

Analyse der Druckberechnung mithilfe einer Zustandsgleichung im Vergleich zur Lösung eines Gleichungssystems in SPH- Flüssigkeitssimulationen

Pascal Hunkler

May 2022

Inhaltsverzeichnis

1	Abstract	4
2	Einleitung	5
3	Grundlagen	6
3.1	Navier-Stokes-Gleichung und Flüssigkeitssimulationen	6
3.1.1	Partikelbasierte Simulation	6
3.1.2	Gitterbasierte Simulation	7
3.2	SPH	7
3.2.1	Diskretisierung mit SPH	7
3.2.2	SPH in partikelbasierten Simulationen	9
3.3	Zeitintegration	11
3.4	Grundlegender Aufbau einer partikelbasierten Flüssigkeitssimulation . . .	12
4	Druckberechnung	13
4.1	Druckberechnung mit einer Zustandsgleichung	13
4.2	Druckberechnung mit IISPH	14
4.2.1	Herleitung des Gleichungssystems	14
4.2.2	Lösung des Gleichungssystems	15
5	Implementierung	18
5.1	Programmierungsumgebung	18
5.2	Architektur der Software	18
5.3	Kernelfunktion, Kernelgradient	18
5.4	Nachbarschaftssuche	18
5.4.1	Uniformes Gitter Aufbau	18
5.4.2	Bestimmung der Nachbarn mithilfe des uniformen Gitters	18
5.5	Simulationsschritt	18
5.5.1	Berechnung der Dichte	18
5.5.2	Berechnung des Drucks	18
5.5.3	Berechnung der Druckbeschleunigung	18
5.5.4	Berechnung der restlichen Beschleunigungen	18
5.6	Visualisierung	18
6	Analyse	19
6.1	Szenarien	19

6.2	Rechen- und Speicheraufwand	19
6.3	Einfluss des Zeitschritts	19
7	Fazit und Ausblick	20
8	Literaturverzeichnis	21

1 Abstract

2 Einleitung

3 Grundlagen

3.1 Navier-Stokes-Gleichung und Flüssigkeitssimulationen

Dieser Abschnitt behandelt die Navier-Stokes-Gleichung, welche die Grundlage dafür bildet, Flüssigkeitssimulationen zu realisieren. Sie beschreibt die Änderungsrate der Geschwindigkeit eines kleinen volumetrischen Flüssigkeitselements. Für die Navier-Stokes-Gleichung gibt es verschiedene Formen, die auf den eulerschen Ansatz oder den lagrangeschen Ansatz beruhen. Diese Arbeit beschäftigt sich im Wesentlichen auf lagrangesche, partikelbasierte Simulationen, der Vollständigkeit wegen wird jedoch auch noch kurz auf eulersche, gitterbasierte Ansätze eingegangen. Die Inhalte dieses Abschnitts beziehen sich auf Ihmsen et al. [IOS⁺14].

3.1.1 Partikelbasierte Simulation

In einer lagrangeschen, partikelbasierten Flüssigkeitssimulation wird die Flüssigkeit in so genannte Partikel unterteilt, die sich mit der Flüssigkeit mitbewegen. Jedes Partikel nimmt ein Teilvolumen der Flüssigkeit ein und besitzt eine Masse. In einem partikelbasierten Ansatz kann die Navier-Stokes-Gleichung wie folgt beschrieben werden:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i + \nu\nabla^2\mathbf{v}_i + \frac{\mathbf{F}_i^{\text{other}}}{m_i} \quad (3.1)$$

Sie gibt die Änderungsrate der Geschwindigkeit $\frac{d\mathbf{v}_i}{dt}$ eines beweglichen Partikels mit Positionen \mathbf{x}_i nach Zeit an, welche durch verschiedene Beschleunigungen beeinflusst wird: Die Druckbeschleunigung $-\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i$, die Viskositätsbeschleunigung $\nu\nabla^2\mathbf{v}_i$, die durch die Viskosität ν beeinflusst wird, und der Einfluss anderer Kräfte $\frac{\mathbf{F}_i^{\text{other}}}{m_i}$, wie beispielsweise die Gravitation. Ziel einer partikelbasierten Simulation ist es, die verschiedenen Beschleunigungen zu berechnen, um die Geschwindigkeiten und Positionen der Partikel stets anzupassen. Eine Methode, um die Beschleunigungen an den Partikeln zu berechnen, ist Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), welches im nächsten Abschnitt vorgestellt wird. In partikelbasierten Simulationen muss regelmäßig die Nachbarschaft eines Partikels bestimmt werden, da diese frei beweglich sind und sich somit die Nachbarschaft ändert. Die Nachbarschaft eines Partikels wird benötigt, um die Beschleunigungen an einem Partikel mit SPH zu bestimmen. Im Gegensatz zu gitterbasierten Simulationen,

welche im nächsten Unterabschnitt vorgestellt werden, muss hier jedoch ein Term aus der Navier-Stokes-Gleichung weniger berechnet werden.

3.1.2 Gitterbasierte Simulation

In eulerschen, gitterbasierten Simulationen wird im Gegensatz zu partikelbasierten Simulationen mit Gittern statt Partikeln gearbeitet. Hier wird die Flüssigkeit nicht in frei bewegliche Partikel unterteilt, sondern in Teilvolumina, die fest an einem Ort sind und meist ein Gitter bilden. Die Navier-Stokes-Gleichung hat durch diesen anderen Ansatz folgende Form:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \nu \nabla^2 \mathbf{v}_i + \frac{\mathbf{F}_i^{\text{other}}}{m_i} - \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i \quad (3.2)$$

Betrachtet wird hier die Änderungsrate der Geschwindigkeit $\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t}$ an einer festen Position \mathbf{x}_i . Dadurch, dass die Positionen fest sind, kommt in der Navier-Stokes-Gleichung neben den Beschleunigungen noch der Term $-\mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i$ vor, welcher die Bewegung der Flüssigkeit ausgleicht. Im Gegensatz zu partikelbasierten Simulationen muss hier jedoch direkt erst einmal keine Nachbarschaftssuche stattfinden, da die Punkte nicht frei beweglich sind. Generell kann jedoch die Performance und Genauigkeit zwischen partikelbasierten und gitterbasierten nicht allgemein verglichen werden.

3.2 SPH

Das Konzept Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), ursprünglich formuliert von Lucy [Luc77] und unabhängig davon von Monaghan und Gingold [GM77], entstand ursprünglich aus dem Bereich der Astrophysik, wird aber heute auch in diversen anderen Bereichen, unter anderem auch der Computergrafik angewandt. Mithilfe von SPH kann durch Diskretisierung und Berechnung von Größen wie der Druckbeschleunigung oder der Viskositätsbeschleunigung die Navier-Stokes-Gleichung gelöst werden. Es eignet sich daher gut für partikelbasierte Simulationen.

3.2.1 Diskretisierung mit SPH

Die Inhalte dieses Abschnittes basieren hauptsächlich auf den Arbeiten von Monaghan [Mon05], von Price [Pri12] und von Koshier et al. [KBST20]. Für eine beliebige skalare Variable A gilt die Identität

$$A(\mathbf{x}) = \int A(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.3)$$

δ ist hierbei die Dirac'sche Deltafunktion, die definiert ist als

$$\delta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \infty, & \text{falls } \mathbf{x} = 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.4)$$

Die Dirac'sche Deltafunktion in Gleichung 3.3 kann mithilfe einer glättenden Kernelfunktion W mit endlicher Breite h approximiert werden.

$$A(\mathbf{x}) = \int A(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + O(h^2) \quad (3.5)$$

Damit die Approximation aus Gleichung 3.5 gültig ist, muss W folgende Eigenschaften besitzen:

$$\int_{\mathbb{R}^d} W(\mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1 \quad (\text{Normalisierung}) \quad (3.6)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x}, h) = \delta(\mathbf{x}) \quad (\text{Dirac-}\delta) \quad (3.7)$$

Weitere wünschenswerte Eigenschaften der Kernelfunktion W sind:

$$W(\mathbf{x}, h) \geq 0 \quad (\text{Positivität}) \quad (3.8)$$

$$W(\mathbf{x}, h) = W(-\mathbf{x}, h) \quad (\text{Symmetrie}) \quad (3.9)$$

$$W(\mathbf{x}, h) = 0 \text{ für } \|\mathbf{x}\| \geq h \quad (\text{Kompakter Support}) \quad (3.10)$$

$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, h \in \mathbb{R}^+$, während h der Kernelsupport ist. Eine beliebige Kernelfunktion ist der Cubic Spline Kernel [Mon92]. Er ist definiert als

$$W(\mathbf{x}, h) = \sigma_d \begin{cases} (2 - q)^3 - 4(1 - q)^3, & \text{für } 0 \leq q \leq 1 \\ (2 - q)^3, & \text{für } 1 \leq q \leq 2 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.11)$$

mit $q = \frac{1}{h} \|\mathbf{x}\|$. Der Kernelnormalisierungsfaktor σ_d ist abhängig von der Dimension d und beträgt für $d = 1, 2, 3$ $\sigma_1 = \frac{1}{6h}, \sigma_2 = \frac{5}{14\pi h^2}, \sigma_3 = \frac{1}{4\pi h^3}$. In der Literatur gibt es verschiedene Formulierungen für den Cubic Spline Kernel, die sich im Wesentlichen in der Parametrisierung unterscheiden. Der Vorteil dieser Kernelfunktion ist, dass die Eigenschaften zu Positivität, Symmetrie, und kompakten Support, erfüllt werden. Zudem erzielt Cubic Spline trotz seiner Einfachkeit gute Ergebnisse.

Um die Interpolation aus Gleichung 3.5 bei einer Flüssigkeit zu diskretisieren, wird die Flüssigkeit in mehrere Partikel unterteilt. Jedes Partikel f besitzt eine Masse m_f , Dichte ρ_f und Position \mathbf{x}_f . Der Wert von A an einem Partikel f wird notiert als A_f , die Approximation davon als $\langle A_f \rangle$. Der Integral aus Gleichung 3.5 kann nun durch eine Summe, und die Masse ρdV durch die Partikelmasse m_f ersetzt werden.

$$A(\mathbf{x}) = \int \frac{A(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \rho(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' + O(h^2) \quad (3.12)$$

$$\approx \sum_{f_f} m_{f_f} \frac{A_{f_f}}{\rho_{f_f}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{f_f}, h) =: \langle A_f \rangle \quad (3.13)$$

f_f sind hierbei alle Partikel der Flüssigkeit. $W(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{f_f}, h)$ wird ab nun durch W_{ff_f} abgekürzt. Da beispielsweise der Cubic Spline Kernel einen Kernsupport von $2h$ besitzt, muss hier nur über Partikel f_f summiert werden, die in direkter Nachbarschaft sind, da die Kernfunktion für Partikel, die weiter als $2h$ von dem Partikel f entfernt sind, null ist. Daher ist die Eigenschaft, dass der Support der Kernfunktion kompakt ist, wünschenswert.

Häufig ist es auch nötig, die Differentialoperatoren zu diskretisieren. Der Gradient einer Variable A kann durch folgende Approximation bestimmt werden:

$$\nabla A_f \approx \sum_{f_f} A_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \nabla W_{ff_f} \quad (3.14)$$

Diese Approximation hat eine Genauigkeit 0-ter Ordnung, wenn folgende Bedingung erfüllt wird:

$$\sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \nabla W_{ff_f} = \mathbf{0} \quad (3.15)$$

Wird zusätzlich die Bedingung

$$\sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} (\mathbf{x}_{f_f} - \mathbf{x}_f) \otimes \nabla W_{ff_f} = \mathbb{K} \quad (3.16)$$

erfüllt, hat sie eine Genauigkeit erster Ordnung. Ist \mathbf{A} höherdimensional, so können komplexere Differentialoperatoren wie folgt diskretisiert werden:

$$\nabla \mathbf{A}_f \approx \sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \mathbf{A}_{f_f} \otimes \nabla W_{ff_f} \quad (3.17)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_f \approx \sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \mathbf{A}_{f_f} \cdot \nabla W_{ff_f} \quad (3.18)$$

$$\nabla \times \mathbf{A}_f \approx - \sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \mathbf{A}_{f_f} \times \nabla W_{ff_f} \quad (3.19)$$

wobei $a \otimes b = ab^T$ das dyadische Produkt ist. Leider führen diese „direkten“ Ableitungen zu einer schlechten Approximationsqualität und instabilen Simulationen. Daher gibt es mittlerweile viele alternative Formulierungen für diese Differentialoperatoren. Zwei davon werden im nächsten Unterabschnitt gezeigt.

3.2.2 SPH in partikelbasierten Simulationen

Dieser Unterabschnitt basiert auf die Arbeit von Koshier et al. [KBST20]. Ziel einer partikelbasierten Simulation ist es, die Beschleunigungen zu bestimmen, die in der Navier-

Stokes-Gleichung angegeben sind. Die Navier-Stokes-Gleichung für einen partikelbasierten Ansatz hat folgende Form:

$$\frac{d\mathbf{v}_f}{dt} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_f + \nu \nabla^2 \mathbf{v}_f + \frac{\mathbf{F}_f^{\text{other}}}{m_f} \quad (3.20)$$

Es muss also in erster Linie die Druckbeschleunigung $-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_f$ und die Viskositätsbeschleunigung $\nu \nabla^2 \mathbf{v}_f$ bestimmt werden. Die SPH Diskretisierung einer Variable A sieht wie folgt aus:

$$A_f \approx \sum_{f_f} m_{f_f} \frac{A_{f_f}}{\rho_{f_f}} W_{ff_f} \quad (3.21)$$

Hieraus ist ersichtlich, dass zur Berechnung von A die Dichte ρ_f aller Partikel benötigt wird. Diese kann jedoch leicht ermittelt werden, indem in Gleichung 3.21 A durch ρ ersetzt wird. Der Faktor $\frac{\rho_{f_f}}{\rho_{f_f}}$ kürzt sich weg und man erhält:

$$\rho_f \approx \sum_{f_f} m_{f_f} \frac{\rho_{f_f}}{\rho_{f_f}} W_{ff_f} = \sum_{f_f} m_{f_f} W_{ff_f} \quad (3.22)$$

Für die Berechnung der Druckbeschleunigung $-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_f$ wird die Diskretisierung des Druckgradienten benötigt. Wie der Druck berechnet werden kann, wird im nächsten Kapitel vorgestellt. Ist der Druck berechnet, ist es naheliegend, die normale SPH Diskretisierung für den Gradienten zu verwenden:

$$-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_f \approx -\frac{1}{\rho_f} \sum_{f_f} A_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}} \nabla W_{ff_f} \quad (3.23)$$

Das Problem bei dieser Näherung ist jedoch, dass die daraus resultierende Beschleunigung nicht den Impuls und Drehimpuls der Flüssigkeit erhält, was zu einer instabilen Simulation führt. Für die Druckberechnung wird häufig stattdessen eine alternative Approximation verwendet, die auf folgender Diskretisierung des Gradienten einer Variable A beruht:

$$\nabla A_f \approx \rho_f \sum_{f_f} m_{f_f} \left(\frac{A_f}{\rho_f^2} + \frac{A_{f_f}}{\rho_{f_f}^2} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (3.24)$$

Der Vorteil an dieser Approximation ist, dass das eben genannte Problem, dass daraus resultierende Kräfte oder Beschleunigungen den Impuls und Drehimpuls der Flüssigkeit nicht erhalten, behoben wird. Dies ist essentiell für robuste, stabile Simulationen. Der Nachteil, der in Kauf genommen wird, ist, dass nun konstante oder lineare Gradienten nicht mehr exakt berechnet werden können. Berechnet man die Druckbeschleunigung anhand dieser Diskretisierung erhält man:

$$-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_f \approx -\sum_{f_f} m_{f_f} \left(\frac{p_f}{\rho_f^2} + \frac{p_{f_f}}{\rho_{f_f}^2} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (3.25)$$

Nun muss noch die Viskositätsbeschleunigung $\nu \nabla^2 \mathbf{v}_f$ berechnet werden. Die normale SPH Diskretisierung für den Laplace Operator ist bestimmt durch

$$\nabla^2 \mathbf{v}_f = \sum_{ff} \frac{m_{ff}}{\rho_{ff}} \mathbf{v}_{ff} \nabla^2 W_{ff} \quad (3.26)$$

Es hat sich jedoch gezeigt, dass die Verwendung der zweiten Ableitung der Kernelfunktion sensibel ist gegenüber Störungen der Partikelanordnung und zu schlechteren Ergebnissen führt als eine alternative Formulierung, die ohne die zweite Ableitung auskommt:

$$\nabla^2 \mathbf{v}_f = 2(d+2) \sum_{ff} \frac{m_{ff}}{\rho_{ff}} \frac{\mathbf{v}_{ff} \cdot \mathbf{x}_{ff}}{\|\mathbf{x}_{ff}\| + 0.01h^2} \nabla W_{ff} \quad (3.27)$$

$\mathbf{x}_{ff} = \mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{ff}$, $\mathbf{x}_{ff} = \mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{ff}$ und d ist die Anzahl der räumlichen Dimensionen. Schließlich erhält man zur Berechnung der Viskositätsbeschleunigung [KBST20]:

$$\nu \nabla^2 \mathbf{v}_f = 2(d+2)\nu \sum_{ff} \frac{m_{ff}}{\rho_{ff}} \frac{\mathbf{v}_{ff} \cdot \mathbf{x}_{ff}}{\|\mathbf{x}_{ff}\| + 0.01h^2} \nabla W_{ff} \quad (3.28)$$

Diese Formulierung erfüllt einige wünschenswerte Eigenschaften: Sie ist galilei-invariant, was bedeutet, dass beispielsweise in einer sich gleichmäßig bewegendes Flüssigkeit die Viskositätsbeschleunigung nicht sich anders verhält als in einer äquivalenten ruhenden Flüssigkeit. Es entsteht unter anderem auch keine Reibung, wenn alle Partikel gleichmäßig rotieren. Zudem wird der Impuls und Drehimpuls erhalten.

3.3 Zeitintegration

Sind in einer partikelbasierten Simulation die Beschleunigungen für den Druck, die Viskosität und die restlichen Beschleunigungen, wie z.B. die Gravitation berechnet, muss eine numerische Zeitintegration durchgeführt werden, um die Geschwindigkeiten und Positionen der Partikel zu aktualisieren. Häufig wird dazu das Euler-Cromer Verfahren genutzt. [KBST20] Die Position $\mathbf{x}_f^{t+\Delta t}$ und Geschwindigkeit $\mathbf{v}_f^{t+\Delta t}$ eines Partikels f zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ wird hier aus der berechneten Beschleunigung \mathbf{a}_f^t zum Zeitpunkt t wie folgt aktualisiert:

$$\mathbf{v}_f^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_f^t + \Delta t \mathbf{a}_f^t \quad (3.29)$$

$$\mathbf{x}_f^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_f^t + \Delta t \mathbf{v}_f^{t+\Delta t} \quad (3.30)$$

Δt ist hierbei die vergangene Zeit zwischen zwei Simulationsschritten, und wird auch als Zeitschritt bezeichnet.

Die Wahl des Zeitschritts Δt ist entscheidend für die Performanz und Stabilität der Simulation. Generell ist es gewollt, möglichst wenige Simulationsschritte berechnen zu müssen,

damit die Simulation insgesamt schneller berechnet wird. Daher wird ein möglichst großer Zeitschritt Δt gewählt. Ist der Zeitschritt jedoch zu groß gewählt, wird die numerische Integration ungenauer, was zu instabilen Simulationen führt, die zusammenbrechen. Um einen möglichst großen Zeitschritt zu wählen, der noch zu einer stabilen Simulation führt, kann sich an der CFL-Bedingung orientiert werden. Die CFL-Bedingung begrenzt den Zeitschritt Δt abhängig eines Parameters λ , der Partikelgröße \hbar , und der Geschwindigkeit des schnellsten Partikels \mathbf{v}^{max} :

$$\Delta t \leq \lambda \frac{\hbar}{\|\mathbf{v}^{max}\|} \quad (3.31)$$

Die Idee dahinter ist, dass für z.B. $\lambda = 1$ sich die Partikel nicht weiter als eine Partikelgröße bewegen. [KBST20]

3.4 Grundlegender Aufbau einer partikelbasierten Flüssigkeitssimulation

Dieser Abschnitt beschreibt, wie sich die Konzepte aus den vorigen Abschnitten und der Druckberechnung, die im nächsten Kapitel erklärt wird, kombinieren lassen, um daraus eine einfache Flüssigkeitssimulation umzusetzen. Zuerst wird für jedes Partikel f die Dichte berechnet mithilfe folgender Gleichung:

$$\rho_f = \sum_{ff} m_{ff} W_{ff} \quad (3.32)$$

Dann wird die Viskositätsbeschleunigung berechnet:

$$\mathbf{a}_f^v = 2(d+2)\nu \sum_{ff} \frac{m_{ff}}{\rho_{ff}} \frac{\mathbf{v}_{ff} \cdot \mathbf{x}_{ff}}{\|\mathbf{x}_{ff}\| + 0.01h^2} \nabla W_{ff} \quad (3.33)$$

Es wird dann eine vorläufige Geschwindigkeit \mathbf{v}_f^* der Partikel bestimmt, die unter dem Einfluss der Viskositätsbeschleunigung und anderen Beschleunigungen wie z.B. der Gravitation aus der ursprünglichen Geschwindigkeit \mathbf{v}_f^t durch eine Zeitintegration berechnet wird:

$$\mathbf{v}_f^* = \mathbf{v}_f^t + \Delta t (\mathbf{a}_f^v + \mathbf{a}_f^{ext}) \quad (3.34)$$

Nun muss noch der Druck der Partikel p_f berechnet werden. Dies wird im nächsten Kapitel beschrieben. Wenn der Druck berechnet ist, wird die Druckbeschleunigung an jedem Partikel berechnet:

$$\mathbf{a}_f^p = - \sum_{ff} m_{ff} \left(\frac{p_f}{\rho_f^2} + \frac{p_{ff}}{\rho_{ff}^2} \right) \nabla W_{ff} \quad (3.35)$$

Anschließend werden die Geschwindigkeit und Position jedes Partikels aktualisiert:

$$\mathbf{v}_f^{t+\Delta t} = \mathbf{v}_f^* + \Delta t \mathbf{a}_f^p \quad (3.36)$$

$$\mathbf{x}_f^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_f^t + \Delta t \mathbf{v}_f^{t+\Delta t} \quad (3.37)$$

4 Druckberechnung

Dieses Kapitel behandelt die Druckberechnung in partikelbasierten Flüssigkeitssimulationen. Die Berechnung des Drucks ist Voraussetzung für die Bestimmung der Druckbeschleunigung, welche Teil der Navier-Stokes-Gleichung ist. Es werden zwei Methoden vorgestellt, um den Druck zu bestimmen: Die Druckberechnung mithilfe einer Zustandsgleichung und das globale Berechnen des Drucks, welches von einer inkompressiblen Flüssigkeit ausgeht, mithilfe von Implicit Incompressible SPH (IISPH) [ICS⁺14], welches auf Incompressible SPH (ISPH) [SL03] aufbaut.

4.1 Druckberechnung mit einer Zustandsgleichung

Eine Methode, um den Druck zu berechnen, ist das Verwenden einer Zustandsgleichung. Hierbei wird der Druck direkt aus der Abweichung der berechneten Dichte ρ_f eines Partikels von der Ruhedichte ρ^0 bestimmt. Ein Beispiel für eine solche Gleichung ist folgende:

$$p_f = \max \left(k \left(\frac{\rho_f}{\rho^0} - 1 \right), 0 \right) \quad (4.1)$$

Der Druck ist immer positiv, da es sonst zu Problemen kommt, wenn $\rho_f < \rho^0$, was vor allem an der Oberfläche der Flüssigkeit auftritt, da die Partikel an der Oberfläche weniger Nachbarn haben. Die Konstante k ist eine Steifigkeitskonstante. In [KBST20] ist beschrieben, dass die Wahl von k einen Einfluss auf die Dichteabweichung hat. Größere Werte für k führen zu einer geringeren Dichteabweichung, jedoch muss ein kleinerer Zeitschritt gewählt werden, da die Simulation sonst instabil wird. Kleinere Werte für k hingegen führen zu größeren Dichteabweichungen und damit auch zu weniger realistischen Simulationen. Anschaulich erklären lässt sich dies anhand eines Beispiels mit einer ruhenden Flüssigkeit, die unter dem Einfluss von Gravitation steht. Da die Flüssigkeit ruht, gilt

$$\mathbf{g} - \frac{1}{\rho_f} \nabla p_f = \mathbf{0} \quad (4.2)$$

Durch Diskretisierung des Druckgradienten erhält man

$$\mathbf{g} = \sum_{f_f} m_{f_f} \left(\frac{p_f}{\rho_f^2} + \frac{p_{f_f}}{\rho_{f_f}^2} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (4.3)$$

Verwendet man beispielsweise die Zustandsgleichung $p_f = k(\rho_f - \rho^0)$ erhält man daraus

$$\mathbf{g} = k \sum_{ff} m_{ff} \left(\frac{\rho_f - \rho^0}{\rho_f^2} + \frac{\rho_{ff} - \rho^0}{\rho_{ff}^2} \right) \nabla W_{ff} \quad (4.4)$$

Die Gravitation ist konstant, also kann man aus dieser Gleichung schließen, dass sich insgesamt aus einer großen Steifigkeitskonstante k geringere Dichteabweichungen ergeben.

4.2 Druckberechnung mit IISPH

Dieser Abschnitt behandelt die Druckberechnung mit der IISPH-Methode. Implicit Incompressible SPH (IISPH) wurde erstmals von Ihmsen et al. entwickelt [ICS⁺14], worauf dieser Abschnitt auch basiert. Im Gegensatz zu Standard SPH (SSPH), also der Druckberechnung durch eine Zustandsgleichung, wird hier ein lineares Gleichungssystem gelöst, um den Druck der Partikel zu berechnen.

4.2.1 Herleitung des Gleichungssystems

Um das lineare Gleichungssystem herzuleiten, wird erst einmal die Kontinuitätsgleichung betrachtet:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (4.5)$$

Die Kontinuitätsgleichung stellt einen Zusammenhang her zwischen der Änderungsrate der Dichte und der Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes. Diese Gleichung wird dann diskretisiert, indem die Änderungsrate der Dichte durch den Vorwärtsdifferenzquotienten $\frac{\rho_f(t+\Delta t) - \rho_f(t)}{\Delta t}$ ersetzt und die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes durch das SPH-Konzept der Divergenz $\nabla \cdot \mathbf{v}_f = -\frac{1}{\rho_f} \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{v}_{ff} \nabla W_{ff}$. Dadurch erhält man:

$$\frac{\rho_f(t + \Delta t) - \rho_f(t)}{\Delta t} = \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{v}_{ff}(t + \Delta t) \nabla W_{ff}(t) \quad (4.6)$$

$\mathbf{v}_{ff}(t + \Delta t)$ ist hierbei $\mathbf{v}_f(t + \Delta t) - \mathbf{v}_{ff}(t + \Delta t)$. Diese Geschwindigkeiten basieren auf Druckbeschleunigungen, welche linear in den Werten für den Druck sind, da

$$\mathbf{a}_f^p = - \sum_{ff} m_{ff} \left(\frac{p_f}{\rho_f^2} + \frac{p_{ff}}{\rho_{ff}^2} \right) \nabla W_{ff} \quad (4.7)$$

Verwendet man das Euler-Cromer Verfahren, so kann die Geschwindigkeit eines Partikels zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ wie folgt geschrieben werden:

$$\mathbf{v}_f(t + \Delta t) = \mathbf{v}_f(t) + \Delta t \left(\mathbf{a}_f^{nonp} + \mathbf{a}_f^p \right) \quad (4.8)$$

\mathbf{a}_f^{nonp} ist hierbei die Beschleunigung, die durch die Viskosität und andere Kräfte wie die Gravitation, entsteht. Wir betrachten ebenfalls die geschätzte Zwischen-Geschwindigkeit \mathbf{v}_f^* :

$$\mathbf{v}_f^* = \mathbf{v}_f(t) + \Delta t \mathbf{a}_f^{nonp} \quad (4.9)$$

Durch diese Zwischen-Geschwindigkeit entsteht auch eine Zwischen-Dichte

$$\rho_f^* = \rho_f(t) + \Delta t \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{v}_{ff}^* \nabla W_{ff}(t) \quad (4.10)$$

Zudem gilt:

$$\mathbf{v}_f(t + \Delta t) = \mathbf{v}_f^* + \Delta t \mathbf{a}_f^p \quad (4.11)$$

Setzt man (4.11) in (4.6) ein, kann man Umformen:

$$\frac{\rho_f(t + \Delta t) - \rho_f(t)}{\Delta t} = \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{v}_{ff}(t + \Delta t) \nabla W_{ff}(t) \quad (4.12)$$

$$= \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{v}_{ff}^* \nabla W_{ff}(t) + \Delta t \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{a}_{ff}^p \nabla W_{ff}(t) \quad (4.13)$$

$$= \frac{\rho_f^* - \rho_f(t)}{\Delta t} + \Delta t \sum_{ff} m_{ff} \mathbf{a}_{ff}^p \nabla W_{ff}(t) \quad (4.14)$$

Da wir erreichen wollen, dass die Dichte $\rho_f(t + \Delta t)$ die Ruhedichte ist, damit die Partikel in einem unkomprimierten Zustand sind, wird $\rho_f(t + \Delta t) = \rho^0$ angenommen. Mit Umformen erhält man dann:

$$\Delta t^2 \sum_{ff} m_{ff} \left(\mathbf{a}_f^p - \mathbf{a}_{ff}^p \right) \nabla W_{ff}(t) = \rho^0 - \rho_f^* \quad (4.15)$$

Setzt man nun (4.7) in (4.15) ein, ist der Druck linear und man erhält ein lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{A}(t) \mathbf{p}(t) = \mathbf{b}(t) \quad (4.16)$$

Für jedes Partikel haben wir eine Gleichung der Form

$$\sum_{ff} a_{ff} p_{ff} = b_f = \rho_0 - \rho_f^* \quad (4.17)$$

4.2.2 Lösung des Gleichungssystems

Das Gleichungssystem, das gelöst werden muss, um den Druck zu berechnen, kann mit verschiedenen Methoden gelöst werden. Empfohlen von Ihmsen et al. [ICS⁺14] ist es, das relaxierte Jacobi-Verfahren anzuwenden, die Herangehensweise dazu ist in [ICS⁺14]

ebenfalls beschrieben, worauf dieser Unterabschnitt auch basiert. Hierzu werden die Werte für den Druck p_f wie folgt iterativ gelöst:

$$p_f^{l+1} = (1 - \omega)p_f^l + \omega \frac{\rho^0 - \rho_f^* - \sum_{f_f \neq f} a_{ff_f} p_{f_f}^l}{a_{ff}} \quad (4.18)$$

l ist hierbei der Iterationsindex und ω der Relaxierungsfaktor. Um dies zu berechnen, werden die Diagonalwerte a_{ff} der Matrix \mathbf{A} benötigt und $\sum_{f_f \neq f} a_{ff_f} p_{f_f}^l$. Diese können jedoch effektiv berechnet werden. Um die Koeffizienten zu extrahieren, betrachten wir den Term $\Delta t^2 \mathbf{a}_f^p$:

$$\Delta t^2 \mathbf{a}_f^p = -\Delta t^2 \sum_{f_f} m_{f_f} \left(\frac{p_f}{\rho_f^2} + \frac{p_{f_f}}{\rho_{f_f}^2} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (4.19)$$

$$= \underbrace{\left(-\Delta t^2 \sum_{f_f} \frac{m_{f_f}}{\rho_f^2} \nabla W_{ff_f} \right)}_{\mathbf{d}_{ff}} p_f + \sum_{f_f} \underbrace{-\Delta t^2 \frac{m_{f_f}}{\rho_{f_f}^2} \nabla W_{ff_f}}_{\mathbf{d}_{ff_f}} p_{f_f} \quad (4.20)$$

Dies kann nun in (4.15) eingesetzt werden, daraus erhält man:

$$\rho^0 - \rho_f^* = \sum_{f_f} m_{f_f} \left(\mathbf{d}_{ff} p_f + \sum_{f_f} \mathbf{d}_{ff_f} p_{f_f} - \mathbf{d}_{ff_f f} p_{f_f} - \sum_{f_{ff}} \mathbf{d}_{ff_{ff}} p_{ff_{ff}} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (4.21)$$

Beachtet werden muss, dass in $\sum_{f_{ff}} \mathbf{d}_{ff_{ff}} p_{ff_{ff}}$ auch Druckwerte p_f vorkommen, da f und f_f Nachbarn sind. Um diese Werte zu separieren, können wir auch schreiben

$$\sum_{f_{ff}} \mathbf{d}_{ff_{ff}} p_{ff_{ff}} = \sum_{f_{ff} \neq f} \mathbf{d}_{ff_{ff}} p_{ff_{ff}} + \mathbf{d}_{ff f} p_f \quad (4.22)$$

Nun können wir die Teile mit Werten p_f von den Teilen mit Werten p_{f_f} und $p_{ff_{ff}}$ in (4.21) trennen. Daraus erhält man:

$$\rho^0 - \rho_f^* = p_f \sum_{f_f} m_{f_f} (\mathbf{d}_{ff} - \mathbf{d}_{ff_f}) \nabla W_{ff_f} + \quad (4.23)$$

$$\sum_{f_f} m_{f_f} \left(\sum_{f_f} \mathbf{d}_{ff_f} p_{f_f} - \mathbf{d}_{ff_f f} p_{f_f} - \sum_{f_{ff} \neq f} \mathbf{d}_{ff_{ff}} p_{ff_{ff}} \right) \nabla W_{ff_f} \quad (4.24)$$

Jetzt können die Koeffizienten a_{ff} einfach berechnet werden durch

$$a_{ff} = \sum_{f_f} m_{f_f} (\mathbf{d}_{ff} - \mathbf{d}_{ff_f}) \nabla W_{ff_f} \quad (4.25)$$

Der iterative Schritt in (4.18) kann nun berechnet werden durch

$$p_f^{l+1} = (1 - \omega)p_f^l + \omega \frac{1}{a_{ff}} \left(\rho^0 - \rho_f^* - \right. \quad (4.26)$$

$$\left. \sum_{ff} m_{ff} \left(\sum_{ff} \mathbf{d}_{ff} p_{ff} - \mathbf{d}_{ff} p_{ff} - \sum_{ff \neq f} \mathbf{d}_{ff} p_{ff} \right) \nabla W_{ff} \right) \quad (4.27)$$

5 Implementierung

5.1 Programmierumgebung

5.2 Architektur der Software

5.3 Kernelfunktion, Kernelgradient

5.4 Nachbarschaftssuche

5.4.1 Uniformes Gitter Aufbau

5.4.2 Bestimmung der Nachbarn mithilfe des uniformen Gitters

5.4.3

5.5 Simulationsschritt

5.5.1 Berechnung der Dichte

5.5.2 Berechnung des Drucks

5.5.3 Berechnung der Druckbeschleunigung

5.5.4 Berechnung der restlichen Beschleunigungen

5.6 Visualisierung

6 Analyse

6.1 Szenarien

6.2 Rechen- und Speicheraufwand

6.3 Einfluss des Zeitschritts

6.4

7 Fazit und Ausblick

8 Literaturverzeichnis

Literaturverzeichnis

- [GM77] Robert A. Gingold and Joseph J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly notices of the royal astronomical society*, 181(3):375–389, 1977. ISBN: 1365-2966 Publisher: Oxford University Press Oxford, UK.
- [ICS⁺14] Markus Ihmsen, Jens Cornelis, Barbara Solenthaler, Christopher Horvath, and Matthias Teschner. Implicit Incompressible SPH. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 20(3):426–435, March 2014.
- [IOS⁺14] Markus Ihmsen, Jens Orthmann, Barbara Solenthaler, Andreas Kolb, and Matthias Teschner. SPH fluids in computer graphics. In *EUROGRAPHICS 2014/S. LEFEBVRE AND M. SPAGNUOLO*. Citeseer, 2014.
- [KBST20] Dan Koschier, Jan Bender, Barbara Solenthaler, and Matthias Teschner. Smoothed particle hydrodynamics techniques for the physics based simulation of fluids and solids. *arXiv preprint arXiv:2009.06944*, 2020.
- [Luc77] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82:1013, December 1977.
- [Mon92] Joe J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual review of astronomy and astrophysics*, 30:543–574, 1992. ISBN: 0066-4146.
- [Mon05] Joe J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on progress in physics*, 68(8):1703, 2005. ISBN: 0034-4885 Publisher: IOP Publishing.
- [Pri12] Daniel J. Price. Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 231(3):759–794, February 2012.
- [SL03] Songdong Shao and Edmond Y.M. Lo. Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface. *Advances in Water Resources*, 26(7):787–800, July 2003.

Algorithm 1 Simulationsschritt

```
1: Determine neighbors of each particle
2: Compute density  $\rho_f$  of each fluid particle using algorithm 2
3: Compute non-pressure accelerations  $\mathbf{a}_f^n$  using algorithm 3
4: for all fluid particle f do
5:    $\mathbf{v}_f^* \leftarrow \mathbf{v}_f + \Delta t \mathbf{a}_f^n$ 
6: end for
7: Compute pressure  $p_f$  of each fluid particle using algorithm 5
8: Compute pressure accelerations  $\mathbf{a}_f^p$  using algorithm 4
9: for all fluid particle f do
10:   $\mathbf{v}_f \leftarrow \mathbf{v}_f^* + \Delta t \mathbf{a}_f^p$ 
11: end for
12: for all fluid particle f do
13:   $\mathbf{x}_f \leftarrow \mathbf{x}_f + \Delta t \mathbf{v}_f$ 
14: end for
15:
```

Algorithm 2 Berechnung der Dichte der Partikel

```
for all particle i do
  if particle i belongs to the boundary then
    continue
  end if
   $\rho_i \leftarrow 0$ 
  for all neighbor j of particle i do
     $\rho_i \leftarrow \rho_i + W_{ij}$ 
  end for
   $\rho_i \leftarrow \rho_i \cdot m_f$ 
end for
```

Algorithm 3 Berechnung der restlichen Beschleunigungen

```
for all particle i do
  if particle i belongs to the boundary then
     $\mathbf{a}_i^n \leftarrow (0 \ 0)^\top$ 
    continue
  end if
   $\mathbf{acc}_g \leftarrow (0 \ -9.81)^\top$ 
   $\mathbf{acc}_v \leftarrow (0 \ 0)^\top$ 

  // Viskositätsbeschleunigung an Partikel i
  for all neighbor j of particle i do
    if particle j belongs to the boundary then
       $\mathbf{acc}_v \leftarrow \mathbf{acc}_v + \frac{1}{\rho_i} \frac{(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + 0.01h^2} \cdot \nabla W_{ij}$ 
    else
       $\mathbf{acc}_v \leftarrow \mathbf{acc}_v + \frac{1}{\rho_j} \frac{(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + 0.01h^2} \cdot \nabla W_{ij}$ 
    end if
  end for
   $\mathbf{acc}_v \leftarrow 2\nu m_f \cdot \mathbf{acc}_v$ 

   $\mathbf{a}_i^n \leftarrow \mathbf{acc}_g + \mathbf{acc}_v$ 
end for
```

Algorithm 4 Berechnung der Druckbeschleunigungen

```
for all particle i do
  if particle i belongs to the boundary then
     $\mathbf{a}_i^p \leftarrow (0 \ 0)^\top$ 
    continue
  end if
   $\mathbf{acc}_p \leftarrow (0 \ 0)^\top$ 

  // Druckbeschleunigung an Partikel i
  for all neighbor j of particle i do
    if particle j belongs to the boundary then
       $\mathbf{acc}_p \leftarrow \mathbf{acc}_p - \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{(\rho_f^0)^2} \right) \cdot \nabla W_{ij}$ 
    else
       $\mathbf{acc}_p \leftarrow \mathbf{acc}_p - \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla W_{ij}$ 
    end if
  end for
   $\mathbf{acc}_p \leftarrow \mathbf{acc}_p \cdot m_f$ 

   $\mathbf{a}_i^p \leftarrow \mathbf{acc}_p$ 
end for
```

Algorithm 5 Berechnung des Drucks der Partikel

```
1: for all fluid particle f do
2:    $A_{ff} \leftarrow -\Delta t^2 \frac{m_f^2}{\rho_f^2} \cdot \left( \sum_{ff} \nabla W_{ff} \nabla W_{ff} + \sum_{fb} \nabla W_{fb} \nabla W_{fb} \right)$ 
3:    $s_f \leftarrow \rho_f^0 - \rho_f - m_f \Delta t \left( \sum_{ff} (\mathbf{v}_f^* - \mathbf{v}_{ff}^*) \nabla W_{ff} + \sum_{fb} \mathbf{v}_f^* \nabla W_{fb} \right)$ 
4:    $p_f \leftarrow 0$ 
5: end for
6:  $e \leftarrow \infty$ 
7: while  $e \geq 0.001$  do
8:    $e \leftarrow 0$ 
9:   Compute pressure accelerations  $\mathbf{a}_f^p$  using algorithm 4
10:  for all fluid particle f do
11:     $(\mathbf{A}p)_f \leftarrow m_f \Delta t^2 \left( \sum_{ff} (\mathbf{a}_f^p - \mathbf{a}_{ff}^p) \nabla W_{ff} + \sum_{fb} \mathbf{a}_f^p \nabla W_{fb} \right)$ 
12:    if f has no neighbors then
13:       $(\mathbf{A}p)_f \leftarrow 0$ 
14:    end if
15:     $p_f \leftarrow \max(p_f + \omega \frac{s_f - (\mathbf{A}p)_f}{\mathbf{A}_{ff}}, 0)$ 
16:     $e \leftarrow e + \frac{(\mathbf{A}p)_f - s_f}{\rho_f^0}$ 
17:  end for
18:   $e \leftarrow \frac{e}{n}$ 
19: end while
```
