



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Építőmérnöki Kar  
Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Tézisfüzet doktori értekezéshez

# **Újszerű hálómentes modellezési algoritmus alkalmazása hidraulikai feladatok vizsgálatára**

**Havasi-Tóth Balázs**

Témavezető: Dr. Szabó Kálmán Gábor

Budapest, 2020. január 16.



## Bevezetés, előzmények

Parciális differenciálegyenletek közelítő megoldásának előállítására számos numerikus módszer létezik, melyeket különböző szempontok, például a diszkretizációs eljárás jellege szerint is osztályozhatunk. Bár a részecskealapú, hálómentes numerikus módszerek ötlete közel egyidős a hálóalapú módszerekével, a numerikus modellezési területen közel fél évszázadig a hálóalapú módszerek alkalmazása dominált. A részecskealapú módszerek területén jelentős fejlődések lényegében csak az 1990-es években születtek, mára azonban számos területen bizonyították létjogosultságukat. Ide tartoznak a diszkrét elemes módszerek, illetve a különböző kollokációs módszerek is. A napjainkban legelterjedtebb részecskealapú numerikus módszer a simított részecskekinematika módszere (SPH – smoothed particle hydrodynamics), melyet az elmúlt évtizedekben az áramlástan problémák széles skáláján alkalmaztak sikeresen.

A részecskealapú módszerekre az előnyös tulajdonságaiknak köszönhetően növekvő érdeklődés mutatkozik a műszaki alkalmazások számos területén. A hálóalapú módszerekkel szemben a részecskealapú módszerek igen hatékony és rugalmas térbeli diszkretizációt tesznek lehetővé tetszőleges geometriájú, akár jelentős topológiai változással járó folyamatok esetén. Ezen megközelítések általában alapvetően eltérő elméleti megfontolásokon alapulnak a hálóalapú módszerekhez képest, ilyenek például a csomópontok közötti belső struktúra hiánya, a szomszédsági viszonyok folyamatos változása, és a számítási tartomány átlapoló lefedése. Ezen különbségekből fakadóan a részecske- és hálóalapú módszerek jelentősen eltérő tulajdonságokkal és alkalmazhatósági körökkel rendelkeznek, ezért jellemzően nem konkurens, hanem egymást kiegészítő numerikus módszereknek tekinthetők a hálóalapú módszerekkel.

A tudományos valamint műszaki célú modellezés területein egyaránt újszerűnek számító részecskealapú megközelítés alkalmazása azonban jelenleg komoly nehézségekbe ütközik. A rendelkezésre álló nyílt forráskódú szoftverek általában nem rendelkeznek kielégítő rugalmassággal sem a matematikai modell, sem az alkalmazott numerikus módszerek tekintetében. Mivel maguk a módszerek is gyorsan változnak, a modellezési folyamat során az új elméletek alkalmazását a szoftverek fejlesztőinek döntései korlátozhatják. Ennek hatására a modellezés során általában elkerülhetetlen az algoritmusok saját, jellemzően specializált implementációja.

A hálóalapú módszerek esetében már ismert megközelítés a matematikai modellek és a numerikus módszerek szétválasztása, melynek köszönhetően lényegesen rugalmasabb és általánosabb felhasználhatóságot biztosító algoritmusok állnak rendelkezésre (pl. FEniCS, OpenFoam). Bár az elmúlt két évtizedben az ilyen eszközök jelentős sikereket értek el műszaki és főként tudományos alkalmazások

területén, a hálómentes modellezés esetében csak az elmúlt években jelentek meg hasonló eszközök.

Értekezésemben egy újszerű megközelítésen alapuló általános célú hálómentes modellezési algoritmust és annak implementációját mutatom be, majd alkalmazom különböző dinamikai problémák vizsgálatára.

## **Célkitűzések**

A doktori munkám során egy hálómentes numerikus módszerek alkalmazását valamint fejlesztését lehetővé tevő tudományos célú modellezési algoritmus megtervezése és implementálása volt a célom. Az algoritmussal szemben az alábbi elvárásokat fogalmaztam meg:

- a vizsgálandó matematikai modellek, és a numerikus módszerek teljes szétválasztása,
- egy háromszintű absztrakción keresztül a matematikai modellek szabad definiálását programozási feladat nélkül (alsó szint: alacsony szintű algoritmusok, középső szint: interakciók definíciója, felső szint: matematikai modell definíciója),
- a numerikus módszerek egyszerű implementációját a megoldó mélyebb ismerete nélkül.

Ezt követően a megoldó alkalmazására vonatkozóan az alábbi célokat tűztem ki:

- egy választott részecskealapú módszer, a simított részecskekinematika (smoothed particle hydrodynamics - SPH) implementációja,
- az algoritmus és az SPH implementációjának verifikációja egyszerű hidrodinamikai teszteseten keresztül,
- különböző hidrodinamikai modellek vizsgálata az implementált megoldó segítségével, a sekélyvízi egyenlet hálómentes megoldása, kiegészítése sekély tavak térben és időben állandó szél-nyírófeszültségek által keltett cirkulációs áramlásainak modellezésére,
- az SPH módszer térben változó felbontású, adaptív variánsának fejlesztése az általános célú megoldó segítségével.

## **Az alkalmazott numerikus módszer**

A célkitűzésnek megfelelő algoritmus implementációját C++-ban végeztem, amely kellő szabadságot és széles eszköztárat biztosít az algoritmus háromszintű absztrakciójának szoftverbe való átültetéséhez.

Bár az algoritmus fejlesztése során lényeges szempont volt az általánosság, azaz a matematikai modell szabad definiálhatósága és konfigurálhatósága mellett a

numerikus módszerek tetszőleges megválasztása is, jelen munkámban a széles körben ismert simított részecskekinamika módszer alkalmazására szorítkoztam.

A konvencionális SPH egy tisztán hálómentes, explicit, lagrange-i kollokációs módszer, melynek segítségével parciális differenciálegyenletek megoldása közelíthető úgy, hogy a kontinuum közeghez tartozó egyenleteket egymással kölcsönhatásban álló anyagi pontok dinamikáját leíró közönséges differenciálegyenlet-rendszerre, azaz egy lényegesen egyszerűbben, numerikus integrálással megoldható rendszerre vezeti vissza. A módszer áramlástani, hidrodinamikai vonatkozása lagrange-i jellegéből adódóan igen jelentős, hiszen nagy hatékonysággal alkalmazható nagyon komplex, nyílt felszínű, tehetetlenségi erők által dominált időfüggő áramlások modellezésére, amelyek esetében a hálóalapú numerikus módszerek jelentős nehézségekbe ütköznek. Munkám során az SPH módszer alkalmazásával modelleztem gyengén összenyomhatónak feltételezett közeget a Navier-Stokes egyenletek közelítő megoldásával két- és háromdimenziós áramlások esetén, valamint vizsgáltam sekély tavak cirkulációs áramlását a kétdimenziós, mélységátlagolt sekélyvízi egyenletek megoldásával. A megoldó egyszerű konfigurálhatóságának köszönhetően felépítettem egy kapcsolt fázis-oszcillátorok dinamikájának vizsgálatát lehetővé tevő modellt, melye gyengített kapcsolású rendszerek modellezésére alkalmaztam.

## Eredmények ismertetése, tézispontok

A tudományos célú részecskealapú numerikus modellezés területén egyértelmű igény mutatkozik az általános célú, a matematikai modellek szabad definícióját lehetővé tevő numerikus megoldókra. A hasonló, de hálóalapú eszközök által motiválva kezdtem meg a fent ismertetett célokat kielégítő algoritmus tervezését és implementációját. A munkámat és a legfontosabb eredményeim az alábbi négy fejezetben és tézispontban foglaltam össze.

### Algoritmus tervezése hálómentes módszerekhez

Annak ellenére, hogy a rugalmas, általános célú végeselemes, véges térfogat és egyéb hálóalapú modellezési algoritmusokat kiemelkedően sikeresen alkalmazzák számos műszaki és tudományos területen, ez a megközelítés a hálómentes módszerek esetében csak a közelmúltban jelent meg.

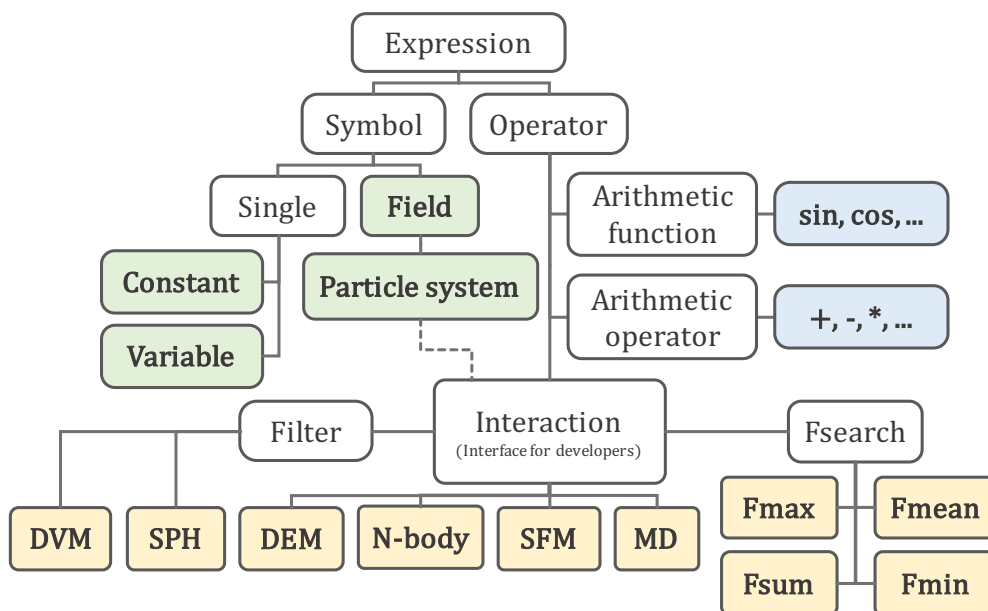
#### 1. Tézis

*(Havasi-Tóth, B. (2019a), Tóth, B. Szabó, K. G. (2014))*

**A hálómentes lagrange-i módszerek hasonlóságait figyelembe véve definiáltam egy egymással kölcsönhatásban lévő anyagi pontok dinamikáját leíró közönséges differenciálegyenletet. Az anyagi ponthalmaz fölött értelmezett tetszőleges mezők, és azok között definiált interakciós függvények segítségével**

**a leíró egyenlet alkalmas mind a hálómentes kollokációs sémák, mind az eredendően diszkrét rendszerek leírására.**

Az algoritmus egyik fontos alappillére, hogy a részecskealapú numerikus módszereket egyszerű, páronkénti interakciós függvényeknek, és azok kombinációjának feltételezi, ezért azok matematikai függvényekként történő definícióját követően közel tetszőleges közönséges differenciálegyenletek állíthatók elő és oldhatók meg. Ennek a megközelítésnek egy fontos következménye, hogy az algoritmus egyaránt alkalmas eredendően diszkrét (molekuláris dinamikai és diszkrét elemes) rendszerek leíró egyenleteinek, valamint folytonos rendszerek (kollokációs módszerekkel) diszkrétizált egyenleteinek megoldására is. A szabadon definiált egyenletek és kifejezések elemzéséhez szükséges osztályhierarchiában tehát a numerikus módszerek egyszerű operátorokként foghatók fel. A hierarchia ezáltal könnyen egészíthető ki új numerikus módszerek implementációjával.

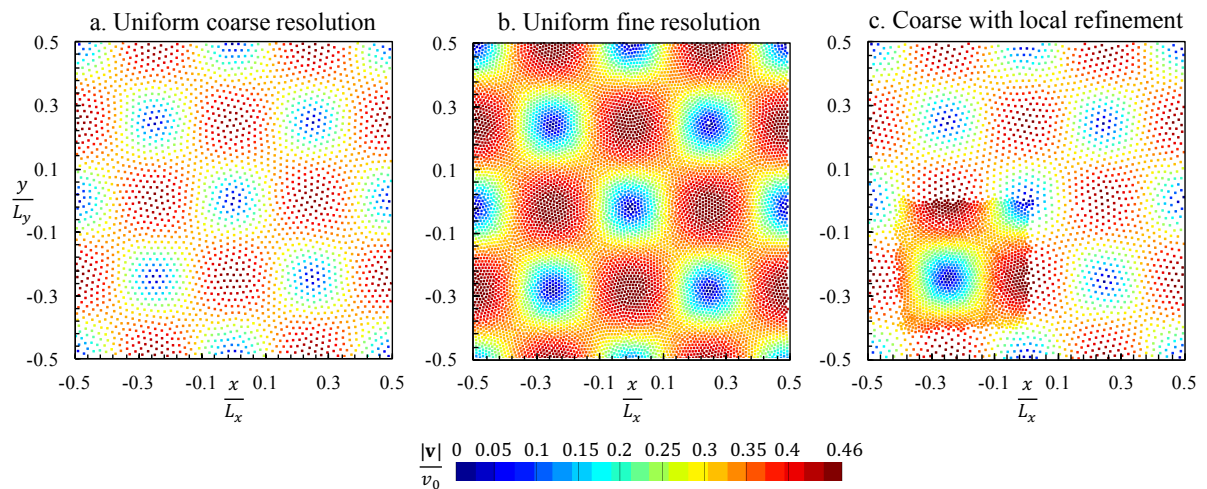


1. ábra: az algoritmus egyenletelemzőjének osztályhierarchiája. A hierarchia legalsó sorában látható osztályok tartalmazzák a numerikus sémákat, vagyis a páronkénti interakciókat.

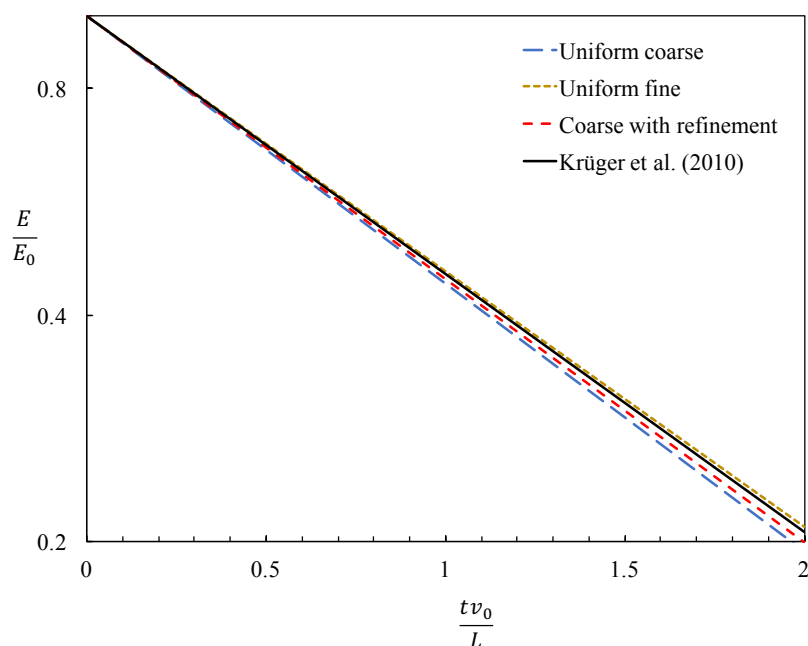
### Numerikus felbontás csökkentése perdület-megmaradással

A parciális differenciálegyenletek megoldásának numerikus módszerekkel való közelítésekor gyakori igény a numerikus felbontás lokális változtathatósága. Ennek oka lehet például az, hogy a numerikus hiba közel egyenletes térbeli eloszlásának biztosítására a megoldásban előforduló nagyobb gradiensek közelében finomabb felbontásra van szükség. Ezenkívül, főleg áramlástan alkalmazásokban játszik fontos szerepet az, hogy a megoldás általában a számítási tartomány csak egy kisebb részében érdekes nagyobb részletességgel, míg a tartomány többi részének a szerepe lényegében az, hogy a peremfeltételek kellő távolságban legyenek a vizsgált zónától. Míg a hálóalapú végestérfogat vagy végelem módszerek esetében a numerikus

felbontás lokális megváltoztatása jól ismert és robusztus elméleti háttérrel rendelkezik, addig az SPH módszer esetében annak lagrange-i jellegéből adódóan a feladat nem magától értetődő. A részecskeméret lokális csökkentése nem elegendő, hiszen a részecskék elsodrónak, helyüket átadva a korábban távolabb elhelyezkedő, durvább felbontású részecskéknek. A jelenleg széles körben használt módszerek ezért dinamikusan végzik a részecskék felosztását és összevonását a vizsgált területek közelében. A felosztás és összevonás folyamatát egy alkalmasan megválasztott numerikus hiba minimalizálásával végezhetjük el. A korábban ismert modellek az összevonáskor azonban jelentős hibával terhelik a számítást azért, hogy a részecskék párosával történő összevonásakor a perdület-megmaradás nem teljesül, mivel az



2. ábra: kétdimenziós Taylor-Green örvények különböző felbontású számítási eredményei. A részecskék színezése a sebességnagyságukat követi. Balról jobbra: durva felbontás, finom felbontás, durva felbontás lokális finomítással.



3. ábra: a Taylor-Green örvények különböző felbontású számításaiból származó kinetikus energia disszipációja

összevonás után kapott, egy részecskéből álló konfiguráció nem rendelkezik kellő számú szabadsági fokkal a perdületet megőrzésére. Ennek javítására tettem javaslatot az alábbiaknak megfelelően.

## 2. Tézis

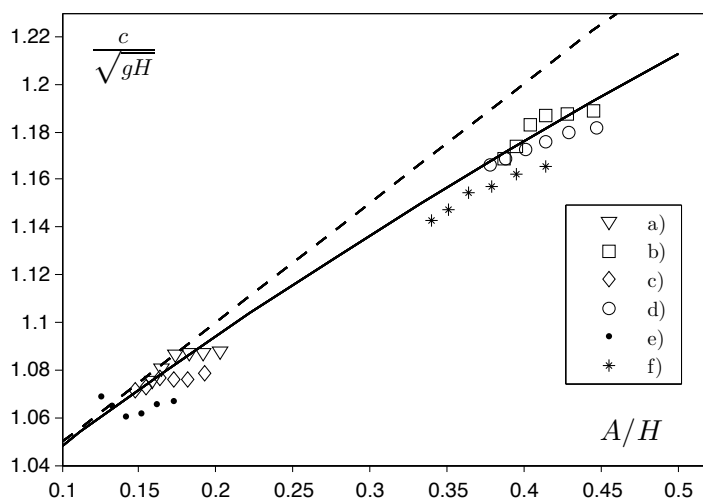
(Havasi-Tóth, B. (2019b))

**Kidolgoztam a már létező, változó felbontású SPH-modellek egy javítását, amely a felbontás változásakor garantálja a perdület egzakt megmaradását. Megmutattam, hogy**

- 2.1. a korábban alkalmazott, a részecskék páronkénti összevonását feltételező modellben, az eredeti konfigurációban három részecske összevonásával a perdületvesztés megszüntethető.**
- 2.2. a részecskehármak összevonásakor a szimulációban elhelyezett új részecskék simítófüggvényéhez tartozó hatósugarak a lokális részecskesűrűség értékének ismeretében iteratív úton közelíthetők.**
- 2.3. az összevonással járó durvább felbontás helyén az új részecskék egymástól mért távolságát szabályozó  $\eta$  paraméter 0.9-es értékével a részecskék térbeli eloszlásának egyenletessége a számítás numerikus pontosságának szempontjából kielégítő.**

### Szabadfelszíni szoliton modellezése SPH-val

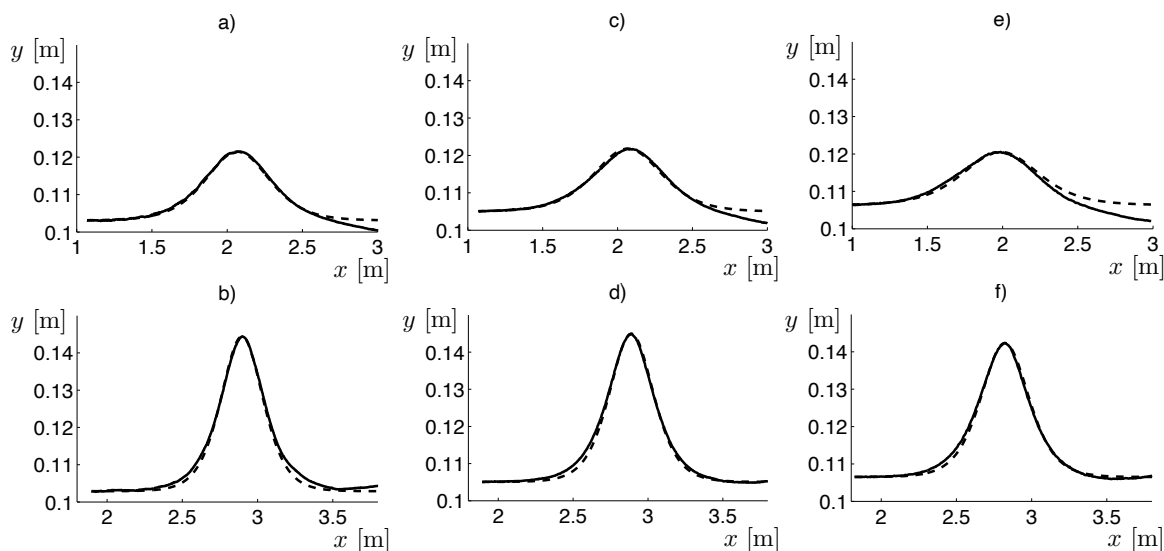
Az algoritmus implementációját követően a megfelelő interakciós osztályok (pl. SPH) definíciójával a program alkalmassá vált anyagi pontok dinamikájának modellezésére, ezen belül akár folyadékdinamikai problémák megoldására is. Az implementáció helyességét egyszerű, többnyire ismert eseteken keresztül vizsgáltam.



Case	$\delta$ [mm]	$dx$ [mm]
a	2.5	0.978
b	2.5	0.978
c	3.75	1.47
d	3.75	1.47
e	5.0	1.96
f	5.0	1.96

4. ábra: különböző kezdeti feltételekkel indított szolitonok evolúciója a 10 m-es csatornában. A táblázat mutatja a kis (a., c., e.) illetve nagy (b., d., f.) amplitúdójú szolitonok evolúcióját és diszperzióját a 10 m hosszú csatornában történő végighaladás közben. A táblázatban szereplő  $dx$  értékek a számításokhoz tartozó részecskék méretét mutatják.

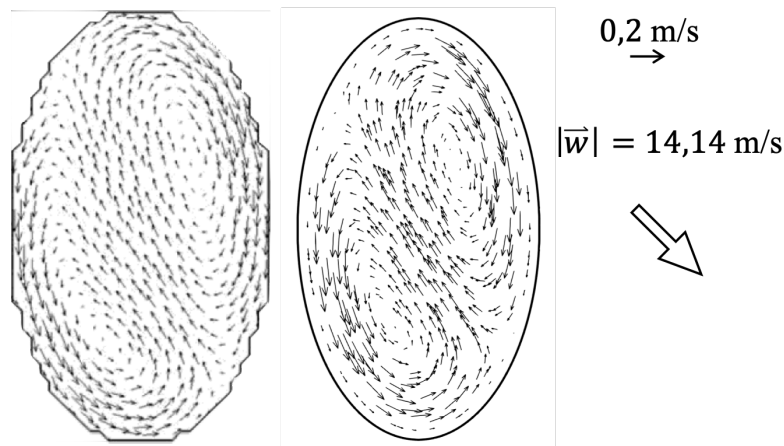
Számításokat végeztem egyenes zárt csatornában haladó szabadfelszíni szoliton hullámalakjának és terjedési sebességének meghatározására. Az gyengén összenyomható áramlásokat leíró SPH-modell nagyfelbontású számítási eredményeit összevetettem a mérési eredményekkel, valamint első- és másodrendű analitikus közelítésekkel.



5. ábra: a táblázatban felsorolt számításokhoz tartozó hullámalakok a SPH modellben  $t=6$  s-nál, (tömör vonal), valamint a KdV-egyenlet megoldása (szaggatott vonal).

### Sekély tavak szél keltette áramlásának modellezése

Gyakran találkozunk a műszaki gyakorlatban olyan áramlási problémákkal, amelyek esetében az áramlási mező térbeli kiterjedése erősen irányfüggő, azaz valamelyik irányban akár több nagyságrenddel kisebb vagy nagyobb, mint a másik két irányban. Ilyenek például a sekély víztestek, pl. tavak áramlásai is. Ezekben az esetekben a teljes, háromdimenziós áramlási mező részletes leírása igen nehézkes, ám a legtöbb esetben szükségtelen is. Azzal a feltételezéssel, hogy a sekély víztestekben



6. ábra: cirkulációs áramlás ellipszis alakú tóban. Bal: Curto és társai 2006, jobb: SPH sekélyvízi egyenletek a szél-nyírófeszültség figyelembe vételével. A térben és időben állandó  $\bar{w}$  szél irányát a fehér nyíl mutatja.

eltekinthetünk a sebességmező mélységtől való függésétől, elvégezhetjük az áramlást leíró egyenletek mélység szerinti átlagolását. Az így kapott ún. sekélyvízi egyenletek megoldása már lényegesen egyszerűbb feladat.

A sekély tavakban kialakuló nagyskálájú cirkulációs áramlások meghajtásáért a szabad felszínen ébredő, a tó fölött áramló szél hatására kialakuló szél-nyírófeszültség a felelős. A cirkulációs áramlások kialakulásához szükséges azonban vagy a nyírófeszültség vagy a medergeometria térbeli függősége is. A numerikus megoldóban felépítettem az SPH módszer sekélyvízi modelljét, melyet a szélnyírófeszültség figyelembevételével alkalmaztam egyszerű geometriájú tavak cirkulációs áramlásának modellezésére.

A csatornában kialakuló szabadfelszíni hullám és a sekély víztestek szél keltette áramlásának modellezését követően az alábbiak szerint foglaltam össze eredményeimet.

### 3. Tézis

(Tóth, B. (2017), Tóth, B. (2018))

**Megmutattam, hogy:**

**3.1.a numerikus felbontás növelésével az SPH-módszer eredményei a másodrendű hullámelmélethez konvergálnak,**

**3.2. a haladó és diszpergálódó hullám a sebességét tekintve stacioner szoliton-megoldások sorozatán halad keresztül,**

**3.3. az SPH által leírt szoliton alakja jó egyezést mutat mind a mérési eredményekkel, mind a KdV egyenlet megoldásával.**

Ezt követően a megoldó átkonfigurálásával sekélyvízű tavak szél keltette áramlásainak vizsgálatát végeztem.

**3.4. A víz felszíne fölött térben és időben állandó szélesebességet feltételezve kiterjesztettem az SPH-módszer sekélyvízi diszkretizációját a szélnyírást leíró forrástag felhasználásával. Egyszerű geometriájú tavak eseteit vizsgálva megmutattam, hogy a módszer alkalmas a sekély víztestek szélnyírást hatására kialakuló cirkulációs áramlások kvalitatív leírására. A modell kielégítő pontossággal jelzi a felszín kitérését, azonban alulbecsli a cirkuláció során kialakuló mélységátlagolt áramlási sebességeket.**

### **Térben kapcsolt fázis-oszcillátorok dinamikájának modellezése**

A megoldó verifikációját követően térbeli, kapcsolt fázis-oszcillátorok szinkronizációját vizsgáltam a Kuramoto-modell segítségével.

A számos tudományterületen megjelenő *szinkronizáció* egy olyan kollektív viselkedés, amely egymással kapcsolatban álló, frekvenciájukat és fázisukat szabályozni képes oszcillátorok között léphet fel. A Kuramoto által 1975-ben közölt modell alkalmassá vált lézerek, neuronok és társas csoportok szinkronizációs viselkedésének leírására. A Kuramoto-modell egyik nevezetes alkalmazása a szentjánosbogarak egy családjának (*Pteroptyx malaccae*) időben változó, periodikus fénykibocsátásának szinkronizációja,

amelynek alapja a rovarok alkalmassága arra, hogy saját fénykibocsátásuk gyakoriságát külső fényimpulzusok hatására megváltoztassák. A fázis tehetetlenségének figyelembevételével Kuramoto-modellben hiszteretikus viselkedés is megjelenhet. A rovarok esetében például megfigyelhető, hogy a szinkronizáció csak kedvező fényviszonyok esetében alakul ki spontán, ennek ellenére a fényviszonyok fokozatos megváltoztatásával a szinkronizáció olyan esetben is fennmaradhat, amelyik esetben aszinkron viselkedésből indított rendszer nem képes a szinkronizációra.

A legegyszerűbb modell szerint az oszcillátorok mindegyike azonos kapcsolatban áll az összes többivel, azonban a valóságban ez ritkán teljesül. Ezért a kapcsolt oszcillátorokból álló rendszerek leírásakor szokás a kapcsolatok gyengítése.

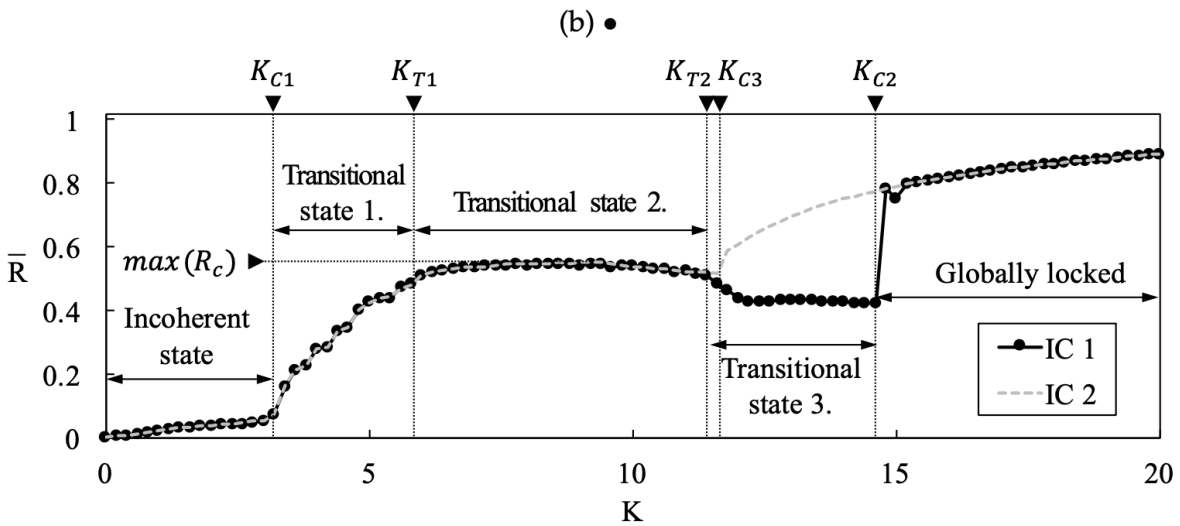
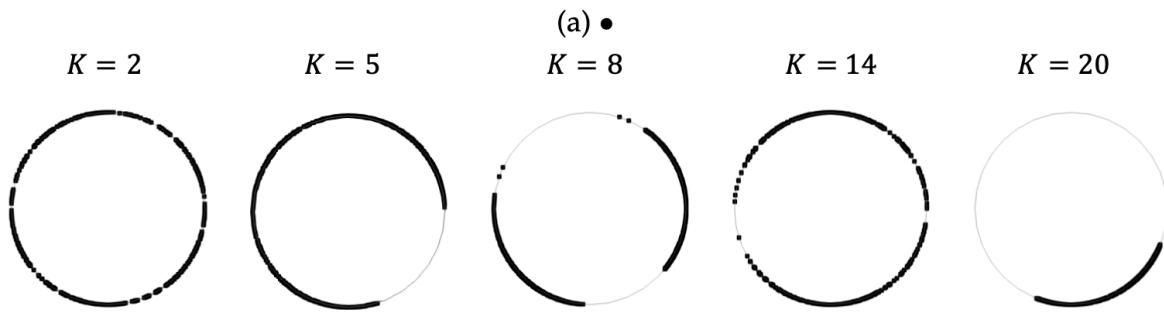
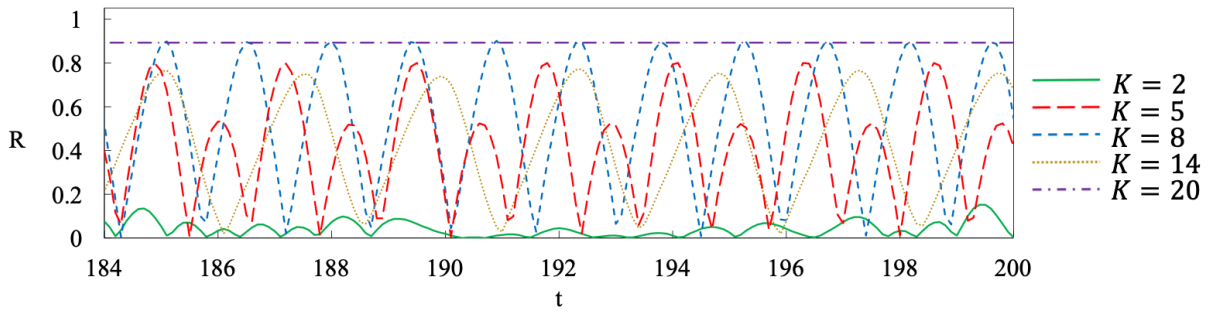
Munkám során a fázis-tehetetlenséggel rendelkező oszcillátorok viselkedését vizsgáltam, melyben a gyengítést a síkon elhelyezett oszcillátorok egymástól mért euklideszi távolságának függvényében valósítottam meg. A távolságfüggő kapcsolatok erősségének meghatározására nullad- és elsőrendű simítófüggvényeket alkalmaztam. Az oszcillátorok dinamikáját eltérő kezdeti feltételekkel és különböző mértékű gyengítést alkalmazva vizsgáltam. Eredményeimet a 4. Tézispontban foglaltam össze.

#### 4. Tézis

*(Fehér, E., Havasi-Tóth, B., Kalmár-Nagy T. (2020))*

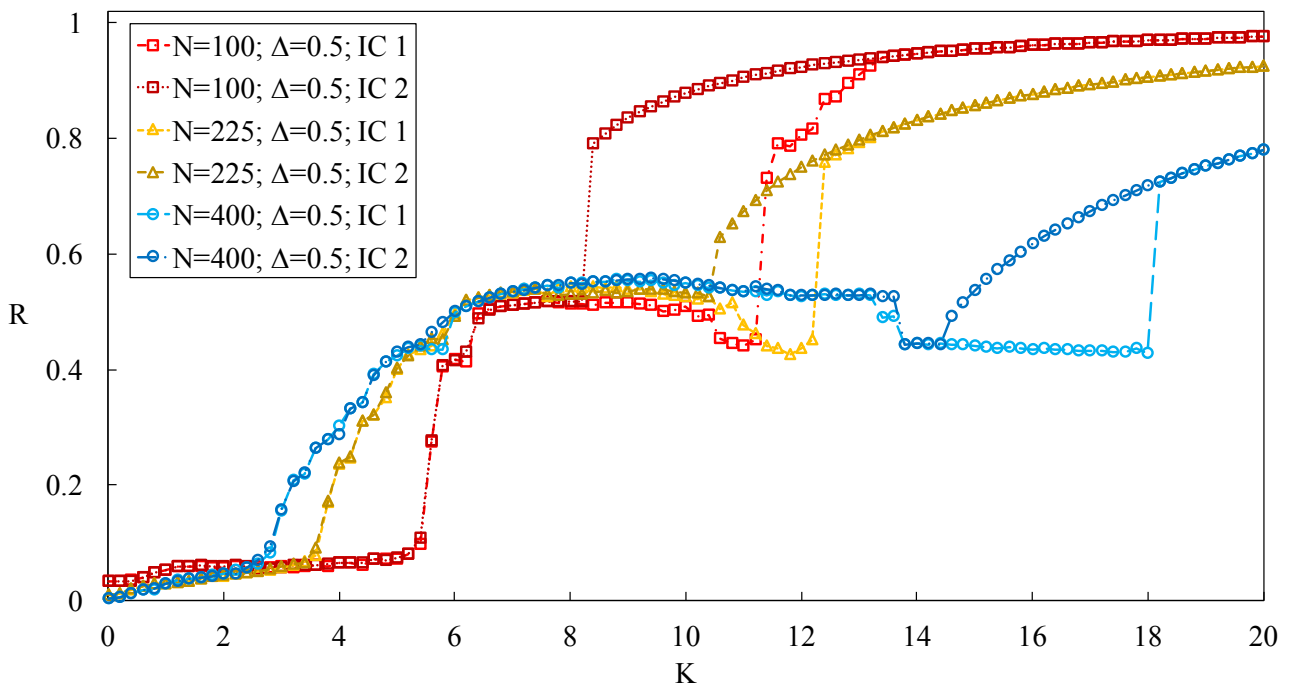
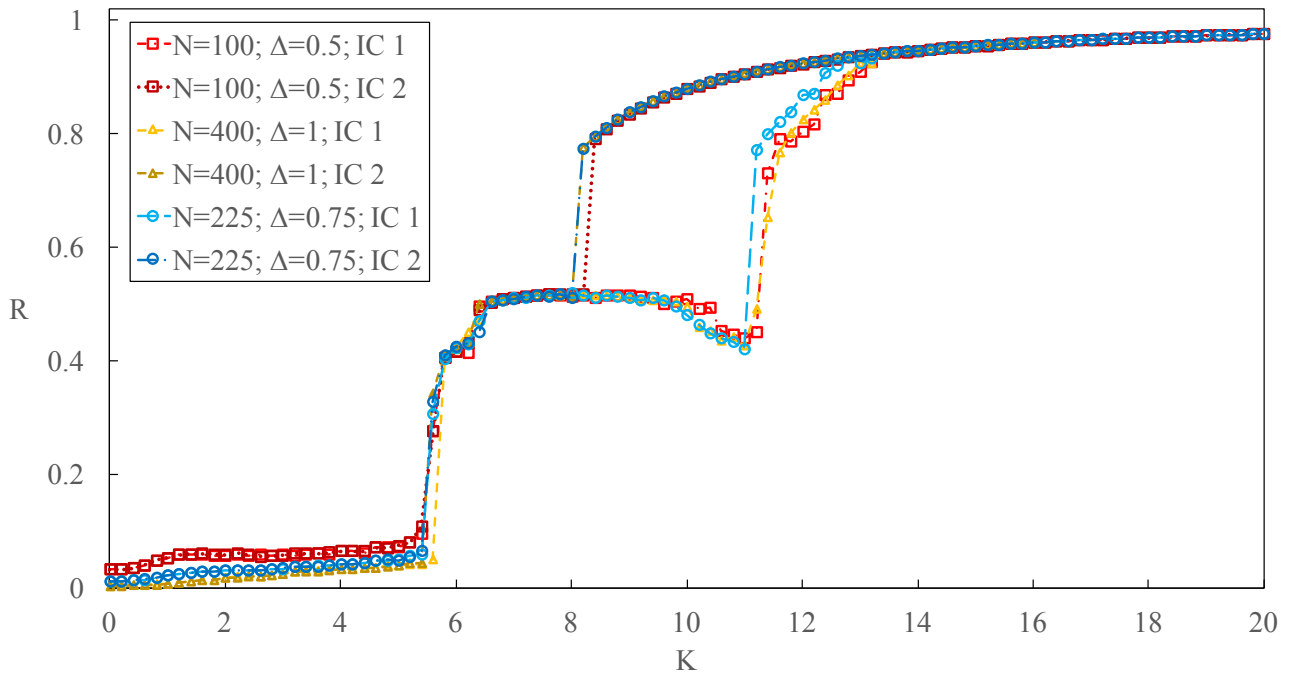
**A kapcsolatok erősségét nullad- és elsőrendű simítófüggvényekkel szabályozva térben elhelyezett kapcsolt fázis-oszcillátorok dinamikáját modelleztem. A számításokat különböző számú oszcillátor esetén, eltérő hatósugarakkal valamint oszcillátorok közötti távolságok változtatásával végeztem. Megmutattam, hogy**

- 4.1. a simítófüggvényen alapuló gyengítés hatására a kapcsolat erősségét szabályzó  $K$  paraméter széles tartományán lokális szinkronizációs csoportok alakulnak ki,**
- 4.2. a  $K$  paraméter növelésével a lokális csoportok felbomlása úgy megy végbe, hogy a globális szinkron kialakulása előtt mind a globális, mind a lokális szinkronizáció mértéke átmenetileg csökken,**
- 4.3. a paraméterek vizsgált tartományán belül a rendszer szinkronizációjának kvalitatív viselkedése csak a rendszer méretével dimenziótlanított  $q$  fajlagos hatósugár nagyságától függ.**



(c) •

7. ábra: A gyengített, térben kapcsolt oszcillátorokból álló rendszer állapotai a  $K$  paraméter függvényében. A  $q$  fajlagos hatósugár értéke 0.46, a hatósugár  $\Delta = 0.6$  m, az oszcillátorok által alkotott rácson  $N = 400$  darab oszcillátorral, a rácstávolság  $\Delta x = 0.05$  m. a) az  $R$  szinkronizációs ráta időszora különböző  $K$  értékek esetén aszinkron (IC1) kezdeti feltétellel.  $K_{C1} < K < K_{C2}$  esetén a rendszer oszcilláló viselkedést mutat. b) Az oszcillátorok fázisértéke poláris megjelenítésben  $t=500$  s-nál. c) A rendszer állapotai, vagyis az időátlagolt szinkronizációs ráta alakulása a kapcsolási erősség függvényében. Az IC2 kezdeti feltétel az  $R = 1$ , teljes szinkronizáltsághoz tartozik.



8. ábra: a szinkronizáció alakulása különböző oszcillátorszám, hatósugár, kezdeti feltétel és rácsméret esetén. Felső ábra: a számításokban a  $q$  értéke azonos. Alsó ábra: a számításokban a  $\Delta$  értéke azonos. Látható, hogy a rendszer dinamikáját a  $q$  fajlagos hatósugár értéke határozza meg.

## **A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk**

### **Folyóiratcikkek (angol nyelvű)**

1. Havasi-Tóth, B. (2019a). Nauticle: A general-purpose particle-based simulation tool. *Computer Physics Communications*, 246, 106855.
2. Havasi-Tóth, B. (2019b). Particle coalescing with angular momentum conservation in SPH simulations. *Computers & Fluids*, 197, 104384.
3. Fehér, E. & Havasi-Tóth, B. & Kalmár-Nagy, T., (2019). Hysteretic behavior of spatially coupled phase-oscillators, *Mathematical Modeling of Natural Phenomena*
4. Tóth, B. (2017). Modeling free-surface solitary waves with smoothed particle hydrodynamics. *Periodica Polytechnica Civil Engineering*, 61(4), 732-739.

### **Folyóiratcikk (magyar nyelvű)**

5. Tóth, B. (2018). Sekélyvizű tavak szél keltette áramlásának modellezése hálóménes módszerrel, *Hidrológiai Közönlöny*, 98(3), 63-68.

### **Konferenciatickk (angol nyelvű)**

6. Tóth, B., & Szabó, K.G., (2014). Flow structure detection with smoothed particle hydrodynamics. *In conference proceedings of the 9th SPHERIC International Workshop*, Paris, 208-215.