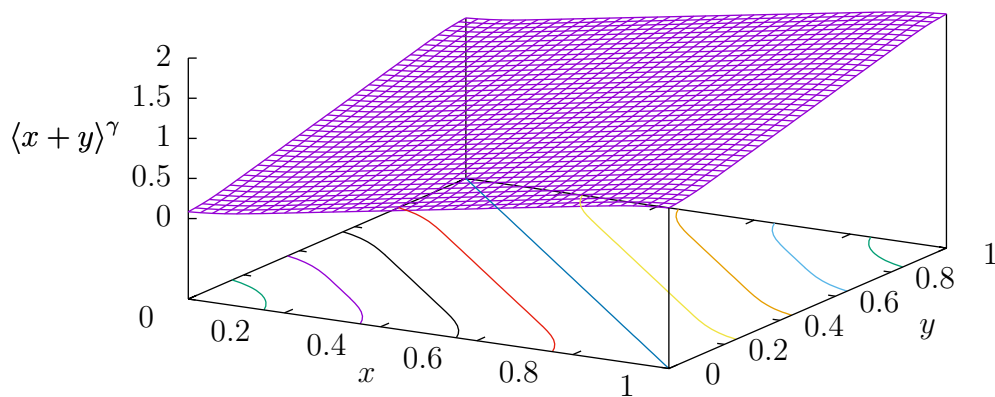
jonka renormalisoimme laskemalla

$$\langle A_b \rangle_d^\gamma = \frac{1}{\gamma_a} \sum_b V_b A_b W_{ab} \quad (4.6)$$

analogisesti jatkuvan tapauksen kanssa. Renormalisaatiokerroin $\gamma_a = \gamma(\mathbf{r}_a)$ on diskreetissäkin tapauksessa jatkuvassa muodossa, sillä sen diskretisoiminen reunojen lähellä ei anna kovin tarkkoja arvoja. Tämä johtuu mahdollisesti siitä, että lähimpänä reunaa olevien hiukkasten ja reunan väliin jää hiukkaseton kaistale, jota γ :n diskreetti muoto ei pysty ottamaan huomioon, mutta jatkuva muoto pystyy.



(a) Renormalisoimaton jatkuva approksimaatio



(b) Renormalisoitu jatkuva approksimaatio

Kuva 6. Tavallinen ja renormalisoitu funktion $x + y$ jatkuva approksimaatio laskenta-alueessa $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ käyttäen Wendland-ydintä, jolle $h = 0.1$. Kuvien pohjilla olevista tasa-arvokäyristä näkyy, että kummassakin tapauksessa approksimaatio on hyvä kaukana reunasta ja renormalisoidussa tapauksessa suhteellisen hyvä vielä reunallakin.

Nyt johdamme renormalisoidut divergenssin ja gradientin käyttäen samaa proseduuria kuin kappaleessa 3.3.1. Tiheyden renormalisoitu SPH-aproksimaatio on

$$\rho_a \approx \langle \rho_a \rangle_d^\gamma = \frac{1}{\gamma_a} \sum_b m_b W_{ab}. \quad (4.7)$$

Kertomalla γ_a :lla ja derivoimalla ajan suhteen saamme

$$\gamma_a \dot{\rho}_a + \dot{\gamma}_a \rho_a = \sum_b m_b \dot{W}_{ab}, \quad (4.8)$$

joka ketjusäännön mukaan on

$$\gamma_a \dot{\rho}_a + \dot{\gamma}_a \rho_a = \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab}. \quad (4.9)$$

Koska γ_a riippuu paikkavektorista \mathbf{r}_a , joka puolestaan riippuu ajasta, on jälleen ketjusäännön mukaan

$$\dot{\gamma}_a = \frac{\partial \gamma_a}{\partial \mathbf{r}_a} \dot{\mathbf{r}}_a = \nabla \gamma_a \cdot \mathbf{v}_a. \quad (4.10)$$

Tämän vuoksi renormalisoitu jatkuvuusyhtälö on

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \frac{1}{\gamma_a} \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} - \frac{\rho_a \nabla \gamma_a \cdot \mathbf{v}_a}{\gamma_a}. \quad (4.11)$$

Minkälainen on vektorin $\nabla \gamma_a$ luonne? Määritelmänsä mukaan se on renormalisaatiokertoimen γ_a gradientti pisteen \mathbf{r}_a suhteen. Se siis kertoo ytimen efektiivisen pinta-alan muutoksesta. Lausekkeen sille voimme selvittää seuraavasti. Olkoon \mathbf{a} jokin vakiovektori. Tällöin

$$\mathbf{a} \cdot \nabla \gamma_a \approx \mathbf{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} \int_{\Omega_a \cap \Omega} W_h(\|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}\|) d^d \mathbf{r} = \mathbf{a} \cdot \int_{\Omega_a \cap \Omega} \nabla_a W_h(\|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}\|) d^d \mathbf{r}. \quad (4.12)$$

Muuttujanvaihdoilla $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}$ saamme edellisen muotoon

$$\int_{\Omega_0 \cap \Omega'} \nabla W_h(\|\mathbf{r}'\|) \cdot \mathbf{a} d^d \mathbf{r}', \quad (4.13)$$

missä Ω' on muunnettujen koordinaattien koko laskenta-alue. Tähän voimme käyttää Gaussin divergenssilauseetta ja muuntaa takaisin alkuperäiseen koordinaatistoon, jolloin integraali on

$$\mathbf{a} \cdot \int_{\Sigma_a} W_h(\|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}\|) \mathbf{n}(\mathbf{r}) d^{d-1} \mathbf{r}, \quad (4.14)$$

missä $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ on laskenta-alueen reunan yksikkönormaalivektori ja $\Sigma_a = \Omega_a \cap \partial\Omega$. Koska \mathbf{a} on mielivaltainen vakiovektori, voimme päätellä

$$\nabla\gamma_a = \int_{\Sigma_a} W_h(\|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}\|)\mathbf{n}(\mathbf{r}) d^{d-1}\mathbf{r}. \quad (4.15)$$

Jos seinämä on taso, on sen normaalivektori vakio ja siten $\nabla\gamma_a$ on suunnattu kohtisuorasti seinästä poispäin, koska ydin ja differentiaalinen ala $d^{d-1}\mathbf{r}$ ovat positiivisia. Näin ollen jatkuvuusyhtälön (4.11) jälkimmäinen termi ei vaikuta hiukkasen tiheyteen mitenkään, jos sen nopeus on seinämän suuntaista ja kasvattaa sitä, jos nopeus on seinämää kohti. Tämä efekti estää nestehiukkasten reunanläpäisyä.

Voimme johtaa myös diskreetin gradientin käyttäen systeemin liikeyhtälöitä ja tiheyden SPH-approksimaatiota, kuten teimme kappaleessa 3.3.1. Eulerin–Lagrangen liikeyhtälöiden toinen termi on

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_a} = -\frac{\partial E_p}{\partial \mathbf{r}_a} = -\frac{\partial E_{\text{int}}}{\partial \mathbf{r}_a} - \frac{\partial E_{\text{ext}}}{\partial \mathbf{r}_a} = -\sum_b m_b \frac{p_b}{\rho_b^2} \frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} + m_a \mathbf{g}. \quad (4.16)$$

Tiheyttä approksimoimme yhtälön (4.7) mukaan, eli

$$\rho_b = \frac{1}{\gamma_b} \sum_c m_c W_{bc}. \quad (4.17)$$

Sijoittamalla tämä saamme derivaataksi

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} \left(\frac{1}{\gamma_b} \sum_c m_c W_{bc} \right). \quad (4.18)$$

Koska derivointi osuu vain osaan summauksien termeistä riippuen indekseistä a , b ja c , tämä sievenee Kroeneckerin deltaa käyttämällä muotoon

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial \mathbf{r}_a} = \frac{1}{\gamma_b} m_a \nabla_a W_{ba} + \frac{\delta_{ab}}{\gamma_a} \sum_c m_c \nabla_a W_{ac} - \frac{\delta_{ab}}{\gamma_a^2} \sum_c m_c W_{ac} \nabla \gamma_a. \quad (4.19)$$

Sijoittamalla liikeyhtälön termiin (4.16) käyttäen ytimen gradientin symmetriaominaisuuksia sekä tekemällä indeksien nimenvaihtoja saamme

$$-\frac{\partial E_{\text{int}}}{\partial \mathbf{r}_a} = -\sum_b m_a m_b \left(\frac{p_a}{\gamma_a \rho_a} + \frac{p_b}{\gamma_b \rho_b} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} + m_a \frac{p_a}{\gamma_a^2 \rho_a^2} \nabla \gamma_a \sum_b m_b W_{ab}. \quad (4.20)$$

Tämän yhtälön oikean puolen jälkimmäinen termi sisältää tiheysapproksimaation (4.7), joten

$$m_a \frac{p_a}{\gamma_a^2 \rho_a^2} \nabla \gamma_a \sum_b m_b W_{ab} = m_a \frac{p_a}{\gamma_a \rho_a} \nabla \gamma_a. \quad (4.21)$$

Näin ollen systeemin liikeyhtälöt ovat

$$m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = - \sum_b m_a m_b \left(\frac{p_a}{\gamma_a \rho_a} + \frac{p_b}{\gamma_b \rho_b} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} + m_a \frac{p_a}{\gamma_a \rho_a} \nabla \gamma_a + m_a \mathbf{g}. \quad (4.22)$$

Kuten aiemminkin, diskreetit divergenssi ja gradientti ovat jatkuvuus- ja liikeyhtälöissä. Siis saamme renormalisoidut operaattorit

$$\begin{cases} D_a^{\gamma,1} \{ \mathbf{A}_b \} = - \frac{1}{\gamma_a \rho_a} \sum_b m_b \mathbf{A}_{ab} \cdot W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} + \frac{\nabla \gamma_a \cdot \mathbf{A}_a}{\gamma_a} \\ \mathbf{G}_a^{\gamma,1} \{ A_b \} = \rho_a \sum_b m_b \left(\frac{A_a}{\gamma_a \rho_a^2} + \frac{A_b}{\gamma_b \rho_b^2} \right) W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} - \frac{A_a}{\gamma_a} \nabla \gamma_a. \end{cases} \quad (4.23)$$

Näiden operaattoreiden käyttäminen takaa massan ja liikemäärän säilymisen myös laskenta-alueen reunalla ilman ylimääräisiä parametreja tai hiukkasia. Tosin tässäkin tavassa virtausalueen geometrian tunteminen on välttämätöntä. Monimutkaisille reunoille renormalisaatiokertoimen γ ja sen gradientin laskeminen voi olla vaikeaa. Erilaisia tapoja tähän käsittelemme kappaleessa A.

4.4.2 Renormalisoitu Laplacen operaattori

Viskoottisille nesteille tarvitsemme myös Laplacen operaattoria. Johdamme sen samalla tavalla kuin kappaleessa 3.3.2 parametrille $k = 1$. Tällöin

$$\nabla \cdot (J_{\mathbf{A}} \nabla \otimes \mathbf{A})_a \approx \frac{\rho_a}{\gamma_a} \sum_b m_b \left(\frac{J_{\mathbf{A},a}}{\rho_b^2} + \frac{J_{\mathbf{A},b}}{\rho_a^2} \right) \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} - \frac{J_{\mathbf{A},a} \nabla \gamma_a \cdot (\nabla \otimes \mathbf{A})_a}{\gamma_a}. \quad (4.24)$$

Lisäksi approksimoimme vektorikentän \mathbf{A} gradienttia Taylor-kehityksen avulla

$$(\nabla \otimes \mathbf{A})_a \cdot \mathbf{r}_{aw} \approx \mathbf{A}_{aw}, \quad (4.25)$$

missä $\mathbf{A}_{aw} = \mathbf{A}_a - \mathbf{A}_w$ ja \mathbf{A}_w on kentän arvon seinämällä. Gradientti $\nabla \gamma_a$ ja normaalivektori \mathbf{n} ovat yhdensuuntaiset ja reunoille, joiden kaarevuus on pieni, myös \mathbf{r}_{aw} on lähes yhdensuuntainen niiden kanssa. Täten

$$\mathbf{r}_{aw} \approx \nabla \gamma_a \frac{r_{aw}}{\|\nabla \gamma_a\|}. \quad (4.26)$$

Yhdistämällä edelliset yhtälöt saamme

$$\nabla \gamma_a \cdot (\nabla \otimes \mathbf{A})_a \approx \frac{\|\nabla \gamma_a\| \mathbf{A}_{aw}}{r_{aw}}. \quad (4.27)$$

Näin saamme määriteltyä Laplacen operaattorin

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (J_{\mathbf{A}} \nabla \otimes \mathbf{A})_a &\approx \frac{\rho_a}{\gamma_a} \sum_b m_b \left(\frac{J_{\mathbf{A},a}}{\rho_b^2} + \frac{J_{\mathbf{A},b}}{\rho_a^2} \right) \frac{\mathbf{A}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} - \frac{J_{\mathbf{A},a} \|\nabla \gamma_a\| \mathbf{A}_{aw}}{r_{aw} \gamma_a} \\ &=: \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{J_{\mathbf{A},b}, \mathbf{A}_b\}.\end{aligned}\quad (4.28)$$

Newtonisen nesteen nopeus- ja viskositeetikentille Laplacen operaattori on siis

$$\mu \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} = \frac{\mu \rho_a}{\gamma_a} \sum_b m_b \left(\frac{1}{\rho_a^2} + \frac{1}{\rho_b^2} \right) \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} - \frac{\mu \|\nabla \gamma_a\| \mathbf{v}_{aw}}{r_{aw} \gamma_a}.\quad (4.29)$$

Jos renormalisoimme samman tapaan muut Laplacen operaattorit (3.69) ja (3.70), saamme

$$\mu \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} = \frac{2\mu}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} - \frac{\mu \|\nabla \gamma_a\| \mathbf{v}_{aw}}{r_{aw} \gamma_a}.\quad (4.30)$$

ja

$$\mu \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} = \frac{2\mu(d+2)}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{\mathbf{v}_{ab} \cdot \mathbf{e}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} \mathbf{e}_{ab} - \frac{\mu \|\nabla \gamma_a\| \mathbf{v}_{aw}}{r_{aw} \gamma_a}.\quad (4.31)$$

Kappaleessa 5.5 valitsemme numeerisen aineiston perusteella Lalacen operaattorin näiden kolmen joukosta.

Numeerisen stabiiliuden vuoksi voimme asettaa

$$\frac{1}{r} \leftarrow \frac{r}{(r + \eta)^2},\quad (4.32)$$

missä η on jokin etäisyyteen r pieni vakio, esimerkiksi $\eta = 0,1h$, kun $r = r_{ab}$ tai $r = r_{aw}$.

Toinen tapa approksimoida gradienttia $(\nabla \otimes \mathbf{A})_a$ on käyttää operaattoria $\mathbf{G}^{\gamma,1}$ (4.23), mutta tällöin viskoottinen vuorovaikutus seinämän lähellä ei vaikuttaisi riippuvan lainkaan seinämän nopeudesta. Kolmas tapa on käyttää leikkausnopeutta [28].

Näin siis renormalisoimalla tiheysapproksimaatio saamme johdettua jatkuvuus- ja liikeyhtälön

$$\begin{cases} \frac{d\rho_a}{dt} = -\rho_a \mathbf{D}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} \\ \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = -\frac{1}{\rho_a} \mathbf{G}_a^{\gamma,1} \{p_b\} + \nu \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} + \mathbf{g}, \end{cases}\quad (4.33)$$

jotka toimivat myös virtausalueen reunoilla.

Ferrand ym. [28] mukaan renormalisoitujen liikeyhtälöiden ongelma on, että gradienttioperaattori ei ole vakiokentälle nolaa, siis $\mathbf{G}_a^{\gamma,1} \{1\} \neq 0$. Tämä aiheuttaa reunojen lähellä epäfysikaalista liikettä esimerkiksi tilanteessa, jossa koko systeemi on vakioisessa ylipaineessa. He ehdottavat tämän korjaamiseksi seuraavanlaista reunaehto.

4.5 Semi-analyttinen reunaehto

Semi-analyttisessä reunaehdossa [28] lähtökohtanamme on jälleen renormalisoitu SPH-approksimaatio, mutta tällä kertaa arvioimme kentän A gradienttia hieman toisella tavalla. Tällaisen approksimaation mukaan

$$\tilde{\mathbf{G}}_a^{\gamma,1} \{A_b, A_s\} = \frac{\rho_a}{\gamma_a} \sum_b m_b \left(\frac{A_a}{\rho_a^2} + \frac{A_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab} - \frac{\rho_a}{\gamma_a} \sum_s \rho_s \left(\frac{A_a}{\rho_a^2} + \frac{A_s}{\rho_s^2} \right) \nabla_a \gamma_{as}, \quad (4.34)$$

missä laskenta-alueen reuna on jaettu osiin s , joista jokaisella on vakiosuuntavektori \mathbf{n}_s ja ala Σ_s . Tämä approksimaatio on kaukana laskenta-alueen reunasta sama kuin renormalisoitu SPH-approksimaatio, mutta lähellä nämä eroavat toisistaan. Semi-analyttinen reunaehto antaa parempia tuloksia vakiokentälle, mutta se ei toteuta liikemäärän säilymistä [29].

4.6 Vapaasti liikkuvat kiinteät kappaleet

Jos haluamme osan reunoista olevan liikkuvia kiinteitä kappaleita, on meidän otettava huomioon nestehiukkasten reunahiukkasiin kohdistama voima sekä reunojen vaikutus toisiinsa.

Nesteen kiinteään kappaleeseen kohdistama voima on Newtonin kolmannen lain mukaan kiinteän kappaleen nestehiukkasiin kohdistamien voimien vastavektorien summa. Näin voimme laskea kappaleeseen kohdistuvat momentit. Tällöin kiinteän kappaleen määrittelevä ehto sen hiukkasten liikkumattomuudesta toistensa suhteen yhdessä voimien ja momenttien kanssa antavat kappaleelle kiihtyvyyden ja pyörimismäärän muutokset. Tällainen käsittely ei ole riippuvainen käytetystä reunankäsittelystä, kunhan pystymme määrittämään, mikä kohta reunassa vuorovaikuttaa nestehiukkasen kanssa. Tällaisessa käsittelyssä pyörimismäärä ei säily eksaktisti, mutta approksimatiivisesti kyllä [20].

5 Erikoistyö – virtaussimulaation toteutus

Toteuttaessamme SPH-simulaatiota avaruuden lisäksi myös aika on diskretisoitava ja vuorovaikutusten laskeminen on tehtävä käytännölliseksi. Ensinnäkin, nestehiukasten välisiä vuorovaikutuspareja on $N^2/2 \in \Theta(N^2)$, eikä näiden kaikkien laskeminen tarpeellista. Koska vuorovaikutuksella on maksimietäisyys r_c , voimme pienentää laskemiemme vuorovaikutusten määrän lineaariseksi. Tämän voimme toteuttaa esimerkiksi linkitetyillä solulistoilla tai Verlet'n listoilla. Toisekseen, joissakin tilanteissa haluamme simuloida äärettömän kokoisia systeemejä, jolloin käytämme periodisia reunaehtoja.

5.1 Aika-askellus

Jos voimme kuvailla systeemiä Hamiltonin funktiolla, on systeemin aika-askellus mahdollista toteuttaa kanonisilla kuvauksilla [17]. Kanonisissa kuvauksissa Hamiltonin funktio ja faasiavaruuden tilavuusalkio säilyvät, joten energia säilyy ja systeemi on stabiili. Symplektinen aika-askellus on sellainen, jossa jokainen aika-askel on kanoninen kuvaus jonkin kertaluvun tarkkuuteen [30]. Toisaalta, kun haluamme kuvata viskoottista nestettä, ei systeemillä ole enää Hamiltonin funktiota, eivätkä perustelut symplektisen aika-askelluksen käyttämiseen enää päde. Toisaalta ei ole myöskään mitään syytä olla käyttämättä symplektistä aika-askellusta dissipatiivisille systeemeille.

Semi-implisiittinen Eulerin menetelmä

$$\begin{cases} \mathbf{v}_a^{m+1} &= \mathbf{v}_a^m + \mathbf{a}_a^m \delta t \\ \mathbf{r}_a^{m+1} &= \mathbf{r}_a^m + \mathbf{v}_a^{m+1} \delta t \\ \rho_a^{m+1} &= \rho_a^m + \dot{\rho}_a^{m+1} \delta t \end{cases} \quad (5.1)$$

on tarkkuudeltaan kertaluokkaa $O(\delta t)$ oleva symplektinen kuvaus ja Verletin menetelmä

$$\begin{cases} \mathbf{v}_a^{m+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_a^m + \mathbf{a}_a^m \frac{\delta t}{2} \\ \mathbf{r}_a^{m+1} &= \mathbf{r}_a^m + \mathbf{v}_a^{m+\frac{1}{2}} \delta t \\ \rho_a^{m+1} &= \rho_a^m + \dot{\rho}_a^{m+\frac{1}{2}} \delta t \\ \mathbf{v}_a^{m+1} &= \mathbf{v}_a^{m+\frac{1}{2}} + \mathbf{a}_a^{m+\frac{1}{2}} \frac{\delta t}{2} \end{cases} \quad (5.2)$$

on toisen kertaluokan (eli $O(\delta t^2)$) symplektinen menetelmä. Molemmat näistä menetelmistä ovat yksinkertaista toteuttaa, eivätkä ne ole laskennallisesti kovin vaativia SPH:ssa, sillä tiheysderivaatat ja kiihtyvyydet lasketaan ainoastaan kerran jokaisessa aika-askeleessa.

Korkeamman kertaluvun symplektisiä aika-askelluksia voimme kehittää käyttäen Baker–Campbell–Hausdorff-yhtälöä. Ainakin kertaluvun $O(\delta t^4)$ menetelmä on kehitetty [30].

5.1.1 Aika-askeleen pituus

Ajan diskretisaatio on toteutettava siten, että jokaisessa aika-askeleessa syntyvä virhe systeemin tilaan olisi mahdollisimman pieni. Näin ollen luonnollinen vaatimus ajan diskretisoinnille on, että systeemi pysyy stabiilina. Epästabiiliudella tarkoitamme systeemin suureiden kasvavaa epäfysikaalista oskillointia. Jotkin aika-askellusmenetelmät muuttuvat epästabiileiksi aika-askeleen kasvaessa liian suureksi. Toisaalta aika-askelta ei ole tarpeen pienentää liiaksi, koska tällöin simulaation laskennallinen intensiteetti kasvaa. Tahdomme löytää aika-askeleen, joka on tarpeeksi lyhyt pitääkseen systeemin stabiilina, mutta joka samalla on niin pitkä kuin mahdollista laskennan vaativuuden pienentämiseksi.

Aika-askeleen pituuden voimme määrittää Courant–Friedrichs–Lewy-ehdolla eli CFL-ehdolla [20], joka SPH:n tapauksessa riippuu virtausnopeuden maksimista, gravitaatiokiihtyvyydestä ja ytimen leveydestä siten, että

$$\delta t = C \frac{h}{c_0}, \quad (5.3)$$

missä vakio $C \leq 0,4$ [31] ja

$$c_0 = 10 \max \left(v_{\max}, \sqrt{gh} \right) \quad (5.4)$$

on numeerinen äänennopeus. Jos gravitaation vaikutus systeemiin on pieni, on

$$c_0 = 10v_{\max}. \quad (5.5)$$

Virtausnopeuden maksimia emme välttämättä tiedä etukäteen, mutta voimme yleensä arvioida sen suuruutta systeemin geometrian ja tunnettujen virtausten perusteella.

Viskositeetti aiheuttaa oman rajoituksensa aika-askeleen pituuteen [32]. Sen mukaan

$$\delta t \leq C_v \frac{\sigma^2}{\nu}, \quad (5.6)$$

missä $C_v \leq 0,125$ ja σ on ytimen keskihajonta eli approksimatiivisesti leveysparametri h .

5.2 Alustus

Kun simuloimme nestettä SPH:lla, on meidän alustettava hiukkasten paikat ja tiheys ja tiheyden kautta myös paine. Jos asetamme kaikkien hiukkasten tiheydeksi referenssitiheyden ρ_0 , tapauksissa, joissa ei ole ulkoisia kenttiä, systeemi on tasapainotilassa, eikä mitään aikakehitystä tapahdu. Tämä tapahtuu riippumatta hiukkasten paikoista. Tällaisissa tapauksissa jokaisen hiukkasen a tiheys ja paine on alustettava SPH-approksimaatiolla

$$\rho_a = \sum_b m_b \left(\frac{\rho_b}{\rho_a} \right)^{k-1} W_{ab}, \quad (5.7)$$

missä k on kuten kappaleessa 3.3.1. Tällöin hiukkasten tiheys riippuu systeemin konfiguraatiosta. Usein kuitenkin tiheyden alustaminen referenssitiheyteen on täysin riittävää. Esimerkiksi kappaleen 5.5 simulaatioissa tasainen painekenttä on kaikkien kolmen tapauksen todellinen alkuehto.

5.3 Linkitetyt solulistat

Koska SPH:n vuorovaikutuksella on maksimietäisyys, voimme vähentää laskettujen vuorovaikutusten määrää käyttämällä linkitettyjä solulistoja (CLL, cell linked list) [33]. Tässä menetelmässä jaamme laskenta-alueen kuution muotoisiin soluihin siten, että jokainen hiukkanen sijaitsee jossakin solussa ja sen vuorovaikutusetäisyys ylittää korkeintaan tämän solun lähimpiin naapureihin. Näin ollen voimme laskea ainoastaan hiukkasen vuorovaikutukset naapurisolujen hiukkasten kanssa. Tämä pienentää vuorovaikutuslaskennan aikavaativuuden lineaariseksi, kuten kohta näemme. Kuvassa 7 on hahmotelma laskenta-alueen jaosta soluihin.

Helpointa on tehdä kaikista soluista samankokoisia ja mahdollisimman vähän suurempia kuin vuorovaikutuksen maksimietäisyys r_c . Siis solujen määrä k -suuntaan on

$$N_{C,k} = \left\lfloor \frac{L_k}{r_c} \right\rfloor, \quad (5.8)$$

missä $\lfloor \cdot \rfloor$ on pyöristys alaspäin. Tällöin solun koko k -suuntaan on

$$r_{C,k} = \frac{L_k}{N_{C,k}}. \quad (5.9)$$

Hiukkaset ovat jakautuneet laskenta-alueelle kohtuullisen tasaisesti, joten jokaisessa solussa on keskimäärin N_c hiukkasta. Solun naapurisolujen määrä on dimensiosta riippuva vakio $N_{N,d}$, jolloin jokaiselle hiukkaselle laskemme keskimäärin

$$N_c N_{N,d} = \text{vakio} \quad (5.10)$$

vuorovaikutusta. Siis yhteensä laskemme

$$N_c N_N, d N \in \Theta(N) \quad (5.11)$$

vuorovaikutusta.

Tarvitsemme toteutukseen kaksi linkitettyä listaa listan hiukkasista. Olkoon hiukkaset jossain tietorakenteessa `particles`, josta j :nnen alkion hakeminen on aikavaativuudeltaan vakio, eli $\Theta(1)$. Lisäksi jokaisessa solussa on päähiukkanen ja joukko muita hiukkasia. Nämä voimme indeksoida kahdella listalla `head` ja `list`, joiden pituudet ovat solujen määrä ja hiukkasten määrä. Indeksoinnissa `head` jokainen alkio on jonkin kyseisessä solussa olevan hiukkasen indeksi. Toisaalta tämä indeksi viittaa alkioon indeksoinnissa `list`. Jokainen indeksoinnin `list` alkio on samalla tavalla sekä viite hiukkaseen että toiseen alkioon samassa indeksoinnissa. Näin syntyy linkitetty lista, joka sisältää jokaisen solussa olevan hiukkasen. Lista päättyy alkioon `EMPTY`.

Katsomme esimerkkiä, jossa hiukkasia on 8 ja soluja on 3 sekä listojen indeksointi alkaa nollassa. Olkoon

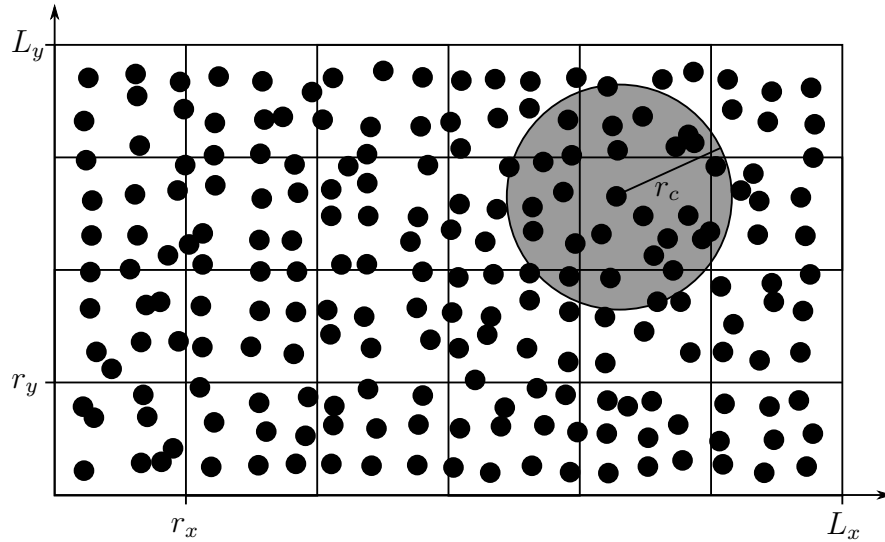
$$\text{head} = [6, 7, \text{EMPTY}] \quad (5.12)$$

sekä

$$\text{list} = [\text{EMPTY}, \text{EMPTY}, 0, 2, 3, 1, 4, 5]. \quad (5.13)$$

Tällöin nolanteen soluun kuuluvat

$$6 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 0 \rightarrow \text{EMPTY}, \quad (5.14)$$



Kuva 7. Hahmotelma linkitettyjen solulistojen ideasta kaksiulotteisessa tapauksessa. Molemmat suunnat on jaettu vuorovaikutusetäisyyttä r_c suurempiin osiin, jolloin yksi hiukkanen vuorovaikuttaa ainoastaan naapurisolussa olevien hiukkasten kanssa.

Taulukko 2. Esimerkki-CLL.

| | | | | | | | | |
|----------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| indeksit | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| head | 6 | 7 | E | | | | | |
| list | E | E | 0 | 2 | 3 | 1 | 4 | 5 |

ensimmäiseen soluun kuuluvat

$$7 \rightarrow 5 \rightarrow 1 \rightarrow \text{EMPTY}. \quad (5.15)$$

ja toiseen soluun kuuluu ainoastaan

$$\text{EMPTY}. \quad (5.16)$$

Sama rakenne on selvennykseksi taulukossa 2.

5.4 Periodiset reunaehdot

Sanomme, että suuntaan k paikassa x_k on periodinen reunaehto, jos $A(0) = A(x_k)$ kaikille kentille A . Olisimme voineet valita periodisen reunaehdon paikaksi minkä tahansa muunkin kuin 0, mutta tämä helpottaa etäisyyksien laskemista periodisen reunan yli. Periodisilla reunaehdoilla voimme toteuttaa periodisesti toistuvan virtauksen. Jos tämä periodi on tarpeeksi pitkä, ovat näiden periodien yli ulottuvien aaltojen vaikutukset pieniä ja näin ollen voimme approksimoida äärettömän pitkää virtausta asettamalla periodiset reunaehdot.

Jos jossakin suunnassa k on periodinen reunaehto, on tällöin hiukkasten a ja b välisissä vuorovaikutuksissa pienin etäisyys

$$|\tilde{r}_{ab,k}| = |r_{ab,k}| - \left\lfloor \frac{r_{ab,k}}{L_k} \right\rfloor L_k, \quad (5.17)$$

missä $\lfloor \cdot \rfloor$ on pyöristys lähimpään kokonaislukuun. Lisäksi, jos hiukkanen ylittää periodisen reunan, on sen korjattu paikkavektori

$$\tilde{r}_{a,k} = r_{a,k} - \left\lfloor \frac{r_{a,k}}{L_{a,k}} \right\rfloor L_{a,k}. \quad (5.18)$$

Periodiset reunaehdot vaikuttavat myös linkitettyihin solulistoihin siten, että periodisen reunan vieressä olevat solut ovat toistensa naapurisoluja.

5.5 Simulaatiotestejä

Testataksemme SPH:ta viskoottisille virtauksille on valittava jokin Laplacen operaattori, aika-askellus sekä reunojen käsittelytapa. Reunojen käsittelyn teemme renormalisaatiolla, jossa renormalisaatiokertoimen laskemme approksimaatiolla (A.18) siten, että jokainen hiukkanen vaikuttaa kerrallaan ainoastaan lähimmän seinäsegmentin kanssa. Aika-integraattoriksi valitsemme symplektisen Eulerin menetelmän (5.1). Kokeilemme seuraavissa testeissä useita eri Laplacen operaattoreita ja valitsemme niiden perusteella parhaiten toimivan myöhempiin simulaatioihin.

5.5.1 Couette- ja Poiseuille-virtaukset

Testaamme simulaatiomme toimivuutta ensin yksinkertaisilla testitapauksilla eli kappaleiden 2.4.1 ja 2.4.2 Couette- ja Poiseuille-virtauksilla. Molemmissa tapauksissa asetamme putken leveydeksi $L = 1$ m, virtauksen maksiminopeudeksi $v_{\max} = 1,25$ m/s ja referenssitiheddeksi $\rho_0 = 1$ kg/m³. Couette-virtaukselle tämä tarkoittaa seinän nopeutta $v_w = v_{\max}$ ja viskositeettia $\mu = 0,1$ Pa·s. Poiseuille-virtauksessa puolestaan ulkoisen kentän aiheuttama kiihtyvyys on $g = 1,25$ m/s² ja viskositeetti on $\mu = 0,125$ Pa·s. Aika-askelen pituus on $\delta t = 1,6$ ms.

Molemmat virtauksissa on x -suunnassa periodinen reunaehto kohdassa $x = 0,4$ m. Alkutilassaan hiukkaset ovat neliöhilassa, jossa y -suunnassa on 30 hiukkasta. Näin ollen hiukkasia on yhteensä 360.

Kuvassa 8 on Couette- ja Poiseuille-virtaukset kaikilla esitellyillä Laplacen operaattoreilla (4.29), (4.30) ja (4.31). Vasemmanpuoleisissa kuvaajissa viskoottinen vuorovaikutus seinän kanssa on kuten yhtälössä (4.29) ja oikeanpuoleisissa kuvaajissa on sama vuorovaikutus kertoimella 2. Sekä Couette- että Poiseuille-virtauksissa näkyy tämän kertoimen vaikutus. Kerroin 1 ei toteuta no-slip-reunaehto, kun taas kerroin 2 toteuttaa sen huomattavasti paremmalla tarkkuudella. Kuten arvelimme kappaleessa 3.3.2, operaattorit (3.66) ja (3.69) antavat hyvin samanlaisia tuloksia, sillä näissä virtauksissa nestehiukkasten paine-erot ovat hyvin pieniä.

Näiden tulosten perusteella valitsemme renormalisoiduksi Laplacen operaattoriksi

$$\mu \mathbf{L}_a^{\gamma,1} \{\mathbf{v}_b\} = \frac{2\mu}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{\mathbf{v}_{ab}}{r_{ab}} W'_{ab} - \frac{2\mu \|\nabla \gamma_a\| \mathbf{v}_{aw}}{r_{aw} \gamma_a} \quad (5.19)$$

käytettäväksi myöhemmissä testeissä.

Testaamme vielä hiukkasmäärän vaikutusta Couette- ja Poiseuille-virtauksiin. Käytämme kolmea eri hiukkasmäärää. Ensimmäisessä tapauksessa y -suunnassa on 30, toisessa 60 ja kolmannessa 90 hiukkasta. Kuvassa 9 on Poiseuille-virtauksen nopeusprofiili näillä hiukkasmäärillä. Tulokset ovat hyvin samanlaisia hiukkasmäärästä riippumatta.

Nyt kun olemme löytäneet vaihtoehtoistamme parhaiten toimivan Laplacen operaattorin, voimme testata SPH-malliamme hieman monimutkaisempiin virtauksiin.

5.5.2 Virtaus putkessa olevan esteen ohitse

Tutkimme seuraavaksi virtausta äärettömän pitkässä putkessa, jossa on tasaisin välein este. Käyttämämme este on ympyrää approksimoiva säännöllinen 16-kulmio. Kuten edellä, nytkin saavutamme äärettömän putken käyttämällä periodista reunaehtoa x -suunnassa.

Putkemme on 3 m leveä ja 5 m pitkä siten, että putken keskellä olevan esteen halkaisija on 1 m. Nesteen referenssitiheys on $\rho_0 = 1 \text{ kg m}^{-3}$ ja ulkoisen kentän aiheuttama kiihtyvyyden $g = 0,1 \text{ m s}^{-2}$. Hiukkasia on y -suunnassa 90, ja yhteensä niitä on 12772. Asetamme virtauksen Reynoldsin luvuksi $Re = 8/3$, jotta virtaus pysyisi laminaarisena. Arvioimme virtauksen maksiminopeuden olevan kaksi kertaa Poiseuille-virtauksen maksiminopeus putken leveällä kohdalla eli

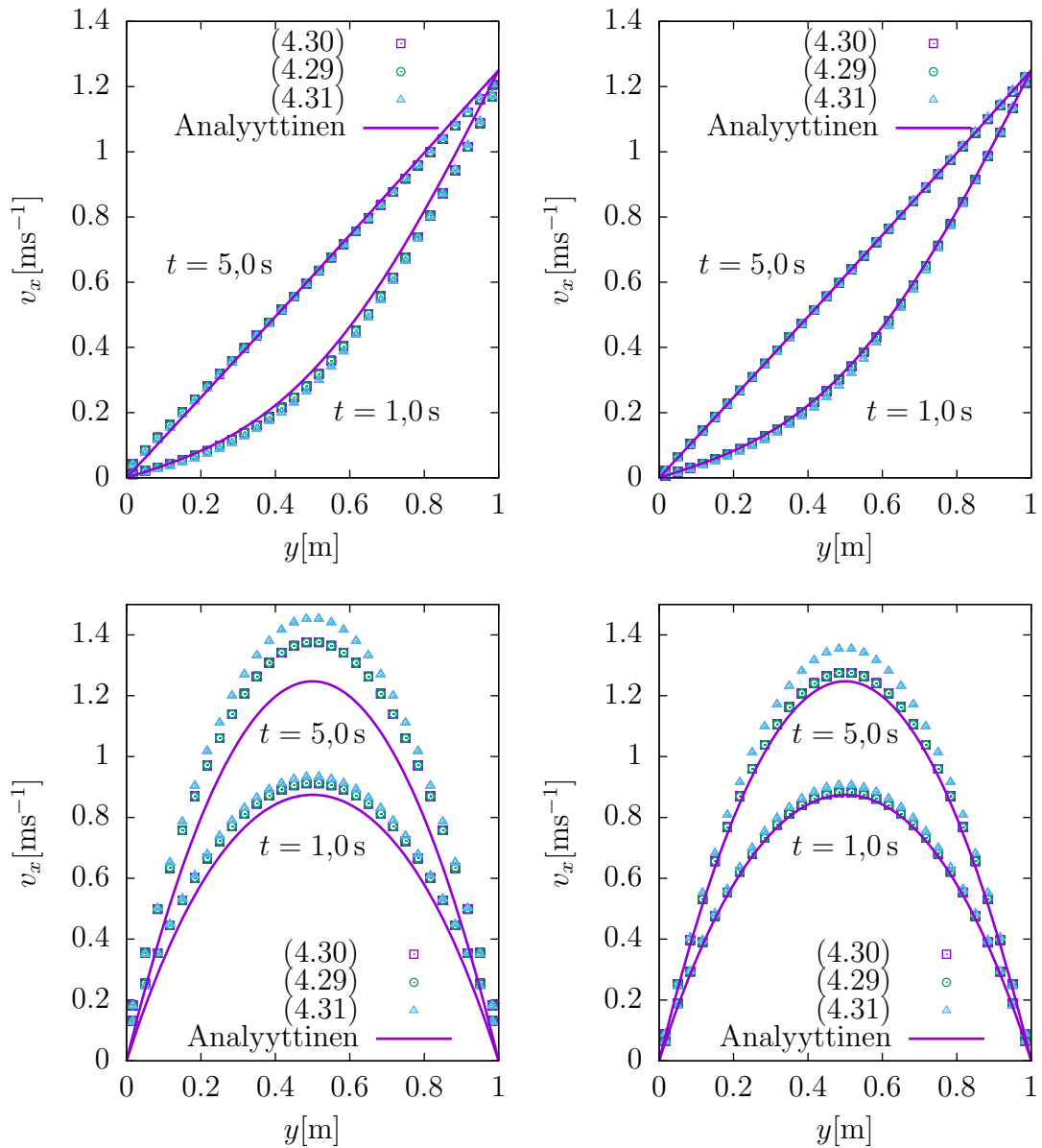
$$v_{\max} \approx 2 \sqrt{\frac{L_y \|\mathbf{g}\| Re}{8}} \approx 0,63 \text{ m/s}. \quad (5.20)$$

Viskositeetti on siis

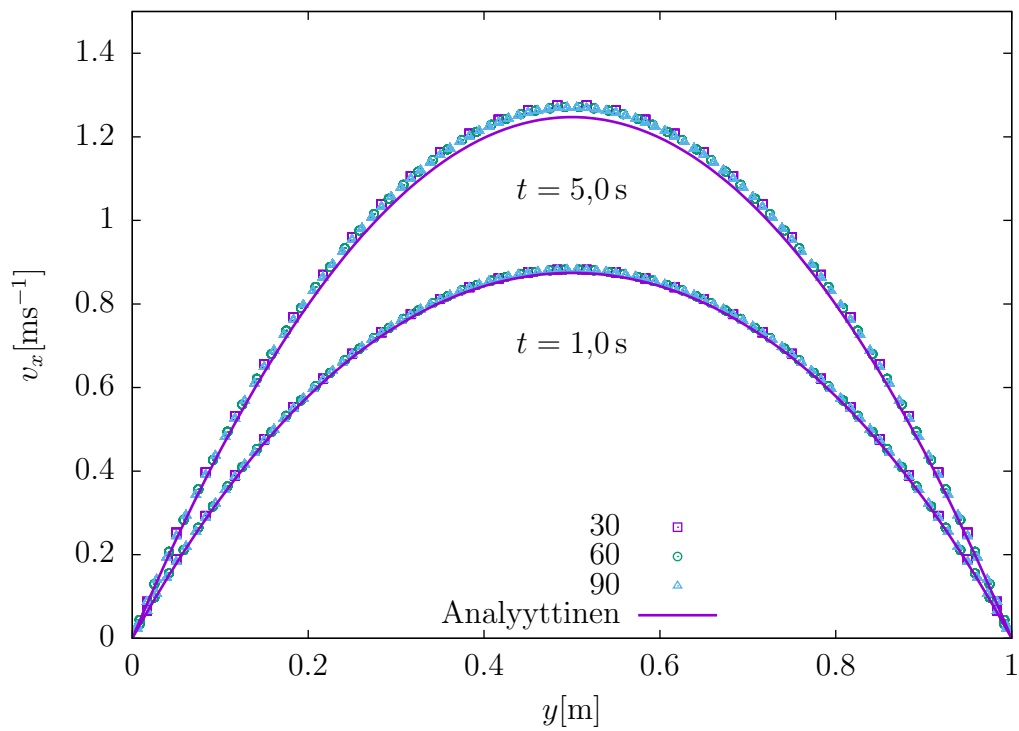
$$\mu = \frac{v_{\max} L_y}{Re} \approx 0,71 \text{ Pa s}. \quad (5.21)$$

Kuvassa 10a on simuloimamme nopeuskenttä ajanhetkellä 15 s. Virtausnopeus on suurinta esteen kohdalla, sillä siinä putki on kapeampi kuin muualla. Reunoilla virtaus pysähtyy ja lisäksi esteen eteen muodostuu patopiste. Kuvassa 10b olemme simuloineet saman virtauksen nopeuskentän käyttäen äärellisten elementtien menetelmän COMSOL Multiphysics -ohjelmistoa. COMSOL-simuloinnissa käytimme verkon asetuksina tyyppiä ”Physics-controlled mesh” ja alkioiden kokoa ”Finer”.

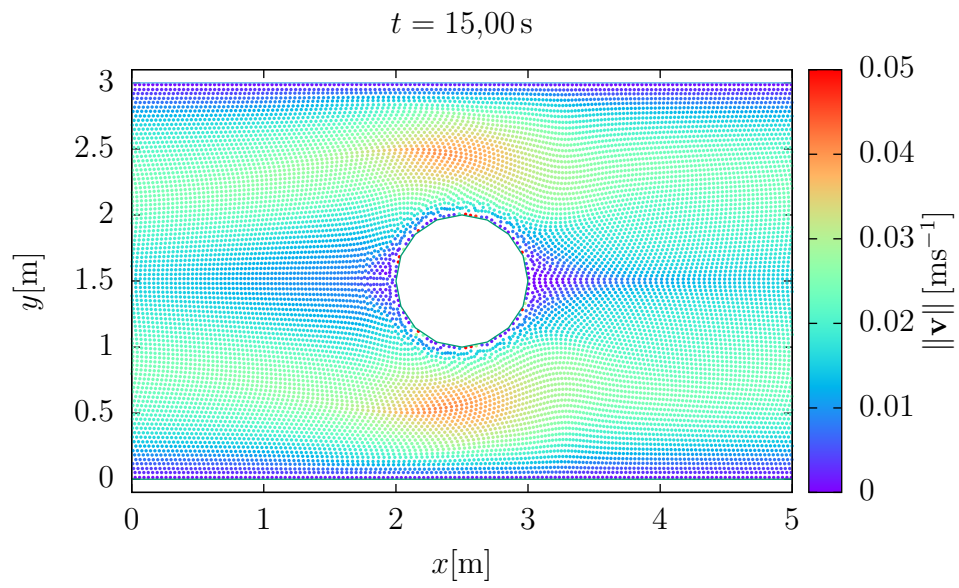
COMSOL:lla simuloitu nopeuskenttä on huomattavasti symmetrisempi esteen ympärillä, mutta kokonaisuudessa kenttien muodot vastaavat hyvin toisiaan. SPH-simulaatiossa nopeuskentän maksimi on $\|\mathbf{v}\|_{\max} \approx 0,04 \text{ m/s}$, kun taas COMSOL-simulaatiossa se on $\|\mathbf{v}\|_{\max} = 0,05 \text{ m/s}$. Näin ollen nopeusskaaloissa on huomattava, 20 prosentin ero. Tätä eroa selittää luultavasti osaltaan käyttämämme melko karkea arvio siitä, että vain yksi seinäsegmentti kerrallaan vuorovaikuttaa nestehiukkasen kanssa, sillä esteen koostavat seinäsegmentit ovat lyhyitä.



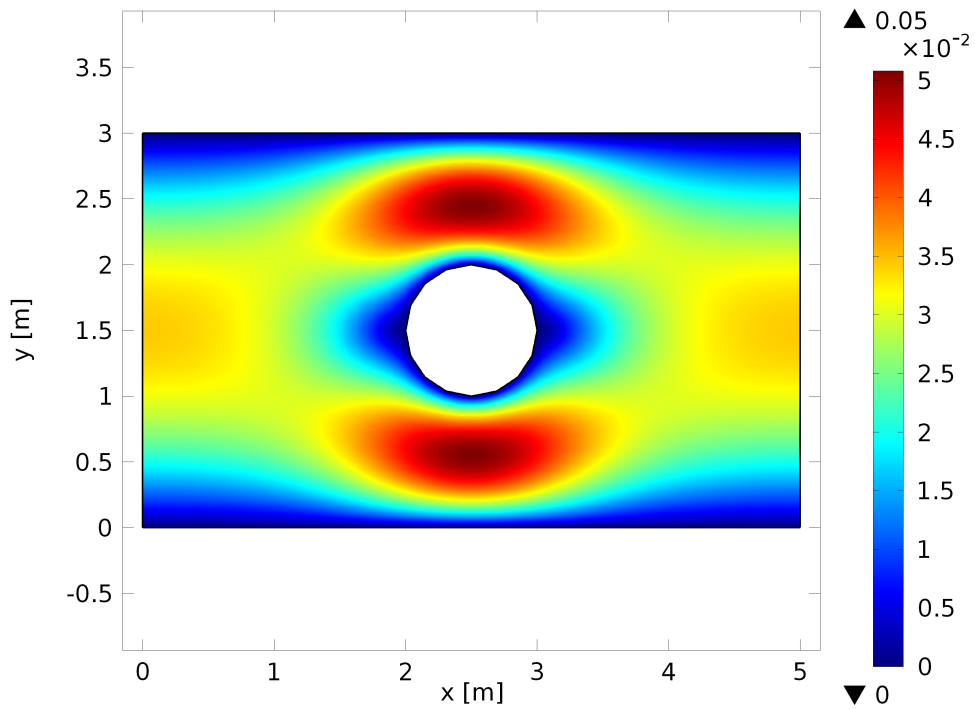
Kuva 8. Couette- ja Poiseuille-virtausten nopeusprofiilit ajanhetkillä $t = 1 \text{ s}$ ja $t = 5 \text{ s}$ Laplacen operaattoreilla (4.30), (4.29) ja (4.31). Nestehiukkasen ja seinän välinen vuorovaikutus ovat vasemmanpuoleisessa sarakeessa kertoimella 1 ja oikeanpuoleisessa sarakeessa kertoimella 2.



Kuva 9. Poiseuille-virtauksen nopeusprofiili kahdella ajanhetkellä ajanhetkellä Laplacen operaattorilla (5.19) usealla eri hiukasmäärällä.



Time=15 s Surface: Velocity magnitude (m/s)



Kuva 10. Putkessa olevan esteen ohi virtaavan nesteen nopeuskenttä simuloituna SPH:lla ja COMSOL-ohjelmistolla ajanhetkellä $t = 15 \text{ s}$.

6 Johtopäätökset

Osoitimme, että SPH on toimiva menetelmä virtausmekaniikan yhtälöiden ratkaisemiseen. Liiketyhtälöiden diskretisoinnin virhe on hallittavissa ja myös viskoottisen nesteen liiketyhtälöt ovat diskretisoitavissa. Rajoitettujen virtausten käsittelyminen onnistuu elegantisti käyttäen ytimen renormalisaatiota, joka johtaa uusiin termeihin diskreeteissä derivaattaoperaattoreissa. Näiden termien vaikutuksen ansiosta viskoottisen nesteen no-slip-reunaehto toteutuu.

SPH ei ole vielä niin tarkasti tutkittu menetelmä kuin jotkin muut, kuten äärellisten erotusten menetelmä tai äärellisten elementtien menetelmä, mutta SPH:n vahvuudet ovat selvästi nähtävissä. Hiukkasluonteensa ansiosta SPH soveltuu hyvin tapauksiin, joissa virtauksen leikkausnopeudet ovat suuria, kuten räjähdykset ja törmäykset. Massan säilyminen on taattu rakenteellisesti. Lisäksi virtausaluetta ei tarvitse etukäteen rajoittaa, vaan kenttä on siellä mihin hiukkaset liikkuvat.

6.1 Toteutus

Rajoittamattoman virtauksen SPH on yksinkertainen toteuttaa, mutta rajoitettujen virtausten ja hiukkasten lähinaapurien etsiminen monimutkaistavat toteutusta tahoillaan. Yleiskäyttöisen ratkaisijan rakentamiseksi molemmat näistä ovat kuitenkin pakollisia. Virtauksen rajoittaminen on pakollista yleiskäyttöisyyden vuoksi ja lähinaapurien etsiminen esimerkiksi linkitettyjen solulistojen avulla käyttökelpoisuuden vuoksi. Ero lineaarisen ja neliöllisen aikavaativuuden välillä tulee ilmeiseksi suuremmilla hiukkasmäärillä.

Kun rakennamme SPH:n käyttämällä diskreettejä derivaatta-operaattoreita, on sitä helpompi laajentaa koskettamaan myös muita tapauksia kuin virtausmekaniikan liiketyhtälöitä. Tämä tekee SPH:n käyttökelpoiseksi esimerkiksi magnetohydrodynamiikan simulointiin.

Nesteen ulosmenojen toteuttaminen SPH:lla on vaikeampaa kuin joillakin muilla menetelmillä. Painereunaehdon asettaminen ulosmenoon ei ole luontevaa, sillä hiukkasten paine riippuu tilanyhtälön kautta tiheydestä, joka taas kehittyy riippumatta ulostuloon asetetusta paineesta. Monessa tilanteessa kuitenkin periodiset reunaehdot ajavat saman asian, kunhan systeemin on periodisessa suunnassaan tarpeeksi pitkä siten, että epäfysikaalisten liian pitkän aallonpituuden aaltojen vaikutus systeemiin pysyy pienenä.

6.2 Simulaatiotulokset

Saamamme simulaatiotulokset osoittavat, että SPH on tämän työn menetelmillä käyttökelpoinen työkalu yksinkertaisten virtausten simulointiin. Renormalisoitu

SPH pystyy toistamaan Couette-virtauksen hyvällä tarkkuudella ja Poiseuille-virtauksenkin kohtuullisella tarkkuudella. Poiseuille-virtauksen maksiminopeus riippuu viskositeetista μ ja Couette-virtauksen ei, joten ero näiden tulosten välillä selittyy luultavasti SPH:n viskoottisen vuorovaikutuksen epätarkkuudesta. Hieman monimutkaisemman tapauksen, jossa neste virtaa putkessa olevan esteen ohitse, tulokset olivat huomattavasti epätarkempia, mutta tämä johtuu mahdollisesti suurelta osin käyttämämme reunaehdon epätarkkuudesta esteen lähetyvillä. Tämä aiheuttaa myös virtauksen epävakautta. Samantapaista epävakautta näkyi myös muissa simulaatiokokeiluissa seinäsegmenttien risteyskohdissa.

Ongelmallisia tapauksia virtausten simuloinnissa SPH:lla ovat olleet stationaariset tilanteet ja virtausten alustaminen oikealla tavalla. Esimerkiksi gravitaation aiheuttaman hydrostaattisen paineen määrittäminen on repulsiivisen potentiaalin (4.1) avulla laskettuna ongelmallista, sillä menetelmä vaatisi parametrin D adaptiivisen säätämisen tasapainon saavuttamiseksi. Lisäksi tilanyhtälössä esiintyvän numeerisen äänennopeuden arvioiminen on oma epätarkkuustekijänsä. Periaatteessa virtauksen nopeuskenttä tulisi tuntea etukäteen tarkan arvon saamiseksi.

6.3 Jatkotutkimuksen kohteet

Renormalisaatiokertoimen γ ja sen gradientin laskemisen voi tehdä tässä työssä käytettyä approksimaatiota tarkemmin liitteen A.1 menetelmällä kaksiulotteisessa tapauksessa ja laajentamalla tätä tai Mayrhoferin menetelmällä [35] kolmiulotteisessa tilanteessa.

Aika-askelluksen toteuttaminen jollakin korkeamman asteen menetelmällä pienentää aika-askelluksessa syntyvää virhettä. Aika-askeleen pituuden ja hiukkasmäärän optimointi kulloiseenkin tapaukseen on hyödyllinen jatkotutkimuksen kohde, sillä hiukkasmäärän lisääminen on turhaa, jos se ei paranna tuloksia, kuten kappaleen 5.5.1 tapauksessa. Hiukkasten lähinaapureiden etsimiseen on useita tapoja, ja näistä tavoista voisi jatkotutkimalla etsiä parhaiten prosessoriaikaa tai muistinkäyttöä optimoivan version käyttötarpeesta riippuen.

Pintailmiöt ovat tärkeitä usean faasin, puoliavoimen ja avoimen virtauksen tapauksissa. Turbulentteja virtauksia puolestaan esiintyy useissa käytännön sovelluksissa, kuten putkivirtausten sekä aero- ja hydrodynamiikan tutkimisessa. Turbulenssin ja pintailmiöiden toteuttaminen ovatkin tärkeitä askeleita kohti realistista SPH-menetelmää.

Viitteet

- [1] R. A. Gingold and J. J. Monaghan, “Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **181** no. 3, (Dec, 1977) 375–389.
- [2] L. B. Lucy, “A numerical approach to the testing of the fission hypothesis,” *The Astronomical Journal* **82** (Dec, 1977) 1013.
- [3] D. Molteni, G. Lanzafame, and S. K. Chakrabarti, “Simulation of thick accretion disks with standing shocks by smoothed particle hydrodynamics,” *The Astrophysical Journal* **425** (Apr, 1994) 161, [arXiv:9310047 \[astro-ph\]](#).
- [4] O. Flebbe, S. Muenzel, H. Herold, H. Riffert, and H. Ruder, “Smoothed Particle Hydrodynamics: Physical viscosity and the simulation of accretion disks,” *The Astrophysical Journal* **431** (Aug, 1994) 754.
- [5] V. Springel and L. Hernquist, “Cosmological smoothed particle hydrodynamics simulations: a hybrid multiphase model for star formation,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **339** no. 2, (Feb, 2003) 289–311, [arXiv:0206393 \[astro-ph\]](#).
- [6] J. Guerrero, E. García-Berro, and J. Isern, “Smoothed Particle Hydrodynamics simulations of merging white dwarfs,” *Astronomy and Astrophysics* **413** no. 1, (Jan, 2004) 257.
- [7] J. P. Morris, “Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **33** no. 3, (Jun, 2000) 333–353.
- [8] A. Colagrossi and M. Landrini, “Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics,” *Journal of Computational Physics* **191** no. 2, (Nov, 2003) 448–475.
- [9] J. P. Morris, P. J. Fox, and Y. Zhu, “Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH,” *Journal of Computational Physics* **136** no. 1, (Sep, 1997) 214–226.
- [10] E. Chow and J. Monaghan, “Ultrarelativistic SPH,” *Journal of Computational Physics* **134** no. 2, (Jul, 1997) 296–305.
- [11] C. E. Aguiar, T. Kodama, T. Osada, and Y. Hama, “Smoothed particle hydrodynamics for relativistic heavy ion collisions,” *J.Phys.* **G27** (2001) 75–94.

- [12] C. Aguiar, Y. Hama, T. Kodama, and T. Osada, “Event-by-event fluctuations in hydrodynamical description of heavy-ion collisions,” *Nuclear Physics A* **698** no. 1-4, (Feb, 2002) 639–642.
- [13] D. J. Price, “Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics,” *Journal of Computational Physics* **231** no. 3, (Feb, 2012) 759–794, [arXiv:1012.1885](#).
- [14] M. B. Liu, G. R. Liu, K. Y. Lam, and Z. Zong, “Smoothed particle hydrodynamics for numerical simulation of underwater explosion,” *Computational Mechanics* **30** no. 2, (2003) 106–118.
- [15] M. Liu, G. Liu, Z. Zong, and K. Lam, “Computer simulation of high explosive explosion using smoothed particle hydrodynamics methodology,” *Computers & Fluids* **32** no. 3, (Mar, 2003) 305–322.
- [16] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, vol. 6 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, english ed., 1959.
- [17] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mechanics*, vol. 1 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 3rd english ed., 1976.
- [18] S. J. Cummins and M. Rudman, “An SPH Projection Method,” *Journal of Computational Physics* **152** no. 2, (Jul, 1999) 584–607.
- [19] P. G. Tait, “Report on some of the physical properties of fresh water and of sea-water,” *Physics and Chemistry of the Voyage of H.M.S. Challenger* **2** no. 4, (1888) .
- [20] D. Violeau, *Fluid Mechanics and the SPH Method*. OUP Oxford, 2012.
- [21] H. Wendland, “Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree,” *Advances in Computational Mathematics* **4** no. 1, (Dec, 1995) 389–396.
- [22] J. J. Monaghan, “Smoothed particle hydrodynamics,” *Reports on Progress in Physics* **68** no. 8, (Aug, 2005) 1703–1759, [arXiv:0507472v1 \[astro-ph\]](#).
- [23] J. J. Monaghan, “Particle methods for hydrodynamics,” *Computer Physics Reports* **3** no. 2, (1985) 71–124.
- [24] G. R. Liu and M. Liu, *Smoothed Particle Hydrodynamics. A Meshfree Particle Method*. World Scientific, 2003.

- [25] S. Adami, X. Hu, and N. Adams, “A generalized wall boundary condition for smoothed particle hydrodynamics,” *Journal of Computational Physics* **231** no. 21, (Aug, 2012) 7057–7075.
- [26] J. J. Monaghan, “Simulating Free Surface Flows with SPH,” *Journal of Computational Physics* **110** no. 2, (Feb, 1994) 399–406.
- [27] S. Kulasegaram, J. Bonet, R. W. Lewis, and M. Profit, “A variational formulation based contact algorithm for rigid boundaries in two-dimensional SPH applications,” *Computational Mechanics* **33** no. 4, (Mar, 2004) 316–325.
- [28] M. Ferrand, D. R. Laurence, B. D. Rogers, D. Violeau, and C. Kassiotis, “Unified semi-analytical wall boundary conditions for inviscid, laminar or turbulent flows in the meshless SPH method,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **71** no. 4, (Feb, 2013) 446–472.
- [29] A. Mayrhofer, B. D. Rogers, D. Violeau, and M. Ferrand, “Investigation of wall bounded flows using SPH and the unified semi-analytical wall boundary conditions,” *Computer Physics Communications* **184** no. 11, (Nov, 2013) 2515–2527.
- [30] E. Forest and R. D. Ruth, “Fourth-order symplectic integration,” *Physica D: Nonlinear Phenomena* **43** no. 1, (May, 1990) 105–117.
- [31] J. J. Monaghan, “Smoothed Particle Hydrodynamics,” *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **30** no. 1, (Sep, 1992) 543–574.
- [32] D. Violeau and A. Leroy, “On the maximum time step in weakly compressible SPH,” *Journal of Computational Physics* **256** (Jan, 2014) 388–415.
- [33] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*. Oxford science publications. Clarendon, Oxford, repr ed., 1990.
- [34] J. Feldman and J. Bonet, “Dynamic refinement and boundary contact forces in SPH with applications in fluid flow problems,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **72** no. 3, (Oct, 2007) 295–324.
- [35] A. Mayrhofer, M. Ferrand, C. Kassiotis, D. Violeau, and F.-X. Morel, “Unified semi-analytical wall boundary conditions in SPH: analytical extension to 3-D,” *Numerical Algorithms* **68** no. 1, (Jan, 2015) 15–34.

Liitteet

A Renormalisaatiokertoimen laskeminen

Sekä renormalisaatiossa että semi-analyttisessä reunojen käsittelyssä renormalisaatiokerroin γ ja sen gradientti on laskettava jollain menetelmällä. Käsittelemme seuraavaksi muutamia erilaisia lähestymistapoja tähän ongelmaan. Kaikkia näitä tapoja yhdistää se, että seinän oletetaan olevan tarpeeksi yksinkertainen, yleensä kaksiulotteisessa tapauksessa murtoviivojen yhdiste ja kolmiulotteisessa tapauksessa kolmiointien yhdiste. Joissakin tapauksissa seinän oletetaan olevan vielä yksinkertaisempi.

A.1 Analyttinen ratkaisu kaksiulotteisessa tapauksessa

Feldman ym. [34] esittelevät seuraavanlaisen proseduurin renormalisaatiokertoimen ja sen gradientin laskemiseksi kaksiulotteisten suorien seinäsegmenttien tapauksessa. Määrittelemme ensin vektorin $\mathbf{W}(\mathbf{x}) = f(q)\mathbf{x}$ yhtälön $\nabla \cdot \mathbf{W} = W$ mukaisesti. Renormalisaatiokerroin on tämän määritelmän ja Gaussin divergenssilauseen nojalla

$$\gamma_a = - \int_{\partial\Omega_a \cap \partial\Omega} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (\text{A.1})$$

Lisäksi vektorin \mathbf{W} määritelmästä seuraa differentiaaliyhtälö

$$W = 2f(q) + qf'(q), \quad (\text{A.2})$$

josta integroimalla Wendland-ytimelle (3.27) on

$$f(q) = \frac{1}{q^2} \int q W_h(q) \, dq = \frac{7}{64\pi h^2} \left(\frac{16C}{q^2} + 8 - 10q^2 + 8q^3 - \frac{5}{2}q^4 + \frac{2}{7}q^5 \right). \quad (\text{A.3})$$

Näistä funktioista valitsemme sen, jolle $f(2) = 0$ eli $C = -\frac{2}{7}$. Siispä voimme ilmoittaa funktion f muodossa

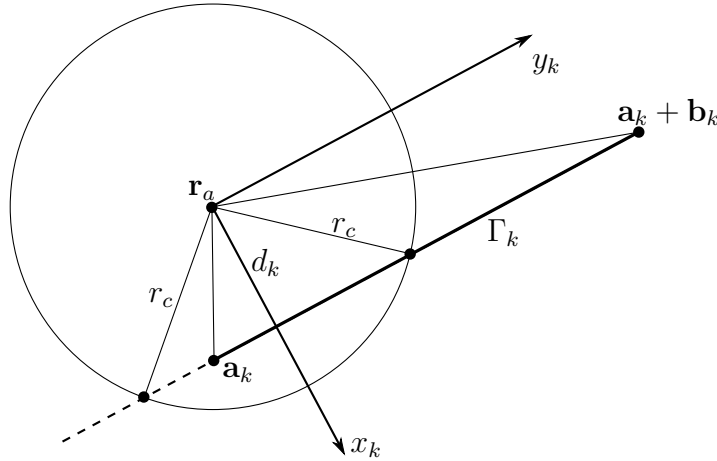
$$f(q) = \frac{7}{64\pi h^2} \tilde{f}(q), \quad (\text{A.4})$$

missä

$$\tilde{f}(q) = -\frac{32}{7} \frac{1}{q^2} + 8 - 10q^2 + 8q^3 - \frac{5}{2}q^4 + \frac{2}{7}q^5. \quad (\text{A.5})$$

Tämä funktio on singulaarinen nollassa, mutta voimme poistaa singulariteetin laskemalla renormalisaatiokertoimen summana

$$\gamma_a = - \lim_{\epsilon h \rightarrow 0} \int_{\partial B(\mathbf{r}_a, \epsilon h)} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Sigma_a} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (\text{A.6})$$



Kuva 11. Yhden suoran seinäsegmentin Γ_k vaikutuksen laskemiseksi tarvittava geometria kaksiulotteisessa tapauksessa. Koordinaatiston y -akseli on segmentin kanssa samansuuntainen.

missä $B(a, r)$ on a -keskeinen ja r -säteinen pallo. Edellä olevan mukaan \tilde{f} on kierto-symmetrinen ja siksi

$$\int_{\partial B(\mathbf{r}_a, \epsilon h)} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{7}{64\pi h^2} \tilde{f}(\epsilon) \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \epsilon h \cos \theta \\ \epsilon h \sin \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \epsilon h d\theta = \frac{7}{32} \epsilon^2 \tilde{f}(\epsilon), \quad (\text{A.7})$$

sillä $\sin^2(\theta) + \cos^2(\theta) = 1$. Näinpä singulariteetin arvoksi tulee

$$\lim_{\epsilon h \rightarrow 0} \frac{7}{32} \epsilon^2 \tilde{f}(\epsilon) = -1. \quad (\text{A.8})$$

ja singulariteetin poiston jälkeen

$$\gamma_a = 1 - \int_{\Sigma_a} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (\text{A.9})$$

Osaamme laskea tämän integraalin suoralle seinäsegmentille k , joka alkaa pisteestä \mathbf{a}_k ja päättyy pisteeseen $\mathbf{a}_k + \mathbf{b}_k$. Kuvassa 11 on esitettynä yksi seinäsegmentti sekä kaikki tarpeelliset suureet. Kierrämme koko systeemiä pisteen \mathbf{r}_a ympäri siten, että seinäsegmentti on y -akselin suuntainen. Kun integroimme yli suureen $s(x, y) = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{h}$,

$$\frac{7d_k}{64\pi h^2} \int_{y_{k,\min}}^{y_{k,\max}} \tilde{f}(s(d_k, y_k)) dy_k = \frac{7d_k}{64\pi h^2} \left(\tilde{F}(d_k, y_{k,\max}) - \tilde{F}(d_k, y_{k,\min}) \right), \quad (\text{A.10})$$

missä \tilde{F} on primitiivi eli funktio, jolle $\partial_y \tilde{F}(x, y) = \tilde{f}(s(x, y))$. Tähän integrointiin tarvitsemamme suureet ovat siis d_k , $y_{k,\min}$ ja $y_{k,\max}$, joille

$$\begin{cases} d_k = \frac{|b_{k,1}(a_{k,2} - r_{a,2}) - b_{k,2}(a_{k,1} - r_{a,1})|}{\|\mathbf{b}_k\|} \\ |y_{k,\min}| = \min \left(\sqrt{r_c^2 - d_k^2}, \sqrt{\|\mathbf{r}_a - \mathbf{a}_k\|^2 - d_k^2} \right) \\ |y_{k,\max}| = \min \left(\sqrt{r_c^2 - d_k^2}, \sqrt{\|\mathbf{r}_a - (\mathbf{a}_k + \mathbf{b}_k)\|^2 - d_k^2} \right). \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Koska primitiivi \tilde{F} on antisymmetrinen y -akselin suhteen, on selvitettävä myös suureiden $y_{k,\min}$ ja $y_{k,\max}$ merkki.

Jos seinä koostuu useammasta segmentistä, on koko seinän vaikutus renormalisaatiokertoimeen

$$\gamma_a = 1 - \int_{\cup_k \Gamma_k} \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} dS = 1 - \sum_k \frac{7d_k}{64\pi h^2} \left(\tilde{F}(d_k, y_{k,\max}) - \tilde{F}(d_k, y_{k,\min}) \right). \quad (\text{A.12})$$

Renormalisaation gradientin saamme laskettua samaan tapaan, sillä

$$\nabla \gamma_a = \int_{\Omega_a \cap \Omega} \nabla W(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}') d^d \mathbf{x}' = - \int_{\Sigma_a} W(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}') \mathbf{n} dS. \quad (\text{A.13})$$

Nytkin yhden suoran seinäsegmentin Γ_k tapauksessa löydämme primitiivin $G(x, y)$ ja integraalin arvo on

$$\nabla \gamma_a = -\mathbf{n}_k (G(d_k, y_{k,\max}) - G(d_k, y_{k,\min})). \quad (\text{A.14})$$

Näin ollen useammasta segmentistä koostuvan seinän vaikutus on

$$\nabla \gamma_a = \sum_k \mathbf{n}_k (G(d_k, y_{k,\min}) - G(d_k, y_{k,\max})). \quad (\text{A.15})$$

Primitiivit $F(x, y) = \frac{7x}{64\pi h^2} \tilde{F}(x, y)$ ja $G(x, y)$ ovat

$$\begin{aligned} F(x, y) = \frac{1}{1536\pi h^7} \left(xy \left(1344h^5 - 560h^3 (3x^2 + y^2) 168h^2 r (5x^5 + 2y^2) \right. \right. \\ \left. \left. - 28 (15x^4 + 10x^2 y^2 + 3y^4) + r (33x^4 + 26x^2 y^2 + 8y^4) \right) \right. \\ \left. - 768h^7 \arctan \left(\frac{y}{x} \right) + 3x^5 (168h^2 + 5x^2) \ln(y + r) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

missä $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ja

$$G(x, y) = \frac{7}{64\pi h^7} \left(16h^5 y - 40h^3 x^2 y - 15x^4 y - \frac{40}{3} h^3 y^3 - 10hx^2 y^3 - 3hy^5 \right. \\ \left. + \frac{1}{24} yr (33x^4 + 26x^2 y^2 + 8y^4 + 600h^2 x^2 + 240h^2 y^2) \right. \\ \left. + \frac{5}{8} x^4 (24h^2 + x^2) \ln(y + r) \right). \quad (\text{A.17})$$

A.2 Approksimatiivinen ratkaisu

Kulasegaram ym. [27] approksimoivat renormalisaatiokerrointa ja sen gradienttia suoran seinän lähellä funktioilla

$$\begin{cases} \gamma(\epsilon) = 1 + (0,0625 - 0,0531\epsilon)(\epsilon - 2)^3 \\ \|\nabla\gamma\|(\epsilon) = \frac{1}{h}(0,2937 - 0,2124\epsilon)(\epsilon - 2)^3, \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

missä $\epsilon = \frac{y}{h}$ ja y on etäisyys seinämään. Kaukana seinämästä molempien approksimaatioiden vaihtelu on hyvin pientä, joten ilman suurta virhettä asetamme

$$\begin{cases} \gamma(\epsilon) = 1 \\ \|\nabla\gamma\|(\epsilon) = 0, \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

kun $\epsilon > 2$. Jäljelle jää etäisyyden y laskeminen ja monimutkaisempien seinien käsittely.

A.3 Aikaintegrointi

Ferrand ym. [28] jakavat kaksiulotteisessa tapauksessa murtoviivaksi ja kolmiulotteisessa tapauksessa kolmioinniksi. He ehdottavat lisäksi, että renormalisaatiokerrointa ei lasketa suoraan paikkavektorista vaan kehittämällä yhtälöä

$$\begin{cases} \frac{d\gamma_a}{dt} = \nabla\gamma_a \cdot \mathbf{v}_a & \Sigma_a \neq \emptyset \\ \gamma_a = 1 & \text{muulloin.} \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

jollakin aika-askelluksella. Gradientin $\nabla\gamma$ laskemiseksi he antavat analyyttisen lausekkeen kaksiulotteisessa sekä Mayrhofer ym. [35] kolmiulotteisessa tilanteessa.

A.4 Hiukkas-approksimaatio

Violeau ehdottaa [20] gradientin laskemista diskreetillä approksimaatiolla

$$\nabla\gamma_a \approx \sum_b \Sigma_b W_{ab} \mathbf{n}_b, \quad (\text{A.21})$$

missä \mathbf{n}_b on seinän nesteeseen osoittava normaalivektori hiukkasen b kohdalla ja $\Sigma_b = \Omega_b \cap \partial\Omega$. Seinäsegmentin pinta-alaa voimme approksimoida esimerkiksi tilavuus-sädesuhteella $\Sigma_b \approx V_b/\delta r$.