

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

# Praca inżynierska

## Jan Nowak

kierunek studiów: informatyka stosowana

# Jakiś długi i nie mieszczący się w jednej linii tytuł pracy inżynierskiej

Opiekun: prof. dr hab. Bądź Doktor

Kraków, styczeń 20??

Oświadczam, świadomy(-a) odpowiedzialn niniejszą pracę dyplomową wykonałem(-am) am) ze źródeł innych niż wymienione w pracy.	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
	(czytelny podpis)

Na kolejnych dwóch stronach proszę dołączyć kolejno recenzje pracy popełnione przez Opiekuna oraz Recenzenta (wydrukowane z systemu MISIO i podpisane przez odpowiednio Opiekuna i Recenzenta pracy). Papierową wersję pracy (zawierającą podpisane recenzje) proszę złożyć w dziekanacie celem rejestracji.

# Spis treści

1	Wst	Wstęp				
	1.1	Motywacja	6			
	1.2	Mój wkład – założenia	6			
2	Teo	ria	7			
	2.1	Równanie Naviera-Stokesa	7			
	2.2	Metoda SPH	8			
		2.2.1 Jądra wygładzające	9			
3	Mo	Modelowanie płynu 11				
	3.1	Gestość «maso-gęstość» i ciśnienie «lokalne»	11			
	3.2	Siły	11			
		3.2.1 Ciśnienie	11			
		3.2.2 Lepkość	12			
		3.2.3 Napięcie powierzchniowe	12			
		3.2.4 Siły zewnętrzne	13			
	3.3	Obsługa kolizji cząstek ze ścianami	13			
	3.4	Symulacja	14			
		3.4.1 Schemat Verleta	14			
		3.4.2 Schemat Leap-frog	14			
4	Wizualizacja płynu 15					
	4.1	Znalezienie cząsteczek powierzchniowych	15			
	4.2	Konstrukcja mapy odległości	15			
	4.3	Renderowanie - GPU raycasting	16			
5	Imp	plementac <b>j</b> a	17			
	5.1	Algorytm	18			
		5.1.1 Schemat blokowy aplikacji	18			
		5.1.2 Pseudokod algorytmu symulacji (?)	19			
		5.1.3 Złożoność obliczeniowa (?)	19			
	5.2	Optymalizacje	19			
		5.2.1 Wyszukiwnie sąsiadów	19			
	5.3	Całkowanie numeryczne	21			
		5.3.1 Krok czasowy	21			
	5.4	Parametry symulacji	21			
		5.4.1 Objętość symulowanego płynu oraz masa pojedynczej cząsteczki	21			
		5.4.2 Promień odcięcia jądra wygładzającego	21			

		5.4.3 Gęstość spoczynkowa	:2
		5.4.4 Lepkość	2
		5.4.5 Napięcie powierzchniowe	2
6	Wy	niki 2	3
	6.1	Prezentacja symulacji «foto»	23
	6.2	Analiza wydajności	23
	6.3	Analiza stabilności numerycznej	23
7	Pod	sumowanie, wnioski i dalszy rozwój	4
	7.1	«Odpowiedź na założenia»	:4
	7.2	«Plany i pomysły na przyszłość»	:4
$\mathbf{S}_{]}$	pis	rysunków	
	1	test	5
	2	Diagram	.8
	3	Diagram indeksowania i szeregowania cząsteczek	2O
$\mathbf{S}_{]}$	pis	tabel	
$\mathbf{S}_{]}$	pis	kodów źródłowych	
	1	Painter.cpp;9:18	5



Rysunek 1: test

```
1
  void Painter::paint(const Tetromino& t)
2
3
    const auto& VBO = t.getVBO();
4
5
    glBindVertexArray(VAO);
6
    glBindBuffer(GL_ARRAY_BUFFER, VBO);
7
    glDrawArrays (GL_TRIANGLES, 0, 6);
    //glDrawElements(GL_TRIANGLES, 6, GL_UNSIGNED_INT, 0);
8
9
    glBindVertexArray(0);
10 }
```

Listing 1: Painter.cpp;9:18

# 1 Wstęp

### 1.1 Motywacja

Symulacja płynów jest stosunkowo złożonym i skomplikowanym problemem. W ostatnim dziesięcioleciu staje się jednak coraz bardziej popularnym tematem opracowań naukowych. Obliczeniowa mechanika płynów (ang. Computational Fluid Dynamics) wykorzystuje metody numeryczne oraz stale rosnącą moc obliczeniową komputerów do rozwijania tej dyscypliny. Powodem złożoności zachowania płynów jest skomplikowany mechanizm działania różnych zjawisk składających się na pełen «obraz» płynów, takich jak turbulentność, laminarność czy napięcie powierzchniowe płynu.

Symulacje płynu można przeprowadzać w dwojaki sposób: offline i online. Metody offline zapewniają największą dokładność obliczeń. Oprogramowania stosujące te techniki wykorzystywane są m.in. w przemyśle motoryzacyjnym, lotniczym i kosmicznym gdzie precyzja kalkulacji jest bardzo istotna. Metody dokładne sprowadzają się do rozwiązania równań Naviera-Stokesa.

W ramach tej pracy wykonano symulacje zachowania płynów w oparciu o metodę online – SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics), która wykorzystuje podejście znane z dynamiki molekularnej i używa wariantu dynamiki Newtonowskiej z parametrami, które mają symulować zachowanie cieczy realnej. Sprawdzają się jednak w symulacjach w czasie rzeczywistym lub sytuacjach gdzie wymagana jest «interakcja z płynem». Te metody wykorzystywane są również we wspomnianych powyżej gałęziach przemysłu, jednak są przydatne jedynie na etapie projektowania. Poza tym metody online znajdują zastosowanie w symulacjach medycznych lub grach wideo.

# 1.2 Mój wkład – założenia

W niniejszej pracy moim celem było zaprezentowanie metody zdolnej do symulacji płynu w czasie rzeczywistym. Głównym założeniem pracy była możliwość interakcji z płynem w stosunkowo dużej skali przy zachowaniu satysfakcjonującej wydajności. Mój wybór, przy sugestii promotora, padł na metodę, która zdobywa w ostatnim dziesięcioleciu najwięcej rozgłosu: Smoothed Particle Hydrodynamics (pol. wygładzonej hydrodynamiki cząstek).

Osobnym krokiem w ramach symulacji płynu jest jego wizualizacja, która sprowadza się do dwóch elementów: wydobywania powierzchni płynu oraz jej renderowania. Ten fragment często pochłania najwięcej czasu symulacji i kluczowym jest znalezienie efektywnego rozwiązania. W niniejszej pracy przedstawiona zostało jedno z możliwych rozwiązań tego problemu.

# 2 Teoria

Metoda SPH zastosowana przy symulacji płynów służy m.in. do dyskretyzacji równania Naviera-Stokesa.

### 2.1 Równanie Naviera-Stokesa

Izotermiczny płyn opisuje się przy pomocy 3 parametrów: prędkości v, gęstości  $\rho$  i ciśnienia p. W celu opisu wykorzystać można również dwa podejścia charakteryzujące ośrodek: Eulera i Lagrange'a. W tym pierwszym płyn umieszcza się na siatce i jego parametry są obliczane w poszczególnych komórkach tej siatki. Za pomocą wspomnianych trzech parametrów opisuje się postępowanie płynu w czasie za pomocą dwóch równań. Pierwsze równanie «opisuje» zasadę zachowania masy:

$$\frac{\partial \boldsymbol{p}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0 \tag{1}$$

Drugie równanie czyli równanie Naviera-Stokesa opisuje zasadę zachowania pędu (drugą zasadę dynamiki Newtona) w nieściśliwym płynie.

RÓWNANIE NAVIERA-STOKESA:

$$\rho \left( \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \, \boldsymbol{v} \right) = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{v} + \boldsymbol{F}$$
 (2)

gdzie  $\mathbf{F}$  oznacza tzw. siły zewnętrzne oddziałujące na płyn a  $\mu$  to współczynnik lepkości dynamicznej płynu. Z tego równania wyprowadzimy wyrażenia na siły lepkości i ciśnienia występujące w symulowanym płynie.

Przy opisie Lagrange'a wykorzystuje się cząsteczki. Każda cząsteczka reprezentuje pewną stałą objętość płynu przypisaną do tej cząsteczki i opisaną wspomnianymi powyżej trzema parametrami. Suma wszystkich cząsteczek w całości definiuje płyn. Takie założenia znacząco ułatwiają równania opisujące płyn. Liczba cząsteczek podczas symulacji jest stała co gwarantuje spełnienie zasady zachowania masy. Rówanie (1) jest zawsze spełnione. Dodatkowo wyrażenie z lewej strony równania (2):  $\left(\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \, \boldsymbol{v}\right)$  jest równoważne pochodnej materialnej  $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$  «ref wiki Operator Stokesa». Z definicji opisu Lagrange'a cząsteczka (tj. układ odniesienia) wobec płynu pozostaje nieruchoma - porusza się razem z tym płynem. Dzięki temu stwierdzeniu wyrażenie upraszcza się do pochodnej  $\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}$ .

Z prawej strony równania (2) pozostają trzy składniki. Wyrażenie ( $\nabla p$ ) opisuje ciśnienie, ( $\mu \nabla^2 u$ ) opisuje lepkość a (F) to pozostałe siły zewnętrzne (np. grawitacja). Równanie (2) możemy ostatecznie zapisać jako:

$$\boldsymbol{f}_i = -\boldsymbol{\nabla} p_i + \mu \nabla^2 \boldsymbol{u}_i + \rho_i \boldsymbol{g} \tag{3}$$

Zgodnie z drugą zasadą dynamiki wartość działających sił jest proporcjonalna do zmiany pędu w czasie. Zakładając stałość masy «maso-gęstość» podczas ruchu przyśpieszenie każdej z

cząsteczek można znaleźć następująco:

$$\boldsymbol{a}_i = \frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = \frac{\boldsymbol{f}_i}{\rho_i} \tag{4}$$

Tak obliczone przyspieszenie posłuży nam do znalezienia pozycji i prędkości w chwili czasowej dla każdej cząsteczki. Metody całkowania zostaną opisane w rozdziale (3.4).

### 2.2 Metoda SPH

Początkowo metoda SPH została stworzona przez «ref Lucy» do symulacji problemów astrofizycznych jednak jest na tyle ogólna, że z powodzeniem znalazła zastosowanie w innych typach modelowań, m.in. w symulacji płynów. Po raz pierwszy SPH do symulacji płynów wykorzystał «ref Müller». Od tamtego czasu ewoluowała w stronę bardziej skomplikowanych algorytmów «PCISPH», «WCSPH», «wymienić inne SPH».

SPH jest metodą interpolacji w układach, w których używa się opisu Lagrange'a, tj. takich gdzie układ odniesienia porusza się razem z cieczą (każda cząsteczka posiada swój własny układ odniesienia). Przy wykorzystaniu SPH pole, które jest zdefiniowane w konkretnych punktach (w położeniach gdzie znajdują się cząsteczki) może zostać opisane dla dowolnego miejsca w przestrzeni. W tym celu wykorzystuje się następujące rówanie:

RÓWNANIE INTERPOLACYJNE SPH:

$$A_S(\mathbf{r}) = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h)$$
(5)

gdzie:

- $A_S$  interpolacja pola w pozycji  ${m r}$
- -j cząsteczki po których następuje iteracja
- $-m_{i}$  masa j-tej cząsteczki
- $oldsymbol{r}_{j}$  pozycja j-tej cząsteczki
- $-\rho_i$  gęstość j-tej cząsteczki
- $A_i$  wartość pola w punkcie  $\boldsymbol{r}_i$
- $W({m r}-{m r}_j,h)$  jądro wygładzające dla j-tej cząsteczki (tj. jej odległości od pozycji  ${m r}:\|{m r}-{m r}_j\|)$

Przy wykorzystaniu powyższego równania da się opisać poszczególne składniki równania Navier'a-Stokes'a (3) opisane w rozdzale (2.1). Opis ten znajduje się w następnym rozdziale.

Istotną właściwością SPH jest łatwość wyliczania pochodnych przestrzennych w postaci gradientu i laplasjanu pola «skalarnego». Gradient pola  $A_S(\mathbf{r})$  w notacji SPH zapisuje się jako:

$$\nabla A_S(\mathbf{r}) = \sum_{j} m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h)$$
(6)

lub w precyzyjniejszej formie gradient pola skalarnego można zapisać jako «ref kelager 3.11»:

$$\nabla A_S(\mathbf{r}) = \rho \sum_j m_j \left( \frac{A}{\rho^2} + \frac{A_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h)$$
 (7)

Laplasjan pola  $A_S(\mathbf{r})$  zapisuje się jako:

$$\nabla^2 A_S(\mathbf{r}) = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla^2 W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h)$$
(8)

### 2.2.1 Jądra wygładzające

Funkcja  $W(\mathbf{r}, h)$  to jądro wygładzające (ang. smoothing kernel) o promieniu h. Taka funkcja musi spełniać dwa następujące warunki:

• normalizacja:

$$\int_{\Omega} W(\boldsymbol{r}, h) d\boldsymbol{r} = 1$$

• zbieżność do delty Diraca przy h dażącym do 0:

$$\lim_{h\to 0} W(\boldsymbol{r},h) = \delta(\boldsymbol{r})$$

Oprócz powyższych warunków funkcja jądra wygładzającego musi być dodatnia:

$$W(\boldsymbol{r},h) \geq 0$$

aby mogła pełnić rolę uśredniającą. Kiedy dodamy jeszcze jeden warunek funkcji jądra - symetrię:

$$W(\boldsymbol{r},h) = W(-\boldsymbol{r},h)$$

wtedy interpolacja jest drugiego stopnia precyzji, to znaczy że błąd przybliżenia sumowania w równaniu (5) jest równy  $O(h^2)$  lub lepszy. Jądro zanika dla promienia większego od  $\mathbf{r}$ :

$$W(\mathbf{r}, h) = 0, \|\mathbf{r}\| > h$$

Dla zastosowań SPH, w oparciu o powyższe założenia, projektuje się różne funkcje jąder wygładzających. Od nich w dużym stopniu zależy stabilność, dokładność i wydajność metody. Za idealna funkcje jądra uważa się krzywą Gaussa. Jej obliczenie jest jednak skomplikowane (przez zawartą funkcję eksponent) dlatego w praktyce stosuje się prostsze funkcje przypominające tą krzywą.

Do większości obliczeń korzysta się z jądra wygładzającego opisanego stosunkowo tanią obliczeniowo funkcją wielomianową  $W_{poly6}$ :

$$W_{poly6}(\mathbf{r}, h) = \frac{315}{64\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - \|\mathbf{r}\|^2)^3 & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(9)

$$\nabla W_{poly6}(\mathbf{r}, h) = \frac{945}{32\pi h^9} \begin{cases} \mathbf{r} (h^2 - \|\mathbf{r}\|^2)^2 & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(10)

$$\nabla^{2}W_{poly6}(\mathbf{r},h) = \frac{945}{32\pi h^{9}} \begin{cases} (h^{2} - \|\mathbf{r}\|^{2}) \left( \|\mathbf{r}\|^{2} - \frac{3}{4}(h^{2}\|\mathbf{r}\|^{2}) \right) & 0 \leq \|\mathbf{r}\| \leq h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(11)

Powyższe jądro wykorzystywane jest przy interpolacji gęstości, ciśnienia oraz pola kolorowego. Przy obliczaniu gradientu ciśnienia oraz siły lepkości, z racji natury oddziaływania tych sił, konieczne jest zastosowanie innych jąder wygładzających.

W przypadku zastosowania jądra  $W_{poly6}$  przy obliczaniu siły ciśnienia cząsteczki mają tendencję do «zlepiania, gromadzenia» się. Dla małych odległości pomiędzy cząsteczkami gradient tego jądra wykorzystywany do obliczania ciśnienia pomiędzy cząsteczkami dąży do zera i siła odpychająca cząsteczki zanika. Ten problem rozwiązuje się korzystając z innego jądra wygładzającego -  $W_{spiky}(\mathbf{r}, h)$ :

$$W_{spiky}(\mathbf{r}, h) = \frac{15}{\pi h^6} \begin{cases} (h - \|\mathbf{r}\|)^3 & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(12)

$$\nabla W_{spiky}(\mathbf{r}, h) = -\frac{45}{\pi h^6} \begin{cases} \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|} (h - \|\mathbf{r}\|)^2 & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(13)

Gradient tego jądra pozostaje niezerowy dla argumentów w pobliżu zera, co generuje odpowiednie siły odpychające. Spełnia również pozostałe warunki konieczne dla jąder wygładzających.

Do obliczenia siły lepkości konieczne jest wprowadzenie jeszcze jednego jądra wygładzającego. Lepkość jest zjawiskiem, które - spowodowane tarciem - prowadzi do rozproszenia energii kinetycznej płynu w postaci ciepła. Laplasjan takiego jądra musi być dodatni aby zjawisko lepkości było poprawnie odwzorowywane. Stosuje się tutaj jądro wygładzające  $W_{viscosity}(\boldsymbol{r},h)$  opisane następującym wzorem:

$$W_{viscosity}(\mathbf{r}, h) = \frac{15}{2\pi h^3} \begin{cases} \left( -\frac{\|\mathbf{r}\|^3}{2h^3} + \frac{\|\mathbf{r}\|^2}{h^2} + \frac{h}{2\|\mathbf{r}\|} - 1 \right) & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(14)

$$\nabla W_{viscosity}(\mathbf{r}, h) = \frac{15}{2\pi h^3} \begin{cases} \mathbf{r} \left( -\frac{3\|\mathbf{r}\|}{2h^3} + \frac{2}{h^2} - \frac{h}{2\|\mathbf{r}\|^3} \right) & 0 \le \|\mathbf{r}\| \le h \\ 0 & \|\mathbf{r}\| > h \end{cases}$$
(15)

$$\nabla^2 W_{viscosity}(\mathbf{r}, h) = \frac{45}{\pi h^6} \begin{cases} (h - ||\mathbf{r}||) & 0 \le ||\mathbf{r}|| \le h \\ 0 & ||\mathbf{r}|| > h \end{cases}$$
(16)

# 3 Modelowanie płynu

Dzięki metodzie SPH można modelować poszczególne elementy równania Naviera-Stokesa, wyróżnione w rozdziale (2) opisane w punkcie (2.1).

Organizacja tego rozdziału odpowiada kolejności obliczania elementów składających się na implementację metody SPH. W pierwszym kroku obliczana jest wartość gęstości dla wszystkich cząsteczek. Następnie znajdywane są siły z jakimi oddziaływują na siebie cząsteczki. Wypadkowa suma sił służy do obliczenia przyśpieszenia każdej z cząsteczek. Dalej następuje wykrycie i odpowiedź na ewentualne kolizje cząsteczek ze ścianami. Ostatnim krokiem jest całkowanie gdzie symulacja postępuje, zgodnie z obliczonym wcześniej przyśpieszeniem.

### 3.1 Gestość «maso-gęstość» i ciśnienie «lokalne»

Zamin zostaną obliczone siły pomiędzy cząsteczkami, konieczne jest znalezienie ich masy oraz gęstości. Masa każdej cząsteczki jest identyczna oraz stała przez cały czas symulacji. Wartość gęstości natomiast jest zmienna i trzeba ją obliczać na początku każdej iteracji symulacji. Poprzez podstawienie do wzoru (5) otrzymujemy wzór na gęstość w punkcie r:

$$\rho_i(\mathbf{r}_i) = \sum_j m_j \frac{\rho_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h) = \sum_j m_j W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h)$$
(17)

Następnie za pomocą równania gazu doskonałego może zostać obliczone ciśnienie. W symulacji wykorzystuje się zmodyfikowaną formę równania gazu doskonałego:

$$p_i = k(\rho_i - \rho_0) \tag{18}$$

gdzie k to stała gazowa zależna od temperatury, stała  $\rho_0$  oznacza tzw. gęstość spoczynkową, a  $\rho_i$  to gęstość obliczona równaniem (17). «słowo komentarza» «w innych pracach gęstość jest czasem nazywana mass-density»

## 3.2 Sily

Przy pomocy «notacji» SPH wyprowadzam równania na składniki równania Naviera-Stokesa

#### 3.2.1 Ciśnienie

«zależy od gradientu ciśnienia»

$$\boldsymbol{F}_{i}^{cisn} = -\nabla p(\boldsymbol{r}_{i}) = -\sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} p_{j} \nabla W(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{j}, h)$$
(19)

Niestety tak przedstawiona siła ciśnienia nie jest symetryczna. Takie oddziaływanie cząsteczek można przedstawić w przypadku interakcji dwóch cząsteczek: przy liczeniu siły ciśnienia

pierwsza cząsteczka i wykorzystuje jedynie wartość ciśnienia drugiej cząsteczki  $p_j$ , i na odwrót. « $p_i$  i  $p_j$  są różne» W ten sposób łamana jest III zasada dynamiki Newtona - siły wzajemnego oddziaływania cząsteczek nie mają takich samych wartości. Aby rozwiązać problem asymetryczności w tym miejscu stosuje się alternatywny wzór SPH (7) na gradient pola:

$$\boldsymbol{F}_{i}^{cisn} = -\nabla p(\boldsymbol{r}_{i}) = -\rho_{j} \sum_{j} m_{j} \left( \frac{p_{i}}{\rho_{i}^{2}} + \frac{p_{j}}{\rho_{j}^{2}} \right) \nabla W(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{j}, h)$$
(20)

#### 3.2.2 Lepkość

«zależy od pola prędkości»

$$\boldsymbol{F}_{i}^{lep} = \mu \nabla^{2} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}_{i}) = \mu \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} \boldsymbol{v}_{j} \nabla^{2} W(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{j}, h)$$
(21)

Podobnie jak w przypadku siły ciśnienia, tak przedstawiona siła lepkości jest asymetryczna. Korzystając jednak z «tego, że» lepkość zależy nie tyle od bezwzględnej prędkości płynu ale od różnic prędkości w płynie, naturalnym sposobem symetryzacji jest podstawienie w miejsce prędkości  $\boldsymbol{v}_i$  różnic prędkości dwóch cząsteczek:

$$\boldsymbol{F}_{i}^{lep} = \mu \nabla^{2} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}_{i}) = \mu \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{j}} (\boldsymbol{v}_{i} - \boldsymbol{v}_{j}) \nabla^{2} W(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{j}, h)$$
(22)

#### 3.2.3 Napięcie powierzchniowe

Napięcie powierzchniowe nie jest uwzględnione w równaniach Naviera-Stokesa, które dotyczą objętości cieczy, a nie jej powierzchni. Efekt napięcia powierzchniowego wprowadzany jest jako warunek brzegowy. Cząsteczki w płynie przyciągają się ze swoimi sąsiadami poprzez wzajemne oddziaływania. Podczas gdy wewnątrz płynu te oddziaływania się równoważą, na powierzchni płynu - gdzie występuje kontakt z innym ośrodkiem (np. powietrzem) - równowaga sił nie jest zachowana. W tym miejscu do gry wchodzi dodatkowa siła nazywana właśnie napięciem powierzchniowym. Powoduje ona dociskanie cząsteczek 'brzegowych' w kierunku normalnym do powierzchni płynu, o zwrocie 'do' tej powierzchni. Jednocześnie siła zmierza do minimalizacji zakrzywienia powierzchni. Im większe jest zakrzywienie powierzchni tym większa jest ta siła. Prowadzi to do 'wypłaszczenia' powierzchni płynu.

Zgodnie z powyższym paragrafem napięcie powierzchniowe zostanie obliczone jedynie dla cząsteczek będących na powierzchni płynu. Znaleźć je można poprzez tzw. pole kolorowe (ang. color field). Pole to przyjmuje wartość 1 wewnątrz objętości płynu (tj. wszędzie tam gdzie znajdują się cząsteczki) i 0 w pozostałych miejscach.:

$$c_S(\mathbf{r}_i) = \sum_i \frac{m_j}{\rho_i} W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h)$$
(23)

Obliczając gradient tego pola uzyskuje się informację o «normalnych/wektorach prostopadłych do» powierzchni płynu, skierowanych do jego wnętrza:

$$\boldsymbol{n}_i = \nabla c_S(\boldsymbol{r}_i) \tag{24}$$

Dywergencja gradientu pola to pole skalarne oznaczające długość wektorów normalnych powierzchni. Długości poszczególnych wektorów oznaczają wielkość zakrzywienia powierzchni w danym miejscu (tj. w miejscu czasteczki *i*):

$$\kappa_i = -\frac{\nabla^2 c_S(\boldsymbol{r}_i)}{\|\boldsymbol{n}_i\|} \tag{25}$$

Minus w powyższym równaniu pozwala na uzyskiwanie dodatnich wartości zakrzywienia dla powierzchni wypukłych.

Łącząc poszczególne elementy otrzymujemy wzór na siłę działającą na jednostkę powierzchni płynu (ang. surface traction):

$$t = \sigma \kappa \frac{n}{\|n\|} \tag{26}$$

Występująca w nim stała  $\sigma$  oznacza współczynnik napięcia powierzchniowego charakterystyczny dla substancji tworzącej płyn.

Aby obliczana siła była aplikowana tylko do cząsteczek znajdujących się na powierzchni wzór (26) mnoży się przez znormalizowane pole skalarne  $\delta = ||n||$ , które maleje wraz z oddalaniem się od powierzchni płynu (jest niezerowe jedynie dla cząsteczek na powierzchni). Ostatecznie wzór na siłę napięcia powierzchniowego wygląda następująco:

$$\boldsymbol{F}_{i}^{pow} = \delta_{i} \boldsymbol{t}_{i} = \sigma \kappa_{i} \boldsymbol{n}_{i} = -\sigma \nabla^{2} c_{S}(\boldsymbol{r}_{i}) \frac{\boldsymbol{n}_{i}}{\|\boldsymbol{n}_{i}\|}$$
(27)

Jak zostało wspomniane powyżej, wartość  $\|\boldsymbol{n}\|$  jest mała dla cząstek 'wewnątrz' płynu. Dzieląc przez tą wartość w powyższym równaniu wprowadza się potencjalną niestabilność numeryczną. Rozwiązaniem tego problemu jest obliczanie tego rówanania jedynie dla wartości  $\|\boldsymbol{n}\|$  przekraczających pewien stały próg l:

$$\|\boldsymbol{n}_i\| \ge l \tag{28}$$

gdzie l > 0.

#### 3.2.4 Siły zewnętrzne

Do symulacji można swobodnie dodawać kolejne siły, które wpływają na zachowanie się płynu. Może być to siła wywoływana przez interakcje użytkownika lub siła symulująca środowisko w jakim znajduje się płyn, np. siła grawitacji czy siła powstała na skutek kolizji płynu z «obiektem stałym».

# 3.3 Obsługa kolizji cząstek ze ścianami

- » spreżyste typu kelager
- » ambitniejsze sposoby: Interactive Simulation of Contrast Fluid using Smoothed Particle Hydrodynamics; A.Grahn

# 3.4 Symulacja

» Dyskusja nt. schematów

### 3.4.1 Schemat Verleta

Do całkowania równania (4) wykorzystywany jest schemat Verleta «ref kelager i link poniżej». Kolejne położenia cząstek są obliczane następującym wzorem:

$$\mathbf{r}_{t+\Delta t} = 2\mathbf{r}_t - \mathbf{r}_{t-\Delta t} + a_t \Delta t^2 \tag{29}$$

gdzie  $[\mathbf{r}_{t-\Delta t}, \mathbf{r}_t, \mathbf{r}_{t+\Delta t}]$  to położenia cząstki w kolejnych trzech chwilach czasowych,  $\Delta t$  to wilekość kroku czasowego a  $a_t$  to przyspieszenie wynikające z wypadkowych sił (opisanych w sekcji (3.2)) działających na cząstkę w danej chwili czasowej. Prędkość cząstki wylicza się na podstawie położenia w dwóch następnych chwilach czasowych:

$$\boldsymbol{v}_{t+\Delta t} = \frac{\boldsymbol{r}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_t}{\Delta t} \tag{30}$$

» Verlet: http://www.saylor.org/site/wp-content/uploads/2011/06/MA221-6.1.pdf

### 3.4.2 Schemat Leap-frog

# 4 Wizualizacja płynu

Wizualizacja płynu opiera się na metodzie opisanej w pracy «Goswami». W tym podejściu powierzchnia płynu reprezentowana jest przez pole wokseli. Każdy woksel zawiera dystans do najbliższej powierzchni. W ten sposób reprezentuje tzw. mapę odległości (ang. distance field). «foto jakiegos DF w 2d» Głównymi elementami opisywanej metody wizualizacji są: znalezienie cząsteczek na powierzchni płynu, konstrukcja mapy odległości oraz przeprowadzenie raycastingu.

«coś o MC z distance field»

## 4.1 Znalezienie cząsteczek powierzchniowych

Cząsteczki, które nie leżą na powierzchni płynu nie są potrzebne do jego wizualizacji i mogą zostać pominięte. Znacznie zmniejsza to koszt generacji mapy odległości za czym idzie przyśpieszenie procesu wizualizacji.

Znalezienie cząsteczek leżacych na powierzchni można przeprowadzić różnymi metodami. Jedna z nich wykorzystuje pole kolorowe (ang. color field) wykorzystywane przy obliczaniu napięcia powierzchniowego płynu. Ja zdecydowałem się jednak zaimplementować podejście oparte na obliczaniu odległości danej cząsteczki do punktu środka masy (ang. center of mass).

Cząsteczka i jest zaliczana do cząsteczek powierzchniowych jeżeli jej dystans do środka masy  $\mathbf{r}_{CM_i}$  jej sąsiedztwa jest większy niż pewna określona wartość. Środek masy można obliczyć poprzez zsumowanie pozycji wszystkich sąsiadujących cząsteczek (w układzie odniesienia i-tej czasteczki) ważone przez mase czasteczek:

$$\mathbf{r}_{CM_i} = \frac{\sum\limits_{j} m_j \mathbf{r}_j}{\sum\limits_{j} m_j} \tag{31}$$

Okazuje się jednak, że powyższy warunek jest niewystarczający w miejscach gdzie występuje niewiele cząsteczek. Dodatkowym «warunkeim» jest automatyczne zaliczenie cząsteczki do powierzchniowych gdy liczba cząsteczek w jej sąsiedztwie jest poniżej pewnego progu.

Jeżeli cząsteczka spełnia powyższe warunki, wpisywana jest do odpowiedniej tablicy. W przeciwnym wypadku jest po prostu pomijana.

«color field»

# 4.2 Konstrukcja mapy odległości

Mapa odległości zbudowana jest z jednorodnej trójwymiarowej siatki wokseli. Gęstość tej siatki ma istatne znaczenie dla wydajności jak i jakości odwzorowania płynu. Siatka o większej ilości wokseli pozwala na zachowanie większej ilości szczegółów ale wymaga więcej czasu na zbudowanie - czas ten rośnie w tempie  $O(n^3)$ . Wpływ na szybkość konstrukcji mapy ma również ilość cząsteczek powierzchniowych.

Podejście proponowane przez «Goswami» wygląda następująco: siatka wokseli inicjowana jest wartością maksymalną  $r_{max}$  « $r_{min} < r < r_{max}$ ?». Dana cząsteczka i otaczana jest sześcianem o boku długości r. Dla kadego woksela znajdującego się wewnątrz tego sześcianu obliczany jest dystans d do cząsteczki i. Wartość woksela określana jest według następującego wzoru:

$$d_v = min(d, d_v^{old}) \tag{32}$$

Jeśli d jest mniejsze niż  $r_{min}$ , to wokselowi zostaje przypisana wartość  $r_{min}$ . «teoretycznie  $r_{max}=r\sqrt{3},\,r_{min}=c::xyzminV$ »

«voxel-based, szacowanie dystansu do powierzchni w obrębie sąsiedztwa»

### 4.3 Renderowanie - GPU raycasting

W ostatnim kroku wizualizacji płynu dane zawarte w mapie odległości (przechowywanej w pamięci karty graficznej jako tekstura 3D) poddawane są procesowi raycastingu. Raycasting polega na przeprowadzeniu promienia przez renderowany obszar dla każdego fragmentu (piksela) obrazu; Dla każdego piksela wykonywany jest mały program - fragment shader - który inicjuje promień zberający krok po kroku próbki z danej objętości. Początek i koniec promienia muszą być znane przed uruchomieniem shadera. Dane te uzyskuje «się» przez uprzednie przeprowadzenie podwójnego

«'volume rendering', shadery, raycasting»

# 5 Implementacja

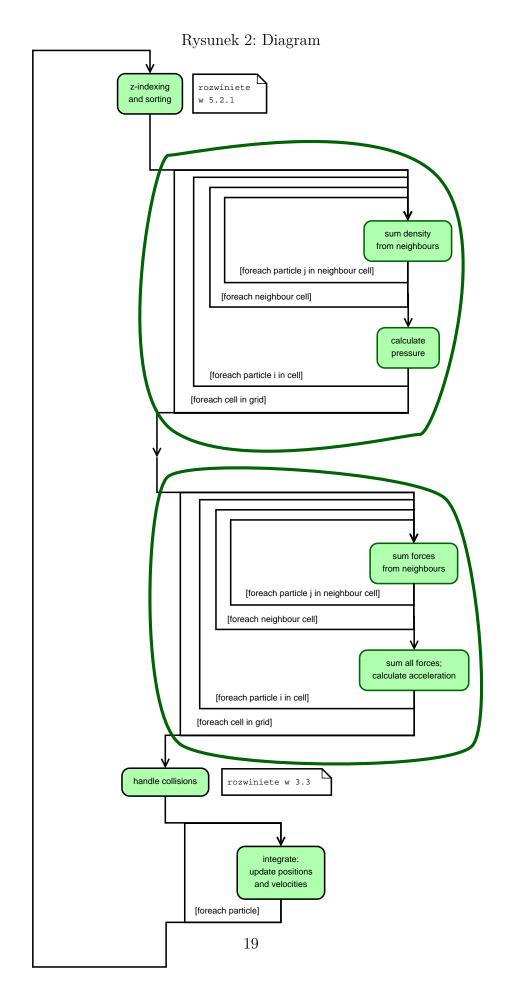
Przedstawioną metodę zaimplementowano w języku C++, przy użyciu elementów języka dodanych przy standaryzacji w wersji C++11/14. Wykorzystano również następujące biblioteki:

- glm (OpenGL Mathematics) biblioteka zawierająca funkcje i klasy wykorzystywane przy operacjach matematycznych. W zamyśle naśladuje zapis OpenGL Shading Language (GLSL).
- OpenGL (ang. Open Graphics Library) API służące do tworzenia grafiki.
- GLEW (OpenGL Extension Wrangler) biblioteka pomocna przy ładowaniu odpowiednich elementów biblioteki OpenGL.
- GLFW biblioteka zawiera zestaw funkcji ułatwiających m.in. tworzenie okna dla aplikacji wykorzystujących OpenGL i obsługę urządzeń wejściowych (klawiatury, myszki, joysticka).

Kod źródłowy aplikacji dostępny jest w publicznym repozytorium kodu pod adresem: https://github.com/filu005/SPH.

# 5.1 Algorytm

## 5.1.1 Schemat blokowy aplikacji



#### 5.1.2 Pseudokod algorytmu symulacji (?)

### 5.1.3 Złożoność obliczeniowa (?)

### 5.2 Optymalizacje

Wydajność aplikacji poprawiać można na wiele sposobów. Najwięcej czasu pochłaniają obliczenia matematyczne związane z symulacją. Tutaj z pomocą przychodzą metody wyszukiwania sąsiadów cząstki koniecznych do obliczenia fizycznych właściwości. Kolejnym 'wąskim gardłem' jest czas dostępu do pamięci RAM więc istotna jest lokalność danych i porządkowanie ich w pamięci podręcznej. Odrębnym tematem jest optymalizacja renderowania powierzchni płynu. «zrównoleglanie obliczeń i GPGPU»

### 5.2.1 Wyszukiwnie sąsiadów

«uniform grid - jednorodna siatka»

Obliczając parametr symulacji dla każdej cząsteczki przy użyciu SPH iteruje się po wszystkich pozostałych cząsteczkach. Jako, że dla każdej cząsteczki musimy poznać jej parametry, złożoność iteracyjna dla n cząsteczek jest «ograniczona przez»  $O(n^2)$ . Chcąc symulować płyn opisany liczbą cząsteczek rzędu 10'000 w czasie rzeczywistym, taka złożoność obliczeniowa jest niesatysfakcjonująca. Aby «zredukować» złożoność obliczeniową stosuje się metody wyszukiwania sąsiadów.

Wykorzystywane w symulacji jądra wygładzające posiadają tzw. promień odcięcia, który ogranicza zasięg jaki jest brany pod uwagę przy obliczaniu parametrów pojedynczej cząstki. Wiedząc, że cząstka wykorzystuje jedynie małą część innych cząstek do wyliczenia swoich parametrów, można znacznie skrócić czas obliczeń. W takim wypadku asymptotyczna złożoność obliczeniowa redukowana jest z  $O(n^2)$  do O(mn), gdzie m oznacza średnią liczbę sąsiadów cząstki. Ta liczba często nie przekracza wartości 30-40.

Jednym z typów struktur, które pozwalają poszeregować cząsteczki na grupy sąsiadów jest jednorodna siatka (ang. uniform grid). Cały obszar, w którym znajdują się cząsteczki - i mogą się znaleźć podczas przebiegu symulacji - dzielony jest na komórki. Obszar ten nie zmienia się przez cały czas trwania symulacji więc istotne jest aby cząsteczki nie miały szansy z niego 'uciec'. W przeciwnym wypadku algorytm nie będzie w stanie poprawnie znaleźć sąsiadów dla 'uciekinierów'. Przy obliczaniu parametrów cząsteczek znajdujących się w komórce X iteruje się tylko po tych cząsteczkach, które znajdują się w 26 komórkach «ref: (tj. w promieniu jednej

komórki; za wyjątkiem komórek znajdujących się na skraju obszaru)» sąsiadujących z komórką X. Rozmiar komórek również jest stały i jest równy najbliższej potędze dwójki większej od promienia odcięcia jądra wygładzającego. Przyjęcie takiego rozmiaru komórki zapewnia, że sąsiadujące komórki zawierają wszystkie cząsteczki wymagane do przeprowadzenia poprawnych obliczeń.

Każdej komórce może zostać przypisany indeks, który oblicza się **dla cząsteczki** według poniższego wzoru, na podstawie jej położenia:

$$c_{idx} = k + l * K + m * K * L \tag{33}$$

gdzie K i L to rozmiary obszaru symulacji w kierunkach x i y «uwaga, że K i L to potęgi dwójki aby nie wprowadzać niedokładności związanych z zaokrągleniami przy dzieleniu», a [k,l,m] to położenie komórki w globalnym układzie współrzędnych. «Implementacja funkcji w dodatku/listingu xxx».

Aby zachować optymalne ułożenie danych w pamięci podręcznej, tablica przechowująca cząsteczki jest sortowana ze względu na indeks komórek w której znajdują się cząsteczki - czyli pośrednio ze względu na ich położenie w obszarze symulacji. Dzięki temu cząsteczki znajdujące się w jednej komórce ułożone są blisko siebie również w pamięci. Nie oznacza to jednak, że cząsteczki z sąsiadujących komórek - które również biorą udział w obliczeniach - będą znajdywały się również niedaleko w pamięci. Aby zwiększyć wykorzystanie danych znajdujących się w pamięci podręcznej (ang. cache-hit) wykorzystywana jest Krzywa Hilberta/Krzywa-Z (ang. Hilbert space filling curve/Z-Curve) «ref Hilbert curve». Indeksowanie komórek i sortowanie cząsteczek według tej krzywej pozwala na ułożenie cząsteczek znajdujących się w sąsiadujących komórkach bliżej siebie w pamięci. «pomiary, grafika z z-curve»

Posortowanie cząsteczek pozwala również na uproszczenie struktury komórki, która przy takich założeniach przechowuje jedynie **adres pierwszej cząsteczki** w posortowanej tablicy i **liczbę cząsteczek** znajdujących się w danej komórce. «graficzna reprezentacja siatki, listing xxx»

Cały opisany powyżej proces optymalizacji wyszukiwania sąsiadów przedstawiony jest na poniższym schemacie:

Rysunek 3: Diagram indeksowania i szeregowania cząsteczek

clear grid

calculate z-index for each particle

insert-sort particles

in grid

bin particles

in grid

### 5.3 Całkowanie numeryczne

### 5.3.1 Krok czasowy

### 5.4 Parametry symulacji

Płyn symulowany metodą SPH można «formułować» nadając wartości kilku stałych opisujących ten płyn. Niektórych wartości parametrów nie można jednak przepisać bezpośrednio z tablic stałych fizycznych, ponieważ w «obszarze» na jakim przeprowadzana jest symulaja nie mają takiego sensu jak w rzeczywistym świecie i nie «powodują/inicjują» spodziewanych efektów. Ich wielkości muszą być także dostrajane z myślą o stabilności symulacji, na którą mają duży wpływ. Powyższe kwestie sprawiają, że ustawianie stałych płynu - przynajmniej na początkowych etapach implementacji symulatora - jest trudne i odbywa się metodą prób i błędów. Poniżej umieszczone zostały przykładowe wartości tych parametrów, które dobrze sprawdzają się dla symulacji płynów skonstruowanym algorytmem oraz wskazówki jak dobierać te wielkości.

### 5.4.1 Objętość symulowanego płynu oraz masa pojedynczej cząsteczki

#### 5.4.2 Promień odcięcia jądra wygładzającego

Promień odcięcia h wyrażany w [m] jest wartością mającą duży wpływ na stabilność i wydajność symulacji oraz jakość odwzorowania płynu. Określa on «'zasięg widzenia'» pojednczej cząsteczki, w którym to szuka swoich sąsiadów - cząsteczek wykorzystywanych do obliczeń parametrów tej cząsteczki. Im więcej sąsiadów, tym zoptymalizowany algorytm ich przeszukiwania (5.2.1) osiąga gorszą złóżoność, która z powrotem dąży do  $O(n^2)$ . Mylnym jest pojęcie o zwiększaniu dokładności symulacji wraz ze zwiększeniem promienia odcięcia. Od pewnego momentu zwiększanie tego parametru powoduje nienaturalne zachowanie się płynu. Siła ciśnienia, która jest odpowiedzialna za utrzymywanie odpowiednich odlegości pomiędzy cząsteczkami staje się zbyt duża i cząsteczki zlepiaja się w kulę lub torusa «foto».

Promień odcięcia może być również zbyt mały. W takim wypadku zbyt mała liczba cząstek jest brana pod uwagę przy obliczaniu parametrów i symulacja znowu staje się nienaturalna. Dodatkowo mały promień negatywnie wpływa na stabilność symulacji.

Ustawianie tego parametru, spowodowane przez jego duży wpływ na «charakter» symulacji, jest trudne. Często sprowadza się do wielokrotnego testowania ustawień tego parametru w

parze z innymi, mającymi wpływ na stabilność i wizualną jakość symulacji. «wyprobowac i moze opisac sposoby kelagera»

### 5.4.3 Gęstość spoczynkowa

Równanie (18) wykorzystuje gęstość spoczynkową do obliczenia ciśnienia dla pojedynczej cząsteczki. Mała wartość tego parametru powoduje, że siła ciśnienia pomiędzy cząsteczkami wzajemnie je odpycha. Odpowiednio go korygując powodujemy zmniejszenie się tej siły odpychającej. W pewnym momencie siła osiąga wartości ujemne i cząsteczki zaczynają się przyciągać. Zbyt duża wartość prowadzi do szybkiego wzrostu wartości ciśnienia co powoduje eksplozję numeryczną.

«odpowiednie ustawienie»

### 5.4.4 Lepkość

Stała występująca w równaniu (22) na siłę lepkości dostosowywana jest ze względu na pożądany «charakter» symulowanego płynu oraz efekt 'wygładzający', który zapobiega nagłym wzrostom prędkości cząsteczek i stabilizuje symulację. «...»

### 5.4.5 Napięcie powierzchniowe

«obecnie chyba blednie zaimplementowane; powoduje artefakty; TODO opis i odpowiednie ustawienie»

- 6 Wyniki
- 6.1 Prezentacja symulacji «foto»
- 6.2 Analiza wydajności
- 6.3 Analiza stabilności numerycznej

- 7 Podsumowanie, wnioski i dalszy rozwój
- 7.1 «Odpowiedź na założenia»
- 7.2 «Plany i pomysły na przyszłość»