

# Hreyfing og árekstrar agna í vökva

Hersir Sigurgeirsson

Kaupþingi Búnaðarbanka

Vefútgáfa: 5. september 2003

**Ágrip** – Þessi grein er samantekt á helstu niðurstöðum doktorsritgerðar minnar. Í fyrri hluta ritgerðarinnar er fjallað um tölulegar lausnir á líkönum sem lýsa hreyfingu agna í lofti eða vökva. Þróað er reiknirit sem leyfir að taka árekstra milli agnanna inn í slíka reikninga. Með flækjustigsgreiningu er sýnt fram á að í einföldum tilvikum er reikniritið eins skilvirkt og mögulegt er. Þá er sýnt, með tilraunum, að niðurstöður flækjustigsgreiningarinnar eiga einnig við í mörgum flókarni tilvikum. Í seinni hluta ritgerðarinnar er sett fram slembið líkan af iðustreymi og hreyfing agna í slíku iðustreymi skoðuð. Þar er sýnt að undir ákveðnum skilyrðum er líkanið slembið hreyfikerfi með slembið aðdráttarmengi. Lýst er hvernig reikna má þetta mengi tölulega og niðurstöður nokkurra slíka reikninga settar fram. Þá er reikniritið úr fyrri hluta ritgerðarinnar notað til að skoða áhrif árekstra á aðdráttarmengið.

## Inngangur

Í þessari grein tek ég saman helstu niðurstöður doktorsritgerðar minnar [1] í mjög stuttu máli. Í hverjum kafla ritgerðarinnar er að finna eina meginniðurstöðu, en hér læt ég nægja að setja fram þessar meginniðurstöður að mestu án sannana. Eðlilega verður umfjöllunin oft heldur knöpp. Áhugasömum er bent á að skoða ritgerðina, en hana má nálgast á vefsíðu minni [www.hersir.com](http://www.hersir.com), eða einhverja af þeim greinum sem ég hef unnið uppúr ritgerðinni og birst hafa í vísindatímaritum undanfarin ár. Efni 1. og 2. kafla birtist árið 2001 í *Journal of Computational Physics* [2], efni 3. kafla árið 2002 í *Stochastics and Dynamics* [3] og efni 4. kafla árið 2002 í *Physics of Fluids* [4]. Að auki birtist grein eftir mig í *Molecular Physics* [5] fyrr á þessu ári þar sem reikniritið úr 1. kafla er notað. Ég hef líka haldið heimildaskrá í lágmarki, en í ritgerðinni og greinunum má finna nákvæman lista yfir allar þær heimildir sem ég hef stuðst við.

Doktorsverkefni mitt er á sviði vökvahreyfifræði og felst í að taka árekstra milli agna með í hefðbundnar lausnir á verkefnum sem hafa með víxlverkun lofts og agna að gera. Meðal hagnýtinga má nefna innspýtingu eldsneytis í sprengirými þotuhreyfils, og hreyfingu sandkorna í iðustreymi.

Með því að nota lögmál Stokes fyrir hreyfingu agnar í seigum vökva eða lofti má setja verkefnið fram sem það að leysa jöfnuna

$$\tau \ddot{x}_i(t) = v(x_i(t), t) - \dot{x}_i(t), \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

milli árekstra, og nota eitthvert utanaðkomandi líkan fyrir það sem gerist við árekstur. Hér er  $n$  fjöldi agna,  $x_i(t)$  staðsetning agnar  $i$  á tíma  $t$ ,  $v$  er hraðasvið vökvans, og  $\tau$  er fasti, kallaður tímafasti agnarinnar. Hann er í réttu hlutfalli við massa agnarinnar og í öfugu hlutfalli við þvermál hennar og seigju vökvans. Hraðasviðið  $v$  er lausn á Navier-Stokes jöfnunum og almennt er gert ráð fyrir að hraði og staðsetning agnanna hafi áhrif á það, þó oft sé þeim áhrifum sleppt til einföldunar.

Við rannsóknir reynist oft vel að skoða fyrst einfalt sértílvik af verkefninu og reyna svo að yfirfæra lausn þess á almenna verkefnið. Einfalt sértílvik þessa verkefnis kemur upp þegar massi agnanna er hverfandi,  $\tau \rightarrow +\infty$ , svo jafna (1) verður  $\ddot{x}_i(t) = 0$ . Í þessu sértílviki ferðast hver ögn eftir beinni línu með jöfnum hraða, þar til hún rekst á aðra ögn. Þá breytir hún um hraða (og stefnu) og ferðast aftur eftir beinni línu með jöfnum hraða.

Það ætti ekki að koma á óvart að margir hafa rannsakað þetta verkefni, og raunar er það grunnur a.m.k. tveggja fræðigreina, annars vegar hreyfifræði frum-

einda í efnafræði, og hins vegar *billiards* í stærðfræði. Í efnafræði er það notað sem einfalt líkan fyrir vökva, en stærðfræðingar hafa einkum rannsakað tölfræðilega eiginleika þess. Við heimildalestur komst ég fljótlega að því að efnafræðingar höfðu þróað skilvirkt reiknirit til að herma þetta líkan, og tölvunarfræðingar höfðu að einhverju leiti greint flækjustig þess, án þess þó að leiða það til lykta. Ég ákvað því að byrja á að ljúka þeirri flækjustigsgreiningu, meðal annars með því að nota niðurstöður úr safneðlisfræði, og um það fjallar 1. kafli ritgerðarinnar.

Mjög einfalt reynist að yfirfæra þetta reiknirit á almenna verkefnið. Það felst einfaldlega í að skipta tímabilinu  $[0, T]$  upp í lítil tímaskref,  $\Delta t$ , og gera ráð fyrir að agnirnar ferðist eftir beinum línunum innan sérhvers tímaskrefs. Þegar  $\Delta t \rightarrow 0$  stefnir lausn þessa verkefnis á lausn upphaflega verkefnisins. Hins vegar eru forsendur flækjustigsgreiningarinnar í 1. kafli ekki uppfylltar í þessu almenna tilviki, og í 2. kafli sýni ég með tilraunum að niðurstöður hennar virðast samt sem áður eiga við.

Til að tilraunirnar í 2. kafli hefðu eitthvert gildi þurfti ég að nota hraðasvið sem líktist á einhvern hátt iðustreymi og fannst heldur flókið að nota iðustreymislausn á Navier-Stokes-jöfnunum. Á þessum tíma var ég að kynna slembnum afleiðu- og hlutafleiðujöfnunum og fannst því tilvalið að auka þekkingu mína á þeim með því að nota slembið hraðasvið sem líkan fyrir iðustreymi. Þegar ég skoðaði dreifingu agnanna í hraðasviðinu var ljóst að fyrir sum gildi á  $\tau$  voru þær langt frá því að vera jafndreifðar heldur drógust að ákveðnum svæðum í hraðasviðinu. Þessi svæði líktust aðdráttarmengjum í hefðbundinni hreyfifræði og ég komst fljót að því að hefðbundin hreyfifræði hafði verið útvíkkuð til að ná yfir slík slembin kerfi. Sú fræðigrein, slembin hreyfikerfi, fjallar m.a. um tilvist á slembnum aðdráttarmengjum og í 3. kafli sýni ég að kerfið sem ég skoðaði í 2. kafli hefur slíkt slembið aðdráttarmengi.

Tilraunaæðlisfræðingar hafa séð samskonar dreifingu agna í raunverulegu iðustreymi og í 4. kafli ber ég saman dreifingar agna í raunverulegu iðustreymi og í slembnu hraðasviði. Greiningin í 3. kafli tekur á engan hátt áhrif árekstra með í reikninginn, og aðferðirnar sem notaðar eru þar bjóða ekki uppá það á einfaldan hátt. Þar sem ég kom upphaflega að þessu verkefni til að meðhöndla árekstra og hafði þróað skilvirkt reiknirit til þess, fannst mér tilvalið að athuga áhrif

þeirra með tilraunum og er niðurstöður þeirra tilrauna einning að finna í 4. kafli.

## 1. Reiknirit fyrir agnir í þyngdarleysi

Í 1. kafli ritgerðarinnar fæst ég við hreyfingu kúlulaga agna í þyngdarleysi, sér í lagi að þróa skilvirkt reiknirit til að herma hreyfingu  $n$  slíkra agna yfir ákveðið tímabil  $[0, T]$ . Meginniðurstaða mín er sú að til er reiknirit fyrir þetta verkefni sem hefur flækjustig  $\mathcal{O}(n_c \log n)$  þar sem  $n_c$  er heildarfjöldi árekstra á tímabilinu. Ég nota hér hefðbundið táknaál úr flækjustigsgreiningu:  $f(n) = \mathcal{O}(g(n))$  táknar að til er heiltala  $N$  og fasti  $C$  þannig að  $f(n) \leq Cg(n)$  fyrir öll  $n \geq N$ ,  $f(n) = \Omega(g(n))$  táknar að til er heiltala  $N$  og fasti  $C$  þannig að  $f(n) \geq Cg(n)$  fyrir öll  $n \geq N$ , og  $f(n) = \Theta(g(n))$  táknar að  $f(n) = \mathcal{O}(g(n))$  og  $f(n) = \Omega(g(n))$ .

Til að setja þessa niðurstöðu í samhengi má benda á að ef markmiðið er að framkvæma einhverja aðgerð við hvern árekstur, þá hafa öll reiknirit fyrir þetta verkefni flækjustig  $\Omega(n_c)$ , og færa má skynsamleg rök fyrir því að sérhvert slíkt reiknirit hafi flækjustig  $\Omega(n_c \log n)$ , t.d. með því að nota reikniritið til að raða  $n_c$  tölum í vaxandi röð.

Það sem gerir árekstur agna í þyngdarleysi einfaldari en ef þær hreyfast skv. jöfnu (1) er fyrst og fremst að fyrir sérhverjar tvær agnir er hægt að ákvarða með einföldum hætti hvenær þær muni næst rekast á, að því gefnu að hvorug þeirra rekist fyrr á aðra ögn. Gerum ráð fyrir að tvær kúlur með geisla  $r_i$  og  $r_j$  og hafi staðsetningar

$$x_i(t) = q_i + v_i t \quad \text{og} \quad x_j(t) = q_j + v_j t$$

við tímann  $t$ . Þær rekast á við tímann  $t_c^{(i,j)} > 0$  ef og aðeins ef fjarlægð milli miðja þeirra er jöfn summu geisla þeirra,

$$\|x_i(t_c) - x_j(t_c)\| = r_i + r_j.$$

Við hefjum báðar hliðar í annað veldi og fáum að  $t_c^{(i,j)}$  er lausn á annars stigs jöfnunni

$$\|\Delta v\|^2 t_c^2 + 2(\Delta v \cdot \Delta x)t_c + \|\Delta x\|^2 = \sigma^2,$$

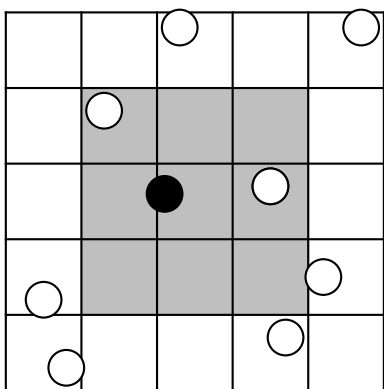
þar sem  $\Delta v = v_i - v_j$ ,  $\Delta x = q_i - q_j$  og  $\sigma = r_i + r_j$ .

Þessi athugun gefur strax einfalt reiknirit til að herma hreyfingu  $n$  agna í þyngdarleysi, sem felst í að endurtaka eftirfarandi skref þar til  $t_m > T$ :

1. Reikna næsta árekstrartíma,  $t_m = \min_{i \neq j} t_c^{(i,j)}$ .
2. Færa allar agnir áfram til tíma  $t_m$ .
3. Breyta hraða þeirra tveggja agna sem rekast á klukkan  $t_m$ .

Þetta reiknirit er mjög einfalt í forritun og afar hentugt til að herma kerfi þar sem  $n$  er lítið. Ef hins vegar ætluin er að herma kerfi með fleiri en nokkrum tugum agna er það gagnslaut, því einföld talning á aðgerðum gefur að flækjustigið er  $\Theta(n_c n^2)$ .

Skilvirka reikniritið byggir þó á þessu einfalda reikniriti, og felst í raun aðeins í þremur einföldum breytingum eða viðbótum á því. Fyrsta viðbótin felst í að geyma árekstra, sem reiknaðir eru í skrefi 1, milli endurtekninga. Árekstrarnir eru geymdir í forgangsbíðröð sem röðuð er eftir árekstrartíma, svo einungis þarf að endurreikna árekstrartíma fyrir þær agnir sem lentu í árekstri í næstu endurtekningu á undan. Önnur viðbótin og sú veigamesta er að skipta rúminu upp í marga smáa teninga, sem við köllum sellur, og reikna einungis út árekstra milli agna í aðlægum sellum. Þetta kallar á að halda bókhald um í hvaða sellu hver ögn er, sem má leysa með því að bæta við færsluatburðum, sem eiga sér stað þegar miðpunktur agnar færast frá einni sellu yfir í aðra. Í skrefi 1 þarf því að reikna bæði næsta árekstrartíma og færslutíma agnarinnar. Mynd 1 sýnir þessa hugmynd í tveimur víddum. Þriðja breytingin felst í að endurreikna ekki staðsetningu allra agnanna í skrefi 2, heldur einungis þeirra tveggja sem taka þátt í árekstrinum, en geyma þess í stað síðasta árekstrartíma hvernar agnar.



**Mynd 1.** Fyrir svörtu ögnina þarf aðeins að reikna árekstrartíma við agnirnar í skygðdu sellunum.

Í stuttu máli felst skilvirka reikniritið því í að setja upp bíðröðina og sellurnar og endurtaka svo eftirfarandi skref [6]:

1. Ná í næsta atburð (árekstur eða færslu) í bíðröðinni.
2. Framkvæma atburðinn, þ.e. uppfæra staðsetningu og hraða agnanna tveggja ef atburðurinn er árekstur, og færa ögnina milli sella ef atburðurinn er færsla.
3. Reikna næsta færslutíma agnarinnar.
4. Reikna næsta árekstrartíma milli agnarinnar og agna í nærliggjandi sellum.
5. Færa ögnina á réttan stað í bíðröðinni.

Með einfaldri talningu aðgerða í þessu reikniriti fæst að heildarfjöldinn er

$$C = \sum_{i \in \text{atburðir}} (c_1 + c_2 n_s(i) + c_3 \log n), \quad (2)$$

þar sem  $n_s(i)$  er fjöldi agna í sellunum umhverfis selluna sem atburðurinn gerist í. Hér er  $c_1$  fjöldi aðgerða við að ná í atburðinn og framkvæma hann,  $c_2 n_s(i)$  fjöldi aðgerða við að reikna árekstra, og  $c_3 \log n$  fjöldi aðgerða við að staðsetja ögnina í bíðröðinni.

Fjöldi aðgerða er því háður heildarfjölda atburða, þ.e. árekstra og færsla, sem og hversu margar agnir ( $n_s(i)$ ) eru í námunda við agnir sem lenda í árekstrum eða færast milli sella. Það er því ljóst að fjöldi sella (þ.e. stærð þeirra) skiptir höfuðmáli; ef þær eru of margar þá verður mikið um færslur, en ef þær eru of fáar þarf að reikna mikið af árekstrartímum við hvern atburð. Það er líka ljóst að  $n_s(i)$  er háð því hvernig agnirnar dreifast um rúmið.

Til að geta einfaldað stæðuna (2) leitum við til safneðlisfræði. Boltzmann [7] rannsakaði hreyfingu agna í þyngdarleysi og sýndi að ef fjöldi agna í teningnum  $[x, x + \Delta x]$  sem hafa hraða á bilinu  $[v, v + \Delta v]$  við tímann  $t$  er  $n f(x, v, t) (\Delta x)^3 (\Delta v)^3$ , þá er

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} f(x, v, t) = C \exp\left(-\frac{\|v\|^2}{2\beta^2}\right). \quad (3)$$

Þetta þýðir að í jafnvægi gildir eftirfarandi:

1. Staðsetningar agnanna eru óháðar og einsdreifðar skv. jafnri dreifingu.
2. Hraðar agnanna eru óháðir og einsdreifðir skv. normaldreifingu.

3. Hraði hvernar agnar er óháður staðsetningu hennar.

Við gerum því ráð fyrir að agnirnar hafi þessa dreifingu á öllum tímum og reiknum meðalflækjustig reikniritisins þar sem meðaltalið er tekið yfir þessa dreifingu. Flækjustigsgreiningin felst því í að reikna væntigildið af stæðunni (2) undir dreifingunni sem felst í forsendum 1–3. Reglan um skilyrt líkindi gefur að meðalfjöldi aðgerða má skrifa sem

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[ \mathbb{E} \left[ \sum_{i \in A} (c_1 + c_2 n_s(i) + c_3 \log n) \middle| n_c + n_t \right] \right] \\ &= (\mathbb{E}n_c + \mathbb{E}n_t)(c_1 + c_2 \mathbb{E}n_s + c_3 \log n), \end{aligned}$$

þar sem  $A$  er mengi allra atburða, og  $n_t$  er heildarfjöldi færsla. Forsendur 1–3 gefa, eftir talsverða útreikninga,

$$\mathbb{E}n_c = \beta T n^{1+1/d}, \quad \mathbb{E}n_t = \beta T m n, \quad \mathbb{E}n_s = \frac{n}{m^d}. \quad (4)$$

Hér er  $\beta$  staðalfrávik hraða agnanna (sbr. (3)),  $d$  er vídd rúmsins ( $d = 2$  í tvívídd,  $d = 3$  í þrívídd) og  $m^d$  er fjöldi sella. Við höfum því að meðalfjöldi aðgerða er

$$EC = \beta T n(n^{1/d} + m)(c_1 + c_2 \frac{n}{m^d} + c_3 \log n).$$

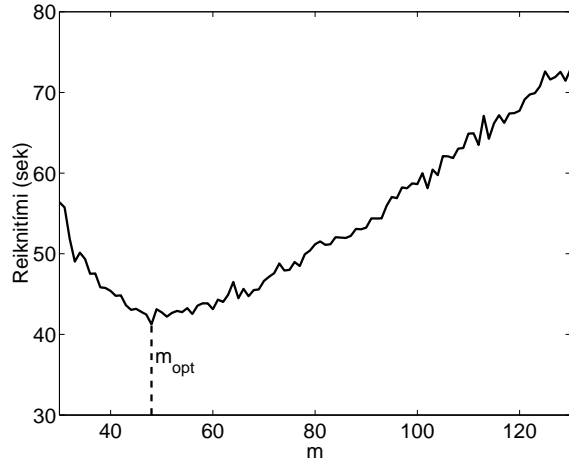
Það er einfalt að sjá að flækjustigið er lágmarkað með því að velja  $m^d = \Theta(n)$ , þ.e. velja fjölda sella í réttu hlutfalli við fjölda agna, og að þá er flækjustigið  $\mathcal{O}(n_c \log n)$ . Við höfum því eftirfarandi niðurstöðu.

**Setning** *Flækjustig reikniritisins er að meðaltali  $\mathcal{O}(n_c \log n)$  ef heildarfjöldi sella er í réttu hlutfalli við heildarfjölda agna.*

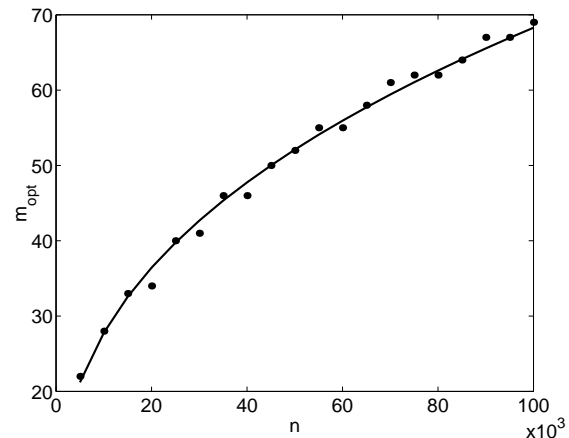
Ég útfærði reikniritið og keyrði það fyrir mismunandi gildi á  $n$  og  $m$ , og myndir 2, 3 og 4 sýna hvernig þessum fræðum ber við raunverulegan keyrslutíma reikniritisins.

## 2. Árekstrar agna í vökva

Í 2. kafla ritgerðarinnar nota ég reikniritið úr 1. kafla til að herma hreyfingu agna í hraðasviði, þ.e. agnir sem hreyfast skv. jöfnu (1). Meginniðurstaða kaflans er að ef tímaþrepið sem notað er til að leysa (1) er

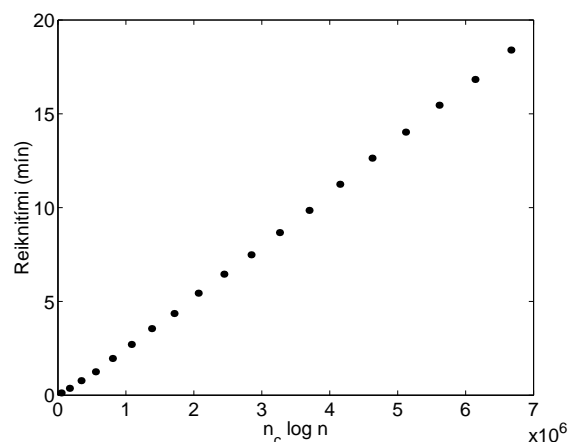


**Mynd 2.** Reiknitími borinn við  $m$  fyrir  $n = 50000$  agnir í þrívídd, þéttleiki  $\rho = 1\%$ , þ.e. heildarflatarmál agnanna er 1% af flatarmáli einingarfernings.



**Mynd 3.**  $m_{opt}$  af mynd 2 borið við  $n$  (punktar) og besti ferillinn á forminu  $an^b$ , með  $a = 0.7626$  og  $b = 0.3904$  (lína); flækjustigsfræðin spá  $b = \frac{1}{3}$ .

ekki minna en meðaltími milli árekstra, þá er flækjustig útvíkkaða reikniritisins  $\mathcal{O}((n_c + n^{1+1/d}) \log n)$ , þar sem  $d$  er vídd rúmsins. Reikniritið er því eins hagkvæmt og mögulegt er ef fjöldi árekstra vex hraðar en  $n^{1+1/d}$ . Við sáum í fyrstu grein (jafna (4)) að fyrir agnir í þyngdarleysi vex fjöldi árekstra eins og  $n^{1+1/d}$ , svo orða má niðurstöðuna þannig að reikniritið sé eins skilvirkt og mögulegt er ef fjöldi árekstra vex a.m.k. jafnhvort með  $n$  og fyrir agnir í þyngdarleysi.



**Mynd 4.** Reiknitími borinn við  $n_c \log n$  fyrir agnir í þrívídd,  $\rho = 1\%$ . Besti ferill á forminu  $a(n_c \log n)^b$  hefur  $a = 2.5322$  og  $b = 1.0372$ .

## 2.1. Agnir í hraðasviði

Samkvæmt lögmáli Stokes er krafturinn sem verkar á ögn í seigum vökva í réttu hlutfalli við innbyrðis hraða vökvans og agnarinnar, þvermál agnarinnar,  $2r$ , og seigju vökvans,  $\mu$ . Hreyfijafna agnarinnar er því

$$m\ddot{x}(t) = 6\pi\mu r(v(x(t), t) - \dot{x}(t)),$$

sem má skrifa sem

$$\tau\ddot{x}(t) = v(x(t), t) - \dot{x}(t) \quad (5)$$

þar sem  $\tau = \frac{m}{6\pi\mu r}$  er svokallaður tímafasti agnarinnar.

Ekki er hægt að nota reikniritið úr 1. kafla óbreytt til að leysa kerfi af  $n$  slíkum ögnum tölulega þar sem það byggir á því að agnirnar ferðist eftir beinum línum milli árekstra. Hins vegar eru afleiðujöfnur af gerðinni (5) yfirleitt leystar tölulega með því að nálga lausnina endurtekið yfir lítil tímaþrep  $[k\Delta t, (k+1)\Delta t]$ ,  $k = 0, \dots, K$ , og til að beita reikniritinu á (5) gerum við einfaldlega ráð fyrir að hreyfing agnana sé línuleg innan hvers tímaþreps og beitum því innan hvers tímaþreps.

Innan hvers tímaþreps er aðgerðafjöldi reikniritisins eins og fyrr gefinn með (2), en að auki þarf að reikna út árekstra og færslur og setja upp forgangsbíðröðina í upphafi hvers tímaþreps, og kostnaðurinn við þá aðgerð er

$$\mathcal{O}\left(\sum_{i=1}^n (1 + n_s^*(i)) + n \log n\right). \quad (6)$$

Hér er  $n_s^*(i)$  fjöldi agna í sellunum umhverfis ögn  $i$  og liðurinn  $n \log n$  er fjöldi aðgerða sem þarf til að setja upp forgangsbíðröð með  $n$  stökum.

Nú eru hins vegar forsendur flækjustigsfræða í þyngdarleysi alls ekki uppfylltar, þar sem Maxwell-Boltzmann-dreifingin á ekki lengur við, og því gilda jöfnur (4) ekki lengur. Sér í lagi verður fjöldi árekstra í hraðasviði  $v$  annar en í þyngdarleysi og við gerum ráð fyrir að  $\mathbb{E}n_c \sim n^{1+\alpha}$ . Fyrir agnir í þyngdarleysi er  $\alpha = \frac{1}{d}$ . Hins vegar er hægt að færa rök fyrir því að fjöldi færslna sé enn línulegur í  $m$  og  $n$ ,  $\mathbb{E}n_t \sim mn$ , og að  $\mathbb{E}n_s \sim \frac{n}{m^d}$ .

Upphafskostnaðurinn er því að meðaltali

$$\mathcal{O}\left(n\left(1 + \frac{n}{m^d} + \log n\right)\right),$$

fyrir hvert tímaþrep og heildarkostnaðurinn að meðaltali

$$\mathbb{E}C = \mathcal{O}\left(n(n^\alpha + m + \frac{1}{\Delta t})(1 + \frac{n}{m^d} + \log n)\right).$$

Ef tímaþrepið  $\Delta t$  er valið þannig að  $\Delta t = \Omega(n^{-\alpha})$ , þ.e. ekki minna en meðaltími milli tveggja árekstra sömu agnarinnar, þá er besta valið á fjölda sella enn í hlutfalli við  $n$ . Fyrir það val er flækjustigið  $\mathcal{O}((n_c + n^{1+1/d}) \log n)$ , sem er eins hagkvæmt og mögulegt er ef  $\alpha \geq \frac{1}{d}$ .

Til að prófa hvernig fræðin koma út í reynd notum við tvívíða hraðasviðið  $v = \nabla^\perp \psi$  þar sem

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi x_1) \sin(2\pi x_2) \quad (7)$$

og

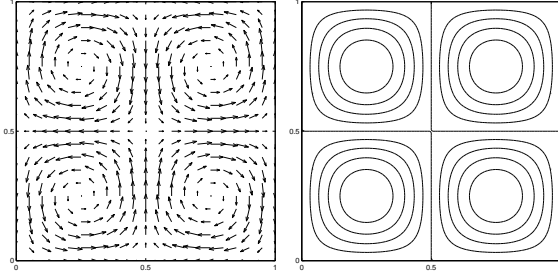
$$\nabla^\perp \psi = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1}\right),$$

þ.e.

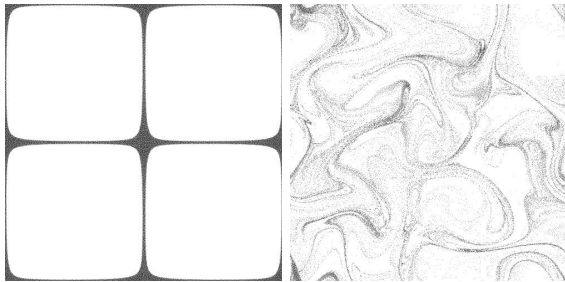
$$v_1(x, t) = \sin 2\pi x_1 \cos 2\pi x_2,$$

$$v_2(x, t) = -\cos 2\pi x_1 \sin 2\pi x_2.$$

Þetta hraðasvið er oft kennt við Taylor og Green. Ástæðan fyrir þessu vali á  $v$  er að það er lausn á Euler jöfnunni eða hliðruðu Navier-Stokes-jöfnunum, og hefur því eitthvað með hreyfingu vökva að gera. Mynd 5 sýnir vigursvið og straumlínur þessa hraðasviðs, og vinstri myndin á mynd 6 sýnir lokadreifingu agna sem hreyfast í þessu hraðasviði skv. jöfnu (5). Til gamans sýni ég einnig lokadreifingu agna sem



**Mynd 5.** Vigursvið (vinstri) og straumlínur (hægri) Taylor-Green hraðasviðsins.



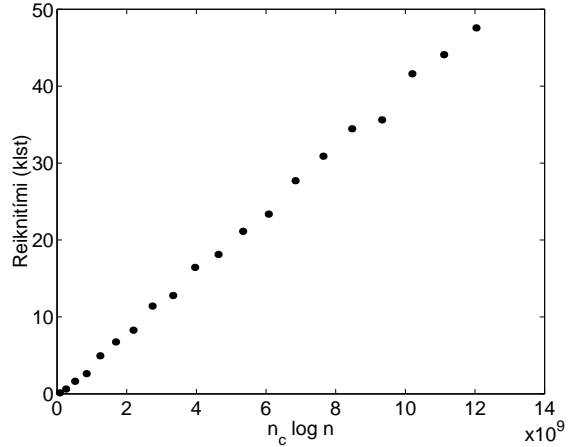
**Mynd 6.** Lokadreifing agna í hraðasviði. Hver punktur gefur staðsetningu í lok tímabilsins á einni af 50 þúsund ögnum sem ferðast samkvæmt jöfnu (5). VINSTRI: Taylor-Green hraðasvið. HÆGRI: Slembið hraðasvið.

hreyfast í slembna hraðasviðinu sem er viðfangsefni 3. kafla.

Mynd 7 sýnir keyrslutíma reikniritisins þegar því er beitt á agnir í Taylor-Green-sviði og fjöldi sella er valinn í hlutfalli við fjölda agna. Það er greinilegt að keyrslutíminn er mjög nálægt því að vera línulegur í  $n_c \log n$ , svo fræðunum ber þokkalega saman við raunverulegan keyrsultíma.

## 2.2. Agnir í vökva

Ef agnirnar hreyfast skv. jöfnu (5) og  $v$  er hraðasvið vökva, þá gefur vökvinn ögnunum skriðþunga. Skv. þriðja lögmáli Newtons taka agnirnar þá skriðþunga frá vökvannum. Hér að ofan litum við framhjá þessari staðreynd, en oft er mikilvægt að taka þessi áhrif agnanna á vökvann með í reikninginn. Hægt er að nota árekstrareikniritið að ofan óbreytt á þetta verkefni, og eini munurinn er sá að leysa þarf hlutfleiðujöfnu fyrir  $v$  samhliða því að beita árekstrareikniritinu. Ef  $v$  er hraðasvið vökva er það lausn á Navier-Stokes-



**Mynd 7.** Reiknitími borinn við  $n_c \log n$  fyrir agnir í Taylor-Green-sviði. Besti veldisferillinn er  $C \sim n_c^{1.13} \log n$ .

jöfnunum, en við látum einfalda sveimjöfnu duga

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \mu \Delta v + f - \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} F_i \quad \text{á } \Omega \quad (8)$$

þar sem  $\delta_{x_i}$  táknar Dirac-fallið í punktinum  $x_i$ ,

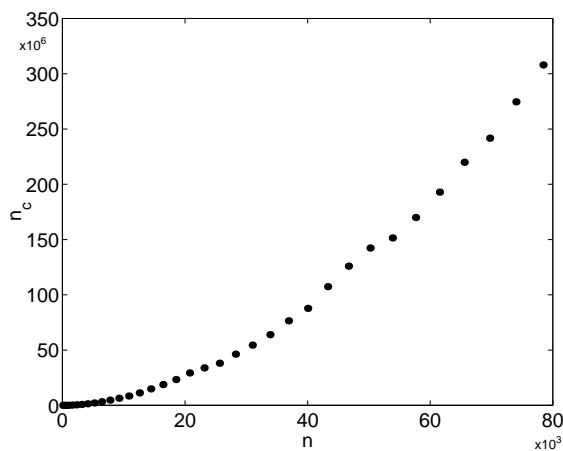
$$F_i(t) = 6\pi\mu r_i \left( v(x_i(t), t) - \frac{dx_i}{dt}(t) \right)$$

og  $f$  er utanaðkomandi kraftur sem verkar á vökvann.

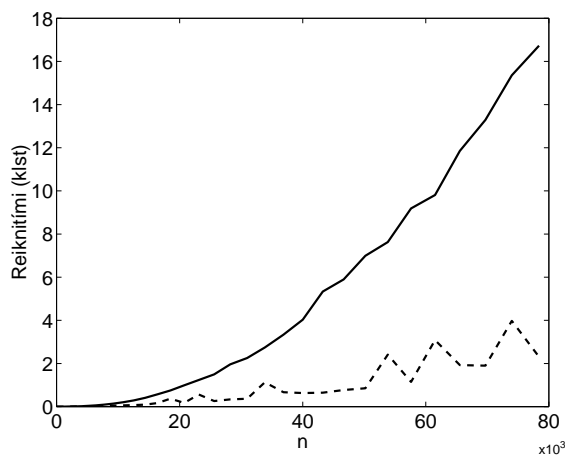
Flækjustig reikniritisins er að sjálfsögðu líka óbreytt, en nú er áhugavert að bera saman kostnaðinn við að leysa hlutfleiðujöfnuna og beita árekstrareikniritinu. Við látum  $N = (\Delta x)^{-d}$  vera fjölda hnútpunkta í lausn á hlutfleiðujöfnunni, og við látum  $n = \Theta(N)$ , þ.e. fjöldi agna er jafn fjölda hnútpunkta sem notaðir eru við lausn hlutfleiðujöfnunnar.

Skilvirkasta fólgna aðferðin til að leysa sveimjöfnu tölulega á reglulegu rétthyrndu reiknineti byggir á notkun hraðrar Fourier ummyndunar (FFT). Flækjustig slíkrar aðferðar er í besta falli  $\Theta(N \log N)$  fyrir hvert tímaþrep. Við veljum tímaþrepið þannig að  $\Delta t \sim \Delta x$ , og því er heildarflækjustigið  $\Theta(N^{1+1/d} \log N)$ .

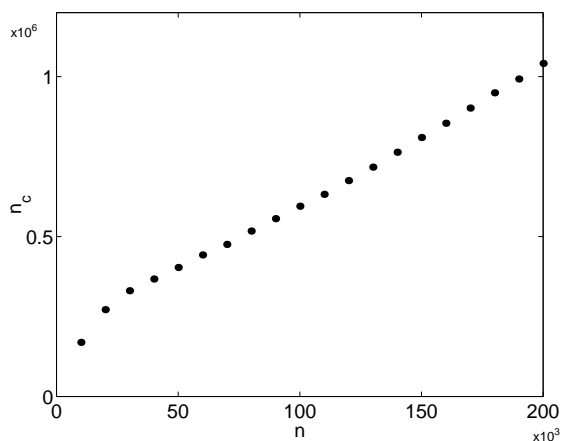
Við sáum að ofan að flækjustig árekstrareikniritisins er  $\mathcal{O}((n_c + n^{1+1/d}) \log n)$ , svo ef  $n_c$  vex hægar en í þyngdarleysi þá bætir árekstrareikniritið ekki við heildarflækjustigið, en ef  $n_c$  vex hraðar en í þyngdarleysi þá yfirgnæfir flækjustig árekstrareikniritisins heildarflækjustigið, en er hins vegar eins hagkvæmt og mögulegt er.



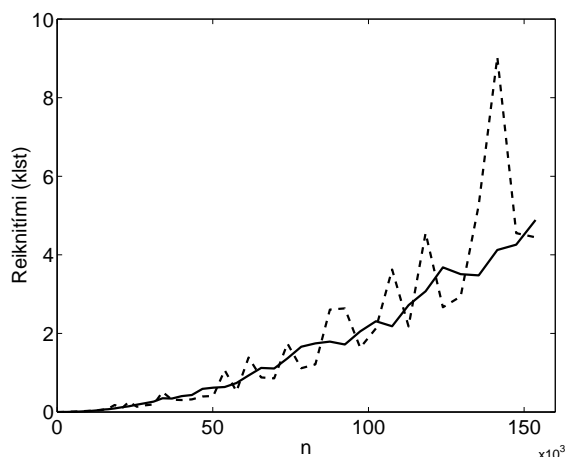
**Mynd 8.** Fjöldi árekstra í milljónum borinn við fjölda agna fyrir Taylor-Green hægri hlið. Besti veldisferill er  $n_c = 0.24n^{1.87}$ , svo  $\alpha > \frac{1}{2}$ .



**Mynd 10.** Tími sem fer í að reikna út árekstra,  $C_1$  (heil lína), og í lausn hlutfleiðujöfnunnar,  $C_2$  (brotin lína) bornir við  $n$  fyrir Taylor-Green hægri hlið. Bestu ferlar eru  $C_1 \sim n^{1.92} \log n$  og  $C_2 \sim n^{1.68} \log n$ .



**Mynd 9.** Fjöldi árekstra í milljónum borinn við fjölda agna fyrir slembna hægri hlið. Besti veldisferill er  $n_c = 0.78n^{1.33}$ , svo  $\alpha < \frac{1}{2}$ .



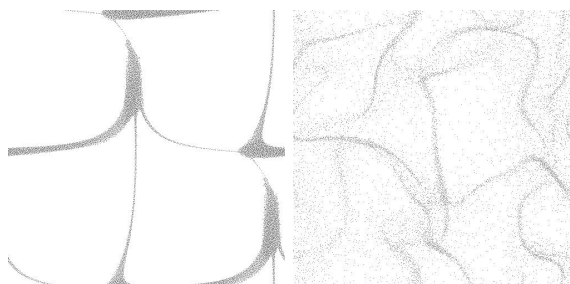
**Mynd 11.** Tími sem fer í að reikna út árekstra,  $C_1$  (heil lína), og í lausn hlutfleiðujöfnunnar,  $C_2$  (brotin lína) bornir við  $n$  fyrir slembna hægri hlið. Bestu ferlar eru  $C_1 \sim n^{1.67} \log n$  og  $C_2 \sim n^{1.63} \log n$ . Sveiflur í reiknitíma við að leysa hlutfleiðujöfnuna eiga uppruna sinn í hröðu Fourier ummynduninni, en kostnaður við hraða Fourier ummyndun er mjög háður frumþáttum tölunnar  $N$ .

Að lokum skoðum við hvernig þessum fræðum ber saman við raunverulegan keyrslutíma. Við notum tvær mismunandi hægri hliðar fyrir hlutfleiðujöfnuna, annars vegar Taylor-Green hægri hlið, þ.e.  $f = \nabla^\perp \psi$  með  $\psi$  úr jöfnu (7), og hins vegar slembna hægri hlið, sem verður nánar lýst í 3. kafla, en slík hægri hlið gefur hraðasvið sem hefur marga eiginleika iðustreymislausnar á Navier-Stokes-jöfnunum.

Lykilatriði í samanburði á kostnaði við að leysa hlutfleiðujöfnuna annars vegar og kostnaði

við árekstrareikniritið hins vegar er hvernig fjöldi árekstra,  $n_c$ , vex með  $n$ , og myndir 8 og 9 sýna það. Fyrir Taylor-Green hægri hlið vex fjöldi árekstra hraðar með  $n$  en fyrir agnir í þyngdarleysi, og fyrir slembna hægri hlið vex hann hægar. Mynd 10 og 11 staðfesta svo niðurstöður flækjustigsgreining-

arinnar, að fyrir Taylor-Green yfirgnæfir kostnaður við árekstrareikniritið kostnaðinn við lausn afleiðujöfnunnar, en fyrir slembna hægrihlið er kostnaðurinn sambærilegur. Mynd 12 sýnir dæmigerða dreifingu agnanna.



**Mynd 12.** Dæmigerð dreifing agna í vökva. Hver punktur gefur staðsetningu í lok tímabilsins á einni af 50 þúsund ögnum sem ferðast samkvæmt jöfnum (5) og (8). VINSTRI: Taylor-Green hægri hlið. HÆGRI: Slembin hægri hlið.

### 3. Agnir í slembnu hraðasviði

Í 3. kafla set ég fram slembið líkan af iðustreymi og skoða hreyfingu agna skv. lögmáli Stokes í slíku iðustreymi. Meginniðurstaða kaflans er að líkanið er slembið hreyfikerfi með slembið aðdráttarmengi að uppfylltum ákveðnum skilyrðum á orkuróf iðustreymisins.

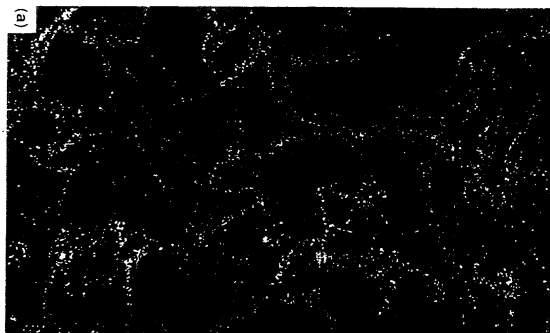
Mynd 13 sýnir þversnið af nornamjölsögnum (*e. lycopodium particles*) í iðustreymi. Dreifing agnanna er greinilega ekki jöfn, og í raun er hún ekki ýkjja frábrugðin dreifingu agna í slembnu hraðasviði sem sýnd er á mynd 12. Þetta fyrirbæri, að agnadreifingin sé fylgin hreyfingum í iðustreyminu, hefur verið nefnt mismununarsambjöppun (*e. preferential concentration*) [8], og á sér stað þegar Stokes talan, sem er hlutfallið milli tímafasta agnanna og tímaskala iðustreymisins, er nálægt einum.

#### 3.1. Gerviiðustreymi

Í víddarlausum breytum eru Navier-Stokes-jöfnurnar

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{Re} \Delta v - v \cdot \nabla v - \nabla p, \quad \nabla \cdot v = 0.$$

Hér er  $v$  hraðasvið vökvans,  $Re$  er svokölluð Reynolds tala, og  $p$  er þrýstingur vökvans. Seinni tveir



**Mynd 13.** Ljósmynd af  $28 \mu\text{m}$  nornamjölsögnum (*e. lycopodium particles*) í iðustreymi sem lýstar eru upp með þunnu lagi af leysigeislum. Hver hvítur depill gefur staðsetningu einnar agnar. Fengið að láni til birtingar frá Eaton og Fessler [8] með góðfúslegu leyfi.

liðirnir í hægri hliðinni eru ólínulegir og því oft erfitt að eiga við þá, svo óformlega er hægt að hugsa sér að skipta þeim út fyrir einhvers konar slembið "suð" $W$ ,

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \nu \Delta v + \frac{\partial W}{\partial t}$$

og velja  $W$  þannig að  $\nabla \cdot v = 0$  og að ákveðnir eiginleikar  $v$  líkist samsvarandi eiginleikum iðustreymis. Hraðasviðið sem þannig fæst er kallað gerviiðustreymi (*e. synthetic turbulence*), og er yfirleitt mun auðveldara að fremja greiningu á því heldur en á Navier-Stokes-jöfnunum.

Í ritgerðinni skoða ég einungis tvívítt lotubundið flæði,  $v : \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ , þar sem  $\mathbb{T}^2 = [0, 1]^2$ . Fyrir slík flæði má uppfylla ósamþjappanleikaskilyrðið,  $\nabla \cdot v = 0$ , með því að velja

$$v = \nabla^\perp \psi := \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right)$$

þar sem  $\psi : \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  er svokallað straumfall. Formleg framsetning á gerviiðustreymi er þá  $v = \nabla^\perp \psi$  þar sem  $\psi$  er lausn á slembihlutfalljöfnunni

$$d\psi(t) = \nu \Delta \psi(t) dt + dW(t), \quad (9)$$

$\Delta$  er Laplace virkinn á einingaferningnum með lotubundnum jaðarskilyrðum og  $W$  er Wiener-ferli. Alþekkt er að eiginfallaliðun  $\nu \Delta$  er

$$\nu \Delta e_k = -\alpha_k e_k, \quad k \in K = 2\pi\mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}$$

þar sem

$$e_k(x) = e^{-ik \cdot x} \text{ og } \alpha_k = \nu |k|^2, \quad k \in K.$$



Wiener-ferlið  $W$  er oft skilgreint með Fourier-liðuninni

$$W(t) = \sum_{k \in K} \sqrt{\lambda_k} \beta_k(t) e_k$$

þar sem  $\lambda_k$  eru jákvæðar rauntölur, og  $\beta_k$  eru óháðar Browns hreyfingar.

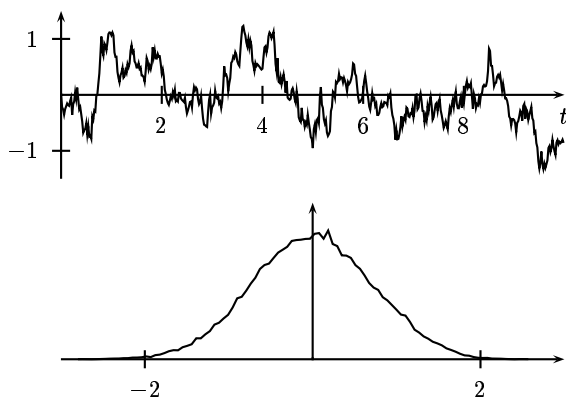
Óformlega leysum við slembihlutafleiðujöfnuna (9) með því að liða  $\psi$  í Fourier-röð,

$$\psi = \sum_{k \in K} \hat{\psi}_k e_k$$

og fáum þá að hver Fourier-stuðull leysir venjulega slembiafleiðujöfnu,

$$d\hat{\psi}_k = -\alpha_k \hat{\psi}_k dt + \sqrt{\lambda_k} d\beta_k.$$

Þetta slembiferli,  $\psi_k$ , er kallað Ornstein-Uhlenbeck-ferli, (OU), og á Mynd 14 má sjá dæmigerðan feril þess og þéttleikafall ferilsins.



**Mynd 14.** Dæmigerður ferill og þéttleikafall OU ferlis.

OU ferlið er ergódískt og jafnvægisdreifing þess er normaldreifing,

$$\mathcal{N}\left(0, \frac{\lambda_k}{2\alpha_k}\right).$$

Við búumst því við að lausnin  $\psi$  á slembihlutafleiðujöfnunni sé ergódísk og að jafnvægisdreifing hennar sé normaldreifing. Við sjáum nú að velja má stuðlana  $\lambda_k$  í Fourier-liðun Wiener-ferlisins  $W$  þannig að orkuróf  $\psi$  og þar með  $v$  sé hvað sem verða vill. Til að orkuróf  $v$  sé  $\{E_k\}_{k \in \mathbb{R}}$  þarf að setja  $\lambda_k = 2\nu \mathcal{E}_k$  þar sem  $\mathcal{E}_k$  er meðal hreyfiorka í Fourier-lið  $k$  og því  $E_{|k|} \approx \frac{1}{2\pi} |k| \mathcal{E}_k$  í tvívídd.

Það er rétt að áréttu að þó  $v$  hafi ýmsa eiginleika raunverulegs iðustreymis, skortir það einnig marga mikilvæga eiginleika þess;  $v$  er einsleitt og einsátta, normaldreift, og engin blöndun á sér stað milli ólíkra Fourier-liða, en raunverulegt iðustreymi verður einmitt til þegar orka úr lágum Fourier-liðum flyst yfir í hærri Fourier-liði.

Í ritgerðinni sýni ég, oft með því vísa í setningar úr [9], að ef  $\lambda_k$  stefnir nógu hratt á núll þegar  $|k| \rightarrow +\infty$ , nákvæmlega ef

$$\sum \lambda_k |k|^{2+\epsilon} < +\infty,$$

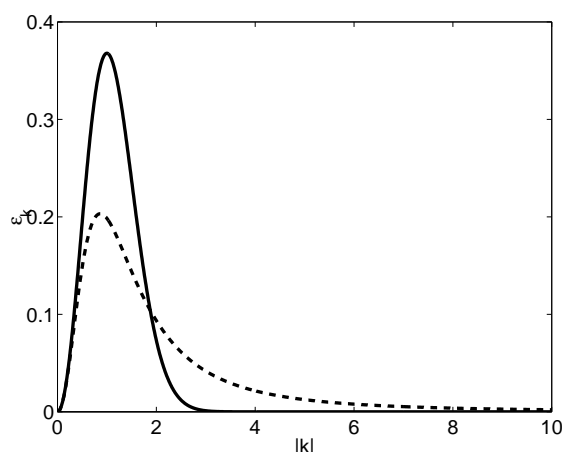
fyrir eitthvert  $\epsilon > 0$ , þá gildir að

1.  $v$  er til, þ.e. hlutafleiðujafnan (9) fyrir  $\psi$  hefur einkvæma lausn sem er diffranleg m.t.t.  $x$ .
2.  $x$  er til, þ.e.  $v$  er það reglulegt að lögmál Stokes (5) hefur einkvæma lausn.
3.  $v$  er í jafnvægi, þ.e. (9) hefur jafnvægisdreifingu.

Þetta nærir til að sýna að lögmál Stokes (5) er slembið hreyfikerfi. Ef  $\lambda_k$  stefnir enn hraðar á núll þegar  $|k| \rightarrow +\infty$  þ.a.

$$\sum \lambda_k |k|^{4+\epsilon} < +\infty,$$

fyrir eitthvert  $\epsilon > 0$ , fæst að þetta slembna hreyfikerfi hefur víðfeðmt slembið aðdráttarmengi. Sönnunin á þessum setningum er talsvert flókin og til að hræða lesendur ekki frá hef ég fært hana í viðaukann.

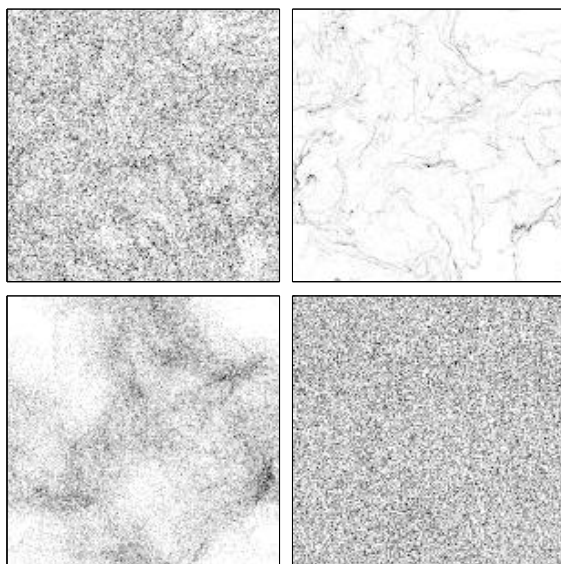


**Mynd 15.** Kraichnan orkuróf,  $\mathcal{E}_k = |k|^2 e^{-|k|^2}$  (heil lína), og Kármán-Obukhov orkuróf,  $\mathcal{E}_k = |k|^2 (1 + |k|^2)^{-7/3}$  (brotin lína).

Mynd 15 sýnir tvö orkuróf sem ég notaði fyrir tölulegar lausnir í ritgerðinni. Það vinstra, Kraichnan orkurófið, stefnir nógu hratt á núll til að uppfylla bæði skilyrðin hér að ofan, en það hægra, Kármán-Obukhov-orkurófið, uppfyllir hvorugt skilyrðið. Orkuróf raunverulegs iðustreymis í seigum vökva minnkar jafnhvort með bylgjutölunni  $k$  og Kármán-Obukhov-orkurófið fyrir meðalstórar bylgjutölur, en deyr þó að lokum jafnhvort og Kraichnan orkurófið.

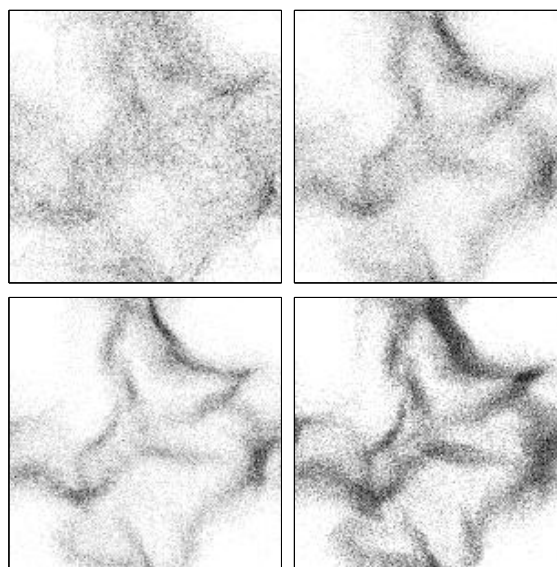
#### 4. Tölulegar lausnir og árekstrar

Í 4. kafla lýsi ég hvernig leysa má hlutfleiðujöfnuna (9) og reikna aðdráttarmengið úr 3. kafla tölulega, og set fram niðurstöður nokkurra slíka reikninga. Þá nota ég reikniritið úr 2. kafla til að skoða áhrif árekstra á dreifingu agnanna. Þar sem efni þessa kafla er mjög tæknilegt læt ég nægja að birta hér nokkrar myndir af dreifingu agnanna sem sýnir hvaða áhrif Stokes talan,  $\tau$ , og heildarrúmmál (þéttleiki) agnanna,  $\rho$ , hafa á dreifinguna. Myndirnar eru fengnar með því að leysa jöfnurnar (9) og (5) tölulega með  $\nu = 10^{-2}$ , og breyta annars vegar Stokes tölunni og sleppa árekstrum milli agna (Mynd 16), og hins vegar festa  $\tau = 1$  en taka árekstra með í reikninginn og auka áhrif þeirra með því að auka heildarrúmmál agnanna  $\rho$ .



**Mynd 16.** Dreifing agna í slemnbu hraðasviði án árekstra;  $\tau = 10^k$ ,  $k = -2, -1, 0, 1$ .

Mynd 16 sýnir áhrif Stokes-tölunnar  $\tau$  á dreifingu agnanna og staðfestir það sem gerist í raunverulegu iðustreymi, að mismununarþjöppun á sér aðeins stað þegar Stokes talan er af stærðargráðunni 1. Ef  $\tau$  er lítið (efra vinstra hornið á mynd 16) eða stórt (neðra hægra hornið) er dreifingin jöfn, en þegar  $\tau$  er nálægt 1 (hinar tvær myndirnar) á sér stað mismununarþjöppun.



**Mynd 17.** Dreifing agna í slemnbu hraðasviði, með árekstrum;  $\tau = 1$ ,  $\rho = 0\%, 0.1\%, 1\%, 10\%$ .

Mynd 17 sýnir áhrif árekstra á agnadreifinguna þegar  $\tau = 1$ . Myndin í efra vinstra horninu ( $\rho = 0\%$ ) er sú sama og sú í neðra vinstra horninu á mynd 16 ( $\tau = 1$ ), en svo eykst  $\rho$  í lesröð. Það sem er einkar áhugavert við þessa mynd er að árekstrar virðast hafa þveröfug áhrif við það sem búast mætti við fyrirfram; það að taka árekstra með í reikninginn ætti, við fyrstu sýn, að dreifa meira úr ögnunum, en þvert á móti þjappast agnirnar því meir saman eftir því sem þéttleiki þeirra eykst.

### Viðauki

Hér set ég fram nákvæmar skilgreiningar á hugtökunum *slembið hreyfikerfi* og *slembið aðdráttarmengi*, og geri lauslega grein fyrir helstu skrefunum í sönnuninni á meginniðurstöðunni úr 3. kafla. Ég vara lesandann við að þessi umfjöllun er umtalsvert þyngri en aðrir hlutar þessarar greinar.

Slembið hreyfikerfi er í grunninn venjulegt hreyfikerfi með slembnu suði. Við rifjum upp að hreyfikerfi er fjölskylda af vörpunum  $\varphi_t : X \rightarrow X$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , sem er *grúpa*, þ.e.  $\varphi_t \circ \varphi_s = \varphi_{t+s}$ . Slembið hreyfikerfi er fjölskylda af vörpunum

$$\varphi(t, \omega) : X \rightarrow X, \quad (t, \omega) \in \mathbb{R} \times \Omega$$

sem er *hjárás* (e. *cocycle*), sem þýðir að

$$\varphi(t, \theta_s \omega) \circ \varphi(s, \omega) = \varphi(t + s, \omega),$$

yfir málrækið hreyfikerfi  $(\Omega, \mathcal{F}, \text{Pr}, \theta_t)$ , þar sem  $\mathcal{F}$  er mengjaalgebra hlutmengja í  $\Omega$  og  $\text{Pr}$  er mál á  $\mathcal{F}$  [10]. Hreyfikerfi er sagt málrækið ef  $\text{Pr} \theta_t^{-1}(A) = \text{Pr}(A)$ ,  $\forall A \in \mathcal{F}$ . Í þessu samhengi er hreyfikerfið  $(\Omega, \mathcal{F}, \text{Pr}, \theta_t)$  nefnt *suð*.

Í hefðbundinni hreyfifræði er mengi  $\mathcal{A}$  kallað óbreytt ef  $\varphi_t(\mathcal{A}) = \mathcal{A}$  fyrir öll  $t > 0$  og mengi  $\mathcal{C}$  er kallað gleypið ef fyrir sérhvert takmarkað mengi  $B$ , er til  $T > 0$  þannig að

$$\varphi_t(B) \subseteq \mathcal{C} \quad \forall t \geq T.$$

Þjappað, óbreytt mengi  $\mathcal{A}$  er kallað aðdráttarmengi ef grenndin  $\mathcal{N}(\mathcal{A}, \epsilon)$  er gleypin fyrir sérhvert  $\epsilon > 0$ . Ein meginsetning í hreyfifræði segir að ef hreyfikerfi hefur gleypið mengi þá hefur það aðdráttarmengi,<sup>1</sup> sem er oft mjög gagnlegt því yfirleitt er talsvert auðveldara að sýna fram á tilvist gleypins mengis, en aðdráttarmengi eru áhugaverðari því þar á hreyfingin sér stað eftir langan tíma.

Í slembinni hreyfifræði koma slembin mengi í stað mengja, en slembið mengi  $\mathcal{A}$  í  $X$  er vörpun  $\mathcal{A} : \Omega \rightarrow 2^X$ . Við segjum að slembið mengi  $\mathcal{A}$  sé óbreytt ef  $\varphi(t, \omega)\mathcal{A}(\omega) = \mathcal{A}(\theta_t \omega)$  fyrir sérhvert  $t > 0$ , og að slembið mengi  $\mathcal{C}(\omega)$  sé gleypið ef næstum alls staðar og fyrir sérhvert takmarkað (óslembið) mengi  $B$ , er til  $T > 0$  þannig að

$$\varphi(t, \theta_{-t} \omega)B \subseteq \mathcal{C}(\omega) \quad \forall t \geq T.$$

<sup>1</sup> Ef  $\mathcal{C}$  er gleypið mengi þá er  $\mathcal{A} = \Omega(\mathcal{C})$  aðdráttarmengi.

Þjappað óbreytt slembið mengi  $\mathcal{A}(\omega)$  er slembið aðdráttarmengi ef grenndin  $\mathcal{N}(\mathcal{A}(\omega), \epsilon)$  er gleypin fyrir sérhvert  $\epsilon > 0$ , næstum alls staðar. Eins og í venjulegri hreyfifræði fæst að ef til er gleypið mengi fyrir slembið hreyfikerfi þá hefur það aðdráttarmengi [10].

Til að setja jöfnu (5) fram sem slembið hreyfikerfi byrjum við á að umrita hana sem fyrsta stigs diffurjöfnuhneppi,

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ \tau \dot{p}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p(t) \\ v(x(t), t) - p(t) \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} x(0) \\ p(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0 \\ p_0 \end{bmatrix}.$$

Við skilgreinum slembið hreyfikerfið  $\varphi(t, \omega) : X \rightarrow X$  með

$$X = \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}^2 \quad \text{og} \quad \varphi(t, \omega) \begin{pmatrix} x_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} x(t) \\ p(t) \end{bmatrix},$$

þar sem " $\omega = \psi$ ", þ.e. hraðasviðið er suðið. Sú staðreynd að  $\psi$  hefur jafnvægisdreifingu gefur að suðið er málrækið.

Til að sýna að  $\varphi$  hefur aðdráttarmengi nægir að sýna fram á tilvist gleypins mengis. Þar sem  $x$ -hniðið er takmarkað ( $x \in \mathbb{T}^2$ ) nægir að sýna að  $\dot{x}(t)$  er takmarkað. Við byrjum með skilgreininguna á  $\varphi$ ,

$$\tau \ddot{x}(s) = v(x(s), s - t) - \dot{x}(s),$$

margföldum með  $\dot{x}$  beggja megin, notum  $2\dot{x} \cdot v(x) \leq |\dot{x}|^2 + |v(x)|^2$  og fáum

$$\tau \frac{d}{ds} |\dot{x}(s)|^2 \leq -|\dot{x}(s)|^2 + |v(x(s), s - t)|^2$$

og margföldum svo með  $\frac{2}{\tau} e^{s/\tau}$  og fáum

$$\frac{d}{ds} \left( e^{s/\tau} |\dot{x}(s)|^2 \right) \leq \frac{1}{\tau} e^{s/\tau} |v(x(s), s - t)|^2.$$

Svo heildum við hvora hlið frá 0 og uppí  $t$  og fáum,

$$|\dot{x}(t)|^2 \leq e^{-t/\tau} |p_0|^2 + \frac{1}{\tau} \int_0^t e^{-(t-s)/\tau} |v(x(s), s - t)|^2 ds.$$

Tilvist gleypins mengis veltur því á að þetta heildi sé endanlegt, þ.e. að  $v$  vaxi ekki of hratt með  $t$ . Útvíkkun á hinu velþekkta ítrekaða logralögmáli fyrir Browns hreyfingu dugir til þess. Ítrekaða logralögmálið fyrir Browns hreyfingu  $B(t)$  segir að

$$\limsup_{t \rightarrow +\infty} \frac{B(t)}{\sqrt{t \log(\log t)}} = 1 \quad \text{n.ö.}$$

og það fylgir að fyrir Ornstein-Uhlenbeck-ferli,  $dX = -\alpha X dt + \sqrt{\lambda} dB$ , er

$$\limsup_{t \rightarrow +\infty} \frac{X(t)}{\sqrt{\log t}} = \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}} \quad \text{n.ö.}$$

Til að gera langa sögu stutta þá má með talsverðri vinnu útvíkka þessa setningu fyrir hlutfleiðujöfnuna (9), og við fáum að

$$\limsup_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{\|\psi(t)\|^2}{\log |t|} \leq \frac{e}{\alpha_1} \sum_{k \in K} \lambda_k \quad \text{n.ö.}$$

Sobolev greyping gefur þá að ef

$$\sum_{k \in K} \lambda_k |k|^4 < +\infty$$

þá er

$$\limsup_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{\sup_{x \in \mathbb{T}^2} |v(x, t)|^2}{\log |t|} \leq K.$$

og því

$$|v(x(t+s), s)|^2 \leq A + B \log(1 + |s|),$$

sem dugir til að heildið að ofan sé endanlegt.

**Summary** This article is a summary of the main results of my Ph.D thesis. The thesis concerns algorithms for particle simulations, and their applications, with emphasis on inter-particle collisions and their effect on particle distributions.

In Chapter 1 we survey algorithms for simulating a system of a large number of hard spheres moving in straight lines and colliding elastically with each other. We give a detailed analysis of the complexity of the resulting algorithms and give a theoretical derivation of the complexity and optimal choice of parameters. This analysis rests on Boltzmann-like assumptions on particle distributions and on an empirical observation about the behavior of the algorithm. We present several experimental results on performance which corroborate the analysis. An optimal algorithm for collision detection has cost scaling at least like the total number of collisions detected. We show, both theoretically and experimentally, that with the appropriate parameter choice and when the number of collisions grows with the number of particles at least as fast as for billiards, the algorithm we recommend is optimal to within a logarithmic factor.

In Chapter 2 we extend the methods from Chapter 1 to driven flow problems and coupled particle-field models. We build on the ideas from Chapter 1 to develop an efficient algorithm for detecting collisions among a large number of particles moving in a velocity field, when the field itself is possibly coupled to the particle motions. We extend the

complexity analysis from Chapter 1 to such problems and present several experimental results on performance which corroborate the analysis.

In Chapter 3 we study Stokes's law for the motion of inertial particles in an incompressible, two dimensional velocity field. Empirical evidence indicates that, in some parameter regimes, the distribution of particles in a turbulent velocity field is correlated with the turbulent motions, a phenomenon which has been termed preferential concentration. We consider a Gaussian velocity field that is incompressible, homogeneous, isotropic and periodic in space, and stationary and Markovian in time. We show that under suitable decay conditions on the mean kinetic energy spectrum of the velocity field, it is regular enough for particle motion under Stokes's law to have a unique solution. We then show that, under the same decay conditions, Stokes's law defines a random dynamical system with a global random attractor.

In Chapter 4 we describe how to simulate the random velocity field from Chapter 3 numerically and how to compute realizations of the random attractor. We explore numerically the spatial distribution of particles moving in a random velocity field, and how the distribution depends on the various parameters. We also explore numerically the important question of the effect of collisions on particle distributions.

## Heimildir

- [1] Hersir Sigurgeirsson. *Particle-field models: algorithms and applications*. doktorsritgerð, Stanford-háskóla, 2002.
- [2] Hersir Sigurgeirsson, Andrew Stuart og Wing-Lok Wan, *Algorithms for particle-field simulations with collisions*, Journal of Computational Physics, 172(2) (2001), 766-807.
- [3] Hersir Sigurgeirsson og Andrew Stuart, *Inertial particles in a random field*, Stochastics and Dynamics, 2(2) (2002), 295-310.
- [4] Hersir Sigurgeirsson og Andrew Stuart, *A model for preferential concentration*, Physics of Fluids, 14(12) (2002), 4352-4362.
- [5] Hersir Sigurgeirsson og David M. Heyes, *Transport coefficients of hard sphere fluids*, Molecular Physics, 101(3) (2003), 469-482.
- [6] Boris D. Lubachevsky, *How to Simulate Billiards and Similar Systems*, Journal of Computational Physics, 94(2) (1991), 255-283.
- [7] L. Boltzmann, *Vorlesungen über Gastheorie*. Ambrosius Barth, Leipzig, 1912.
- [8] J. K. Eaton og J. R. Fessler, *Preferential concentration of particles by turbulence*, Journal of Multiphase Flow, 20 (1994), 169-209.

- [9] Guiseppe Da Prato og Jerzy Zabczyk, *Stochastic equations in infinite dimensions*, Cambridge University Press, 1992.
- [10] Ludwig Arnold, *Random Dynamical Systems*, Springer, 1998.

**Um höfundinn** Hersir Sigurgeirsson er fæddur 1972 í Vestmannaeyjum. Hann lauk stúdentsprófi við Menntaskólann við Hamrahlíð 1991, BS-prófi í stærðfræði við Háskóla Íslands 1995, MS prófi í fjármálastærðfræði við Stanford-háskóla 1999, og doktorsprófi í hagnýtri stærðfræði og reiknifræði við Stanford-háskóla árið 2001 undir leiðsögn prófessors Andrew Stuart. Hersir starfaði á reiknideild Hafrannsóknarstofnunar 1995-1996, hjá Integral Development Company í Palo Alto árið 1997 og hjá Íslenskri Erfðagreiningu 2001-2002. Hann starfar nú við áhættustýringu hjá Kaupþingi Búnaðarbanka.

---

Kaupþing Búnaðarbanki  
Ármúla 13, IS-108 Reykjavík  
hersir@hersir.com

*Móttekin: 17. maí 2003*