



УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ  
ФАКУЛТЕТ ИНЖЕЊЕРСКИХ НАУКА

Дејан Петровић

МОДЕЛИРАЊЕ САМОВЕЗУЈУЋИХ МАТЕРИЈАЛА  
ПРИМЕНОМ МЕТОДЕ ДИСИПАТИВНЕ ЧЕСТИЧНЕ  
ДИНАМИКЕ И ПАРАЛЕЛИЗАЦИЈА ПРОГРАМСКОГ КОДА

Докторска дисертација

Крагујевац, 2012



<b><i>I Аутор</i></b>
Име и презиме: Дејан Петровић
Датум и место рођења: 16.04.1980. Смедеревска Паланка
Тренутно запослење: Истраживачко – развојни центар за биоинжењеринг, БиоИРЦ, Крагујевац
<b><i>II Докторска дисертација</i></b>
Наслов: <b>Моделирање самовезујућих материјала применом методе дисипативне честичне динамике и паралелизација програмског кода</b>
Број страница: 117
Број слика: 57
Број библиографских података: 45
Установа и место где је рад израђен: Факултет инжењерских наука
Научан област (УДК): Примењена информатика и рачунарско инжењерство (519.876)
Ментор: др Ненад Филиповић, редовни професор Факултета инжењерских наука
<b><i>III Оцена и одбрана</i></b>
Датум пријаве теме: 11.11.2011. године
Број одлуке и датум прихватања теме докторске дисертације: 01 – 1 / 1002 – 5 од 20.04.2012. године
Комисија за оцену подобности теме и кандидата: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Др Ненад Филиповић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>2. Др Вељко Милутиновић, редовни професор, Електротехнички факултет, Београд</li> <li>3. Др Радован Славковић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>4. Др Мирослав Живковић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>5. Др Драган Милосављевић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>6. Др Милош Ивановић, доцент, Природно – математички факултет, Крагујевац</li> <li>7. Др Драган Адамовић, ванредни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> </ol>
Комисија за оцену и одбрану писаног дела дисертације: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Др Ненад Филиповић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>2. Др Вељко Милутиновић, редовни професор, Електротехнички факултет, Београд</li> <li>3. Др Радован Славковић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>4. Др Мирослав Живковић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> <li>5. Др Драган Милосављевић, редовни професор, Факултет инжењерских наука, Крагујевац</li> </ol>

6. Др Милош Ивановић, доцент,  
Природно – математички факултет, Крагујевац
7. Др Драган Адамовић, ванредни професор,  
Факултет инжењерских наука, Крагујевац



## Предговор

Још на самом почетку студија на Машинском факултету у Крагујевцу, на предметима из примењене механике код проф. Филиповића и проф. Живковића, задивила ме је идеја и могућност, да физичке процесе који се јављају у природи можемо симулирати на рачунару примењујући познате физичке законе. У тим тренуцима сам био прилично убеђен да ће та област бити сфера мог даљег усавршавања. Након завршених основних студија на Машинском факултету у Крагујевцу, проф. Филиповић и проф. Којић су препознали моја интересовања тако да сам, 2007. године, са њихове стране ангажован у Центру за научна истраживања САНУ и Универзитета у Крагујевцу. На почетку самог ангажовања проф. Филиповић ми је дао веома захтеван задатак у оквиру Европског пројекта на коме смо били учесници, а радило се о симулацији оштећења материјала, као и њиховој заштити уз помоћ нових технологија, коришћењем методе дисипативне честичне динамике. Тада је, може се рећи, и почео рад на овој докторској дисертацији.

Пошто је број честица код методе честичне динамике био јако велики, што је додатно успоравало процес рачунања вредности од интереса, требало је извршити убрзање прорачуна. Тиме се дошло до идеје паралелизације кода, која игра све значајнију улогу у модерним апликацијама. Како је рад на поменутом проблему текао, тако су и захтеви постајали све већи. Поред симулације коришћењем дисипативне честичне динамике, урађена је и симулација методом коначних елемената а све је било потребно поставити на интернет како би приступ био омогућен свим учесницима пројекта.

Све поменуте изазове било би јако тешко превазићи без подршке професора Ненада Филиповића и професора Милоша Којића којима се овом приликом неизмерно захваљујем. Професору Филиповићу изражавам велику захвалност, за стрпљење, разумевање и помоћ приликом израде и тестирања моделираног проблема, као и за стручну и моралну подршку коју је он као ментор несебично пружао како током израде саме дисертације тако и током студија а и у Центру за научна истраживања САНУ и Универзитета у Крагујевцу и сада у Истраживачко – развојном центру за

биоинжењеринг. Професору Којићу се захваљујем на саветима и помоћи током студија чиме ми је појаснио принципе и суштину метода које користимо као алате за добијање величина које нас занимају.

Велику захвалност за помоћ приликом паралелизације програмског кода дугујем Др Милошу Ивановићу, доценту Природно-математичког факултета у Крагујевцу, који је имао стрпљења да ми помогне код сваког питања или проблема на које сам наилазио током израде софтвера. Својим саветима ми је помогао да што боље савладам свет паралелних рачунара, као и да разумем основне принципе на којима паралелно програмирање почива.

Професорима Радовану Славковићу, Мирославу Живковићу и Ненаду Грујовићу се захваљујем на стручној помоћи и сугестијама, како током основних тако и током докторских студија. Због својих особина и приступа студентима дугујем им захвалност јер су увелико допринели да се управо из тих разлога одредим за област примењене механике.

Наравно, не могу а да не поменем и захвалим се својим некадашњим колегама из Центра за научна истраживања САНУ и Универзитета у Крагујевцу а садашњим у БиоИРЦ-у, на свакодневной атмосфери и подршци коју су ми пружали када год ми је била потребна. Посебно бих се захвалио колегиници Милицы Обрадовић која је имала стрпљења и великог удела у изради модела који су моделирани и без чије помоћи бих сигурно много теже и касније стигао до циља. Изражавам захвалност и колегама са Природно – математичког факултета у Крагујевцу Адаму Станојевићу и Илији за помоћ приликом израде појединих делова апликација.

На крају, али вероватно и најбитније, за успех који сам постигао захваљујем се својој породици чија ми подршка, како морална тако и материјална, није мањкала ни у једном тренутку студија. Захваљујем се својим родитељима Славици и Живославу, сестри Данијели и сестрићу Давиду, као и теткама Ивани и Верици и њиховим породицама, без чије помоћи и подршке мог студирања не би ни било. Такође се захваљујем својим пријатељима и другарима, у Рачи и Крагујевцу, чија ми је морална подршка у појединим тренуцима давала снагу да наставим даље и стигнем до жељеног

циља и са којима сам провео многе незаборавне тренутке којих ће, надам се, у будућности бити још више.

Хвала вам свима.

Дејан Петровић





## Садржај

Листа скраћеница.....	1
1. Увод.....	1
1.1. Мотивација.....	1
1.2. Дефиниција проблема.....	2
1.3. Преглед садржаја дисертације.....	2
2. Основи самовезујућих материјала.....	4
2.1. Мотивација.....	4
2.2. Задаци и циљеви.....	5
2.3. Концепт заштите помоћу самовезујућих материјала.....	7
2.3.1. Корак 1. Експеримент.....	8
2.3.2. Корак 2. Процена резултата експеримента.....	8
2.3.3. Корак 3. Принципи приликом моделирања.....	9
3. Основе дискретних метода (MD, DPD).....	11
3.1. Молекуларна динамика – MD.....	11
3.1.1. Увод.....	11
3.1.2. Интракцијске и једначине кретања.....	11
3.1.3. Бездимензионе јединице.....	13
3.2. Дисипативна честична динамика – DPD.....	15
3.2.1. Увод.....	15
3.2.2. Модел дисипативне динамике честица.....	17
3.2.3. Интеграција кретања честица.....	24
3.2.4. Гранични услови.....	27
3.2.5. Почетно стање.....	31
3.2.6. Интеграција „leapfrog“ методом.....	31
3.2.7. Физичке величине.....	32
4. Примена DPD методе у динамици флуида.....	34
4.1. Моделирање струјања вискозног флуида између две статичне паралелне плоче под дејством запреминске силе.....	34
4.2. Моделирање струјања вискозног флуида између два коаксијална цилиндра.....	37
4.2.1. Случај А – цилиндри ротирају истим угаоним брзинама.....	39
4.2.2. Случај Б – унутрашњи цилиндар мирује док спољашњи ротира.....	40
4.2.3. Случај В – цилиндри ротирају истим угаоним брзинама, али у супротним смеровима.....	41
4.3. Опструјавање непомичног кружног цилиндра.....	42

4.4.	Чиста ротација елипсасте честице при градијенту смичућег напона код струјања (Цефријево решење).....	45
5.	Имплементација паралелних DPD алгоритама.....	50
5.1.	Мотивација.....	50
5.2.	Врсте паралелних архитектура .....	51
5.3.	Архитектура дељене меморије.....	53
5.4.	Архитектура дистрибуиране меморије .....	53
5.5.	Хибридна архитектура.....	53
5.6.	Стратегија паралелизације .....	55
5.7.	Основе OpenMP (Open Multi - Processing) .....	58
6.	Резултати и анализа.....	61
6.1.	Увод.....	61
6.2.	Моделирање <i>self – healing</i> – а.....	61
6.3.	Моделирање инхибиције .....	67
6.4.	FEM модел .....	74
6.5.	Мапа ризика заштите материјала добијена FEM моделом .....	78
6.6.	Резултати паралелизације.....	90
7.	Закључна разматрања.....	97
7.1.	Постигнути циљеви.....	97
7.2.	Смернице за даљи рад.....	99
	Литература.....	101



## Листа скраћеница

<b>CUDA</b>	Compute Unified Device Architecture
<b>DPD</b>	Dissipative Particle Dynamics
<b>FEM</b>	Finite Element Method
<b>GB</b>	Gibbs Boltzmann
<b>GPGPU</b>	General-Purpose computing on Graphics Processing Units
<b>LB</b>	Lattice Boltzmann
<b>LGA</b>	Lattice Gas Automata
<b>MD</b>	Molecular Dynamics
<b>MIMD</b>	Multiple Instruction Multiple Data
<b>MISD</b>	Multiple Instruction Single Data
<b>MKE</b>	Метод Коначних Елемената
<b>МКЗ</b>	Метод Коначних Запремина
<b>МКР</b>	Метод Коначних Разлика
<b>MPI</b>	Message Passing Interface
<b>MUST</b>	Multi-level protection of materials for vehicles by smart nanocontainers
<b>OpenMP</b>	Open Multi - Processing
<b>POSIX</b>	Portable Operating System Interface (for Unix)
<b>SIMD</b>	Single Instruction Multiple Data
<b>SISD</b>	Single Instruction Single Data



## 1. Увод

### 1.1. Мотивација

Основна идеја нумеричких метода, које су данас у широкој научној и инжењерској употреби у механици и другим областима, је постојање тзв. мреже елемената. Код такве мреже повезаност између чворова је позната пре почетка решавања једначина проблема. У ову групу нумеричких метода спадају метода коначних елемената (МКЕ), метода коначних запремина (МКЗ), метода коначних разлика (МКР) и друге. Ове методе су данас у широкој употреби и имају задовољавајућу тачност резултата али у њиховој примени понекад долази до потешкоћа када се моделирају проблеми нпр. са великим деформацијама домена модела, приликом моделирања проблема механике лома итд. Последњих година прошлог века се трагало за нумеричким методама које би могле да превазиђу наведене проблеме и које би имале универзалнији карактер. На тај начин се дошло на идеју креирања безмрежних метода код којих се не захтева дефиниција геометријско – интерполационе везе између чворова пре почетка решавања проблема већ се везе међу чворовима, у овом случају честицама, успостављају током самог процеса решавања проблема.

Дисипативна честична динамика (Dissipative Particle Dynamics – DPD у даљем тексту) је релативно новији представник безмрежних метода. Као и код осталих безмрежних метода, везе и тежински фактори утицаја чворова једних на друге се одређују у току самог прорачуна, као што је већ споменуто. Најпогоднија примена ове методе је у динамици флуида где налази све већу употребу. Ова метода се базира на методи молекуларне динамике (Molecular Dynamics – MD) али за разлику од ње узима у обзир додатне силе које делују на честице.

Циљ ове дисертације је моделирање нових типова материјала коришћењем DPD методе као и паралелизација програмског кода ради убрзања. Поред овога биће тестирани неки основни примери из динамике флуида за које је познато аналитичко решење ради валидације методе. Такође, биће осврта на предности и мане безмрежних

метода као што су MD и DPD у односу на МКЕ која је представник групе мрежних метода.

## 1.2. Дефиниција проблема

DPD је једноставна нумеричка метода базирана на Њутновом закону и има јако добре перформансе у рачунарском смислу. Због својих особина, наметнула се као добро решење за симулацију самовезујућих материјала. Самовезујући материјали састоје се из вишеслојне активне заштите која подразумева наношење боја, премаза и других лепљивих материја у којима се налазе активни састојци, тј. наноконтејнери. Управо је моделирање слојева заштите веома лако урадити помоћу DPD модела, а и сам процес самозаштите се одвија на мезо – скали што је и допринело одабиру баш ове методе за моделирање.

Сама имплементација DPD методе је веома захвална што се тиче програмирања и врло је једноставна за коришћење и креирање различитих модела. Овде је развијана верзија програма која је од почетка прилагођена паралелизацији па из тог разлога није било тешко урадити други део дисертације.

Паралелизација програмског кода, је у данашње време, незаобилазан део програмирања јер се тиме знатно скраћује време потребно да се уради задати посао. Мана готово свих безмрежних метода, због чега прорачуни трају дуже од прорачуна код мрежних метода, лежи у чињеници да се међусобни утицај чворова тј. честица и њихова повезаност рачуна у току самог извршавања, и то пре сваког итерационог корака, док је код мрежних метода та зависност унапред задата и позната. Због ове чињенице, један од задатака дисертације је и креирање паралелне верзије програмског кода како би се скратило време трајања DPD анализе. У ту сврху направљена су два, концептуално различита, приступа при паралелизацији.

## 1.3. Преглед садржаја дисертације

Дисертација је подељена у 6 целина. На почетку дисертације су објашњене идеје самовезивања материјала, постављене теоријске основе коришћених метода, затим је описана примена DPD методе у динамици флуида, а на крају су приказани добијени



резултати са анализом и дискусијом. Нешто детаљнији опис појединих глава је дат у наставку.

У Глави 2 су дате основне идеје самовезујућих материјала, приступи помоћу којих је могуће постићи самозаштиту материјала као и начин реализације саме идеје.

Глава 3 даје теоријске основе безмрежних метода, којима припада и DPD метода. Описане су основе MD а дата је детаљнија анализа DPD методе и програмска имплементација. Такође је описан метод којим су моделирани материјали који су од интереса.

Тема Главе 4 је примена DPD методе у динамици флуида. Дати су неки основни примери струјања флуида. За неке од примера, добијени резултати су упоређивани са резултатима добијеним коришћењем осталих безмрежних метода. Код примера где постоји аналитичко решење такође је вршено упоређивање добијених резултата са аналитичким решењем.

Глава 5 се односи на имплементацију паралелних DPD алгоритама и опис коришћених метода при паралелизацији као и њихове разлике. Описана су оба приступа као и њихове предности и мане.

У Глави 6 су приказани добијени резултати DPD и методом коначних елемената. Методом коначних елемената је добијена и мапа ризика заштите самовезујућих материјала где су приказане зоне када ће материјал остати незаштићен или када ће бити потпуно заштићен за различите улазне параметре.

У последњој глави, Глави 7, дате су смернице за даља истраживања и будући правци развоја приказаних метода.

## 2. Основи самовезујућих материјала

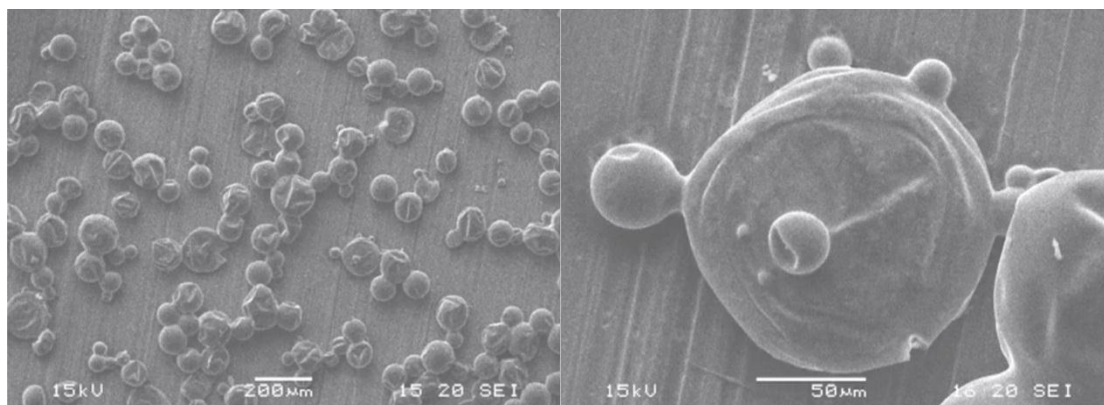
### 2.1. Мотивација

Заштита животне средине и корозија металних структура су веома важна питања којима се баве државе у Европи, које тренутно улажу више од 200 милијарди евра годишње инвестирајући у заштиту од корозије. Транспорт робе и људи је веома важна грана индустрије која има јако високе захтеве који се тичу отпора на корозију. Да би се задовољили ти захтеви, примена органских наноса и премаза се показала као веома ефикасан начин за побољшање заштите од корозије а самим тим и трајност металних конструкција.

Из горе поменутих економских разлога, 2008. године покренут је Европски пројекат MUST („Multi – level protection of materials for vehicles by smart nancontainers“ – Вишеслојна заштита материјала код возила коришћењем „паметних“ наноконтејнера, [1]) који је за циљ имао унапређење заштите од корозије и сличних дефеката који настају на материјалу. MUST предвиђа дизајн, развој и примену нове вишеслојне заштите као што су премази, наноси и лепљиве материје. Главна стратегија је одговор на деструктивне услове који настају, реакцијама које имају ефекат самовезивања. Значајан напредак се може направити у дужини трајања заштитних премаза ако се поремећај код материјала уочи на време. Материјали прекривени оваквом врстом заштите се називају биомиметички јер се заправо опонашају природни процеси самозаштите живих организама.

Циљ пројекта је обезбеђивање нових технологија базираних на активној вишеслојној заштити код материјала који ће се користити у аутомобилској, авио или поморској индустрији. „Паметни“ наноконтејнери (Слика 1.) ће бити комерцијализовани у стандардним бојама, лаковима и лепковима како би се производима обезбедила заштита самовезивањем. Главни задатак MUST пројекта је дизајнирање, развој, тестирање и примена заштитних материјала код будућих возила. Нови систем активне заштите се заснива на различитим типовима „паметних“ наноконтејнера који су укључени у полимерне матрице и прилагођени одређеном

степену заштите. Овакви системи омогућују радикално унапређивање карактеристика материјала који за основу имају металну или полимерну основу.



Слика 1. Изглед наноконтејнера (Извор: А. Jovanovic et al., 2012, Final report for FP7 MUST project)

## 2.2. Задаци и циљеви

Деградација структуре материјала услед корозије је једно од важнијих питања данашњице. У зависности у каквој средини су експлоатисани, код материјала и долази до различитих механичких оштећења. На рачун тога постоје два приступа приликом заштите материјала од корозије, активни и пасивни приступ [2], [3]. Пасивни приступ подразумева постављање различитих слојева заштите на основни материјал док се активни приступ треба да умањи степен корозије када се оштете слојеви који такву заштиту обезбеђују. На површини материјала могу се јавити мала оштећења која могу имати утицај на механичке карактеристике материјала. Да би се избегло пропадање материјала, метод код кога се на материјал наносе различити облици заштите је широко распрострањен и користи се у великом броју случајева, од аутомобила и авиона до кућних апарата.

„Self-healing“ тј. самовезивање или инхибиција су релативно нови појмови у науци о материјалима који дефинишу опоравак материјала како би му се повратиле механичке карактеристике које су измењене дејством околине. Постоји велика индустријска потреба за испитивањем и развијањем активног механизма заштите коришћењем полимера и лепљивих материја. Циљ је постављање вишеслојне заштите

материјала како би се спречиле и репарирале различите врсте оштећења. Заштитни систем треба да реагује на унутрашње и спољашње факторе, укључујући и озбиљност оштећења [4].

Концепт вишеслојне заштите је базиран на четири слоја [5], [6]:

- 1) „нанозамке“ – заштита која служи да апсорбује супстанце које подстичу настанак и развој корозије;
- 2) „истискивач воде“ – делује код макро оштећења и штити материјал од штетног утицаја воде и старења као и од слабијих механичких оштећења;
- 3) „самовезивање полимеризацијом“ – штити основни материјал од јаких удара и већих механичких оштећења;
- 4) „инхибиција корозије“ – заштита од свих фактора који утичу на механичке карактеристике материјала.

„Self-healing“ – ом се материјал штити од мањих оштећења која могу настати услед механичког оптерећивања. Са друге стране, инхибицијом се материјала штити од оштећења насталих од спољашњег утицаја и од јаких механичких удара.

Главни циљ је моделирати систем који ће квантитативно описати процес заштите, који ће оптимизовати састав нанетих слојева где треба узети у обзир садржај наноконтејнера, њихову дистрибуцију у слоју, њихове површинске карактеристике, карактеристике инхибитора и заштитних агенаса као што су квашење и др. Наноконтејнер у суштини представља запремину која је испуњена инхибиторима и који када се његова мембрана физички уништи испушта полимере да би се ти полимери везали и направили ланац који би представљао отпор корозији.

Могући корисници овако конципиране заштите од корозије су ауто, авио, и поморска индустрија. Да је овакав тип заштите пожељан, показује и интересовање великих Европских фирми и добављача за премазе и лепљиве масе код возила. Резултат MUST пројекта је знатно дужи животни век материјала што доводи до повећања конкурентности Европске индустрије која се тиче транспорта робе и људи. Приступ вишеслојне заштите такође отвара могућности примене и коришћења модерних и лаких материјала као што су на пример легуре магнезијума и легуре алуминијума.



**Слика 2.** Области примене наноконтејнера (Извор: A. Jovanovic et al., 2012, Final report for FP7 MUST project)

### **2.3. Концепт заштите помоћу самовезујућих материјала**

Површинске дефекте у материјалу је тешко открити и санирати. Велики изазов у науци о материјалима је дизајн „паметних“ синтетичких система који могу да поново изграде континуитет и интегритет оштећене области. Недавна истраживања наноконтејнера са процесом самовезивања материјала обећавају нови пут за нове, паметне и нанопокривајуће заштите. Основна идеја самовезујућих материјала лежи у аналогiji са биолошким системима код којих се оштећење само санира где, наравно, настало оштећење не може бити тотално.

У сврху моделирања система који садржи наноконтејнере на нано – скали коришћена је DPD метода док је метод коначних елемената (FEM – Finite Element Method) коришћен упоредо за моделирање понашања наноконтејнера на макро нивоу. Коришћењем ових методологија могуће је апроксимирати понашање наноконтејнера који се налазе у заштитном слоју, што раније није било могуће.

Креирање виртуелних експеримената код заштите материјала од корозије смањује време и уложена средства у фази развоја а као резултат добија се могућност оптимизације у тој најранијој фази. Захваљујући индустријској подршци, постоје експериментални узорци на основу којих је било могуће упоредити и верификовати добијена решења за развијене моделе.

Алгоритми који су овде развијени, заснивају се на бази разумевања основних процеса креирања наноконтејнера који се користе на свим нивоима заштите као и

њихова интеракција са осталим слојевима заштите и брзина испуштања и транспорт инхибитора и заштитних агенаса.

У наредних неколико корака приказани су поступци третирања материјала који су заштићени наноконтејнерима [1].

### 2.3.1. Корак 1. Експеримент

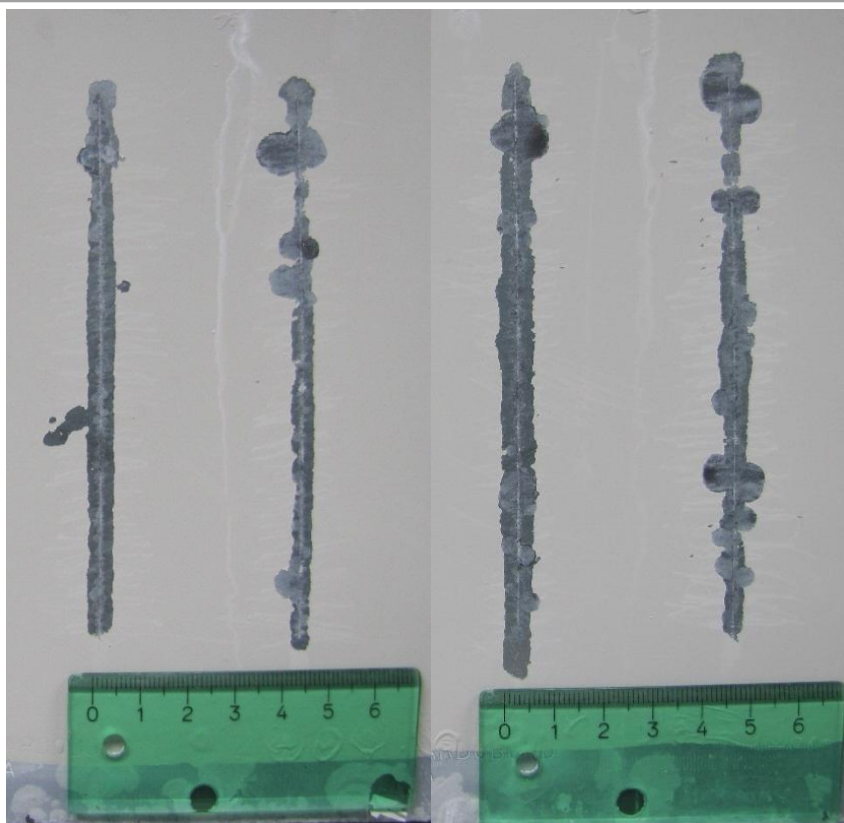
„Тест слане магле“ је тест испитивања отпорности материјала и наноса на материјалу према корозији у складу са стандардом ДИН ЕН ИСО – 11997 – 1. Заштитне честице се налазе у заштитном средству које се наноси на металну плочу. Оштећене металне плоче, које се тестирају, су смештене у затвореном простору који је испуњен „сланом маглом“. Плоче се остављају у таквом окружењу 2000 сати. На слици 3. је приказан процес излагања металних плоча поменутом тесту [7].



**Слика 3.** Процес излагања металних плоча које садрже заштитне слојеве (Извор: А. Јовановић et al., 2012, Final report for FP7 MUST project)

### 2.3.2. Корак 2. Процена резултата експеримента

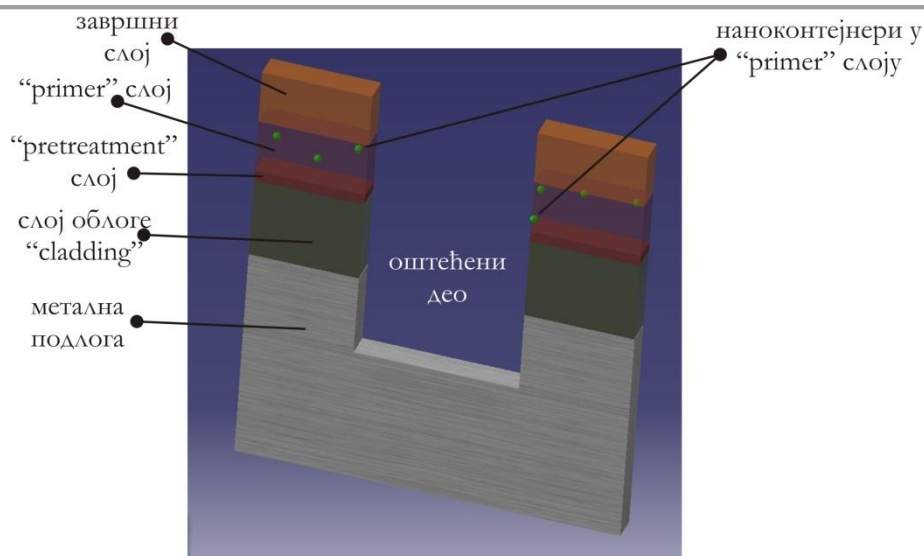
Након теста из корака 1., врши се испитивање оштећења металних плоча.



**Слика 4.** Металне плоче заштићене MUST заштитним средством са наноконтејнерима после теста из корака 1 (Извор: А. Jovanovic et al., 2012, Final report for FP7 MUST project)

### 2.3.3. Корак 3. Принципи приликом моделирања

Постоји неколико техника за моделирање, а у зависности од величине проблема, тј. да ли је проблем у нано – скали, мезо – скали или макро – скали, употребљена је одговарајућа техника моделирања. За моделирање система заштите металних плоча помоћу наноконтејнера коришћена је DPD метода и метод коначних елемената. Резултати добијени моделирањем су приказани у глави 6.



**Слика 5.** Изглед 2.5D модела и насумични распоред наноконтејнера у „primer“ слоју (Извор: А. Jovanovic et al., 2012, Final report for FP7 MUST project)

У зависности од области примене користе се различити слојеви премаза за различите подлоге. У MUST пројекту су коришћене легуре алуминијума за примену у ваздухопловству и поцинковани челик који се користио у аутомобилској индустрији [8], [9].

За примену у ваздухопловству је коришћена легура алуминијума 2024 као материјал подлоге док је за "pretreatment" коришћен позитивно оксидишући слој. Код завршног и "primer" слоја коришћена су епоксидна једињења која су базирана на води док, опционо, у "primer" могу бити додати наноконтејнери.

Када је реч о примени у аутомобилској индустрији, слој цинка који се наноси на челик је дебљине око 8  $\mu\text{m}$ , "pretreatment" слој чини  $\text{SiO}_2$  основа, дебљине око 150 nm, у коју се могу додати наноконтејнери. Као завршни наноси се "weld through primer" слој који представља специјалну врсту боје која не сагорева при заваривању. Дебљина завршног слоја износи од 3  $\mu\text{m}$  до 4  $\mu\text{m}$  а може садржати "нанозамке" или наноконтејнере.



### 3. Основе дискретних метода (MD, DPD)

#### 3.1. Молекуларна динамика – MD

##### 3.1.1. Увод

Ово поглавље пружа уводни део у Молекуларну Динамику (Molecular Dynamics – у даљем тексту MD) и има за циљ да читаоцу представи основни концепт MD. Наравно, техника рачунања сила о којој ће овде бити дискусије није нарочито ефикасна, са рачунске тачке гледишта, тако да је овде представљен модел који је најједноставнији.

Молекуларна динамика је мултидисциплинарна метода, настала крајем 50-их и почетком 60-их година прошлог века у оквиру теоријске физике [10], [11], али се данас углавном примењује у раду са биомолекулима и у науци о материјалима. Да би се обавила MD симулација неопходно је дефинисати функцију потенцијала, или опис услова по којима ће се јавити међусобна интеракција честица у симулацији. У хемији и физици под овим подразумевамо дефинисање поља сила.

##### 3.1.2. Инетракцијске и једначине кретања

Најосновнији микроскопски модел за супстанцу која може да се одржи у сва три позната агрегатна стања – чврсто, течна и гасовита – је заснован на сферичним честицама које могу да интерагују једна са другом, а у интересу краткотрајности такве честице представљају атоме (додуше без наговештаја о њиховом квантном пореклу). Интеракције, на најосновнијем нивоу, се јављају између парова атома и одговорне су за обезбеђивање две главне карактеристике међуатомских сила. Прва сила је отпор на притисак, па отуда и последица одбојне интеракције која се дешава на малом растојању. Друга сила тежи да веже атоме заједно у чврста и течна стања, а због овога атоми морају привлачити једни друге у опсегу раздвајања. Потенцијалне функције изложене овим карактеристикама могу усвојити различите облике и, ако су пажљиво изабране, заправо могу да обезбеде корисне моделе за реалне супстанце.

Најпознатији од ових потенцијала, првобитно предложених за течни аргон, је Ленард – Џонс (Lennard – Jones, LJ) потенцијал. За пар атома  $i$  и  $j$  који се налазе на међусобном растојању  $r_{ij}$  потенцијална енергија је

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} < r_c \\ 0 & , \quad r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (3.1)$$

где је  $r_{ij} = r_i - r_j$  и  $r_{ij} = |r_{ij}|$  [12]. Параметар  $\varepsilon$  регулише јачину интеракције тј. дубину енергетског зида а  $\sigma$  дефинише ван дер Валсов (van der Waals) полупречник. Интеракција између честица најпре има одбојни карактер а затим привлачни и на крају она престаје на неком растојању  $r_c$ . Док је чврсто одбојно језгро које потиче од, речено језиком квантне механике, неvezујућих преклапања између облака електрона и које има прилично произвољан облик, и друге функционалне форме које се често користе, заправо представљају ван дер Валсове силе које делују међу електронима. Интеракција укључује индивидуалне парове атома. Сваки тај пар се третира независно и нема утицаја на силе међу тим другим атомима који се налазе у суседству. Ако даље поједноставимо интеракцију игноришући привлачне силе једначина (3.1) постаје:

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \varepsilon, & r_{ij} < r_c \equiv 2^{1/6} \sigma \\ 0 & , \quad r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (3.2)$$

са изабраним  $r_c$  тако да  $V(r_c) = 0$ . Коришћењем израза (3.2) добија се модел флуида код кога је укупни потенцијал нешто већи од збира потенцијала свих честица које су у колизији. Све што држи овакав систем заједно је скуп у коме су атоми, или честице, ограничени. Док су врсте система, које могу бити квантитативно представљене овим врло поједностављеним моделом, ограничене – обично гасови при малим густинама – ипак има много тога заједничког са детаљнијим моделима. Предност у погледу рачунарске једноставности оваквих система је јасно уочљива.

Сила која одговара  $V(r)$  је

$$f = -\nabla V(r) \quad (3.3)$$

па је сила којом атом  $j$  делује на атом  $i$

$$f_{ij} = \left( \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \right) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] \mathbf{r}_{ij} \quad (3.4)$$

уз услов да је  $r_{ij} < r_c$  и да је у супротном нула. Како растојање  $r$  расте ка  $r_c$  сила опада на нулу, тако да нема дисконтинуитета на растојању  $r_c$  (и у случају силе и у случају потенцијала); градијент силе  $\nabla f$  и виши изводи су дисконтинуални, мада то нема утицаја на нумеричко решење. Једначине кретања које следе из другог Њутновог закона су

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{N_m} \mathbf{f}_{ij} \quad (3.5)$$

где се врши сумирање над свих  $N_m$  атома (или молекула у случају једног атома), искључујући само  $i$ , а  $m$  представља атомску масу. Ове једначине су оне које морају бити нумерички интегралне. Трећи Њутнов закон налаже да је  $\mathbf{f}_{ji} = -\mathbf{f}_{ij}$  тако да сваки пар атома треба испитати само по једном. Количина посла који треба урадити је пропорционална  $N_m^2$  тако да код модела код којих је  $r_c$  мало у поређењу са величином тог модела добро је одредити парове атома код којих је  $r_{ij} < r_c$  и тиме знатно смањити ресурсе потребне за извршавање рачуна.

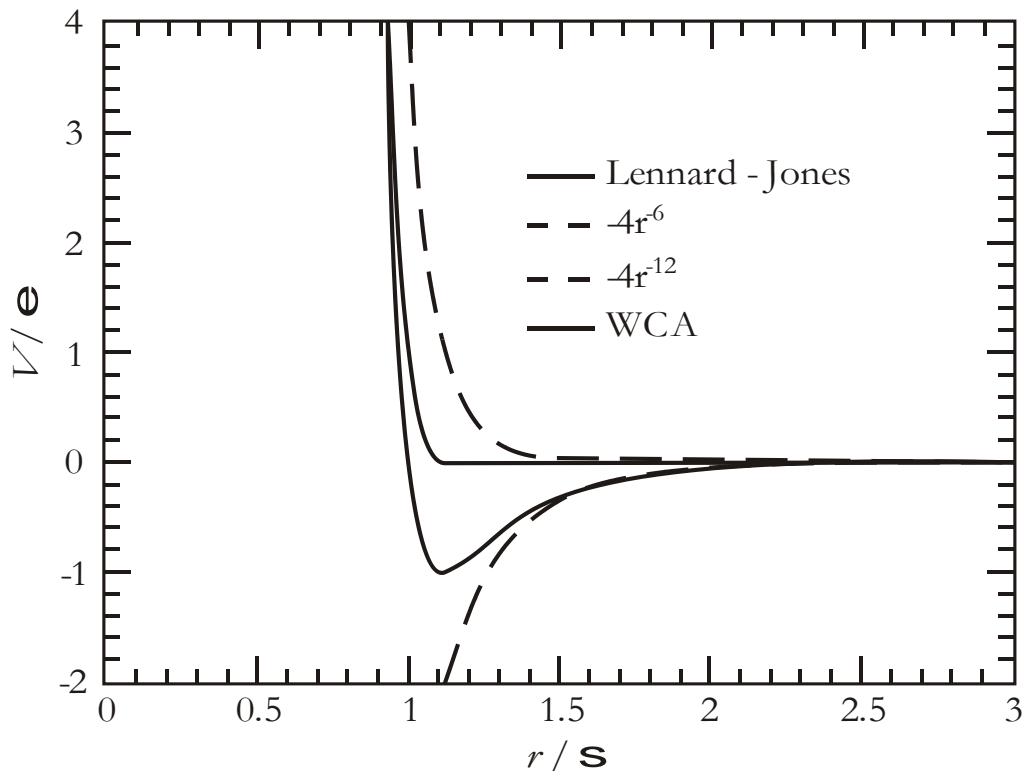
### 3.1.3. Бездимензионе јединице

У овом поглављу ће бити представљен сет бездимензионих, или редукованих, MD величина одакле ће све физичке величине бити изражене. Постоји неколико разлога за ово. Један од њих је да су једначине кретања упрошћене јер су неки од параметара који дефинишу модел, ако не сви, уврштени преко тих јединица. Најупечатљивији разлог за коришћење таквих јединица је повезан са општим појмом скалирања, дакле, да један модел може да опише целу класу проблема и да када се

особине тог модела једном изразе у бездимензионим јединицама након тога оне могу бити лако прилагођене одговарајућим физичким јединицама за проблем који се решава.

Код MD, потенцијал коришћен у облику Ленард – Џонсовог израза, који је представљен једначином (3.1), је најпогоднији јер бездимензионе јединице могу да се изаберу тако да  $\sigma$ ,  $m$ , и  $\varepsilon$  буду јединице дужине, масе и енергије, респективно, и тада можемо направити замену

- дужина:  $r \rightarrow r\sigma$
- енергија:  $e \rightarrow e\varepsilon$
- време:  $t \rightarrow t\sqrt{m\sigma^2 / \varepsilon}$



**Слика 6.** Дијаграм Ленард – Џонсовог потенцијала између пара атома заједно са утицајима делова  $r^{-12}$  и  $r^{-6}$

Дијаграм Ленард – Џонсовог потенцијала је приказан на слици 6. а на истој слици је приказан и WCA (Weeks – Chandler – Andersen) померени репулзивни део потенцијала [12].

Коначни облик једначине кретања, у MD јединицама, је

$$\ddot{\mathbf{r}}_{ij} = 48 \sum_{j(\neq i)} \left( r_{ij}^{-14} - \frac{1}{2} r_{ij}^{-8} \right) \mathbf{r}_{ij} \quad (3.6)$$

Бездимензионе вредности кинетичке и потенцијална енергије, за један атом, су

$$E_K = \frac{1}{2N_m} \sum_{i=1}^{N_m} v_i^2 \quad (3.7)$$

$$E_U = \frac{4}{N_m} \sum_{1 \leq i < j \leq N_m} \left( r_{ij}^{-12} - r_{ij}^{-6} \right)$$

где  $v_i$  представља брзину.

У MD моделу температура је представљена са  $\varepsilon / k_B$ , а како сваки трансляциони степен слободе доприноси за  $k_B T / 2$  кинетичкој енергији, то је температура  $d$  – димензионог система ( $d = 2$  или  $3$ )

$$T = \frac{1}{dN_m} \sum_i v_i^2 \quad (3.8)$$

Ако поставимо да је  $k_B = 1$ , имаћемо и MD јединицу за температуру такође дефинисану.

## 3.2. Дисипативна честична динамика – DPD

### 3.2.1. Увод

Метода дисипативне динамике честица (Dissipative Particle Dynamics – DPD) је релативно нова компјутерска метода за моделовање динамике честица на мезо – скали. Међу сложеним системима, који се проучавају коришћењем компјутерских симулација, су системи са флуидом који су често састављени од околине која је у течном стању у којој се објекти од интереса растварају. Поменути објекти могу бити колоиди или полимери у раствору, или чак биолошки ситеми као што су на пример мембране. Пошто понашање таквих система може бити знатно сложеније од понашања које имамо код флуида, они се такође називају и сложени флуиди.

На динамику сложених флуида у основи утиче њена микроскопска структура што има за последицу то да они не могу бити детаљно описани само Навије – Стоксовим (Navier – Stokes) једначинама. То практично значи да састав на микроскопском нивоу утиче на понашање флуида на макроскопском нивоу. Присуство оваквог диспаритета представља проблем приликом компјутерских симулација. Нумерички солвери који користе Навије – Стоксове једначине нису адекватни због микроскопске структуре сложених флуида тако да не могу бити искоришћени. Симулације које користе молекуларну динамику такође нису адекватне за овакве системе јер таква симулација представља микроскопски ниво сложених флуида.

Да би наведени проблеми били превазиђени потребно је направити метод за симулирање на средњој, тзв. мезо – скали. Основа мезоскопских симулација је теорија крупних честица која је креирана на такав начин да задовољава одређене законе очувања или симетрије који се узимају као основа за посматрани феномен. Мезо – скала се обично креће у дужинском опсегу од 10 nm до 1000 nm а у временском опсегу од 1 ns до 10 ms [13], [14].

Једна од првих симулација које представљају средњу скалу је Латис Гас Аутомата (LGA – Lattice Gas Automata) [15], тј. решеткаста гасна метода у којој се честице крећу по унапред задатој решетки. Овде долази до колизије честица по унапред задатим законима. У поређењу са молекуларном динамиком, рачунарски ресурси су овде знатно уштеђени а и временски корак може бити доста већи. Алтернативна метода методи LGA је Латис Болцман (LB – Lattice Boltzmann), где су чворови решетке описани функцијом расподеле. Развој система је подељен у фазу простирања, у којој се расподела честица мења према тренутном кретању, и у фазу сударања, у којој се брзине рачунају према одређеним правилима колизије. LB метода је заправо модификована LGA метода. Обе ове методе имају недостатке због решетке али и због рачунања граничних услова [16].

DPD метода је мезоскопска метода симулације за изотермалне сложене флуиде. Главна идеја је да се променљиве за померања и брзине ажурирају у фази простирања и у фази колизије, тј. сударања. Код DPD методе између честица делују силе које се сматрају да нису интензивне и да су коначне. На овај начин је решен проблем решетке

док је задржана могућност избора великог временског корака. Да би се постигао ефекат крупних честица, међучестичне силе садрже и расипни и стохастички део. Важно је напоменути да су силе тако креиране да омогућавају одржање масе и момента. Дисипативна честична динамика је, како само име каже, честична метода код које честице не представљају физички појам већ центар масе једног флуидног делића.

Дисипативна честична динамика има многе предности у односу на претходно поменуте методе:

- како не постоји мрежа много је лакше превазићи проблем граничних услова,
- како имамо очување масе и момента очекивано је да DPD верно представи хидродинамичко понашање система,
- пошто је у питању честична метода прилично је прилагодљива на додавање нових особина честица.

DPD методу су прво представили Hoogerbrugge и Koelman [14], као нову методу за симулирање хидродинамичких проблема. Она комбинује најбоље особине молекуларне динамике и LGA приступа. Ова метода превазилази проблем Галилејеве инваријанте и изотропије а садржи очување момента и масе. У основи, потврђено је да метода верно осликава хидродинамичко понашање како са аналитичке тако и са стране моделирања и симулације.

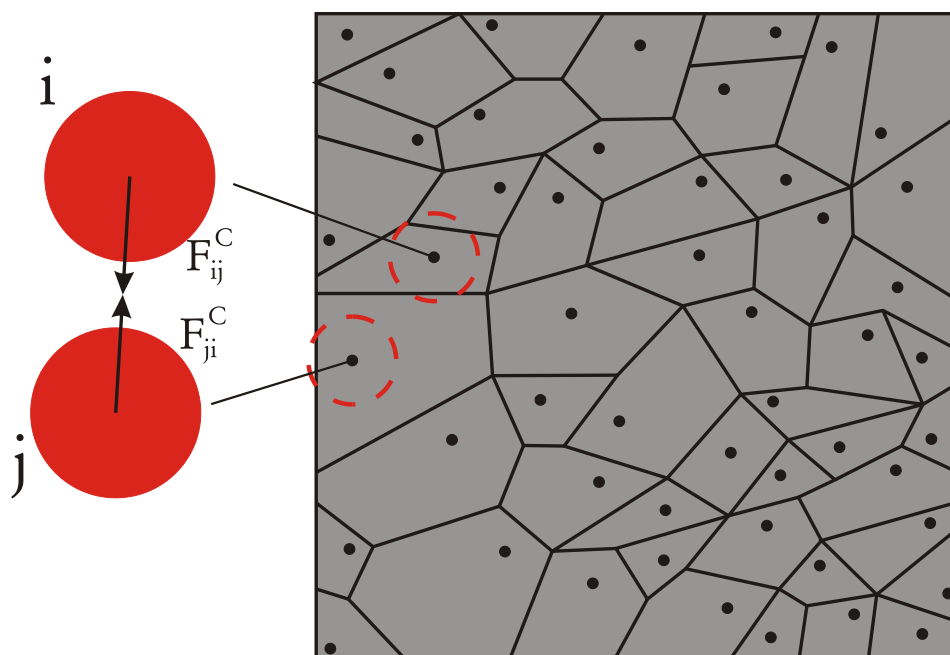
Метода је коришћена за симулирање стационарног смицања коришћењем „тврђих“ сила између честица [17] и код симулирања полимера [18], [19]. Дисипативне и стохастичке силе код DPD методе немају очување енергије система. Нема преноса енергије и од модела се очекује да је изотермалан. Како било, у оригиналној поставци параметри модела не зависе од температуре што су утврдили Espanol и Warren [20] који су установили тачан однос флукуације дисипације код трења. Groot и Warren [21] су утврдили на који начин могу бити изабрани коефицијент трења, јачина шума и временски корак.

### 3.2.2. Модел дисипативне динамике честица

Код ове методе флуид је дискретизован у скуп интерактивних честица. Свака DPD честица представља кластер MD честица (атома и молекула). DPD је заправо

техника за симулацију која представља побољшану методу молекуларне динамике. Код DPD методе честице мењају позицију у току времена према Њутновој једначини кретања. Интеракција између честица се одвија тако да реалистично и стабилно представља понашање система на различитим скалама. DPD метода се примењује углавном код система код којих постоји велики број међусобно повезаних честица које су потопљене у течност или у случајевима струјања флуида кроз сложене површине.

Воронојева тесалација се користи у дискретизацији флуидног простора, тако да су њихови центри DPD честице чије кретање је прорачунато. Дијаграм Воронојева тесалације у случају 2D простора приказан је на слици 7 [22]. Код MD методе постоји флукуација у маси код Воронојева ћелије јер MD честице могу ући и изаћи из ћелије а такође, облик ћелија се мења док се ћелије крећу. Међутим, ова флукуација масе и промена облика ћелија се занемарују приликом формулисања DPD честица. Тако, DPD честице које представљају Воронојева ћелије имају константну масу током кретања.



Слика 7. Воронојева тесалација 2D простора и шематски приказ Воронојева ћелије уз помоћ куглица

Интерактивне конзервативне одбојне силе између ћелија  $i$  и  $j$  су  $\mathbf{F}_{ij}^C = -\mathbf{F}_{ji}^C$ .



Свака честица у тродимензионалном DPD систему има константну масу и радијус интеракције. Симулација се остварује итеративно кроз временске кораке, где се сматра да је сваки временски корак мали али коначни тренутак времена. У сваком временском кораку свака честица поседује позицију, брзину и убрзање што се изражава тродимензионалним вектором у простору, а поменуте физичке величине се сматрају константним током временског корака.

Силе које делују на честице у сваком временском кораку зависе од положаја и брзине честице у том тренутку. Промена убрзања за сваку честицу, што је последица деловања силе у одређеном временском кораку, се рачуна на крају временског корака као количник суме свих сила које делују на посматрану честицу и масе. Затим се вектор убрзања користи за рачунање брзине и положаја честице користећи интеграциону шему која представља Њутнову једначину кретања.

Честица која поседује радијус интеракције у 3D систему може бити представљена као флуидна. До преклапања сфера долази када је растојање између честица мање од суме њихових радијуса деловања.

Кретање сваке DPD честице описано је другим Њутновим законом и то према следећој једначини:

$$m_i \dot{\mathbf{v}}_i = \sum_j (F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R) + F_i^{ext} \quad (3.9)$$

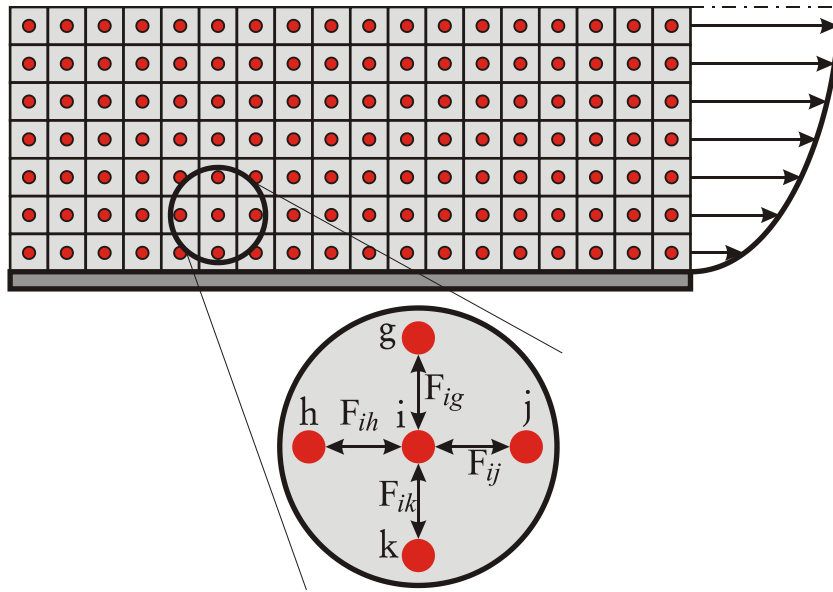
где је:

- $m_i$  маса честице  $i$ ;
- $\dot{\mathbf{v}}_i$  је убрзање честице које је представљено као извод брзине по времену;
- $\mathbf{F}_{ij}^C$ ,  $\mathbf{F}_{ij}^D$  и  $\mathbf{F}_{ij}^R$  су конзервативна (репулзивна), дисипативна, и насумична сила интеракције којом честица  $j$  делује на честицу  $i$ , респективно, уз услов да је честица  $j$  у радијусу деловања  $r_c$  у односу на честицу  $i$ ;
- $\mathbf{F}_i^{ext}$  представља спољашњу силу која делује на честицу  $i$ .

Сила  $\mathbf{F}_i^{ext}$  обично представља градијент притиска или силу гравитације и даје иницијално покретање честица у случају када имамо домен флуида [23]. Укупна сила интеракције  $\mathbf{F}_{ij}$  између две честице је дата на слици 8.

$$\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R \quad (3.10)$$

Силе приказане у једначини (3.10) су увек једнаких интензитета и супротних смерова тако да имамо очување момента и на локалном а и на нивоу читавог система.



Слика 8. Силе интеракције између честица код DPD методе

Компоненте укупне силе могу бити изражене као у изразу (3.11) према [24]:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^C &= a_{ij} \left( 1 - \frac{r_{ij}}{r_c} \right) \mathbf{r}_{ij}^0 \\ \mathbf{F}_{ij}^D &= -\gamma w_D \left( \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} \right) \mathbf{r}_{ij}^0 \\ \mathbf{F}_{ij}^R &= \sigma w_R \xi_{ij} \mathbf{r}_{ij}^0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

У једначинама које су приказане у изразу (3.11) су коришћене следеће величине:

- $a_{ij}$  представља параметар којим се одређује вредност максималне репулзивне силе по јединици масе;
- $r_{ij}$  је растојање између честица  $i$  и  $j$ ;

- $\mathbf{r}_{ij}^0 = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}$  је јединични вектор правца који има смер од честице  $j$  ка честици  $i$ ;
- $\gamma$  представља коефицијент трења;
- $\sigma$  представља амплитуду насумичне силе;
- $w_D$  и  $w_R$  представљају тежинске функције за дисипативну и насумичну силу, у зависности од растојања  $r$  од честице  $i$ ;
- $\xi_{ij}$  је насумична променљива са нултим средњим и јединичним варирањем.

Сила интеракције је једнака нули изван домена утицаја  $r_c$  (радијус деловања), дакле  $F_{ij} = 0$  за  $r_{ij} > r_c$ .

Да би DPD систем који садржи флуид достигао Гибс – Болцманово (GB – Gibbs – Boltzmann) стационарно стање, однос између тежинских функција за дисипативну и насумичну силу мора задовољити следећи израз:

$$w_D = w_R^2 \quad (3.12)$$

Такође, амплитуда насумичне силе  $\sigma$  је повезана са апсолутном температуром  $T$  преко једначине (3.13).

$$\sigma = (2k_B T \gamma)^{1/2} \quad (3.13)$$

где је  $k_B$  Болцманова константа. Тежинске функције могу бити изражене у облику како је приказано у [23] на следећи начин:

$$w_D = \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^2, \quad w_R = 1 - \frac{r_{ij}}{r_c} \quad (3.14)$$

Честице које ће бити коришћене у овом раду представљају и инхибиторе и околну заштиту са различитим материјалним карактеристикама. Ово је постигнуто узимајући у обзир различите коефицијенте репулзивне силе  $a_{ij}$ . Такође имамо додатну силу интеракције која делује између честица инхибитора, које су смештене у слоју „primer“, и честица које представљају металну подлогу, као што је урађено у моделу тромбозе [24], [25]. Ова привлачна сила може бити представљена једначином (3.15).

$$F_a = k_{sf} \left( 1 - \frac{L_{sf}}{L_{sf}^{\max}} \right) \quad (3.15)$$

где  $L_{sf}$  представља растојање од честице инхибитора до честице која представља металну подлогу,  $k_{sf}$  представља коефицијент крутости опруге а  $L_{sf}^{\max}$  је максимално растојање за домен честица које припадају инхибиторима.

Обично, честице у систему се деле на групе по типовима па се групишу честице које имају исте радијусе интеракције и масу. Односи између парова честица су дефинисани константама  $a_{ij}$  и  $\gamma$  које представљају параметре интеракције. У теорији, свака честица може имати различит домен (радијус) утицаја или масу, која може бити константна или се мењати током временских корака, овакви теоријски случајеви су ретки и неефикасни што се тиче рачунарских ресурса.

Конзервативна сила директно утиче на одбијање честица једну од друге, а јачина ове силе је функција од њиховог међусобног растојања. Максимална вредност конзервативне силе одређена је параметром  $a_{ij}$  и та вредност је обично константна и независна у односу на типове честица. Избор параметра  $a_{ij}$  зависи од тога колика је „чврстоћа“ честица и обично се та вредност креће између 10 и 100 [26] у јединицама  $k_B T / r_0$  [27], [28].

Дисипативна сила уклања енергију смањујући брзину честица у зависности од њиховог релативног положаја. Честице које имају велику брзину ће бити успорене овом силом, што ће учинити систем предвидљивијим и подложнијим контроли. На пример, уколико две честице интерагују једна са другом и крећу се једна ка другој или једна од друге дисипативна сила ће успорити њихово кретање. Уколико су честице у интеракцији једна са другом и имају паралелне брзине дисипативна сила неће имати утицаја на брзину тих честица. У горњим једначинама  $v_{ij}$  представља разлику апсолутних брзина честица, што је еквивалентно њиховој релативној брзини. Коефицијент трења,  $\gamma$ , одређује интензитет дисипативне силе и обично има вредност између 1 и 10 [26]. Већа вредност овог параметра представља систем који врло брзо реагује на промене у температури.

Трећа сила,  $F_{ij}^R$ , је насумична. Њени параметри су:

- $\xi$  је насумична променљива са јединичном варијацијом расподеле;
- $k_B$  је Болцманова константа;
- $T$  је жељена температура стационарног стања система у Келвинима.

Насумична сила, насупротив дисипативне, уноси енергију у систем. Величина насумичне силе је повезана са величином дисипативне силе таласно – дисипативном теоремом, која осигурава да ће оваква комбинација сила довести систем у жељено стационарно стање. Ако се свакој честици пропише насумична сила на основу жељеног стационарног температурског стања, тада ће систем достићи ту температуру током времена. Ако немамо насумичну силу, тј.  $T = 0$ , тада ће честице губити енергију током сваке интеракције а температура система ће тежити нули.

Дисипативна и насумична сила интеракције су узрок да енергија честица које се брже крећу буде расута кроз читав систем. Оваква шема ствара јако контролисано окружење које је толерантно на честице које у почетку имају велику брзину и дозвољава нам да помоћу мале количине сферичних честица моделирамо сложеније молекулске структуре са одређеном тачношћу. Ова комбинација сила је такође разлог због чега код DPD методе можемо имати већу вредност временског корака него код MD методе па је самим тим време трајања симулације знатно краће.

Мора постојати довољна густина честица које представљају неки систем да би се појавило довољно интеракција које су кратког домета а самим тим температура система се може прецизније контролисати. Уколико постоји доста празног простора, честице ће се кретати без деловања дисипативне силе. Из ових разлога DPD се користи за моделирање флуида или неке чврсте материје која је потопљена у флуид. Симулација укључује одређену густину водених честица које испуњавају читав систем и обезбеђују јако пуно интеракција међу честицама. Честице воде су често рачунарско уско грло, јер многе симулације укључују посматрање објеката који су потопљени у течност а не само воду.

Такође треба напоменути да се жељена температура, параметар система који није мерљива вредност, користи како би се одредила насумична сила у свакој интеракцији без обзира на тренутну вредност брзине честице у таквом физичком окружењу. Из овог разлога је јако тешко правилно моделирати термодинамичке системе уз помоћ DPD методе. Прецизно понашање честица треба очекивати само када постоји претпоставка да је температура униформна у читавом систему али је прихватљиво и решење код кога се жељена температура мења у било ком тренутку током симулације. На пример, могуће је започети симулацију са нижом температуром, затим сачекати смиривање система а онда увећати температуру система.

### 3.2.3. Интеграција кретања честица

Свака DPD честица приликом симулације има јасно дефинисан положај, брзину и убрзање у сваком временском кораку. Силе се рачунају анализом тренутног положаја и брзине у односу на друге честице. Укупна сила се у посматраном тренутку, за сваку честицу, дели са масом честице како би се добила промена убрзања. Коришћењем интеграционе шеме над Њутновом једначином кретања, уз малу вредност временског корака  $\Delta t$ , добија се убрзање које служи за израчунавање брзине и положаја честице за наредну итерацију.

Било каква примена Њутнових једначина ће довести до неке грешке јер се сматра да је убрзање честице константно за сваки временски корак. Било како било, овакве грешке су сведене на прихватљиву вредност коришћењем малог временског корака у спрези са ефикасним интеграционим алгоритмом. Сама DPD техника је јако толерантна на појаву интеграционих грешака због комбинације дисипативно – насумичних сила које су претходно описане.

Најзаступљенија шема интеграције је „Velocity Verlet“ алгоритам [26]. Овај алгоритам користи приступ где се брзина честице рачуна за вредност половине временског корака. Вектор брзине, који се користи за израчунавање сила интеракције, се рачуна за вредност половине сила из претходног временског корака а друга половина се рачуна из тренутног временског корака. Ова техника се користи како би се смањила

грешка приликом интеграције. У следећим једначинама је приказана шема „Verlet“ алгоритма:

$$\begin{aligned}
 \vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \\
 \vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) &= \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t \\
 \vec{a}(t + \Delta t) &= \frac{1}{m} \text{forces}(\vec{r}(t + \Delta t), \vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2})) \\
 \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t
 \end{aligned}
 \tag{3.16}$$

Где је  $\Delta t$  временски корак а  $\vec{r}(t)$ ,  $\vec{v}(t)$ ,  $\vec{a}(t)$  су положај, брзина и убрзање честице у претходном временском кораку. Предност овакве шеме интеграције је да се само једна вредност положаја, брзине и убрзања памти за сваку честицу. Испод је наведен псеудо код који представља директну имплементацију „Velocity Verlet“ шеме.

$$\begin{aligned}
 r &\leftarrow \text{почетни положај} \\
 v &\leftarrow \text{почетна брзина} \\
 a &\leftarrow \left(\frac{1}{m}\right) \text{силе}(r, v) \\
 &\text{за сваки временски корак} \\
 r &\leftarrow r + v\Delta t + \left(\frac{1}{2}\right)a\Delta t^2 \\
 v &\leftarrow v + \left(\frac{1}{2}\right)a\Delta t \\
 a &\leftarrow \left(\frac{1}{m}\right) \text{силе}(r, v) \\
 v &\leftarrow v + \left(\frac{1}{2}\right)a\Delta t \\
 &\text{сними } r
 \end{aligned}
 \tag{3.17}$$

У алгоритму приказаном са (3.17),  $r$ ,  $v$  и  $a$  представљају тренутне вредности, положаја, брзине и убрзања респективно, које описују одређену честицу. Код овакве имплементације се уводи претпоставка да ће само положај честица бити сачуван на диску. Код следећег поједностављења је тешко снимити брзину честице на крају временског корака али ове вредности могу бити интерполиране од вредности података за положаје честица. Редослед првих двеју линија у следећем псеудо коду може бити замењен, а како се брзина не снима, могу се комбиновати два израза приликом ажурирања брзине тако да добијамо следећи псеудо код:

---

```

 $r \leftarrow$  почетни положај
 $v \leftarrow$  почетна брзина
 $a \leftarrow \left(\frac{1}{m}\right)$  силе( $r, v$ )
за сваки временски корак
  if (први корак)
     $v \leftarrow v + \left(\frac{1}{2}\right)a\Delta t$ 
  else
     $v \leftarrow v + a\Delta t$ 
   $r \leftarrow r + v\Delta t$ 
   $a \leftarrow \left(\frac{1}{m}\right)$  силе( $r, v$ )
  снимити  $r$ 

```

(3.18)

Само за први корак, брзина се ажурира користећи половину вредности тренутног убрзања. Посматрано са физичког аспекта, ово утиче да један део сила има само половичан ефекат. У стварности, ово има занемарљив утицај на резултат симулације, пошто је природа DPD методе таква да се мале неправилности врло брзо апсорбују температуром која се контролише дисипативном и насумичном силом. Што се праксе тиче, првих неколико хиљада корака се користе да се дозволи систему да достигне жељену температуру коју обезбеђује одговарајућа околина у којој се експеримент изводи. Благо прилагођавање сила код првог временског корака неће имати утицај на резултате симулације, тако да се то може и изоставити из алгоритма.

Коначно, рачунање сила може бити померено на почетак процедуре као што је приказано следећим псеудо кодом. Оваква верзија алгоритма је једноставнија, лакша за имплементацију и ефикаснија.

```

 $r \leftarrow$  почетни положај
 $v \leftarrow$  почетна брзина
за сваки временски корак
   $a \leftarrow \left(\frac{1}{m}\right)$  силе( $r, v$ )
   $v \leftarrow v + a\Delta t$ 
   $r \leftarrow r + v\Delta t$ 
  снимити  $r$ 

```

(3.19)



За било коју од напоменутих интеграционих шема и алгоритама најважнији фактор је избор временског корака  $\Delta t$ . Велика вредност корака може узроковати да честице „скачу“ преко других честица или да честице постану нестабилне а насупротив томе, мала вредност корака, ће повећати тачност симулације али и време трајања симулације. Спровођене су различите студије, које се баве овом проблематиком, у којима је утврђено да вредност временског корака од 0.01 или 0.005 више него довољна [29].

#### 3.2.4. Гранични услови

Физичка интерпретација компјутерске симулације постоји у бесконачном простору. Међутим, компјутерске симулације захтевају коначан простор за рачун који се спроводи. Код DPD симулација морамо имати дефинисане спољашње границе система. Уколико посматрамо 3D систем он је обично представљен коцком одређених димензија на пример између 10 и 1000 јединица док је величина једне честице једна јединица. Одавде мора бити задовољен услов да све честице морају остати у тако дефинисаној запремини (површини код 2D система) са изузецима који су јако ретки.

„Зидови“ таквог система представљају границе у оквиру којих је дозвољено кретање честицама. На честицу која долази у контакт са зидом треба деловати тако да спречимо њен пролазак кроз зид. У најједноставнијем случају, ако имамо 3D проблем, зидове представљају шест страница коцке. У зависности од примене, системи могу бити дизајнирани тако да ограничавају честице у цеви, цилиндру, сфери или некој другој сложеној структури.

Гранични услови се односе на утицај зидова система на кретање честице када ове дођу у контакт са зидом. Постоје различите врсте граничних услова које варирају у зависности од физике проблема. Заједничко за све типове граничних услова је да су они вештачки јер у реалном проблему честице морају остати ограничене у неком коначном систему. Дакле, постоји изазов да се дефинишу такви гранични услови који ће најверодостојније описати посматрани систем.

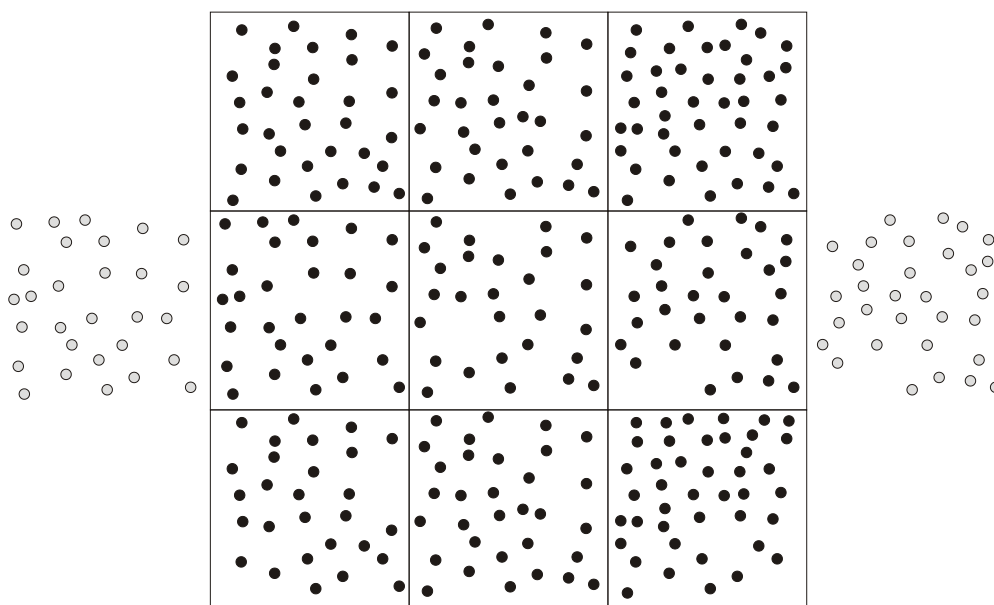
Уколико имамо закривљени зид, на пример у случају цилиндра, или ако унутар симулације постоје такви облици тада се мора узети у обзир одабир правог типа граничног услова.

Постоје два главна облика граничних услова:

- периодични и
- затворени

Код периодичних граничних услова честица која напусти простор симулације на једној страни аутоматски се помера на другој страни простора. Код затворених граничних услова се зидови „укрућују“ или „омекшавају“ тако да спрече честице које имају тежњу да пређу преко зида. У зависности од природе проблема и система који се симулира могуће је користити и комбинацију ових граничних услова.

Систем који је ограничен али који не садржи физичке зидове може бити креиран применом периодичних граничних услова, што је шематски приказано на слици 9.



**Слика 9.** Периодични гранични услови у случају дводимензионалног система

Периодични гранични услови се могу посматрати као бесконачан простор који је испуњен идентичним копијама региона који се симулира. Постоје две последице оваквог услова. Прва је, да када се честица нађе изван зидова система, тј. модела који се

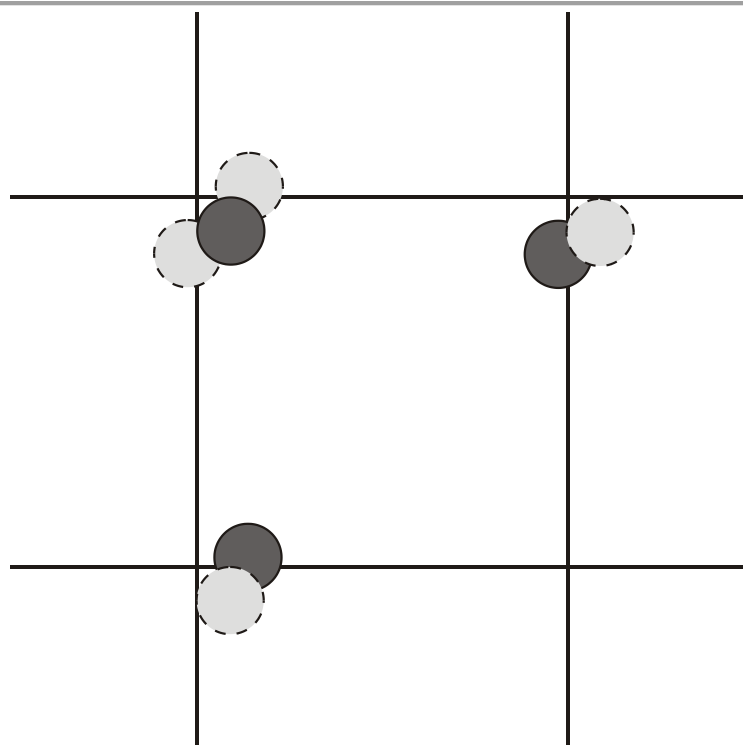
симулира, кроз одговарајућу граничну површину, одмах улази у регион кроз површину која се налази на супротној страни од оне где је честица изашла. Друга последица је да атоми који леже на удаљености од границе, имају интеракцију са атомима који се налазе на супротној страни. Ову последицу треба узети у обзир и у случају интегрисања једначина кретања и у рачунској интеракцији. Овакав приступ ствара један бесконачан систем под претпоставком да су инстанце система континуирано једна до друге. Коришћењем оваквог граничног услова број честица се одржава константним али такође се дозвољава честицама да напусте посматрану запремину – површину. Периодични гранични услови су корисни код било ког типа симулације који представља континуум кретања (пример струјања флуида између две плоче, струјање кроз бесконачно дугу цев итд.).

После сваког интеграционог корака координате атома морају бити проверене, и у случају да је атом изашао изван граница региона који се моделира његове координате се преправљају. Уколико имамо да нам  $x$  координата има вредности између  $-L_x/2$  и  $L_x/2$  где нам је  $L$  величина проблема у  $x$  правцу тада би имали следећи случај:

- ако је  $r_{ix} > L_x/2$ , заменити  $r_{ix}$  са  $r_{ix} - L_x$ ;
- у супротном, ако је  $r_{ix} < -L_x/2$ , заменити  $r_{ix}$  са  $r_{ix} + L_x$ ;

Периодични гранични услови се најлакше постављају и посматрају када је проблем који се симулира правоугаоног или квадратног облика, када имамо дводимензионални проблем, или коцкастог облика када имамо тродимензионални модел.

Имплементација периодичних граничних услова може бити јако компликована јер се радијус интеракције честице може продужити и преко граница система и на тај начин честица врши интеракцију са честицама које се налазе на супротној страни а улазе у радијус интеракције. Уколико силе интеракције, код оваквих честица, не би узимали у обзир тада би код система веће густине са малим честицама добијали слојеве уз зидове, тј. границе система. Периодични гранични услови такође утичу на минималну величину система тако да честице не би могле да интерагују саме са собом.



**Слика 10.** Периодични гранични услови у случају дводимензионалног система.

Као што се са слике види овде имамо само три честице које се налазе на границама модела који се симулира и приказане честице су далеко једна од друге. Међутим, све честице су заправо у физичком контакту са најмање једном „виртуелном“ честицом.

Код затворених граничних услова слобода кретања честице је смањена на обим система. Постоје многи приступи и могућности када честица дође у контакт са границом система и у зависности од природе проблема примењује се различити приступ. За било које изабрано решење честице морају бити ограничене од спољашњих утицаја који нарушавају одржање момента у систему. Док год постоје гранични услови на супротним странама система, можемо имати одржање момента и у оквиру једног временског корака али то није неопходно. Укупан моменат код затворених система често је ирелевантан пошто зидови таквог система спречавају акумулирање момента.

Код граничних услова где се претпоставља да је зид тврд, честице се одбијају од границе као у случају чисто еластичног судара. Када честица прође кроз границе система, њен положај се истог тренутка мења и враћа унутар граница а смер

компоненте брзине која је нормална на зид се поставља на супротну страну. Проблем код овако дефинисаног граничног услова је у томе што када се одједном промени правац брзине та промена утиче на околину тако да честице које су близу зида „ускачу“ у суседне честице што креира нежељене ефекте као на пример подрхтавање или поскакивање. Овакво решење не нарушава равнотежу система и постиже се очување енергије али такав поступак, окретања смера брзине, је не реалан.

Уместо нагле промене смера и правца брзине честице требало би деловати силом на честицу која прође кроз границу система тако да се тим деловањем силе она врати у систем кроз неколико временских корака. Коришћење силе уместо нагле промене правца и смера брзине је знатно поузданији приступ и ближи је принципима DPD методе. Да би креирали гранични услов тзв. меког зида додаје се слој чврстог зида унутар граница система на одређеној удаљености. Честице које се нађу у овом слоју ће добити вредност силе у зависности од тога колико се далеко налазе у слоју. Честице које имају већу брзину и у потпуности прескоче овај слој ће бити одбачене од зида али овакви случајеви су ретки а и не утичу негативно на систем.

### 3.2.5. Почетно стање

Да би DPD био користан и имао сврху мора бити испуњен услов да коначан резултат, наравно уз адекватно трајање симулације, буде независтан од почетног стања система, тако да је свако почетно стање система дозвољено. Ако узмемо на пример правоугаони дводимензионални проблем са одређеном густином честица, и свакој честици доделимо неку почетну силу у усвојеном правцу и смеру и константног интензитета, на основу температуре, требало би увек добити сличан резултат. Резултат не може бити потпуно исти због постојања насумичне силе која се код рачунарске имплементације рачуна на основу системског времена рачунара које се у сваком тренутку мења.

### 3.2.6. Интеграција „leapfrog“ методом

Интеграција једначина кретања користи најједноставнији нумерички метод („leapfrog“). Овај метод јесте један од једноставнијих али има изванредну особину очувања енергије и широко је распрострањен.

Ако нам  $h = \Delta t$  представља величину временског корака који користимо за нумеричку интеграцију тада, интеграциона формула која се примењује на координате и брзине честице је

$$\begin{aligned}v_{ix}(t+h/2) &= v_{ix}(t-h/2) + ha_{ix}(t) \\r_{ix}(t+h) &= r_{ix}(t) + hv_{ix}(t+h/2)\end{aligned}\tag{3.20}$$

Само име методе „leapfrog“ потиче од чињенице да се положај и брзине честица рачунају у различитим временским тренуцима као што се види у једначини (3.20). Ако је потребно да се брзине честица израчунају у временском тренутку за које имамо израчунате и координате, тј. положај, онда се може користити следећи израз

$$v_{ix}(t) = v_{ix}(t-h/2) + (h/2)a_{ix}(t)\tag{3.21}$$

Локалне грешке које, овом приликом, настају у сваком временском кораку су реда  $h^4$  за положаје честица и  $h^2$  за брзине честица. Овај метод може бити реформулисан тако да положаји и брзине честица буду рачунате за исти временски тренутак, избегавајући потребу за кориговањем брзина које је изражено једначином (3.21). Да би се то постигло рачунање брзина и координата честица се дели на два дела. Пре израчунавања вредности убрзања, ажурирају се брзине за половину временског корака користећи старе вредности за убрзања, а онда се врши рачунање координата за пуни временски корак коришћењем средњих вредности брзина [12].

$$\begin{aligned}v_{ix}(t+h/2) &= v_{ix}(t) + (h/2)a_{ix}(t) \\r_{ix}(t+h) &= r_{ix}(t) + hv_{ix}(t+h/2)\end{aligned}\tag{3.22}$$

Након овога се користе новоизрачунате координате да би се израчунале последње величине убрзања и тада се ажурирају брзине за вредност друге половине временског корака,

$$v_{ix}(t+h) = v_{ix}(t+h/2) + (h/2)a_{ix}(t+h)\tag{3.23}$$

### 3.2.7. Физичке величине

Приликом израде модела који ће представљати одређени физички проблем веома је важно водити рачуна о основним физичким величинама јер оне треба да пресликају модел у реалност. У зависности од скале система који се моделира могу се

користити нанометри и милиметри [26]. У табели 1. имамо приказане вредности основних и изведених физичких величина у зависности од скале система који се моделира.

**Табела 1.** Физичке величине у DPD моделу

	Модел у нанометрима	Модел у милиметрима
Дужина	$10^{-9} \text{ m} = 1 \text{ nm}$	$10^{-3} \text{ m} = 1 \text{ mm}$
Маса	$10^{-24} \text{ kg}$	$10^{-6} \text{ kg}$
Време	$3.16 \times 10^{-7} \text{ s}$	$10^{-2} \text{ s}$
Енергија	$10^{-20} \text{ J}$	$10^{-8} \text{ J}$
Сила	$10^{-11} \text{ N}$	$10^{-5} \text{ N}$
Притисак	$10^7 \text{ Pa}$	$10^1 \text{ Pa}$
Температура	$10^3 \text{ K}$	-
Гравитација	-	0.98
$k_B T_{300K}$	0.414 (собна температура)	
Наелектрисање	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$	-
$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1}$	0.285	-

Специфична густина воде у оба ова система је 1.0 па је због тога њу потребно симулирати коришћењем три честице радијуса 1.0 и масе 1/3 по јединичној запремини симулације.

## 4. Примена DPD методе у динамици флуида

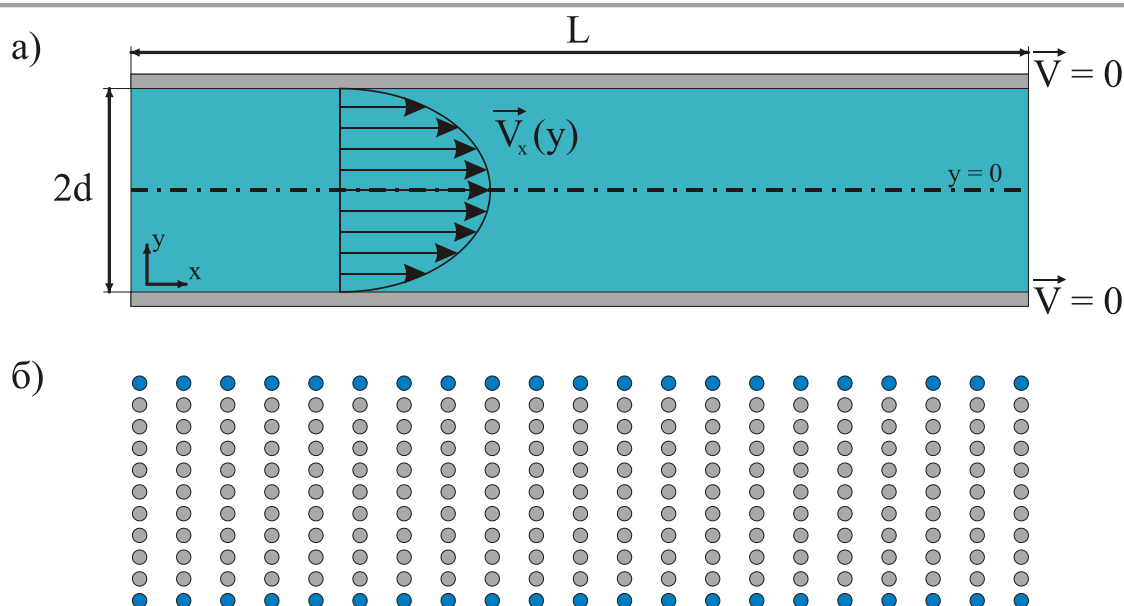
DPD метода има широку примену код симулације кретања флуида. Спектар примера је велики а овде су приказани само неки примери и поређена су решења тих симулација и аналитичка решења симулираних проблема, наравно, тамо где је могуће израчунати аналитичко решење. Најбоља потврда тачности DPD методе, као и код осталих нумеричких метода, је упоређивање резултата симулације и аналитичког решења или, ако је тешко доћи до аналитичког решења, упоређивање са експериментом.

Један од најчешћих коришћених примера верификовања методе у хидродинамици је струјање флуида између две бесконачно дуге паралелне плоче.

### 4.1. Моделирање струјања вискозног флуида између две статичне паралелне плоче под дејством запреминске силе

2D пример за тестирање протока флуида ниског Рејнолдсовог броја је тзв. *Poiseuille* струјање. Овај пример је познат као веома осетљива провера тачности свих метода рачунске динамике флуида. Резултат прорачуна ће бити поређен са аналитичким решењем које је јако једноставно израчунати за овај пример. На слици 11.а је приказан шематски приказ примера струјања вискозног флуида између две стационарне паралелне плоче под дејством запреминске силе а на слици 11.б је приказана шема иницијалног распореда честица.



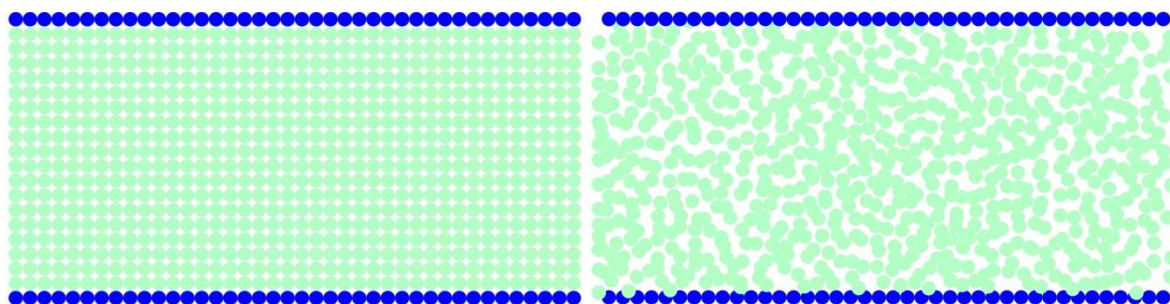


**Слика 11.** Пример струјања вискозног флуида између две стационарне паралелне плоче под дејством запреминске силе; а) шематски приказ; б) DPD шема иницијалног распореда честица

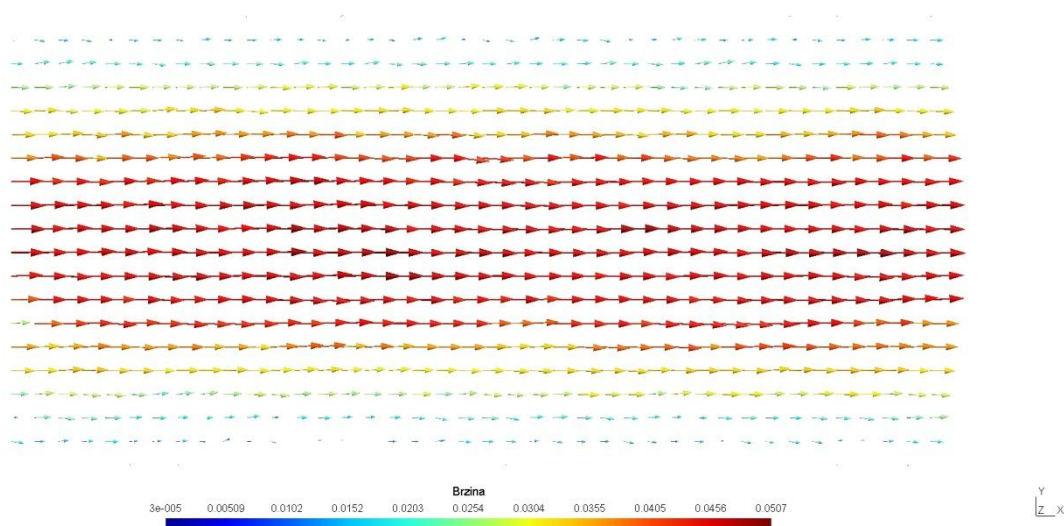
Случај који се разматра представља нестационарно струјање флуида између две, у правцу ( $z$ ) бесконачно дуге, паралелне плоче у стању мировања. Протицање се извршава у  $(x, y)$  равни, у смеру позитивне  $x$  осе, при чему је домен који се моделира дефинисан у  $x$  правцу са  $-10 < x < 10$  и у правцу  $y$  осе са  $-5 < y < 5$ . Периодични гранични услови су задати у правцу  $x$  осе и то на излазу и улазу модела. Број честица који се моделирао у овом примеру је 800, 40 честица у  $x$  правцу и 20 у  $y$  правцу. На сваку честицу која представља флуид је задата сила гравитације  $g = 0.2$ , у правцу струјања, која покреће читав систем [30].

Регион модела је подељен у неколико слојева у којима је вршено рачунање брзина струјања где је узимана средња брзина и просторно и временски. Број корака симулације је 100000 са временским кораком  $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$  DPD јединица. Осредњавање брзина је вршено на сваких 10000 корака као и штампање резултата. На слици 12. је приказан иницијални модел са пољем брзина у последњем кораку. Поређење решења је извршено на слици 13.

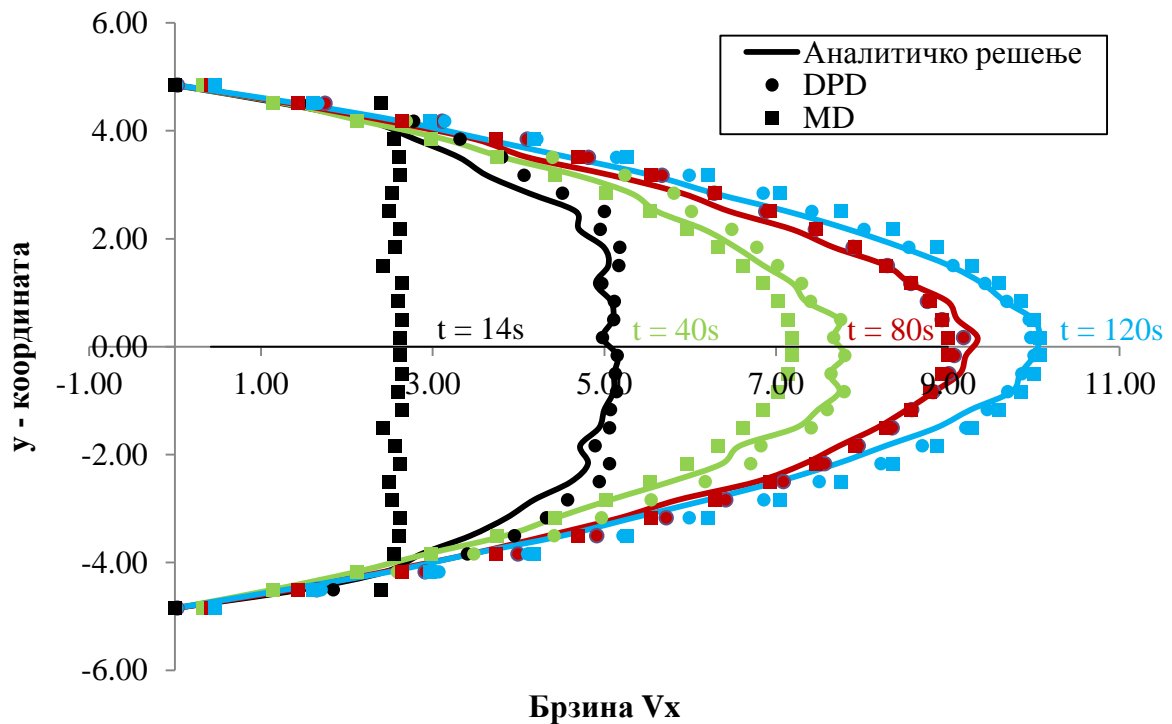
а)



б)



Слика 12. DPD модел *Poiseuille* струјања; а) шема распореда честица ( $t = 0s$  и  $t = 200s$ ); б) поље брзина



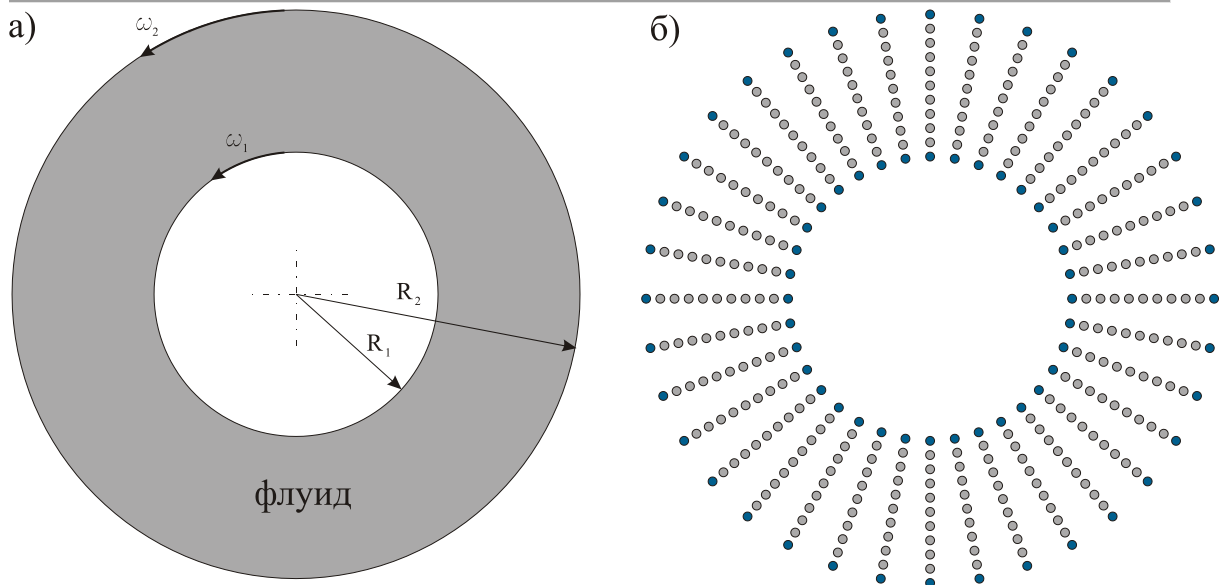
Слика 13. Профили брзина у различитим временским тренуцима

$$v_x(y, t) = v_0 \left( 1 - \frac{y^2}{d^2} \right) \quad (4.1)$$

Аналитичко решење се добија уз помоћ једначине (4.1), а дијаграм на слици 13. приказује поређење профила брзине добијених помоћу поменуте једначине и уз помоћ симулације, а такође је извршено поређење резултата са MD методом. Због малог броја честица не долази се до потпуног поклапања решења али се може уочити тренд прилаза решењу [30]. На дијаграму су приказана решења за различите временске тренутке као и решење у задњем кораку када се добије устаљено струјање флуида.

#### 4.2. Моделирање струјања вискозног флуида између два коаксијална цилиндра

Други 2D случај за тестирање струјања флуида при малом Рејнолдсовом броју је компликованији од претходног случаја али као и пример *Poiseuille* струјања често коришћен приликом провере тачности различитих нумеричких метода које постоје за моделирање динамике флуида. То је случај струјања флуида између два коаксијална цилиндра уз различите почетне кинематске услове [31].

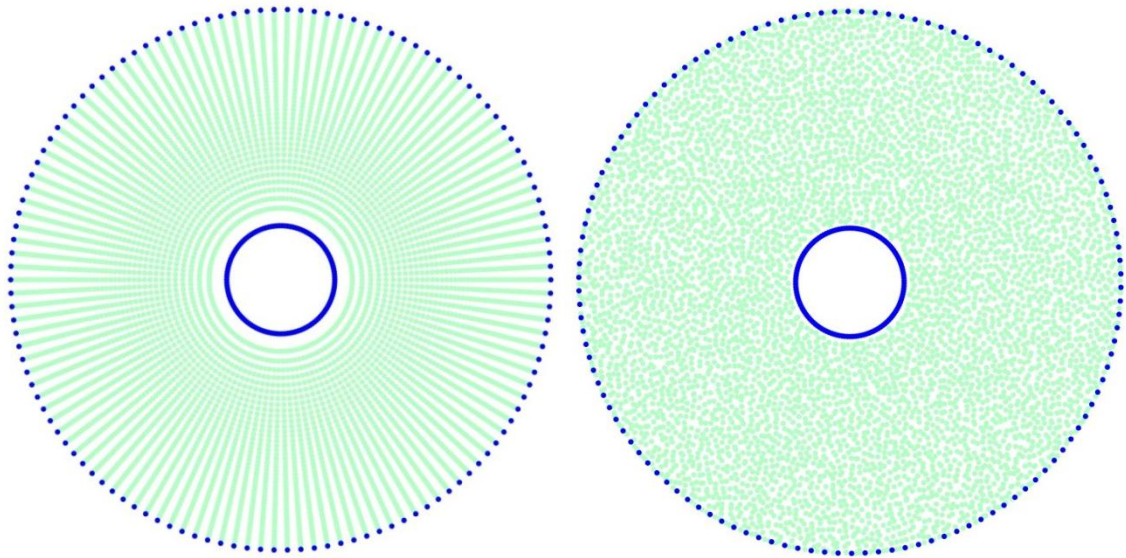


**Слика 14.** Пример струјања вискозног флуида између два ротирајућа коаксијална цилиндра; а) шематски приказ; б) DPD шема иницијалног распореда честица

Геометрија проблема приказана је на слици 14. Радијус спољашњег цилиндра ( $R_2$ ) је пет пута већи од радијуса унутрашњег цилиндра ( $R_1$ ). Цилиндри ротирају око заједничке осе угаоним брзинама  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , а како не постоји потреба за периодичним граничним условима то даље поједностављује модел. Посматрају се три различита кинематска услова, и то:

- 1) случај А – оба цилиндра ротирају истим угаоним брзинама у истом смеру;
- 2) случај Б – унутрашњи цилиндар стоји док спољашњи ротира;
- 3) случај В – цилиндри ротирају истим угаоним брзинама, али у супротним смеровима.

Модел који је симулиран садржи 5922 честице које су иницијално, тј. у тренутку ( $t = 0s$ ), у положају као на слици 15. На истој слици је приказан и положај честица у последњем кораку који одговара времену од ( $t = 300s$ ).



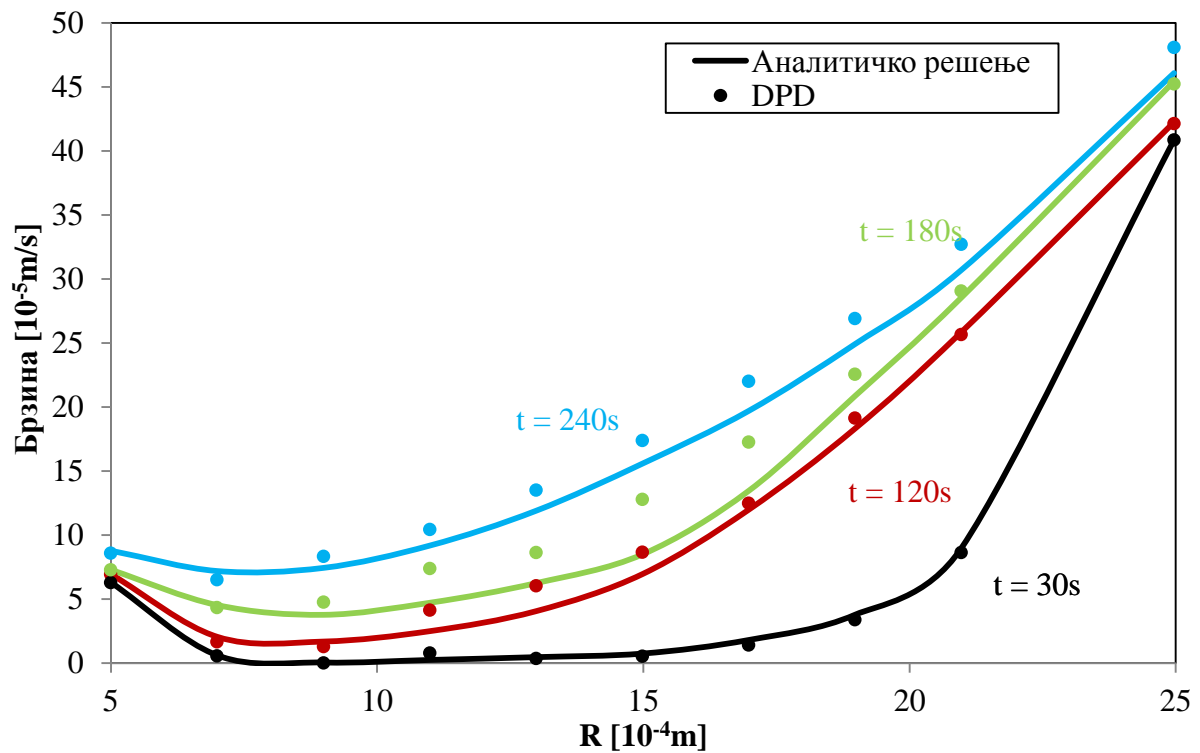
**Слика 15.** Шема распореда честица код DPD модела струјања флуида између два коаксијална цилиндра за  $t = 0s$  и  $t = 300s$

Симетрија модела нам омогућава да се профил брзина честица уочи у било ком пресеку. Бездимензиони радијуси су  $R_1 = 5r_c$  за унутрашњи цилиндар и  $R_2 = 25r_c$  за спољашњи цилиндар тако да нам је однос радијуса унутрашњег и спољашњег цилиндра 5 ( $R_2 / R_1 = 5$ ). Величина  $r_c$  нам представља гранични радијус који има јединичну вредност за овај случај. Честице на ободу цилиндара се крећу задатом угаоном брзином.

#### 4.2.1. Случај А – цилиндри ротирају истим угаоним брзинама

На слици 16. је извршено упоређивање аналитичког и решења добијених DPD симулацијом за случај када оба цилиндра ротирају истом угаоном брзином [32].

Регион модела је подељен у неколико прстенастих слојева у којима је вршено рачунање брзина струјања где је узимана средња брзина и просторно и временски. Број корака симулације је 30000 са временским кораком  $\Delta t = 1 \times 10^{-2}$  DPD јединица. Осредњавање брзина је вршено на сваких 3000 корака.

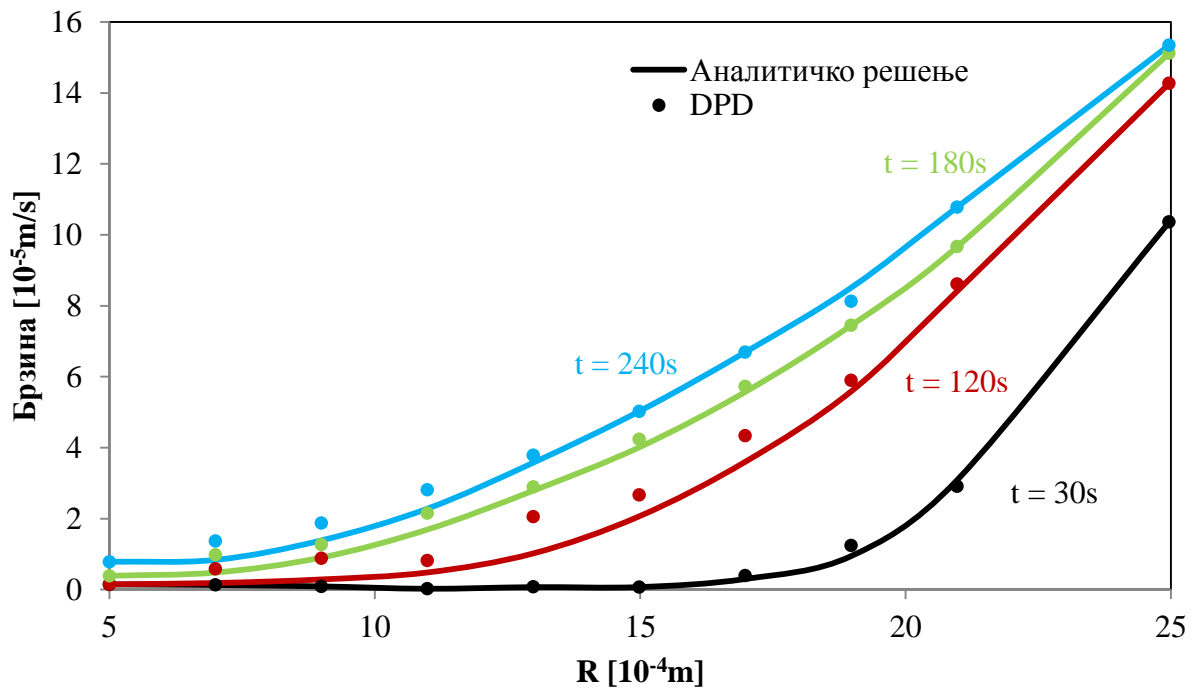


Слика 16. Профили брзина у различитим временским тренуцима

#### 4.2.2. Случај Б – унутрашњи цилиндар мирује док спољашњи ротира

Код овог случаја распоред брзина по пресеку је нешто другачији због мировања унутрашњег цилиндра. Зона нултих брзина је знатно већа него код претходног случаја.

Дистрибуције брзина за овај случај су приказане на слици 17. Параметри модела су исти као и у претходном случају осим брзине унутрашњег цилиндра која је сада нула.

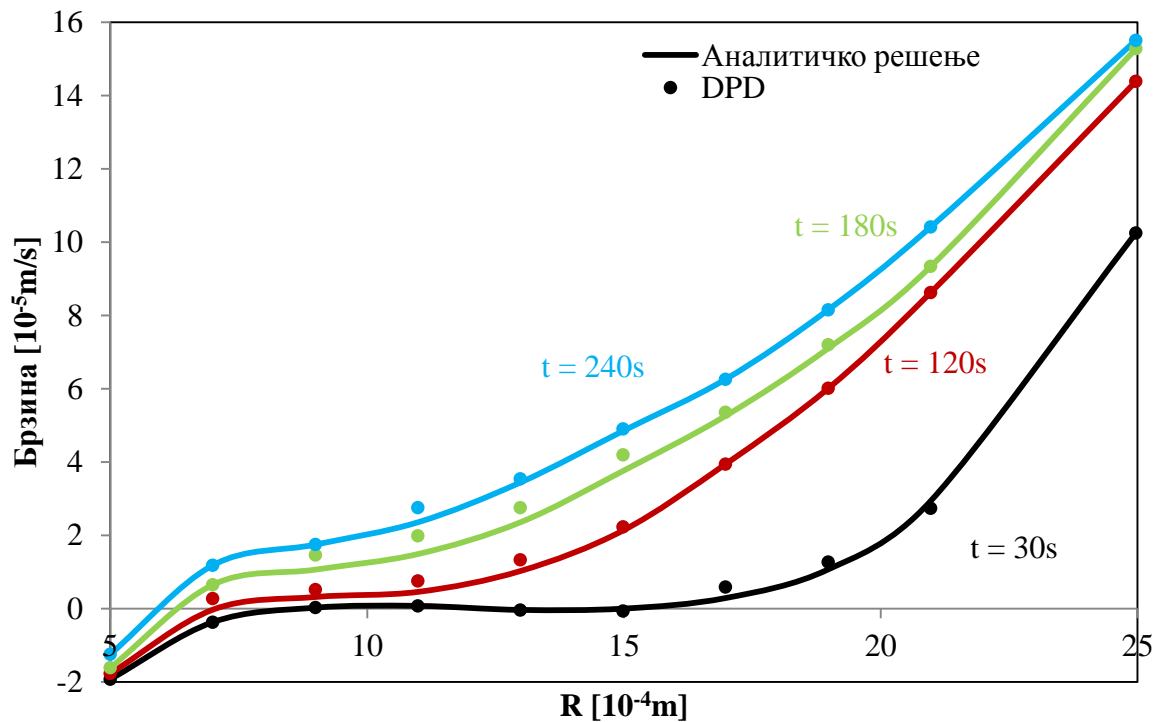


Слика 17. Профили брзина у различитим временским тренуцима

#### 4.2.3. Случај В – цилиндри ротирају истим угаоним брзинама, али у супротним смеровима

Код овог случаја распоред брзина по пресеку је нешто другачији због окретања цилиндара у супротном смеру тако да имамо зону око унутрашњег цилиндра где нам је брзина негативна.

Дистрибуције брзина за овај случај су приказане на слици 18. Параметри модела су исти као и у претходном случају осим брзине спољашњег цилиндра која је сада негативна.



Слика 18. Профили брзина у различитим временским тренуцима

Аналитичко решење за пример струјања флуида између два коаксијална цилиндра приказано је једначином (4.2) [33].

$$v_{\theta} = \frac{1}{r_2^2 - r_1^2} \left( (\omega_2 r_2^2 - \omega_1 r_1^2) r + r_1^2 r_2^2 (\omega_1 - \omega_2) \frac{1}{r} \right) \quad (4.2)$$

### 4.3. Опструјавање непомичног кружног цилиндра

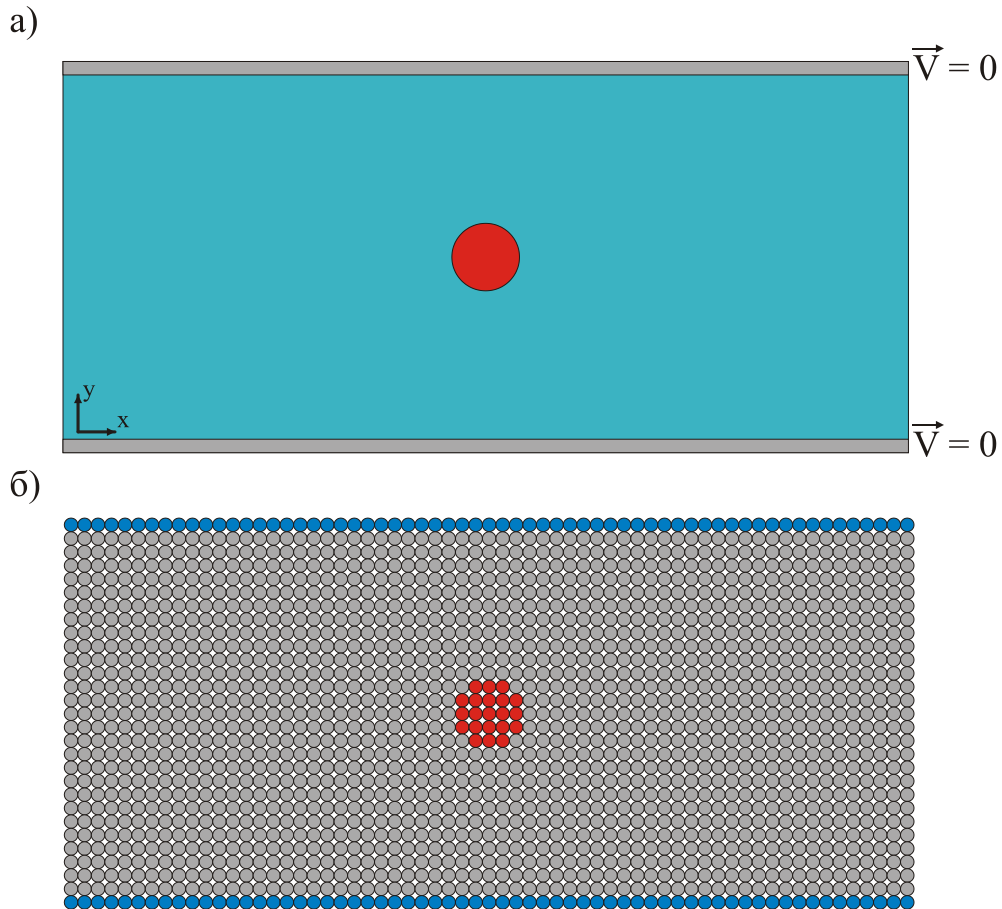
Наредни пример који се доста често среће у пракси је опструјавање цилиндра за процену силе отпора  $F$ . Цилиндар је постављен у средиште канала, а висина канала је 20 пута већа од полупречника цилиндра. Систем се састојао од 20000 честица, 200 у  $x$  правцу 100 у  $y$  правцу, укључујући и непомичне честице које чине сам цилиндар. На слици 19. је приказана шема и иницијални распоред DPD честица [34]. Као и код примера *Poiseuille* струјања имамо периодичне граничне услове у правцу струјања флуида тј. у  $x$  правцу. Константна сила је примењена на све честице у хоризонталном,  $x$ , правцу, а периодични гранични услови су постављени на излазу из канала и на улазу



у канал. Сила отпора  $F$  око цилиндра при ламинарном струјању аналитички је израчуната [35], [36], [37] у облику:

$$F = 6\pi\mu RV \left(1 + \frac{3}{8} R_e\right) \quad (4.3)$$

где је  $\mu$  динамичка брзина флуида, а  $R_e$  је Рејнолдсов број ( $R_e = 2\rho RV/\mu$ ).

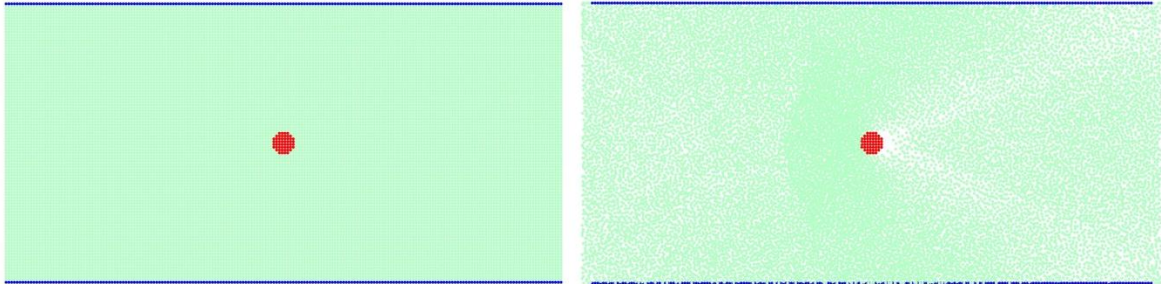


**Слика 19.** Шематски приказ примера струјања вискозног флуида око непомицног цилиндра; а) шематски приказ; б) DPD шема иницијалног распореда честица

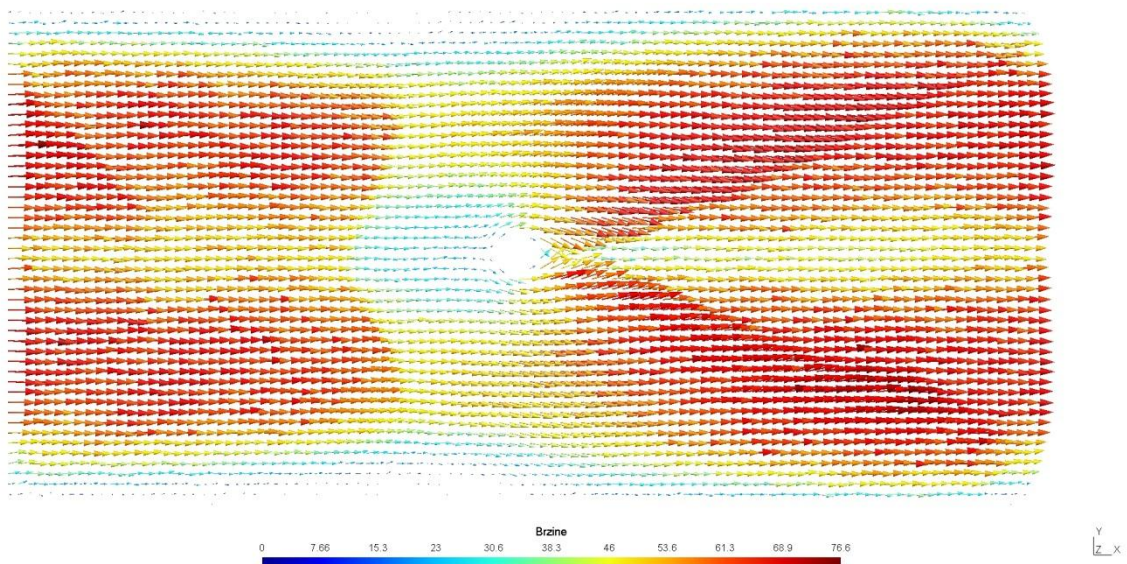
На сваку честицу која представља флуид је задата сила гравитације  $g = 0.1$ , у правцу струјања, која покреће читав систем. Број корака симулације је 10000 са временским кораком  $\Delta t = 1 \times 10^{-2}$  DPD јединица. Осредњавање брзина је вршено на сваких 500 корака.

На слици 20. је приказан DPD модел у почетном тренутку,  $t = 0$ , и у тренутку  $t = 100$  као и поље брзина у последњем кораку.

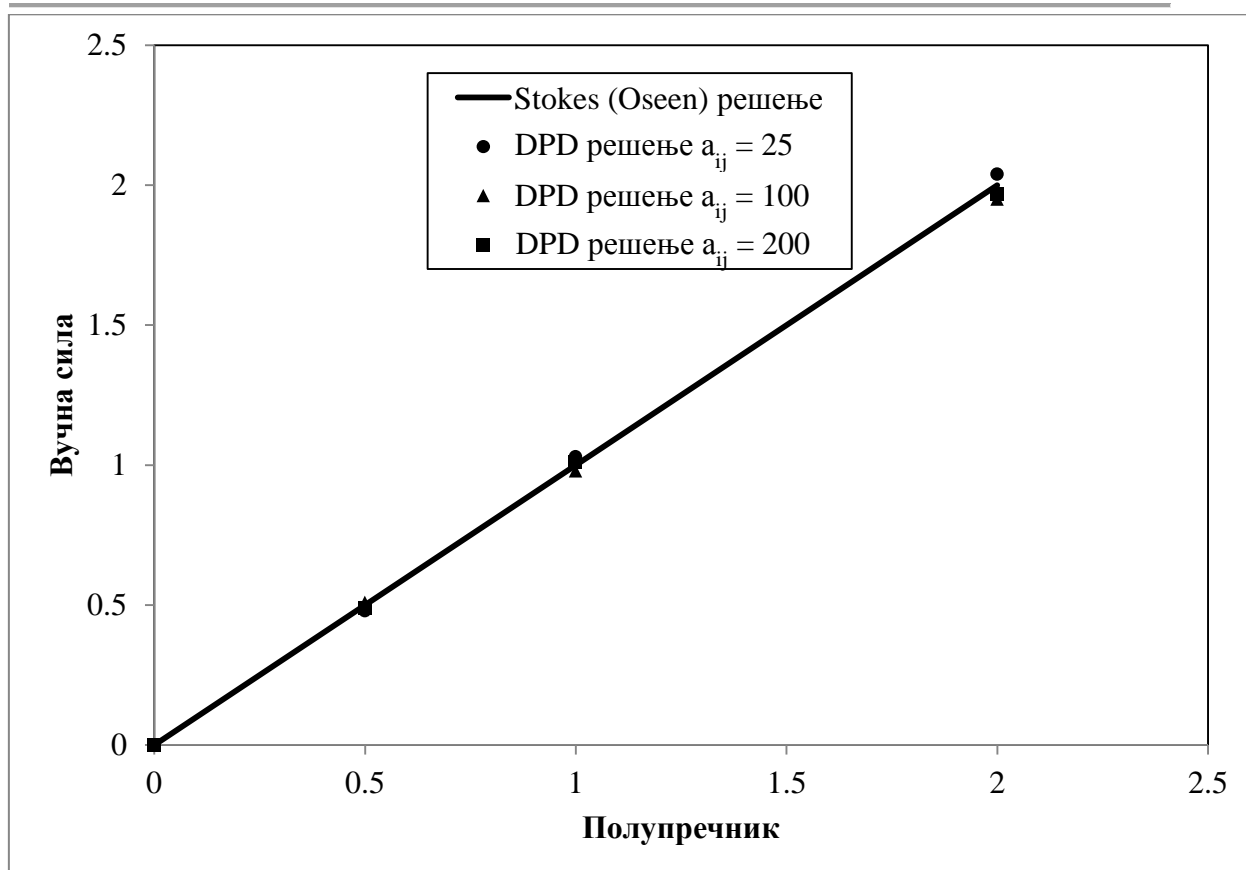
а)



б)



**Слика 20.** Резултати DPD симулације струјања; а) модел у тренутку  $t = 0$  и  $t = 100$ ; б) поље брзина у последњем кораку

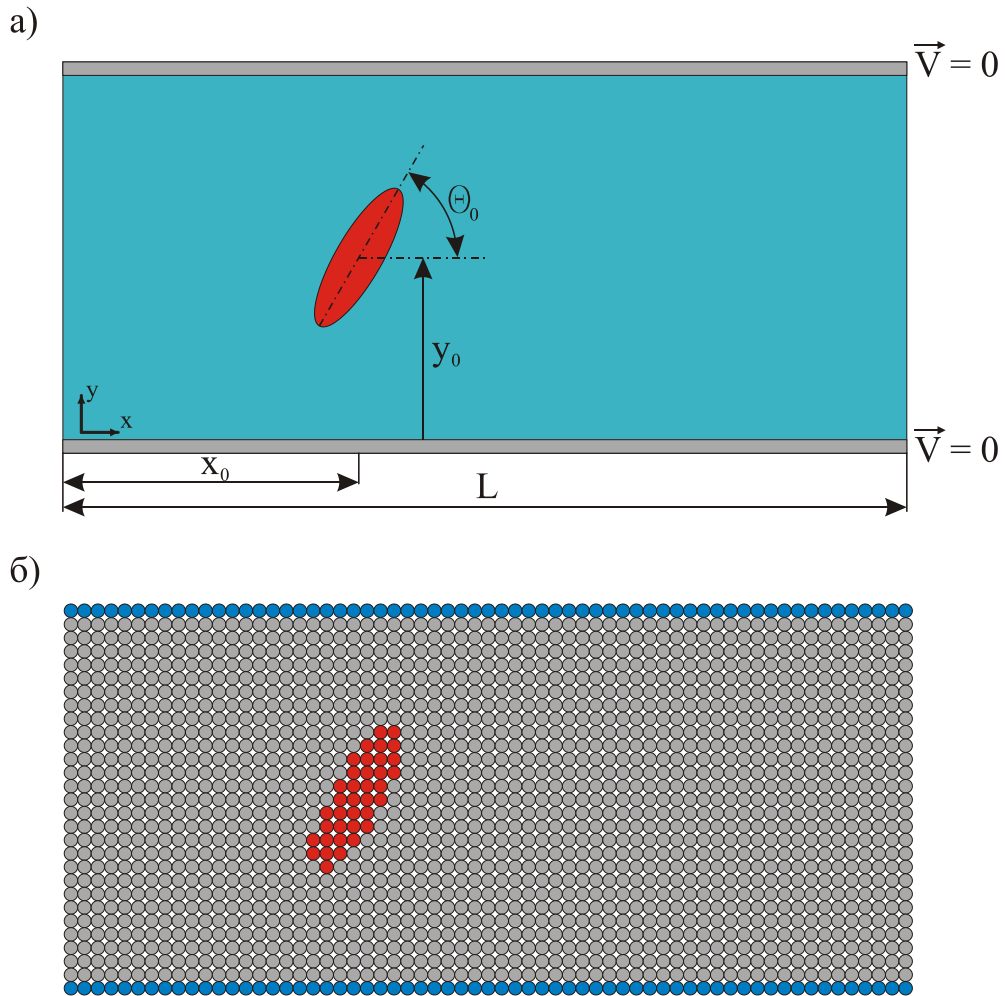


**Слика 21.** Поређење вучне силе добијене DPD методом и аналитичког решења датог у [35] и [36], за различите вредности полупречника цилиндра

На слици 21. приказана је варијација  $\Omega$  ( $\Omega = F / (6\pi\mu V (1 + 3R_e/8))$ ) у зависности од полупречника цилиндра  $R$  као и осетљивост коефицијента максималне вредности конзервативне силе  $a_{ij}$ . Температура у овом случају остаје константна током читавог трајања симулације у читавом каналу. Густина флуида остаје константна осим у близини чврстих зидова где долази до нагомилавања честица [31].

#### 4.4. Чиста ротација елипсасте честице при градијенту смичућег напона код струјања (Цефријево решење)

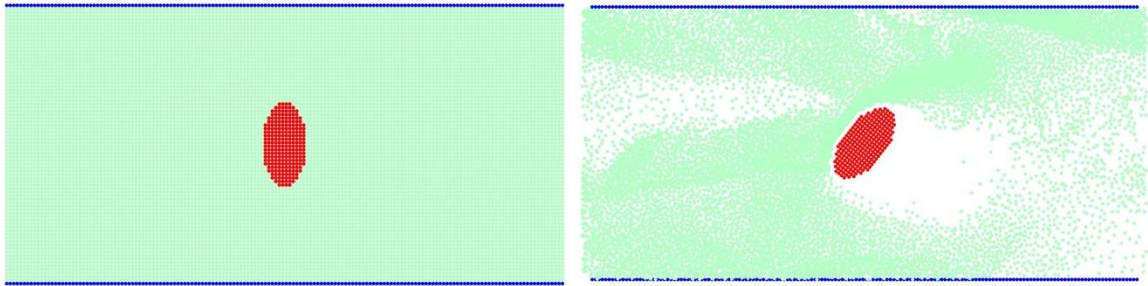
Наредни пример је коришћен за процену оријентације елипсасте честице која слободно ротира у градијенту смичућег напона при линеарном струјању. Елипсаста честица одређена великом и малом полуосом фиксирана је у свом центру.



Слика 22. Ротација елипсасте честице; а) шематски приказ; б) DPD модел

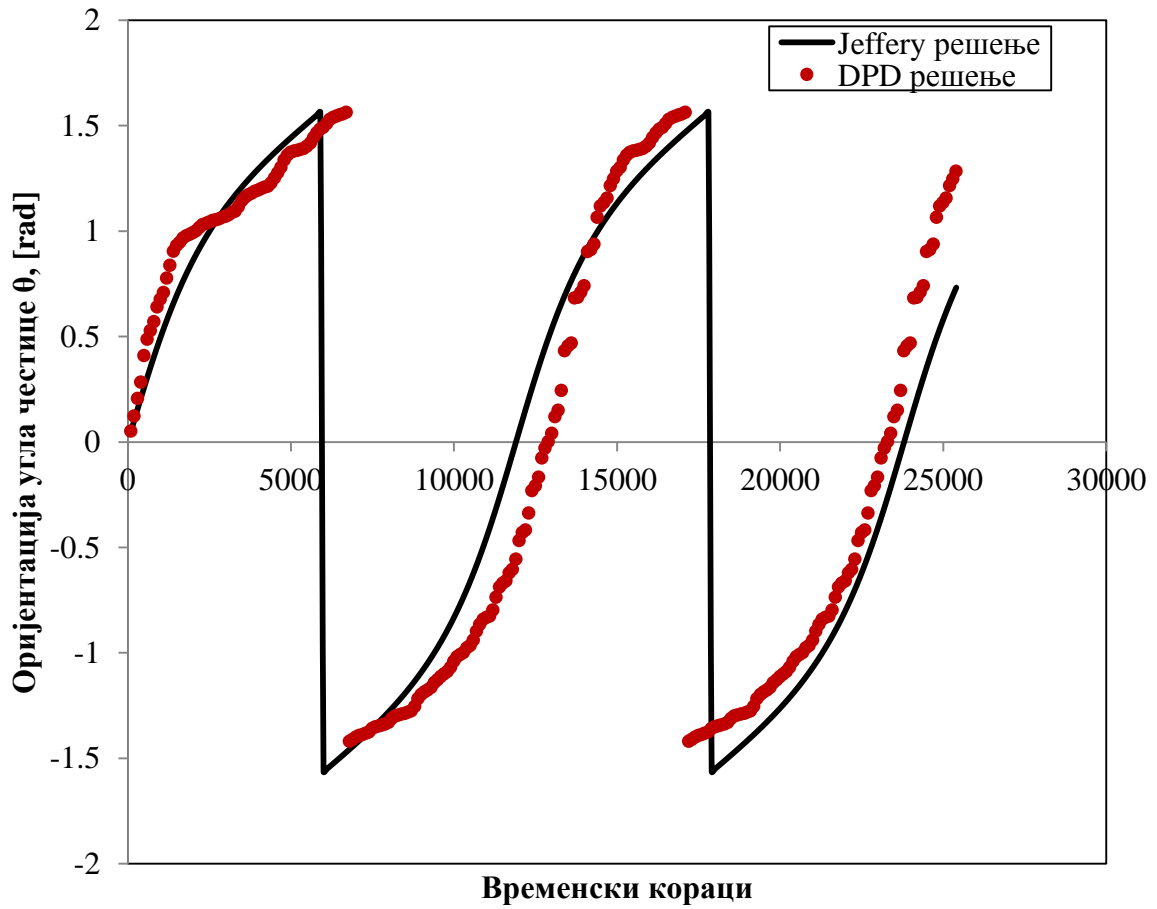
Као и у претходним примерима и овде се ради о нестационарном струјању флуида а протицање се извршава у  $(x, y)$  равни, у смеру позитивне  $x$  осе, при чему је домен који се моделира дефинисан у  $x$  правцу са  $-30 < x < 30$  и у правцу  $y$  осе са  $-20 < y < 20$ . На сваку честицу која представља флуид је задата сила гравитације  $g = 0.6$ , у правцу струјања, која покреће читав систем.

За модел који је симулиран честице су иницијално, тј. у тренутку  $(t = 0)$ , у положају као на слици 23. На истој слици је приказан и положај честица у последњем кораку који одговара времену од  $(t = 200)$ .



**Слика 23.** Резултати DPD симулације струјања; положај честица у тренутку  $t = 0$  (слика лево) и у тренутку  $t = 200$  (слика десно)

Приликом решавања овог проблема, прво је испитана осетљивост решења узимајући у обзир интеракцијски параметар одбијања између честица и флуида  $a_{ij}$ . Укупан број DPD честица је био 12800 а број непомичних честица унутар елипсе 200. Периодични гранични услови примењени су на улазу и излазу из домена DPD модела. Величина симулираног домена била је десет пута већа од веће осе елипсасте честице. Ротација елипсастог дела модела одређена је коришћењем збира свих сила које делују на површину елипсе и применом основних једначина ротације механике крутог тела. DPD решење за развој ротације елипсе представљено је на слици 24. заједно са Цефријевим решењем [38] (једначина (4.5)) где је однос краће и дуге осе елипсе 0.5 ( $\gamma = b/c = 0.5$ ).



Слика 24. Оријентација угла честице  $\theta$  у току времена

Пуна линија представља Џефријево решење. Почетни угао који заклапа већа оса елипсе са хоризонталним правцем у смеру струјања за овај случај био је  $\theta = \pi/2$ . Угаона брзина израчуната је као временски извод угла ротације  $\theta$ . За дати проблем пронађено је аналитичко решење за угаону брзину  $\omega$  изражену преко угла ротације  $\theta$ , као

$$\omega = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1-\gamma^2}{1+\gamma^2} \cos 2\theta \right) \quad (4.4)$$

са

$$\theta(t) = \arctan \left[ \frac{1}{\gamma} \tan \left( \frac{\gamma t}{1+\gamma^2} \right) \right] \quad (4.5)$$

---

Варијација угла ротације  $\theta$  са временом  $t$  приказана је на слици 24. за аналитичко решење (једначина (4.5) – пуна линија) и нумерички резултат користећи DPD методу (испрекидана линија). Као што се може видети, ова два решења се прилично слажу.



## 5. Имплементација паралелних DPD алгоритама

### 5.1. Мотивација

Приликом пројектовања и имплементације нумеричких симулација све више се сусрећемо са великим бројем сложених проблема чије решавање захтева рачунаре високих перформанси. Неоспорно је да се процесорска снага, тј. брзина персоналних рачунара, унапређује и континуално расте у последње две деценије, али за нумеричке симулације било ког типа, процесорске снаге увек је премало.

До скоро, једини начин да се реше велики проблеми као што су прогноза времена, биоинжењерски проблеми, и остали проблеми који могу бити симулирани, је био коришћењем супер – рачунара. Како је одржавање и набавка таквих система јако скупа и недоступна широком кругу корисника дошло се до идеје да се више обичних персоналних рачунара, који су опремљени одговарајућим оперативним системом, повеже међусобно *ethernet* мрежом.

Досадашњи механизми убрзавања рачунара су били минијатуризација и повећање радног такта, али се ту дошло до физичко – техничког лимита, тј. тренд је знатно успорен. Због овог ограничења дошло се на идеју да се постави 2, 3, 4 или више процесора, тј. независних процесорских јединица, на једном физичком интегралном колу, при чему овај број процесора има тренд пораста. Процесори са оваквим карактеристикама се данас уграђују и у персоналне рачунаре тако да они представљају врсту паралелног рачунара са дељеном меморијом. Оваквим решењем се цена једне физичке јединице процесора незнатно повећава за разлику од смањивања полупроводничких компоненти, које су данас на нивоу од 22 нанометра, што знатно повећава цену израде процесора. Сваким смањивањем величине полупроводничких компоненти мора се употребљавати нова технологија којом се долази до креирања интегрисаног кола што имплицира знатно повећање цене процесора.

Смер у коме се рачунарска индустрија данас креће је сасвим логичан, ако узмемо у обзир горе поменути минијатуризацију, јер ће се једног дана свакако доћи до



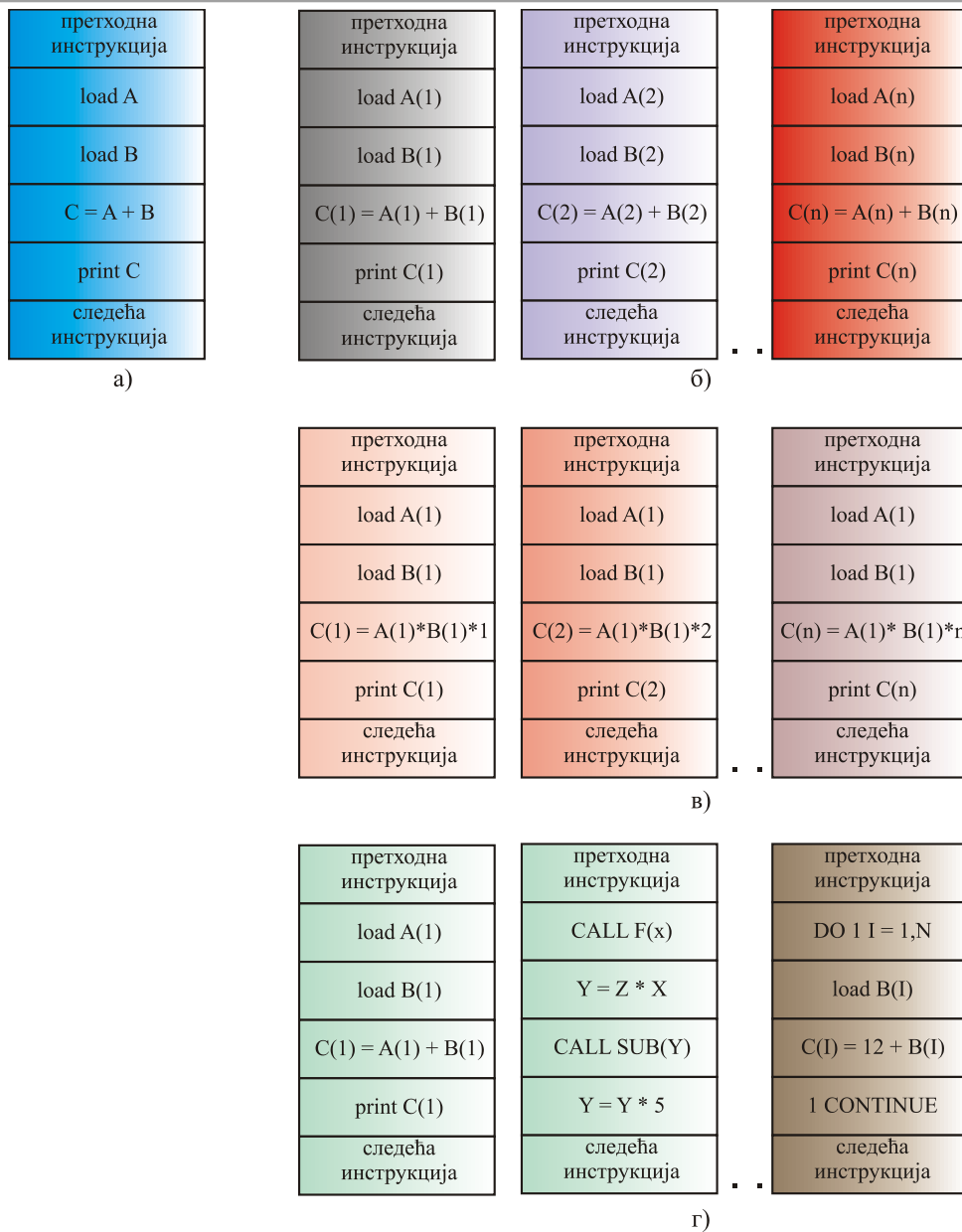
---

лимита величине транзистора који је могуће сместити на једном интегрисаном колу.

Поред овог постоји и, можда још битније, ограничење које је економске природе.

## 5.2. Врсте паралелних архитектура

Већина рачунара које се данас израђују спада, према Флиновој таксономији, у категорију MIMD (*Multiple Instruction Multiple Data*) архитектуру. MIMD заправо значи да сваки процесор извршава сопствени ток инструкција на сопственом току података. Поред MIMD архитектуре, постоје и SISD (*Single Instruction Single Data*), SIMD (*Single Instruction Multiple Data*) и MISD (*Multiple Instruction Single Data*). На слици 25. су приказане архитектуре рачунара према Флиновој таксономији [39].



Слика 25. Шематски приказ архитектура према Флиновој таксономији а) SISD; б) SIMD; в) MISD; г) MIMD

Поред ове, постоји и много познатија подела паралелних рачунара која има утицаја на сам начин програмирања, а заснива се на меморијској архитектури. Постоји подела на три врсте рачунара према меморијској архитектури и то:

- архитектура дељене меморије;
- архитектура дистрибуиране меморије;
- хибридна архитектура.

### **5.3. Архитектура дељене меморије**

Основна карактеристика система са оваквом архитектуром је да сви процесори у систему приступају целокупној расположивој меморији, у јединственом адресном простору. Ово има за последицу да уколико један од процесора промени податак који се налази на одређеној адреси у меморији, та промена је аутоматски видљива и осталим процесорима (слика 26.а). Пример овакве архитектуре је највећи број данас широко доступних двојезгарних, тројезгарних, четворојезгарних система.

Предност овакве архитектуре је једноставнији приступ меморијским ресурсима од стране програмера, олакшано програмирање паралелних алгоритама као и брзо дељење података између процеса. Неки од недостатака оваквом типу архитектуре је што се повећањем процесора повећава и саобраћај на магистралама тако да то знатно успорава размену података међу процесима.

### **5.4. Архитектура дистрибуиране меморије**

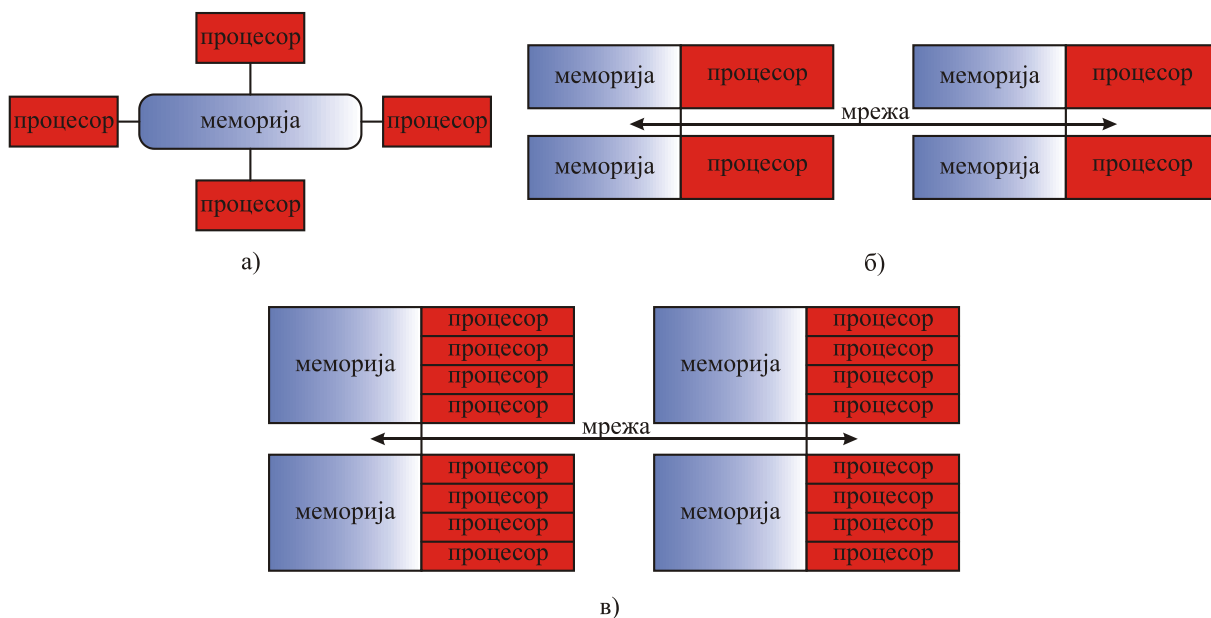
Код архитектуре дистрибуиране меморије постоји захтев за комуникационом мрежом како би се омогућила размена података међу процесорима. Сваки процесор има своју локалну меморију тако да ако једном од процесора затреба податак са адресног простора који припада другом процесору, тада је задатак програмера да обезбеди такву комуникацију (слика 26.б).

Предност архитектуре дистрибуиране меморије је бржи приступ процесора сопственој, локалној, меморији као и цена процесора и мрежне комуникације (употреба стандардних процесора и стандардне мрежне опреме). Један од недостатака оваквог приступа је апсолутна одговорност програмера за све међупроцесне комуникације.

### **5.5. Хибридна архитектура**

Представља укрштање претходно две поменуте архитектуре. Наиме, више архитектура са дељеном меморијом је умрежено и на тај начин добијена комбинација две претходно поменуте архитектуре. На слици 26.в. је дат шематски приказ овакве

архитектуре, где постоје очекивања да оваква архитектура у будућности буде доминантна у односу на претходне две.



**Слика 26.** Шематски приказ меморијске архитектуре паралелних система; а) дељена архитектура; б) дистрибуирана архитектура; в) хибридна архитектура

У зависности од типа меморијске архитектура која је имплементирана на посматраном систему, бира се и програмски модел за развој.

Код модела дељене меморије најпознатији модел је модел нити, где сваки процес може имати вишеструке, конкурентне путеве извршавања. Свака нит поседује своје локалне податке, али такође има приступ ресурсима главног процесора. Неке од имплементација оваквог модела су OpenMP (*Open Multi – Processing*) и POSIX Threads [32].

Код модела порука више процеса може се налазити на истом или на више различитих рачунара. Процеси међусобно комуницирају искључиво размењујући поруке. На пример, свака порука која се шаље са једног процеса мора имати одговарајући пријем на другом процесу. Приликом програмирања програмер је потпуно одговоран за одређивање целокупног проблема. Најпознатија имплементација овог модела је стандард MPI (*Message Passing Interface*).

У последњих неколико година све више су у употреби тзв. системи паралелизације података, где се паралелизација врши над великим скупом података. Подаци су обично организовани у низове, једнодимензионе или вишедимензионе, а сваки процес оперише над својим делом података. Један од представника је nVidia CUDA (*Compute Unified Device Architecture*)).

Сваки од поменутих модела има свој домен примене. Тако је домен примене модела са дељеном меморијом искључиво на истоврсној хардверској архитектури, док се компликованији модели, као што је модел порука, може имплементирати како на рачунарима са архитектуром дељене меморије, тако и на кластерима и супер – рачунарима.

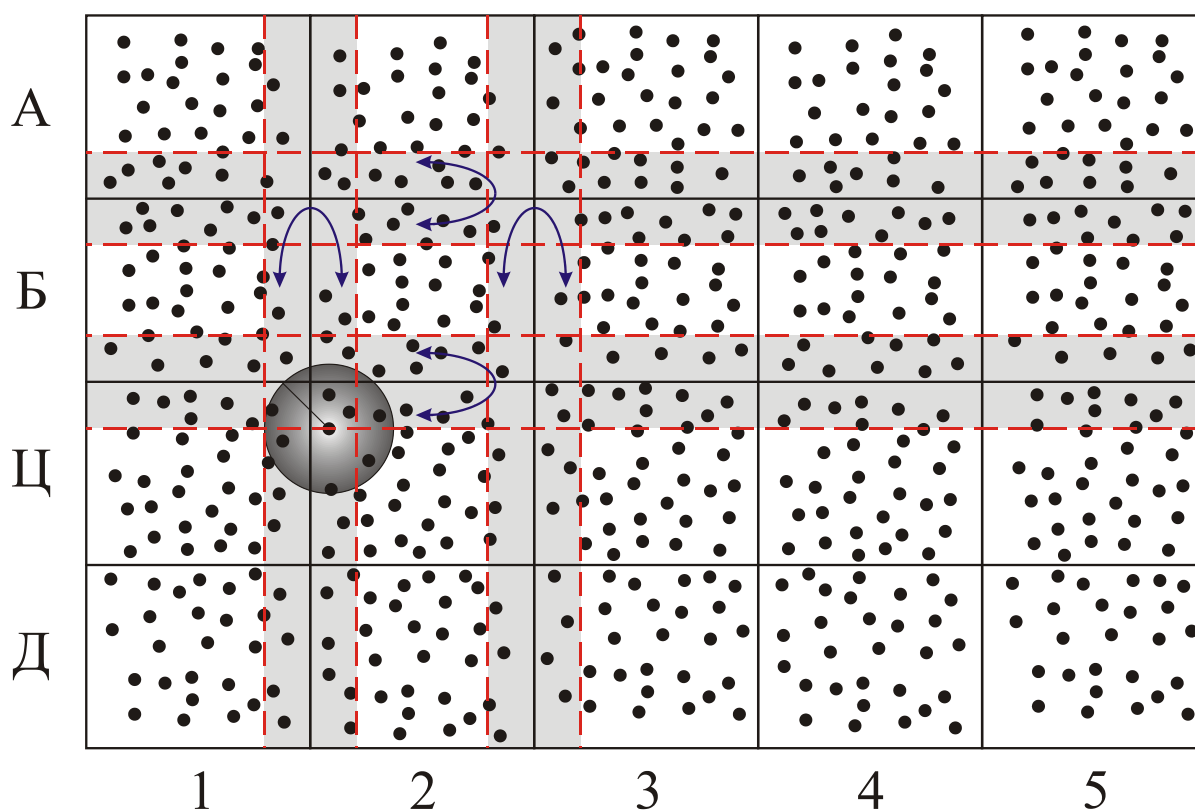
## 5.6. Стратегија паралелизације

Паралелизација конкретног проблема заправо представља поделу тог проблема на више дискретних делова који се могу дистрибуирати процесорима. Овај поступак је познат као декомпозиција. Постоје две врсте декомпозиције:

- функционална декомпозиција – декомпонује се посао који треба обавити;
- домен декомпозиција – декомпонује се скуп података које треба обрадити.

Приликом паралелизације софтвера урађена је домен декомпозиција.

Да би се правилно израчунале величине од интереса потребно је извршити комуникацију између процеса за честице које су у зони утицаја од суседног процеса. На слици 27. је шематски приказана домен декомпозиција и како се обавља размена података међу процесорима.



Слика 27. Размена података између суседних процеса

Дакле, размена података, у општем случају, се врши у два правца и у два смера. На пример, процес Б2 добија податке од процеса Б1, Б3, А2 и Ц2 за честице које су у домену утицаја за посматрану честицу и обратно, процес Б2 шаље податке процесима Б1, Б3, А2 и Ц2 за честице које су у поменутом домену утицаја. Као што се са слике види, у зависности од положаја, процес може имати комуникацију са суседним процесима, за податке о честицама од интереса, у свим правцима и смеровима, али може, као на пример процес А1, имати комуникацију само са процесима А2 и Б1. Један од специјалних случајева може бити и такав да у хоризонталном правцу имамо број подела 1, а у вертикалном правцу имамо, као на слици на пример, 5 подела.

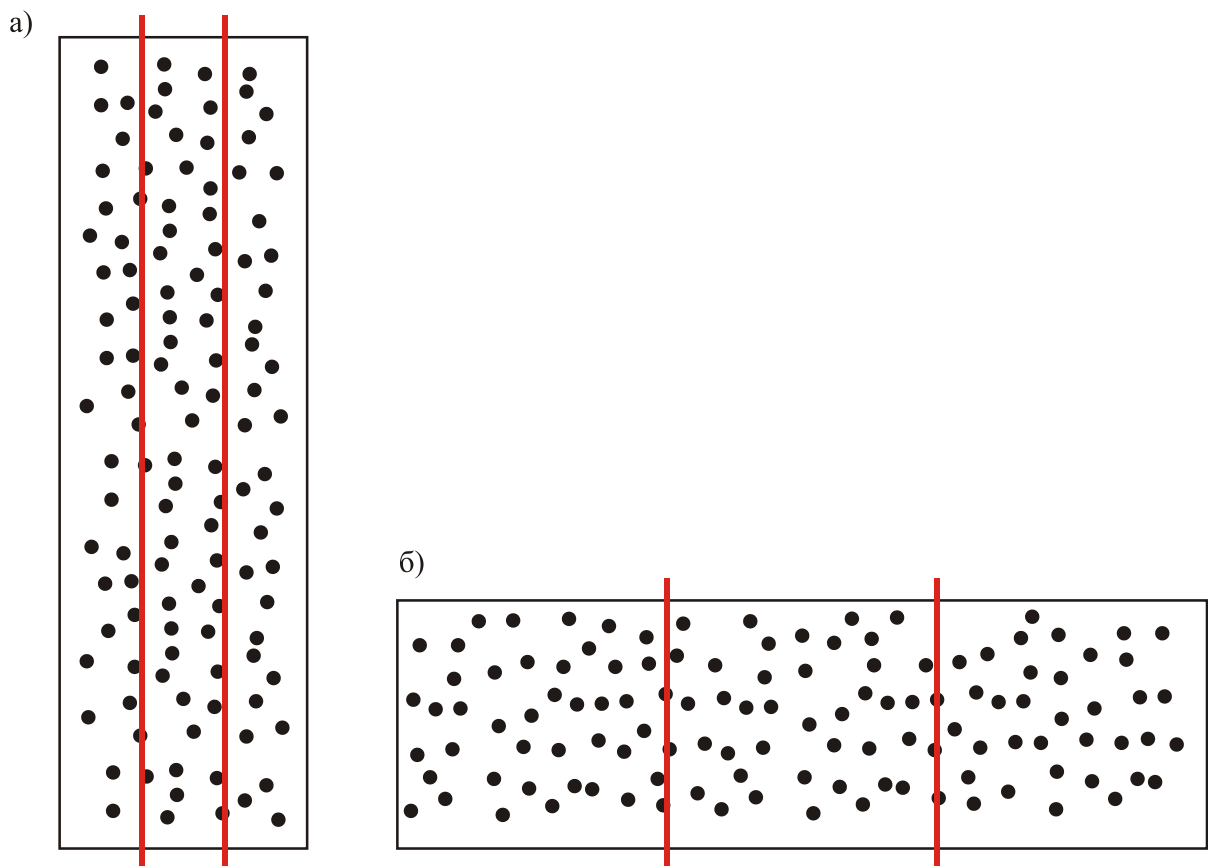
Пре сваког новог корака одреди се ком процесу честица припада, а онда се, приликом рачунања сила, размењују потребни подаци са суседним процесима.

Ово је најкомпликованији и најскупљи вид комуникације, што се утрошеног времена тиче, јер се ради по великој количини података која треба бити размењена у сваком кораку.

Идеални пример представљају проблеми код којих нема размене података између процеса, као што је на пример обрада битмапа и слични проблеми. Код DPD методе имамо померање честица у сваком кораку па је вероватноћа да ће честица прећи из једног процеса у други јако велика, што за последицу има потребу за разменом неопходних података.

Узевши у обзир чињеницу да интерпроцесна комуникација представља уско грло код архитектура дистрибуиране меморије, јасно је да целокупну комуникацију треба свести на најмању могућу меру, како по количини података који се шаљу тако и по фреквенцији позивања. Свака комуникација уводи додатно кашњење, а хардверски ресурси који се могу искористити за корисно рачунање, користе се за паковање и трансфер података.

Јасан је закључак да је боље спаковати одређену количину података и проследити другом процесу него слати податке за једну по једну честицу.



Слика 28. Домен декомпозиција правоугаоног модела; а) неефикасно; б) ефикасно

Велики утицај на број комуникација који се обави има и избор правца декомпозиције домена. На слици 28. је приказана разлика између избора поделе процеса по  $X$  односно  $Y$  координати. Са слике се јасно види да је подела по  $X$  правцу бољи избор јер има мање заједничких честица.

На почетку симулације изврши се додела честица процесорима и креирају се тзв. *ghost* честице, тј. копије честица суседних процеса које се налазе у жељеном домену утицаја. У току сваког временског корака врши се освежавање *ghost* честица да би се утврдиле њихове тренутне позиције и брзине, и врши се испитивање услова припадања честице процесу. Уколико се испостави да честица више не припада дотадашњем процесу врши се пребацивање честице на суседни процес.

Приликом копирања честица или пребацивања честица на други процес, уколико је изашла из домена посматраног процеса, подаци који се прослеђују суседном процесу су положај и брзина честице као и њен идентификациони број и врста материјала честице.

### 5.7. Основе OpenMP (Open Multi - Processing)

За разлику од MPI, OpenMP представља интерфејс (API – *Application Programming Interface*) који подржава модел дељене меморије за програмирање у програмским језицима C / C++ и Fortran, а такође подржава и велики број процесорских архитектура и оперативних система. Оперативни системи који подржавају OpenMP платформу су Solaris, GNU / Linux, Mac OS X и Windows.

OpenMP ARB (Architecture Review Board) је у октобру 1997. године објавио прву API спецификацију за Fortran 1.0, а у октобру наредне године је објављен и стандард за C и C++ програмске језике. Након три године објављена је и друга по реду спецификација за Fortran 2.0, док је за C / C++ нова спецификација објављена 2002. године.

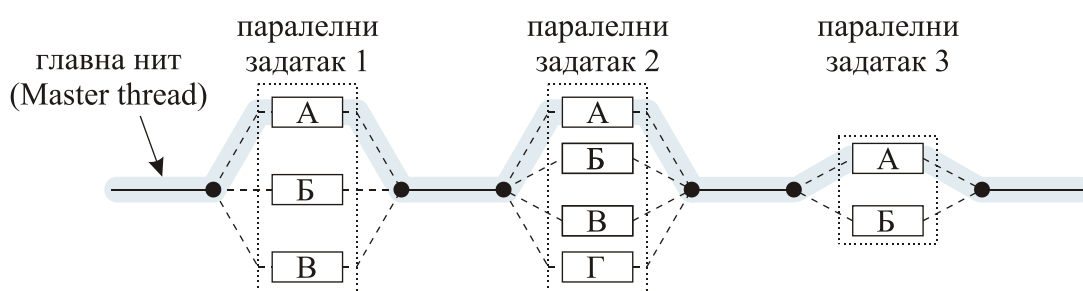
Основна разлика између MPI и OpenMP паралелизованог кода је тај што код OpenMP кода главна нит обавља сав посао док се не дође до дела кода који је паралелизован. Код MPI интерфејса паралелно се извршава сав код између функција



MPI\_Init и MPI\_Finalize док се код OpenMP – а предпроцесорском директивом експлицитно наглашава који део кода (функција, петља итд.) се извршава паралелно.

Након предпроцесорске директиве тај део кода се извршава паралелно а главни процес тада креира нити који ће тај део извршити паралелно. Свакој нити се додељује идентификациони број до кога се може доћи позивом функције `omp_get_thread_num()`, а главни процес има ID 0. Након извршења паралелног дела кода нити се уклапају назад у главни процес и даље се код извршава секвенцијално до следеће предпроцесорске наредбе којом се паралелизује програмски код [40].

На слици 29. је шематски приказан могући ток програма код OpenMP интерфејса.



Слика 29. Шематски приказ паралелног тока програма код OpenMP интерфејса

Сама имплементација OpenMP алгоритама је далеко једноставнија од имплементације код претходно описаног приступа, тј. код MPI архитектуре. Највише пажње је посвећено делу кода који се понавља за сваки корак, а то је рачунање брзина и положаја честица, затим примена граничних услова, креирање листе суседа и рачунање сила.

Рачунање брзина и положаја се дели по нитима које се чине тај паралелни део кода док је код примене граничних услова свака нит добила исти број честица које треба обрадити. Тако се код примене граничних услова дошло до оптималне паралелизације кода јер је време које је потребно да се провери једна честица приближно исто за све честице тако да је скраћено време потребно за синхронизацију нити.

Креирање листе суседа је паралелизовано по истом принципу као и део кода који примењује граничне услове. Што се тиче рачунања сила, део кода који задаје спољашњу силу није паралелизован и њега извршава главна нит док је сам прорачун силе за честицу паралелизован по нитима.

---

## 6. Резултати и анализа

### 6.1. Увод

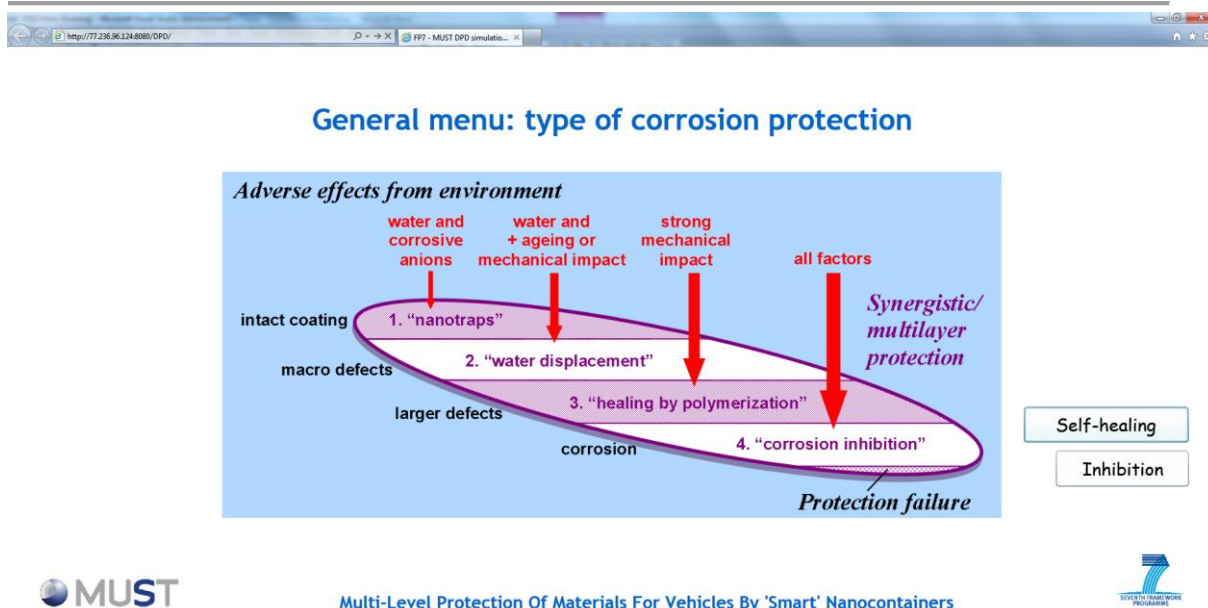
У овој глави биће презентовани резултати који су добијени моделирањем коришћењем DPD и FEM (Finite Element Method) метода. Уз помоћ DPD – а су моделирани процеси инхибиције и самозаштите материјала док је са FE методом моделиран процес *creepage* – а, тј. раст корозије око зоне канала.

Алати за пре – и пост – процесирање резултата и код DPD и код FEM анализе су креирани у Microsoft – овом Silverlight окружењу које омогућава коришћење апликација и алата на свим платформама и свим познатијим оперативним системима.

### 6.2. Моделирање *self – healing* – а

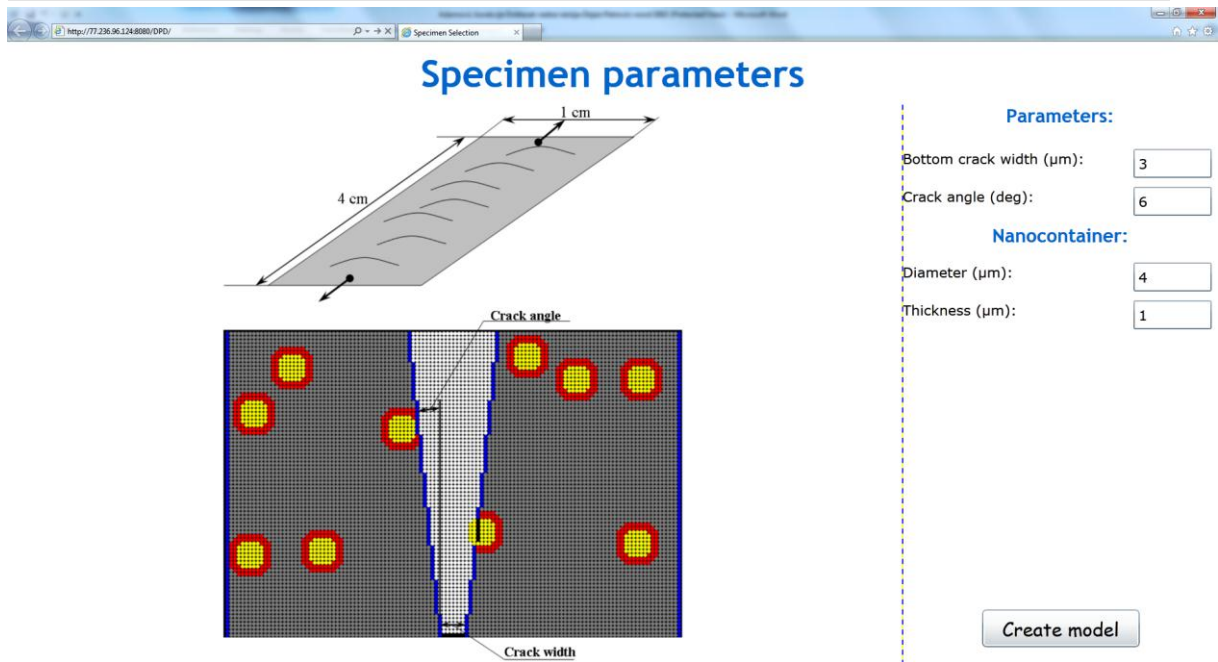
Самозаштита нанетих слојева и металне подлоге се моделира DPD методом. Коришћењем више симулација на мезо – скали може се постићи ефекат да се такав процес одиграва на макро нивоу. DPD омогућава предвиђање времена „залечења“ материјала на основу величине наноконтејнера, њихове количине и испуњености.

Како би омогућили приступ свим учесницима FP7 – MUST пројекта приступ развијеним алатима и апликацијама, сви алати и апликације су направљене да раде на интернету. На слици 30. је приказана главна страница на којој се врши избор креирања модела, *self – healing* или *inhibition*.



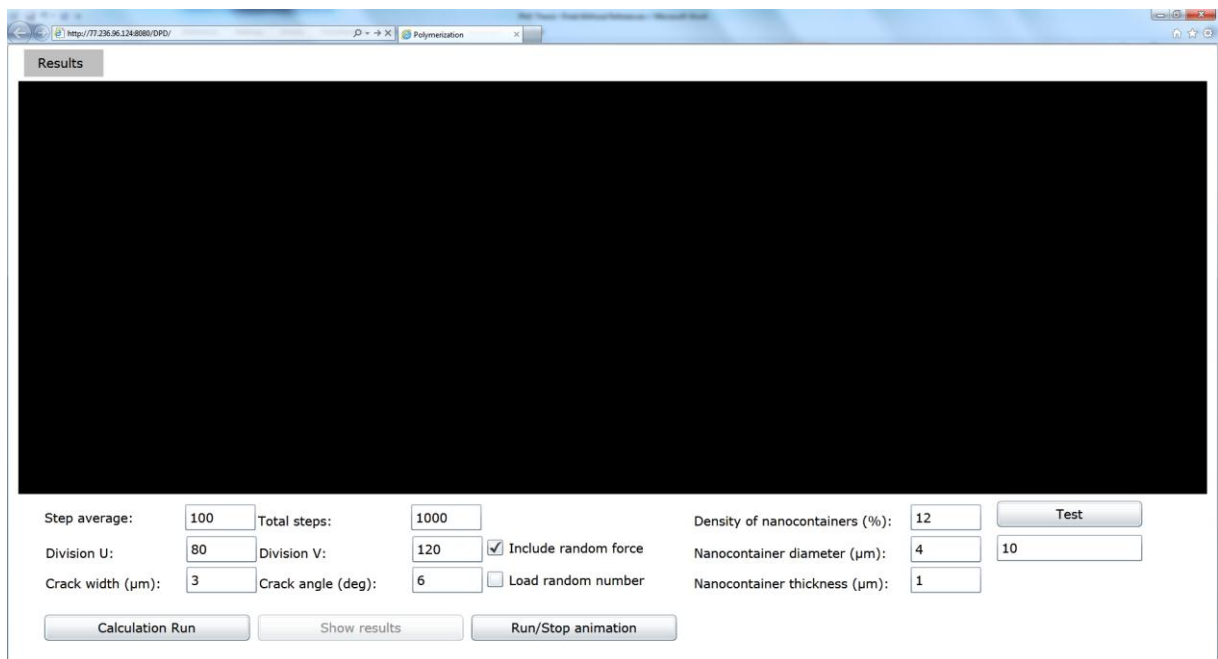
**Слика 30.** Изглед основног прозора приликом моделирања DPD методом

Кликом на дугме „Self-healing“ отвара се прозор, као на слици 31, у коме се врши избор параметара модела *self – healing* – а. Као што се види са слике, могуће је мењати геометријске параметре модела и то, ширину доњег дела пукотине и угао под којим се пукотина пропагира, а такође је могуће изменити пречник и дебљину опне наноконтејнера. Након уноса жељених величина кликом на дугме „Create model“ отвара се прозор као на слици 32. у коме је могуће вршити детаљнија подешавања модела.



Слика 31. Избор геометријских параметара *self-healing* модела

Геометријске величине модела које су подешене у прозору са слике 31. се преносе на наредни прозор тако да их је могуће још једном изменити пре почетка прорачуна.



Слика 32. Изглед прозора за покретање прорачуна *self-healing* – а

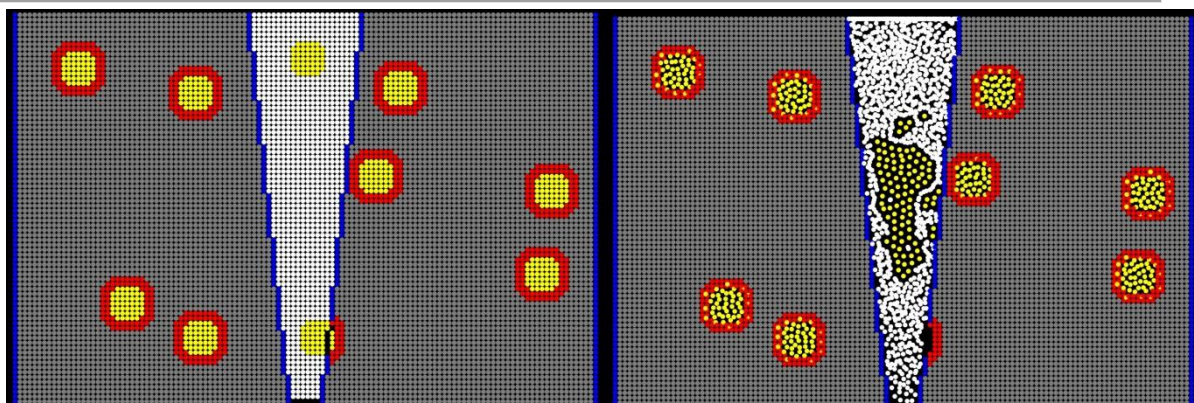
На приказаном прозору могуће је подесити број корака на којима ће бити штампани резултати као и укупан број корака. Такође, могуће је подесити број честица у хоризонталном и вертикалном правцу. Постоји могућност да се укључи или искључи насумична сила као и да се понове резултати означавањем поља „Load random number“. Дугметом „Test“ се врши провера броја наноконтејнера на основу задате густине у процентима. Уз помоћ дугмета „Calculation run“ покреће се прорачун са задатим величинама, а након завршетка прорачуна и учитавања резултата могуће је извршити приказ анимације кликом на „Run/Stop animation“.

Коришћењем менија „Results“ могуће је снимити, учитати већ снимљене или обрисати резултате. Резултати се снимају на серверу где је страница постављена тако да када један од корисника сними резултате прорачуна они су доступни и видљиви свим корисницима. Мени „Results“ постоји и код модела инхибиције као и код FE методе којом се рачуна *creepage*.

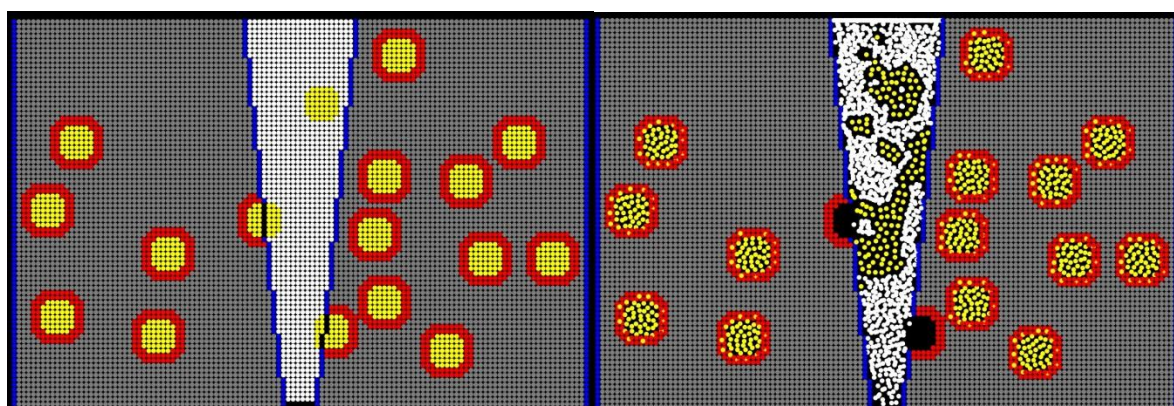
На слици 33. приказани су резултати где је модел креиран са 9600 честица, временски корак је  $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$  док на сваку честицу која представља флуид (беле честице) делује константна сила  $g = 0.02$ . Густина наноконтејнера у читавом моделу је 12 процената од читаве површине модела. Распоред наноконтејнера у моделу је насумичан тако да ће се за сваки нови прорачун добити другачији распоред наноконтејнера. Уколико се желе поновити резултати потребно је означити поље „Load random number“ као што је објашњено раније. На слици 34. су приказани резултати где је густина повећана на 20 процената. Дијаграми на слици 35. показују зависност испуњености пукотине током времена за поменута два случаја.

Експериментални резултати, који су спроведени у оквиру MUST пројекта, су показали да се оптимална заштита основног материјала може остварити са густином наноконтејнера од 10 до 20 процената па су те вредности узете као референтне.

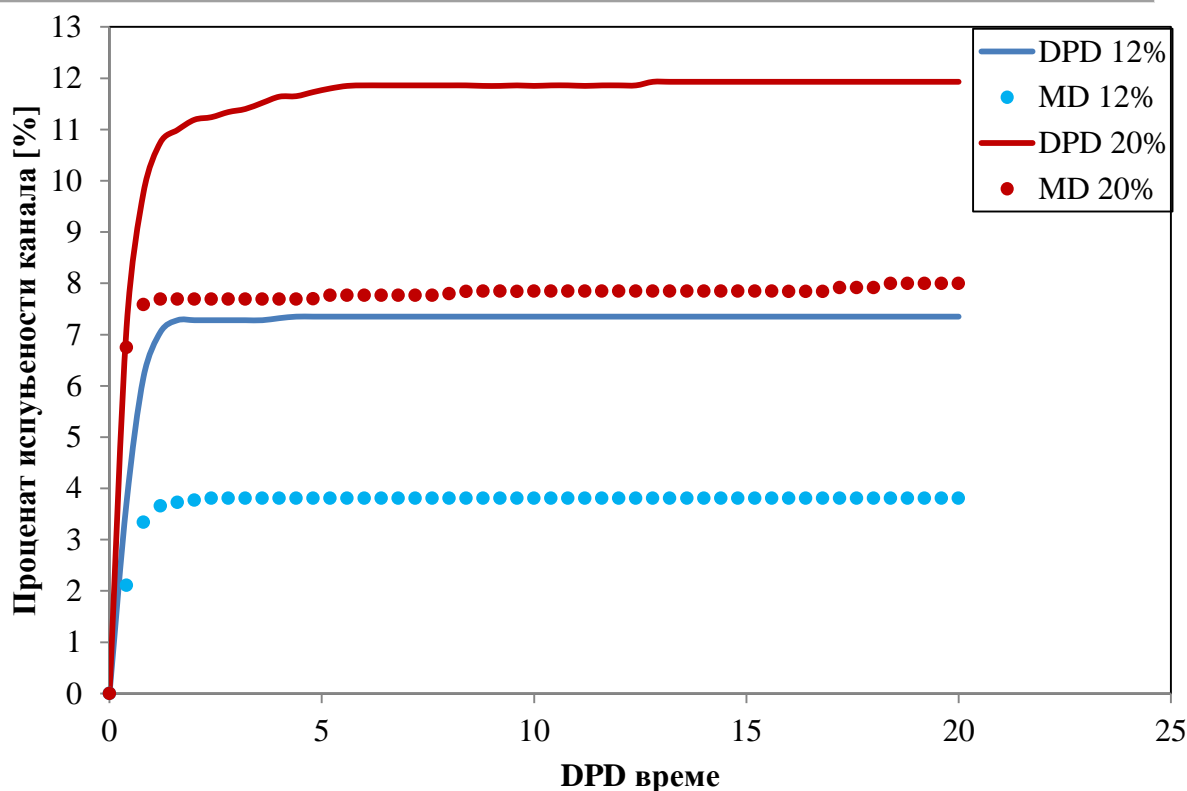




Слика 33. Положај честица у почетном (слика лево) и задњем тренутку (слика десно) при густини наноконтејнера 12%



Слика 34. Положај честица у почетном (слика лево) и задњем тренутку (слика десно) при густини наноконтејнера 20%

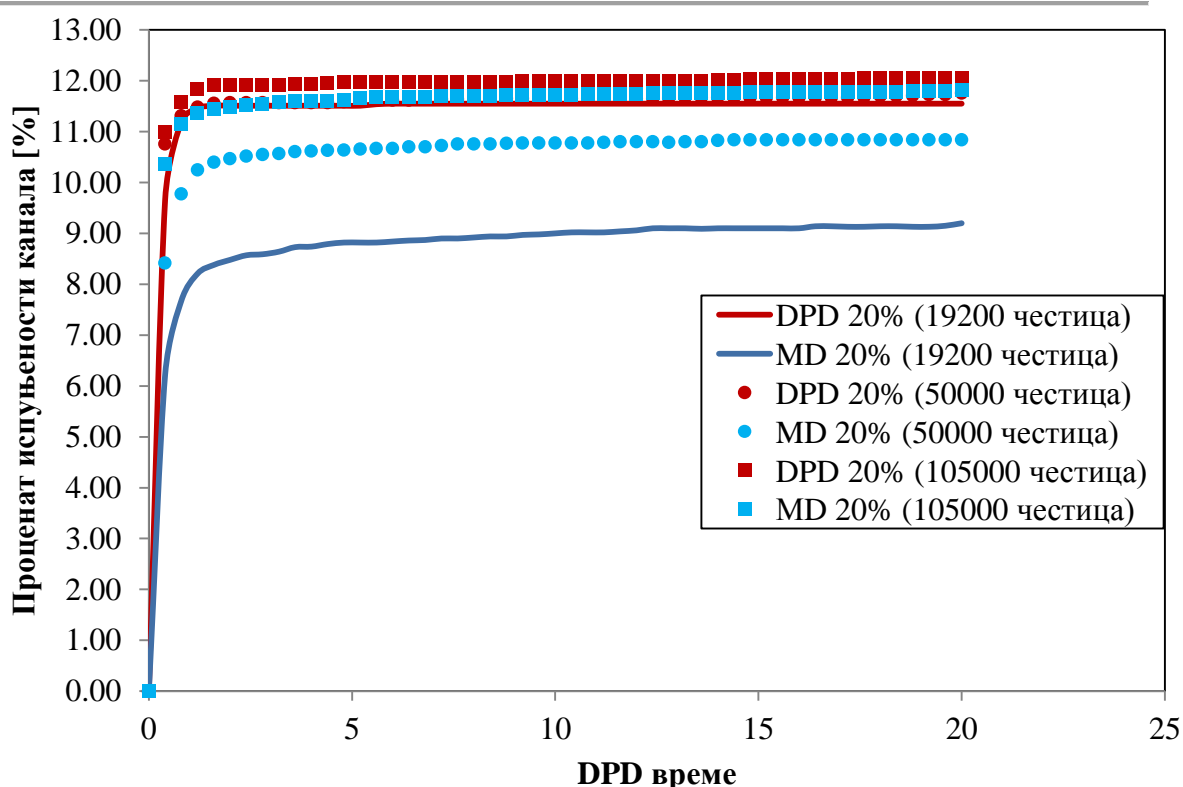


Слика 35. Испуњеност пукотине (канала) за густину наноконтејнера од 12% и 20%

Са слике 35. може се јасно уочити да се за већу густину наноконтејнера добије и боља покривеност пукотине. Нагли скок густине се јавља због иницијално великог броја *healing* честица, а како симулација тече даље тај број незнатно расте док се не испразне и други наноконтејнери чије су мембране физички оштећене насталом пукотином.

Очигледна разлика у резултатима који су приказани на слици 35, код DPD и MD методе, проистиче из чињенице да број честица у моделу утиче на решење код методе молекуларне динамике [41], [42], [43]. Дијаграми на слици 36. приказују поређење резултата са 20 процената *self – healing* агенаса у моделу али са различитим бројем честица. Као што се са слике види, већи број честица код DPD методе незнатно утиче на промену резултата, тј. на тачност, док је та промена код методе молекуларне динамике знатно уочљивија.



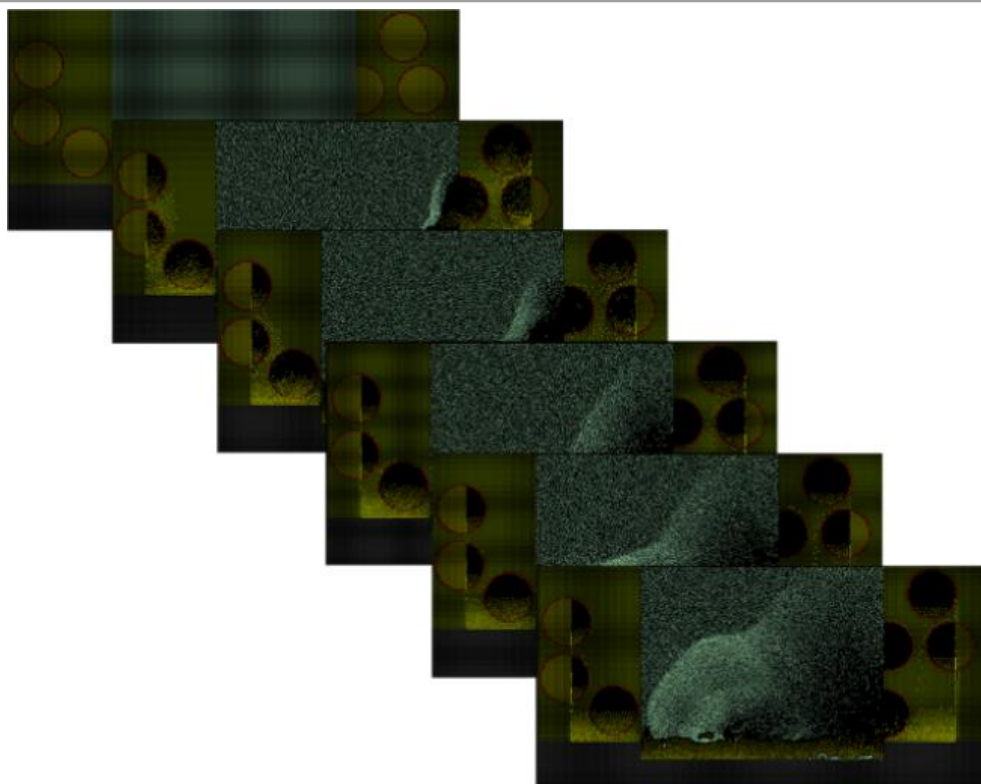


Слика 36. Утицај броја честица у моделу на тачност резултата

### 6.3. Моделирање инхибиције

Моделирање процеса инхибиције се врши помоћу DPD методе и методом коначних елемената. Као и код претходног корака, наноконтејнери су распоређени насумично и испуњени су инхибиторима који излазе из њих када се мембрана наноконтејнера физички покида. На слици 37. је приказан процес инхибиције и стварање слоја инхибитора на основном материјалу који треба да штити тај материјал од корозије.

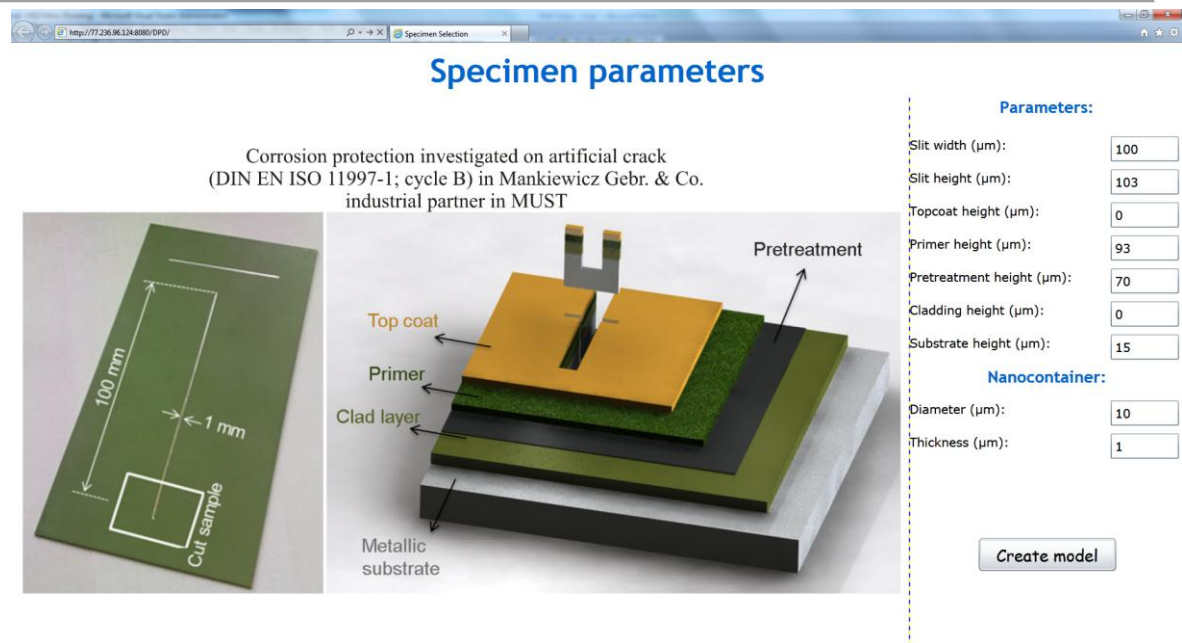
Приликом моделирања процеса инхибиције вредност конзервативне силе између честица које представљају инхибиторе је већа него између честице које представљају флуид. Инхибитори се везују за основни материјал помоћу додатне силе опруге, која се додаје конзервативној сили, и на тај начин стварају заштитни слој.



Слика 37. Процес инхибиције

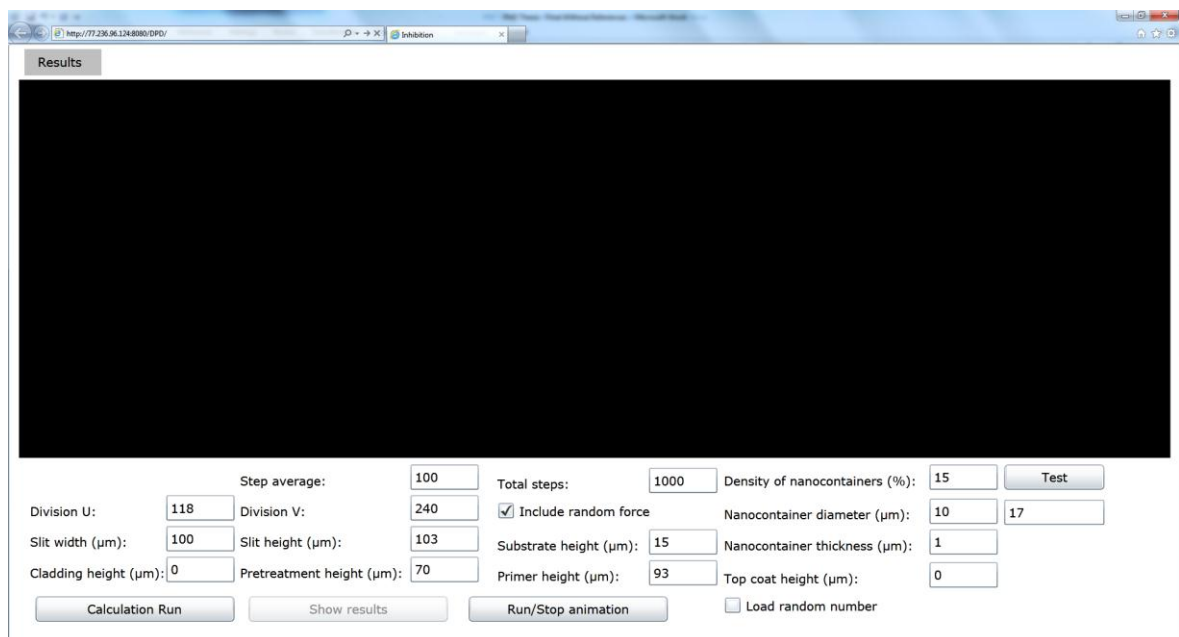
За креирање модела инхибиције, потребно је кликнути на дугме „Inhibition“ (видети слику 30). Након тог избора следи прозор за избор геометријских параметара за модел инхибиције. Изглед прозора за избор геометријских величина за пример инхибиције је приказан на слици 38.

Модел инхибиције је нешто сложенији, што се тиче саме геометрије проблема, од модела *self – healing* – а па самим тим имамо и више величина које могу да се унесу.



Слика 38. Избор геометријских параметара модела инхибиције

На слици 38. са десне стране су поља за унос и измену геометријских величина модела, а на средини слике се налази приказ металне подлоге са слојевима заштите који се моделирају. Да би правилно извршили моделирање за најдебљи слој је постављен „primer“ јер се у том слоју и смештају наноконтејнери приликом саме израде заштитног материјала.

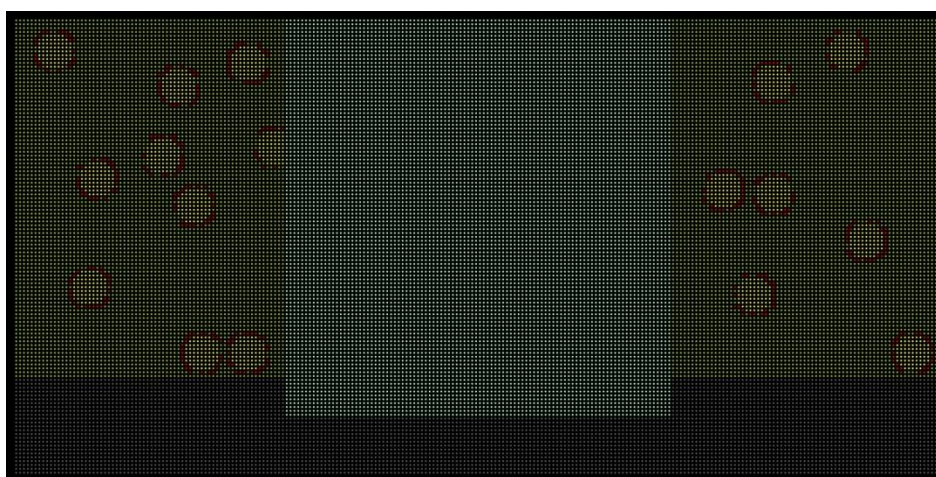


Слика 39. Изглед прозора за покретање прорачуна модела инхибиције

Као и код примера *self – healing* – а у главном прозору имамо додатна поља у којима можемо исконтролисати модел и саму симулацију. То су број честица у хоризонталном и вертикалном правцу, број корака за штампу, укупан број корака и жељена густина наноконтејнера. Као и код претходне методе, кликом на дугме „Calculation run“ покрећемо прорачун а након завршетка прорачуна и учитавања резултата могуће је покренути симулацију.

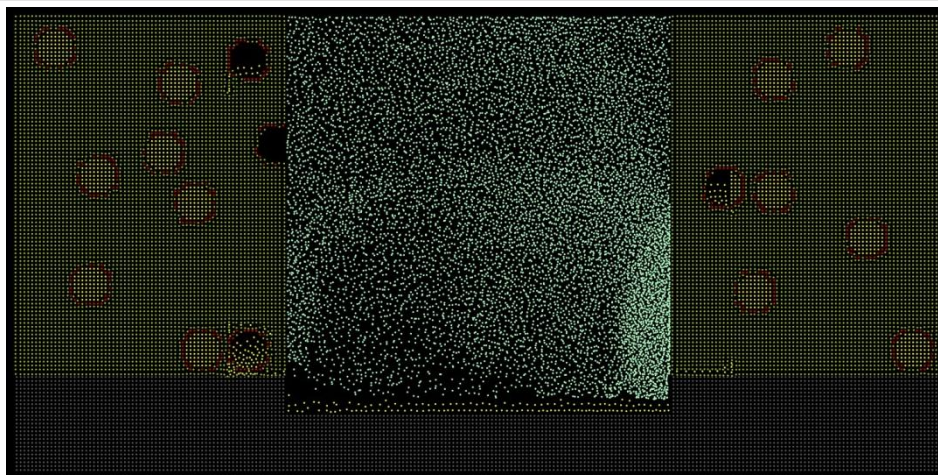
На слици 40. приказани су резултати где је модел инхибиције креиран са 28320 честица, временски корак је  $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$  док на сваку честицу која представља флуид (беле честице) делује константна сила  $g = 10.3$ . Густина наноконтејнера у читавом моделу је 15 процената од површине коју заузима „primer“ слој. Распоред наноконтејнера у моделу је насумичан тако да ће се за сваки нови прорачун добити другачији распоред наноконтејнера као и код модела *self – healing* – а. Уколико се желе поновити резултати потребно је означити поље „Load random number“ као што је објашњено раније. На слици 41. су приказани резултати где је густина повећана на 25 процената. Дијаграми на слици 42. показују зависност испуњености пукотине током времена за поменута два случаја.

а)



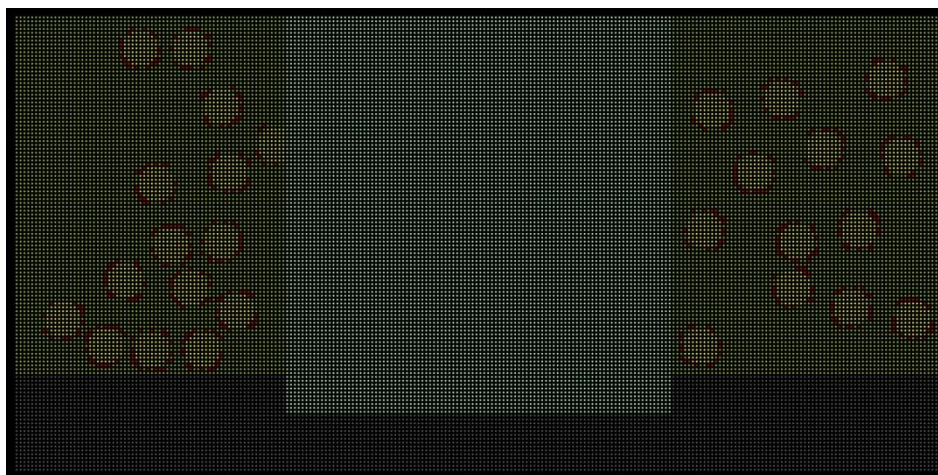
б)



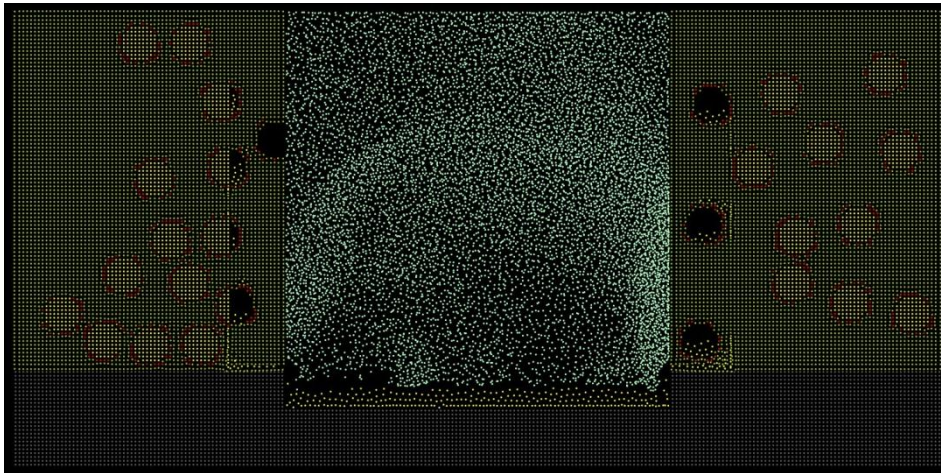


Слика 40. Положај честица при густини наноконтејнера 15%; а) у почетном тренутку;  
б) у задњем тренутку

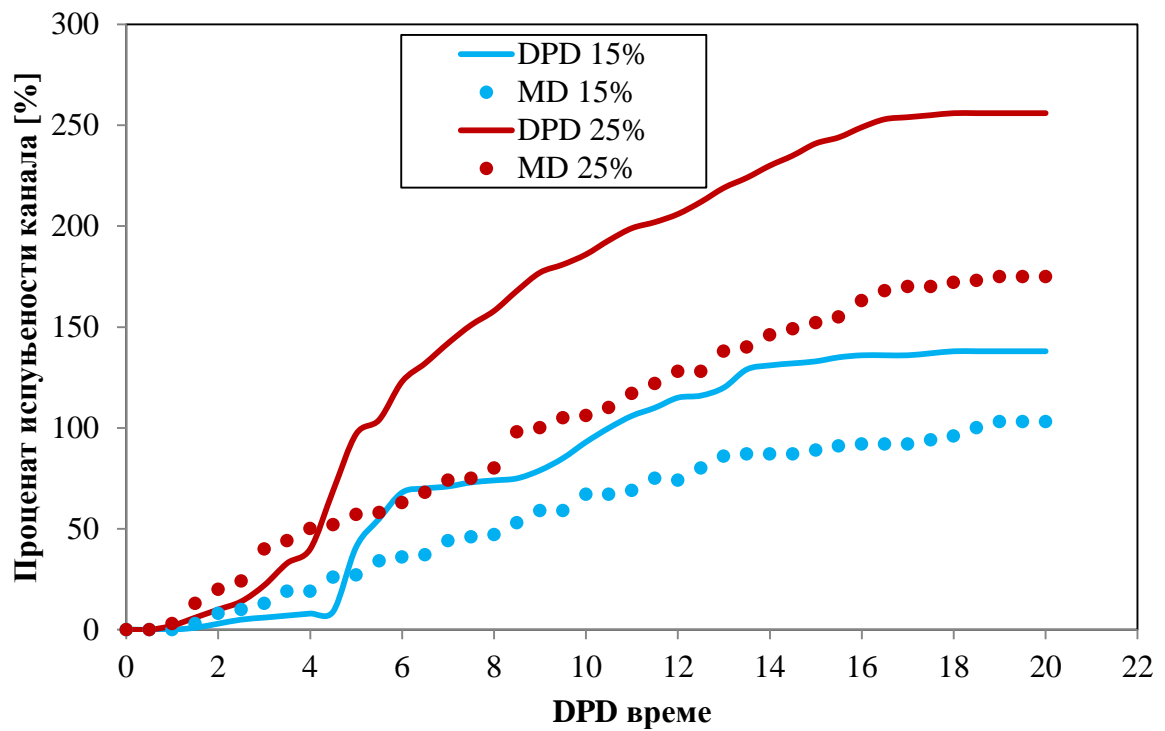
а)



б)



Слика 41. Положај честица при густини наноконтејнера 25%; а) у почетном тренутку; б) у задњем тренутку



Слика 42. Испуњеност пукотине (канала) за густину наноконтејнера од 15% и 25%

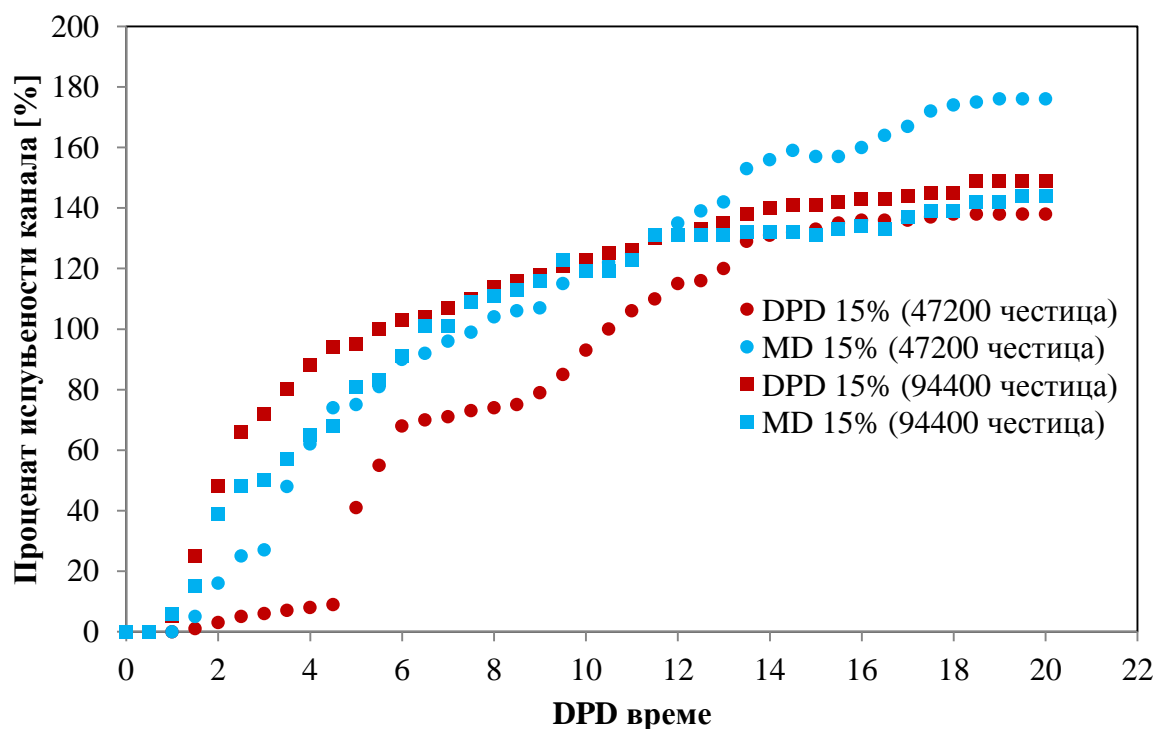
Са слике 42. може се јасно уочити, као и код процеса *self-healing* – а, да за већу густину наноконтејнера имамо и бољу покривеност прореца (канала). Са слике 40.б. и слике 41.б. је јасно уочљиво да имамо више од једног слоја инхибитора на металној

основи. Самим тим се и на дијаграмима на слици 42. добија покривеност канала преко сто процената.

Код примера инхибиције, довољно је имати један слој инхибитора на оштећеном делу металне подлоге да би се обезбедила жељена заштита материјала.

Одавде се намеће закључак да је жељену површину могуће заштитити и са концентрацијом наноконтејнера и мањом од 15 процената, али би за мањи проценат требало више времена да се површина канала заштити сто процената.

Као и код модела *self-healing* – а, и у моделу инхибиције је присутна разлика у решењима код две примењене методе што је приказано на слици 42. Са слике 43. јасно је да број честица код MD модела има запажен утицај на вредност резултата прорачуна.



Слика 43. Утицај броја честица у моделу на тачност резултата

#### 6.4. FEM модел

Процес транспорта масе, код система заштите материјала од корозије путем инхибиције, одвија се по конвективно – дифузној једначини (6.1) па је извршено моделирање канала и помоћу методе коначних елемената.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + q^{wall} \quad (6.1)$$

У горњој једначини компоненте су:

- $c$  је концентрација инхибитора;
- $v_x$ ,  $v_y$  и  $v_z$  су компоненте брзине у Декартовом координатном систему;
- $D$  представља коефицијент дифузије;
- $q^{wall}$  представља флуks процеса везивања инхибитора за зидове канала.

Током читавог процеса сматра се да је коефицијент дифузије константан.

У овом кораку се врши моделирање „creepage“ – а, тј. корозије на бочним странама, процесом дифузије где су задати параметри коефицијент дифузије и флуks. Модел који се симулира је 3D и садржи прорез, тј. канал који представља оштећење материјала. На слици 44. је представљена вредност концентрације инхибитора у каналу и вредност корозије на обалама канала.

а)



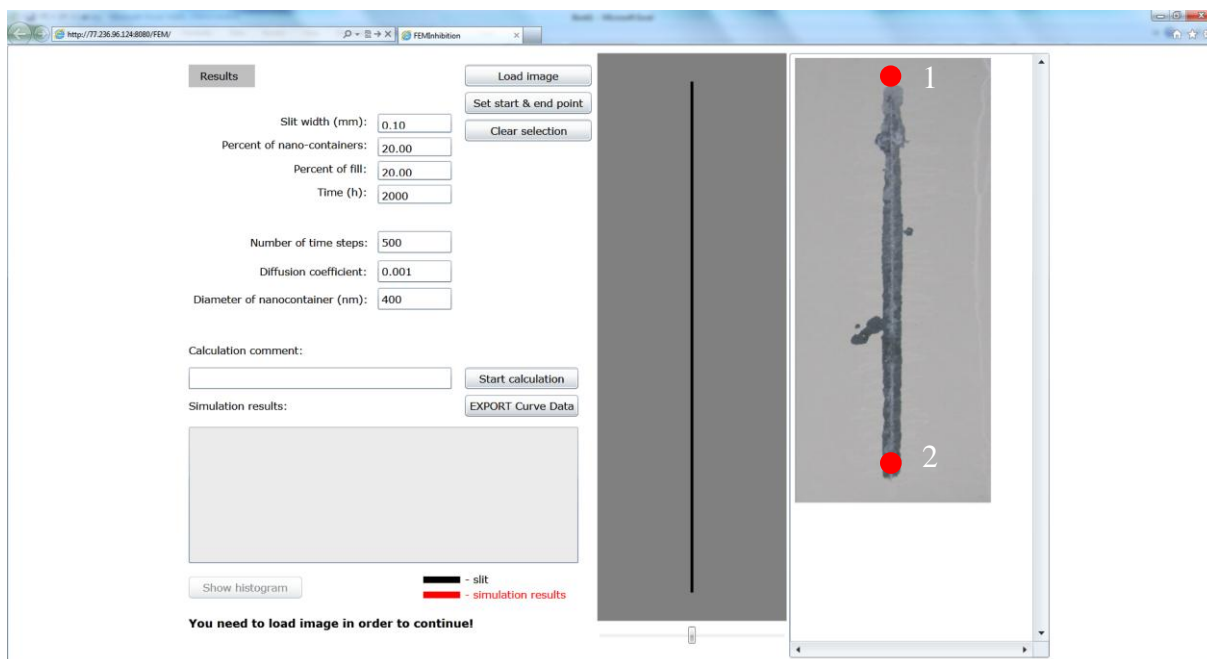
б)





Слика 44. а) Концентрација инхибитора у каналу; б) вредности „creepage“ – а на обалама канала

Као и код DPD модела и за овај приступ је креирана *online* апликација којој корисници могу приступити преко интернета. Апликација је, као и DPD алат, направљена у Microsoft – овој Silverlight технологији тако да је приступ могућ са различитих оперативних система. На слици 45. је приказана страница помоћу које се креира FEM модел и стартује прорачун. Најпре се учитава слика прореза, тј. канала, и обележавају тачке на учитаној слици канала који се моделира а затим се подешавају параметри модела.



Слика 45. Изглед странице за стартовање прорачуна и приказ резултата код моделирања FEM моделом

Резултати који се добијају након прорачуна су максимални и средњи *creepage* као и његова дистрибуција дуж прореза која је представљена црвеном линијом на слици

46.a. Након завршеног прорачуна и снимљених резултата могуће је добити расподелу *creepage* – а, тј. раст корозије на бочним странама канала као на слици 46.б.

а)

Results

Slit width (mm):

Percent of nano-containers:

Percent of fill:

Time (h):

Number of time steps:

Diffusion coefficient:

Diameter of nanocontainer (nm):

Calculation comment:

Simulation results:

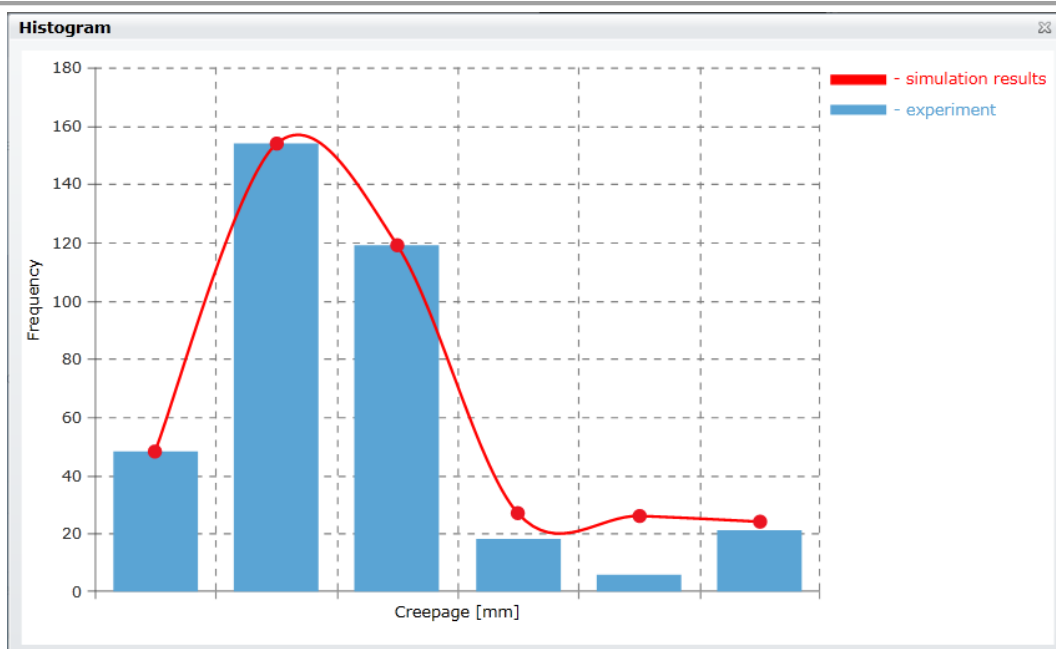
Maximal left creepage (mm): 0.28  
Maximal right creepage (mm): 0.38  
Average value of creepage on left side (mm): 0.22  
Average value of creepage on right side (mm): 0.26

- slit  
 - simulation results

**You need to load image in order to continue!**



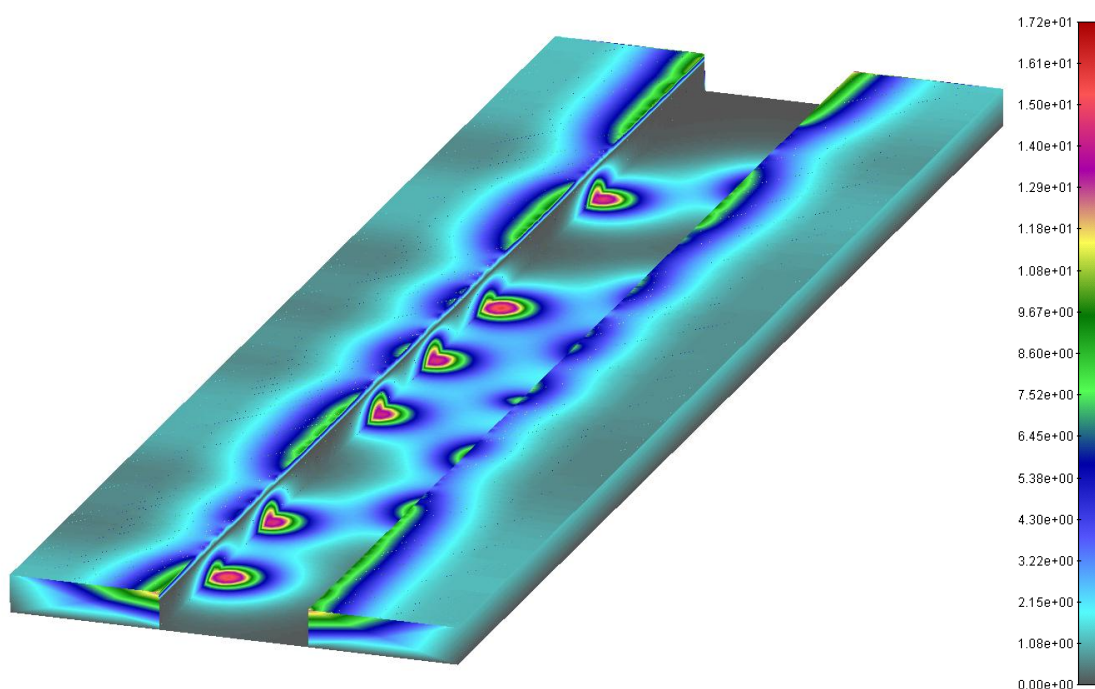
б)



Слика 46. Прорачун *creepage* – а FEM моделом; а) максимални и средњи *creepage*; б) хистограм

Са хистограма са слике 46.б. се види да је најраспрострањенији *creepage* ширине 1mm док нешто мање имамо *creepage* ширине 2mm. Остале вредности се могу занемарити и најчешће спадају у домен грешке приликом обраде слике јер овде поредимо резултате експеримента, тј. *creepage* добијен са учитане слике, и резултате симулације.

На слици 47. се види концентрација инхибитора при димензији прореза од 0.1x100mm, висина „primer“ слоја, у коме су смештени наноконтејнери, је 4000nm, а пречник наноконтејнера је 400nm. Процент инхибитора унутар наноконтејнера је 20 %, а процент самих наноконтејнера унутар „primer“ слоја је 10%. За брзину конвекције је претпостављено да је нула пошто је процес дифузије доминантнији. Такође, имамо задат јединични флуks, што зависи од механичких особина оштећеног материјала, а претпостављамо да нема воде на површини канала.



**Слика 47.** Дистрибуција инхибитора на оштећеној површини, након 6 сати

Слично као код DPD модела, где имамо насумични распоред наноконтејнера, овде се такође концентрација задаје насумично па је већа концентрација инхибитора дуж ивица канала [44].

### 6.5. Мапа ризика заштите материјала добијена FEM моделом

Како је било потребно извршити велики број прорачуна да би се статистички одредиле величине *creepage* – а, креирана је апликација за покретање прорачуна коришћењем SSH (Secure Shell) везе ка удаљеном кластеру, тј. његовом систему за пакетну обраду послова.

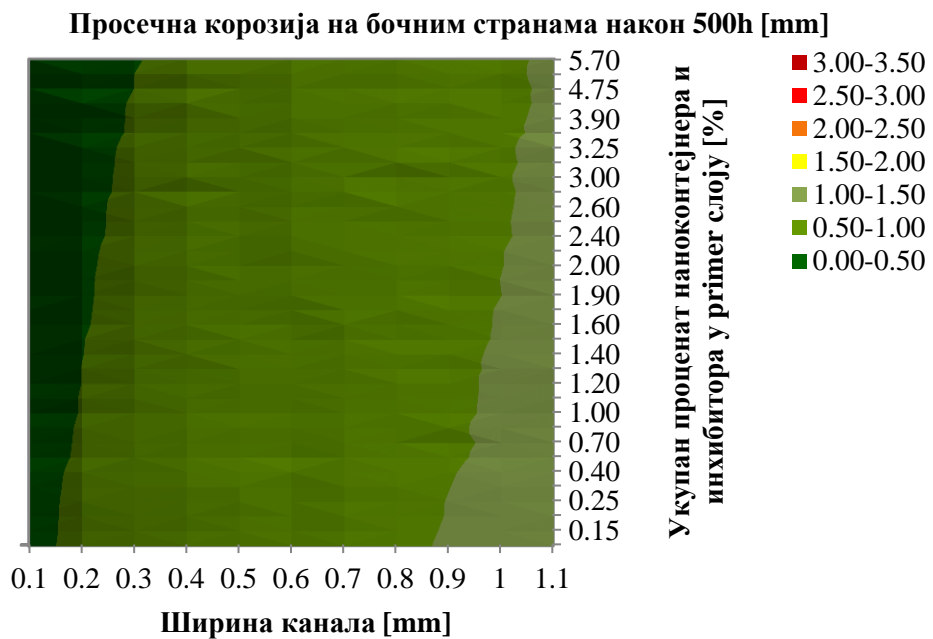
Ширина канала се кретала од 0.1 до 1.1mm, а проценат наноконтејнера у „primer“ слоју од 1% - 19% (1, 4, 7, 10, 13, 16, 19). Процент испуњености наноконтејнера инхибиторима је била у границама од 10% - 30% и то за вредности 10, 15, 20, 25, 30. Време симулације је било 2000h као и приликом извођења експеримената с тим што је било потребно штампати резултате на 300h, 500h, 700h, 1000h, 1500h и 2000h. Поред ових варијација, сваки прорачун је са истим параметрима покретан 7 пута ради добијања што веродостојнијих резултата.

Добијени резултати су приказани на наредним сликама.

а)

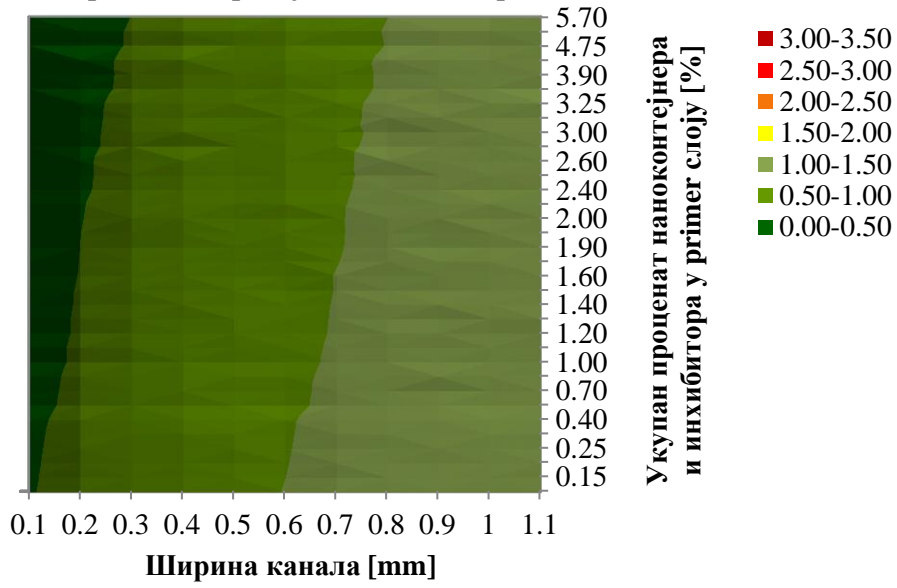


б)



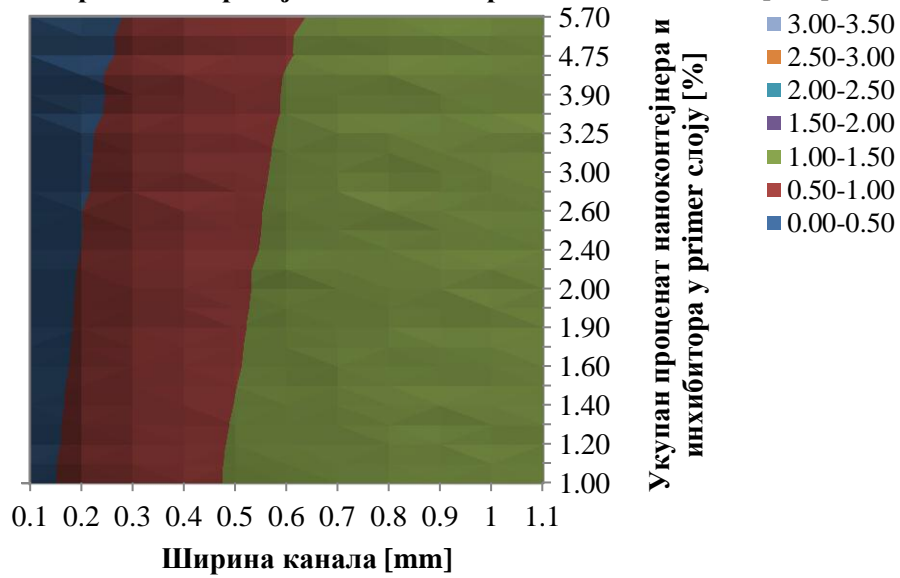
в)

**Просечна корозија на бочним странама након 700h [mm]**

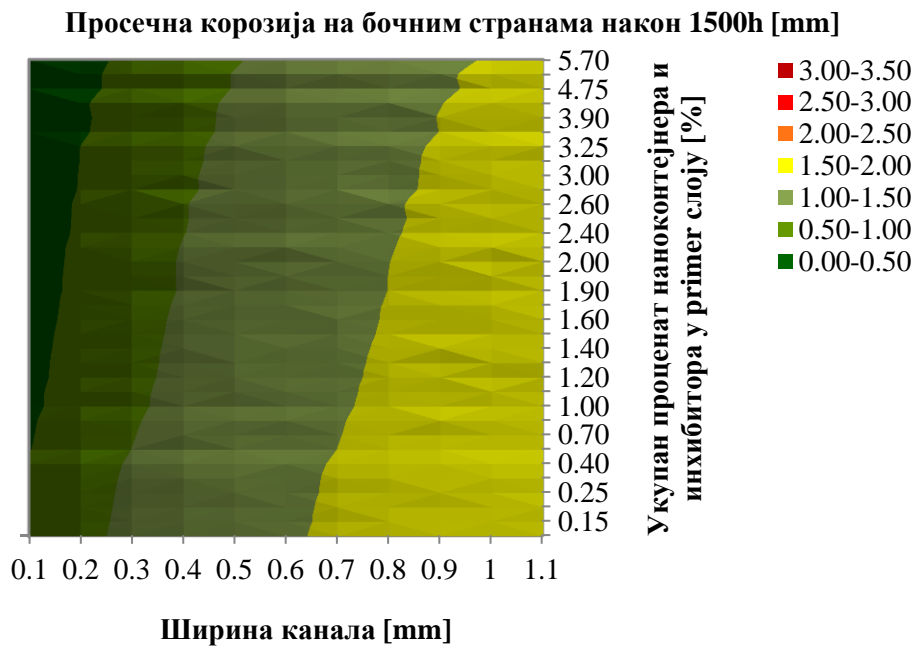


г)

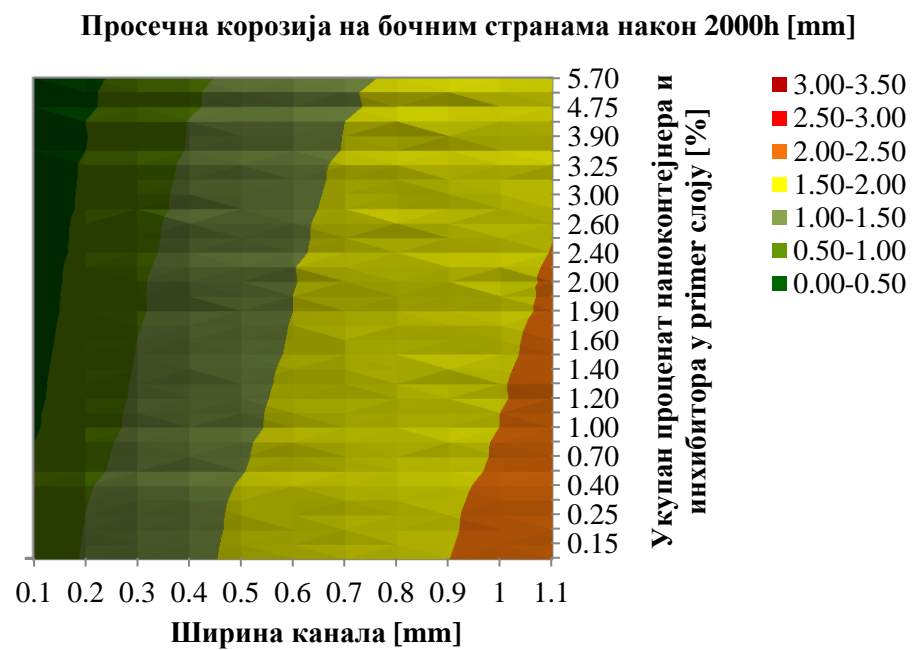
**Просечна корозија на бочним странама након 1000h [mm]**



д)



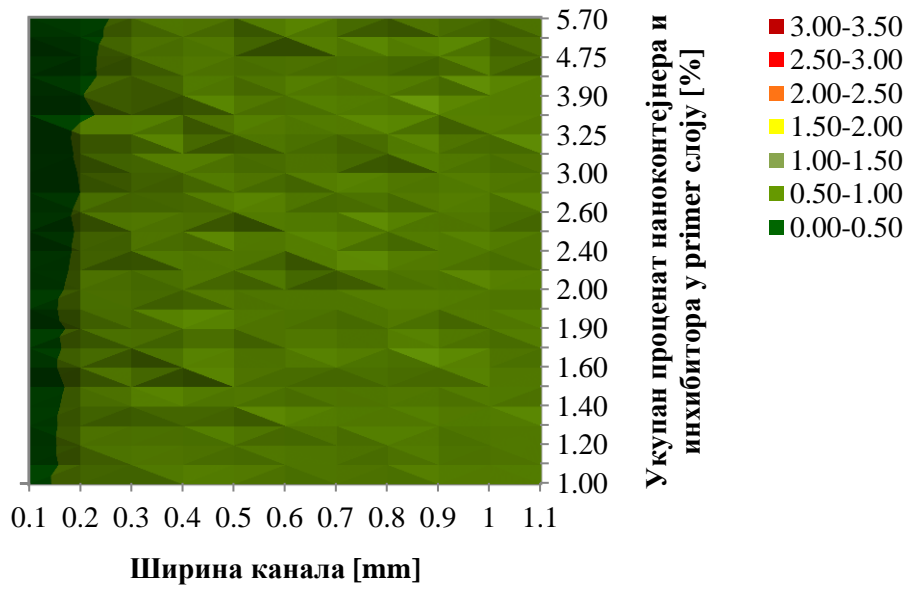
ђ)



**Слика 48.** Просечна вредност корозије на бочним странама канала, у mm, након: а) 300h; б) 500h; в) 700h; г) 1000h; д) 1500h; ђ) 2000h

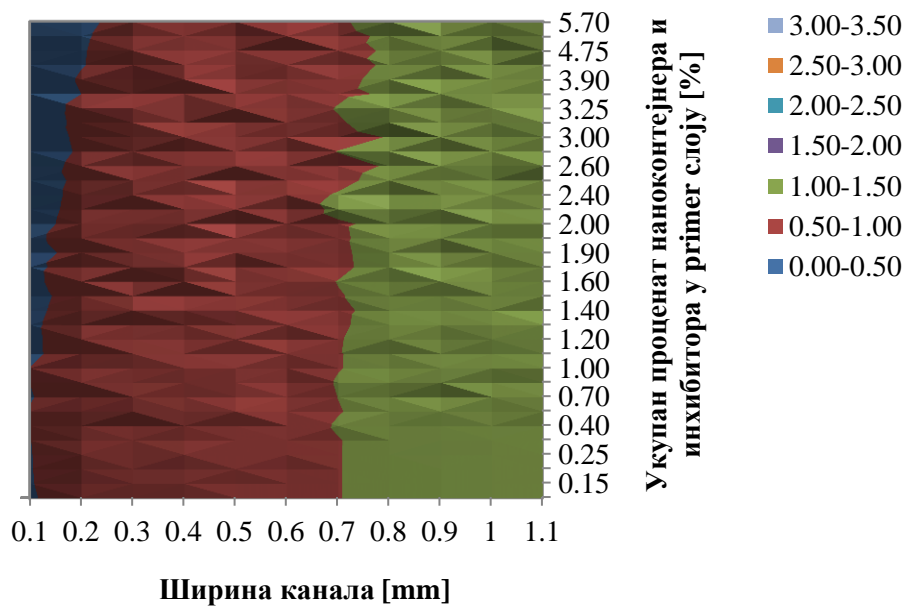
а)

**Максимална корозија на бочним странама након 300h [mm]**



б)

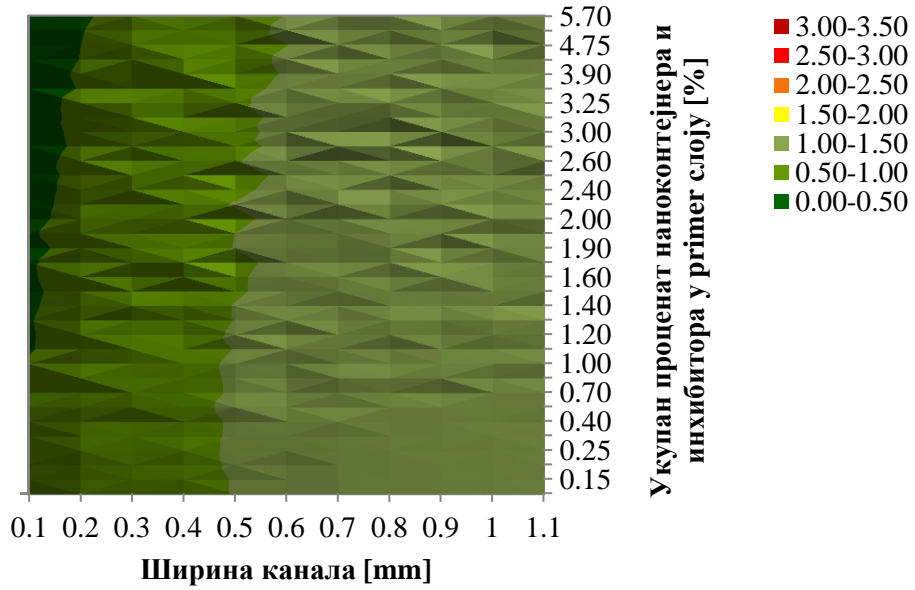
**Максимална корозија на бочним странама након 500h [mm]**



в)

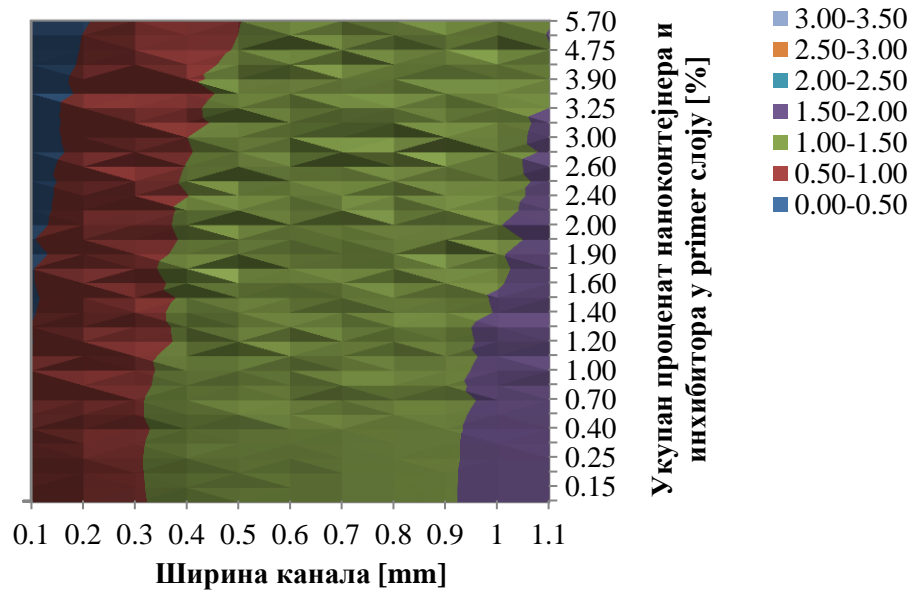


**Максимална корозија на бочним странама након 700h [mm]**

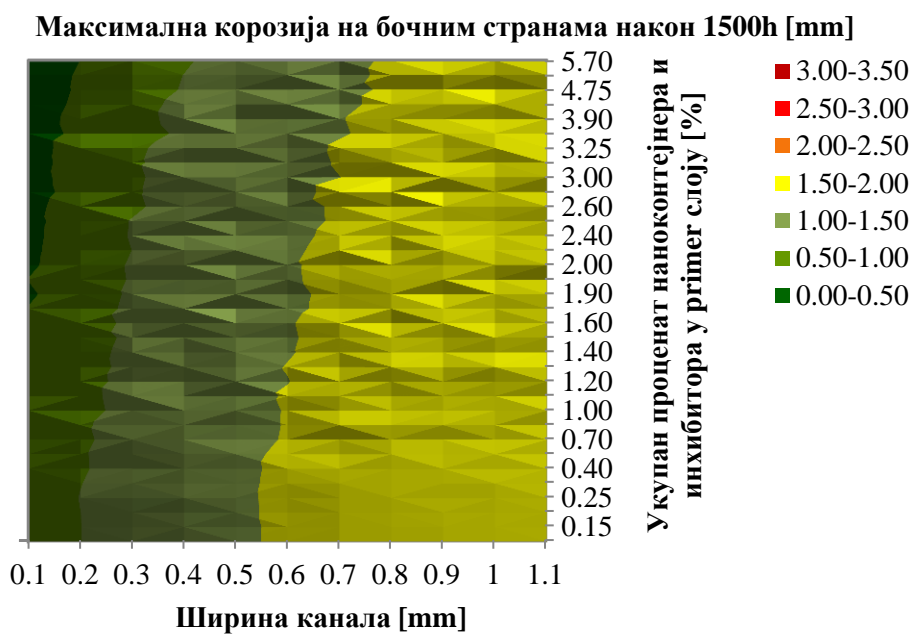


г)

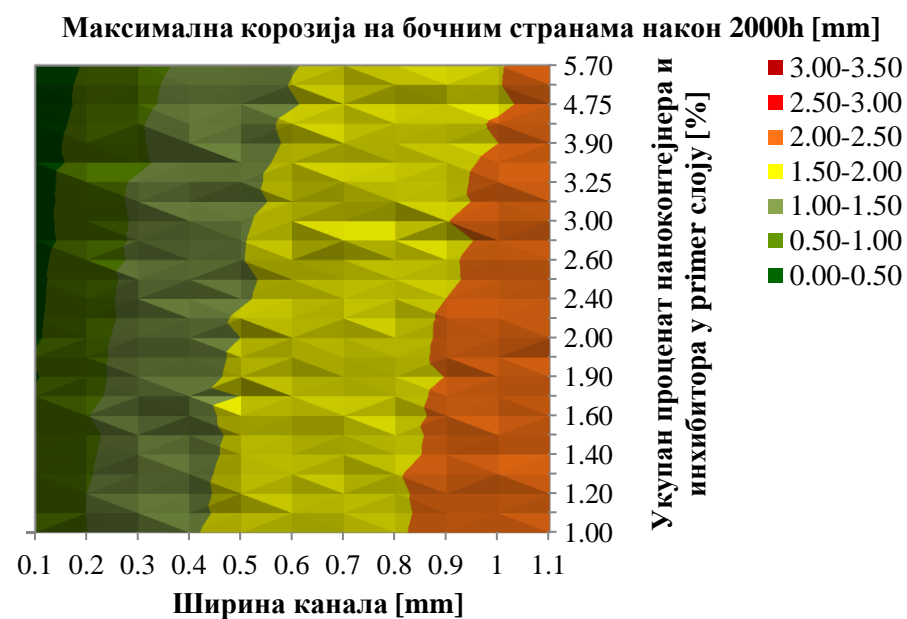
**Максимална корозија на бочним странама након 1000h [mm]**



д)

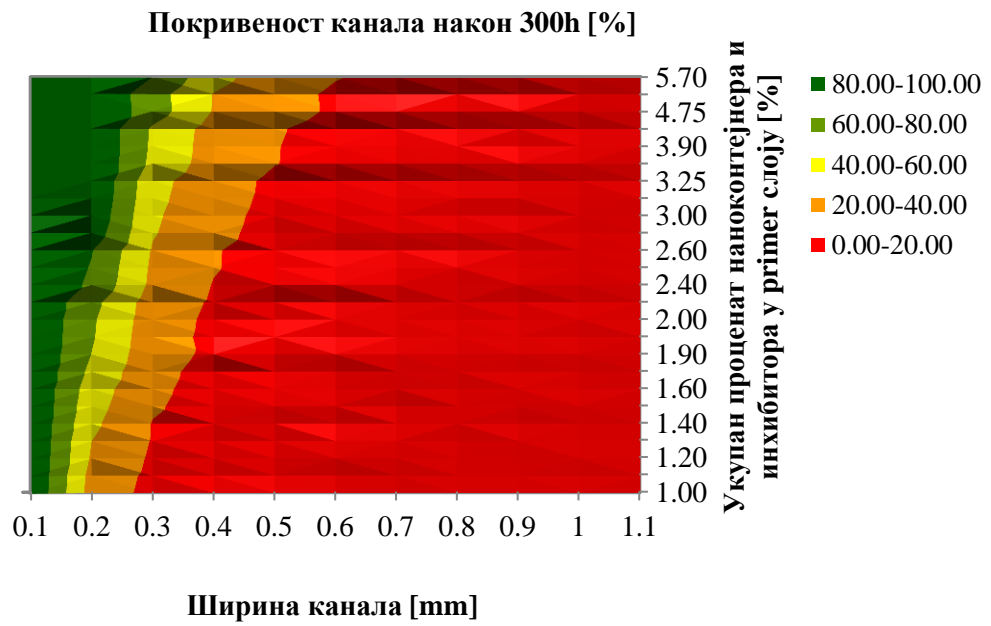


ђ)

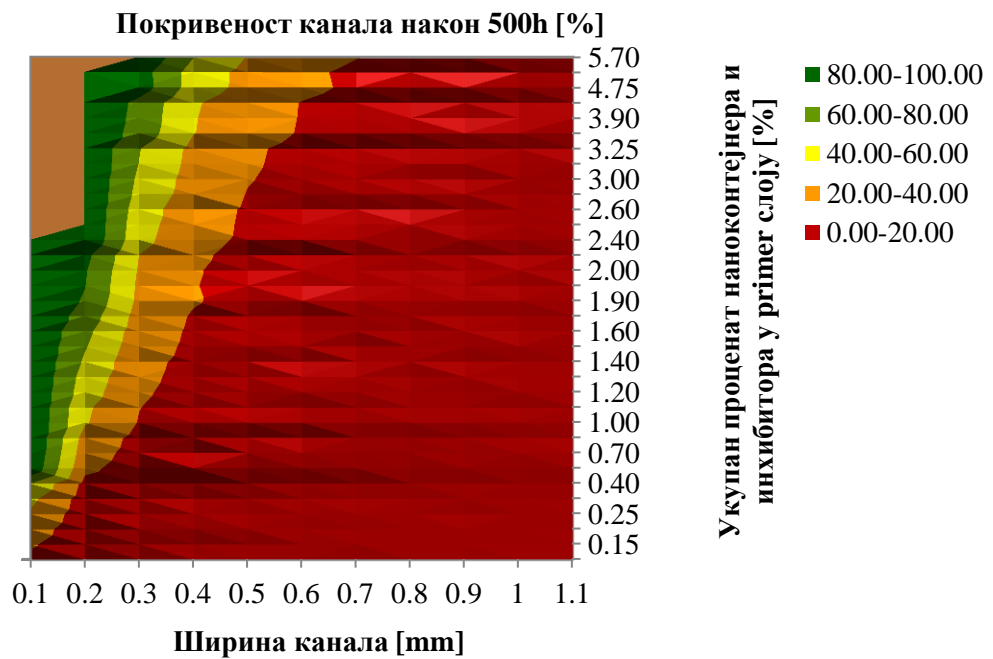


**Слика 49.** Максимална вредност корозије на бочним странама канала, у mm, након: а) 300h; б) 500h; в) 700h; г) 1000h; д) 1500h; ђ) 2000h

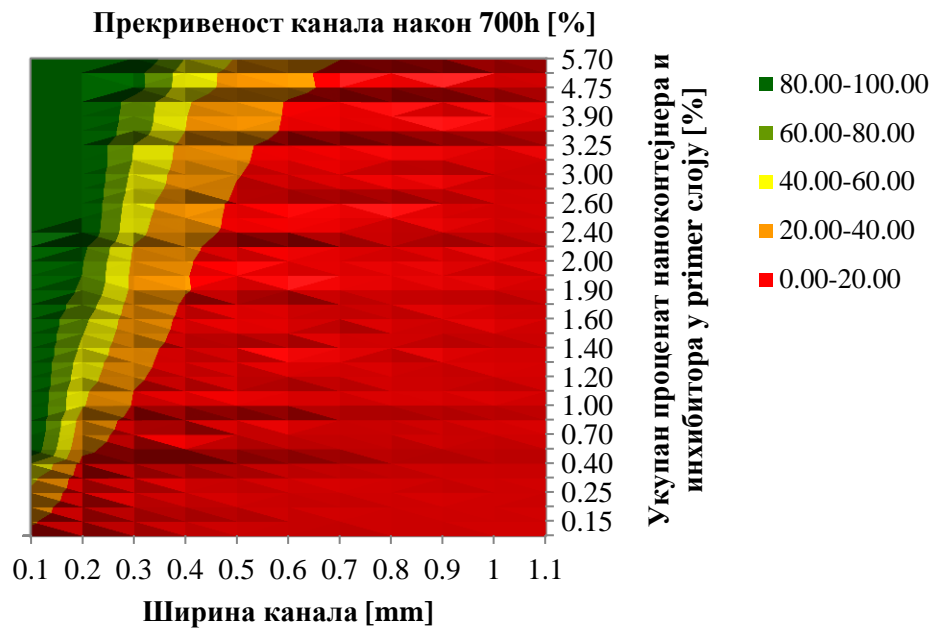
а)



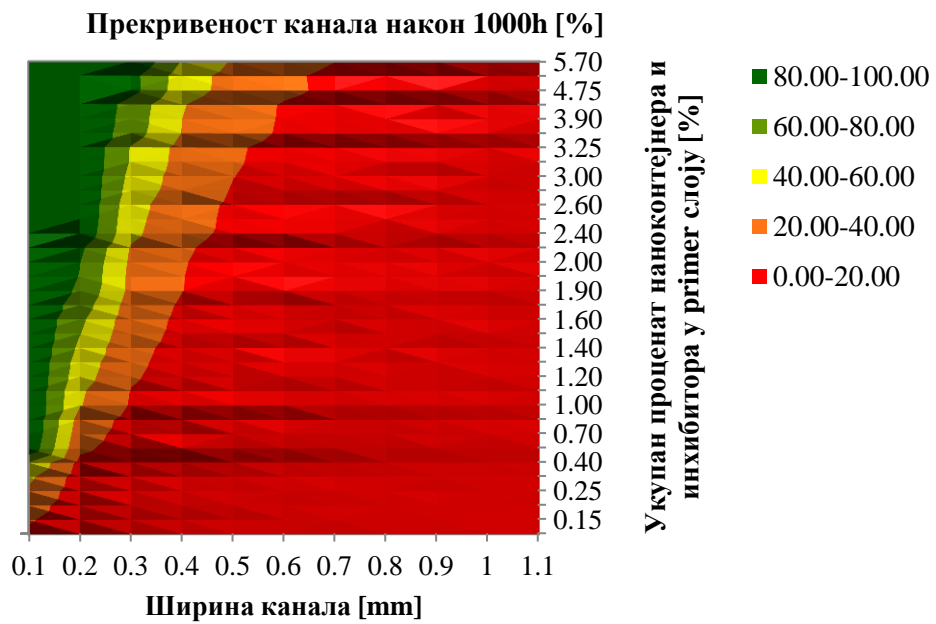
б)



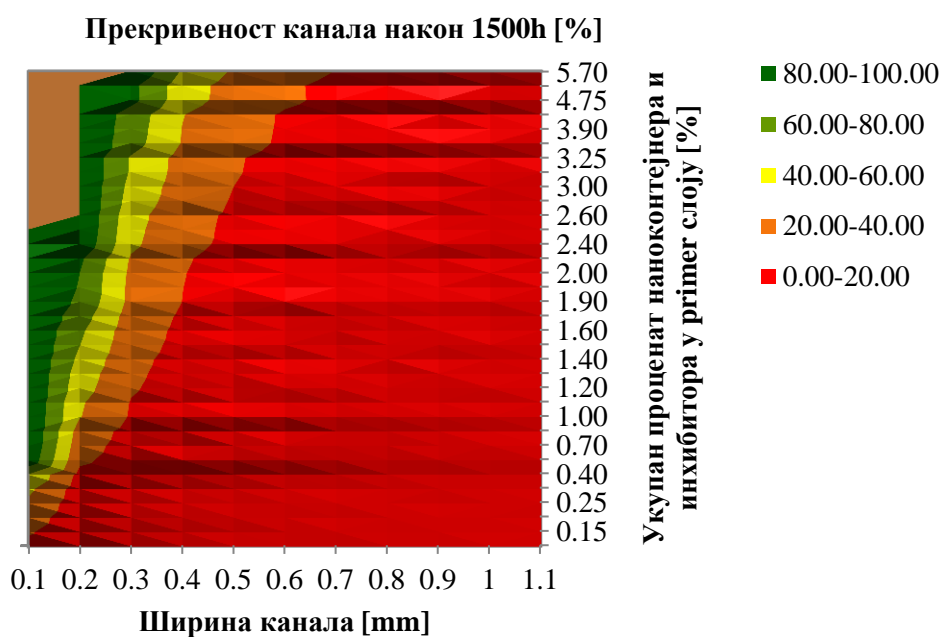
в)



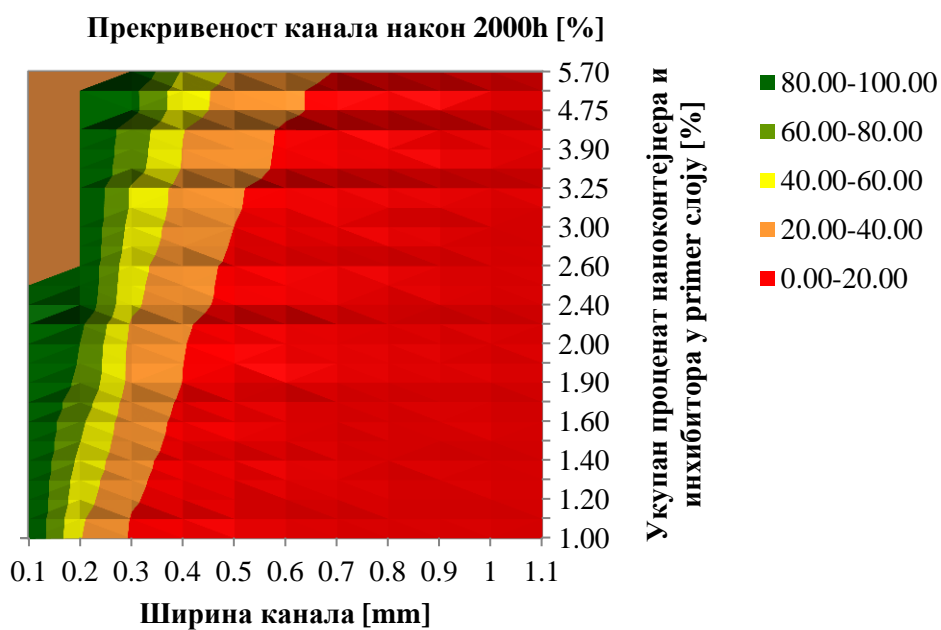
г)



д)



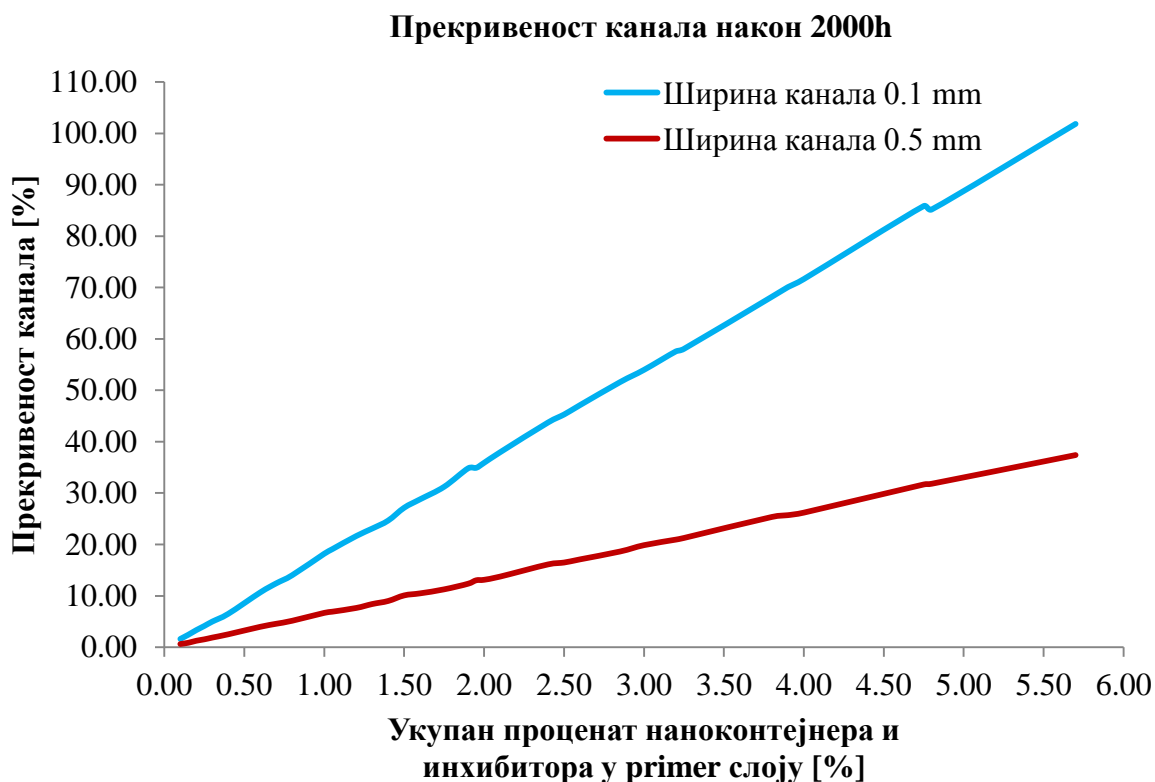
ђ)



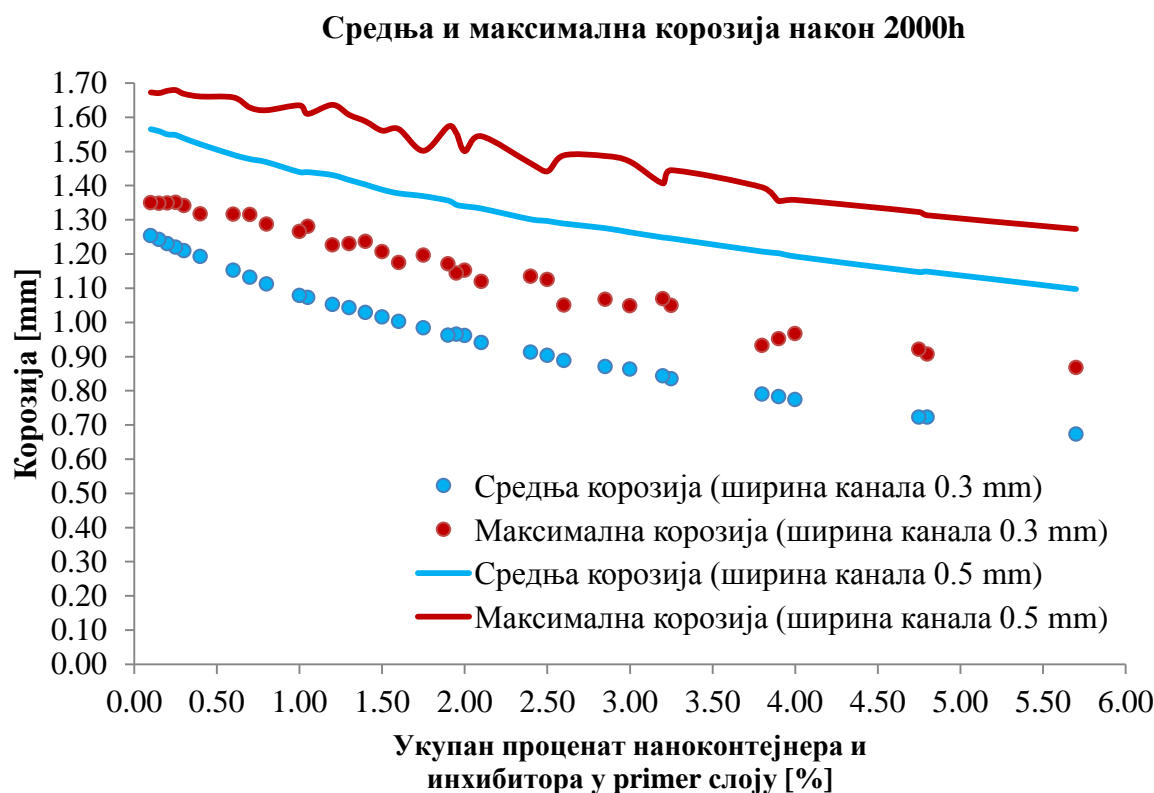
Слика 50. Средња вредност прекривености канала, у %, након: а) 300h; б) 500h; в) 700h; г) 1000h; д) 1500h; ђ) 2000h

Добијени резултати су у складу са експерименталним резултатима који су извршени. Максимална корозија на страницама канала износи 0.94mm након 300h, док је средња вредност поменуте корозије 0.88mm након 300h. Може се уочити да како се

ширина канала повећава и укупан проценат инхибитора опада да корозија расте, и супротно. Такође се види да је боља покривеност канала када је он мањих димензија а укупан проценат инхибитора расте. Поменуте зависности су приказане на сликама 51. и 52.



**Слика 51.** Покривеност канала након 2000 сати [%] у зависности од процента наноконтејнера и инхибитора у primer слоју



**Слика 52.** Средња и максимална вредност корозије након 2000 сати [mm] у зависности од процента наноконтејнера и инхибитора у прIMER слоју

Како током времена корозија напредује тако се и мењају посматране вредности тако да за време од 2000h добијамо већу вредност корозије, тј. гору заштиту на страницама канала, али добијамо бољу покривеност на дну прореза јер се инхибитори током времена боље разлију по подножју што је и за очекивати. На крају процеса, добијена максимална вредност корозије на странама канала је 2.29mm, док је средња вредност 2.16mm. Вредности за корозију које су овде поменуте су преузете из табела које су добијене након извршених прорачуна на рачунарима.

Резултати добијени симулацијама се у великој мери поклапају са експерименталним резултатима који су приказани на слици 4. На поменутој слици је приказано неколико изведених експеримената док је њихов број знатно већи и мери се хиљадама.

## 6.6. Резултати паралелизације

Тестирање примера је вршено на серверском рачунару на коме је инсталиран Scientific Linux 5.8 оперативни систем за обе архитектуре које су овде поменуте [45]. Карактеристике поменутог рачунара су наведене испод:

- Intel(R) Xeon(R) Processor E5504 (4M Cache, 2.00 GHz, 4.80 GT/s Intel(R) QPI)
- Број језгара: 4
- Број нити: 4
- 8 GB RAM меморије
- Оперативни систем: Scientific Linux SL release 5.5 (Boron), 64-bit

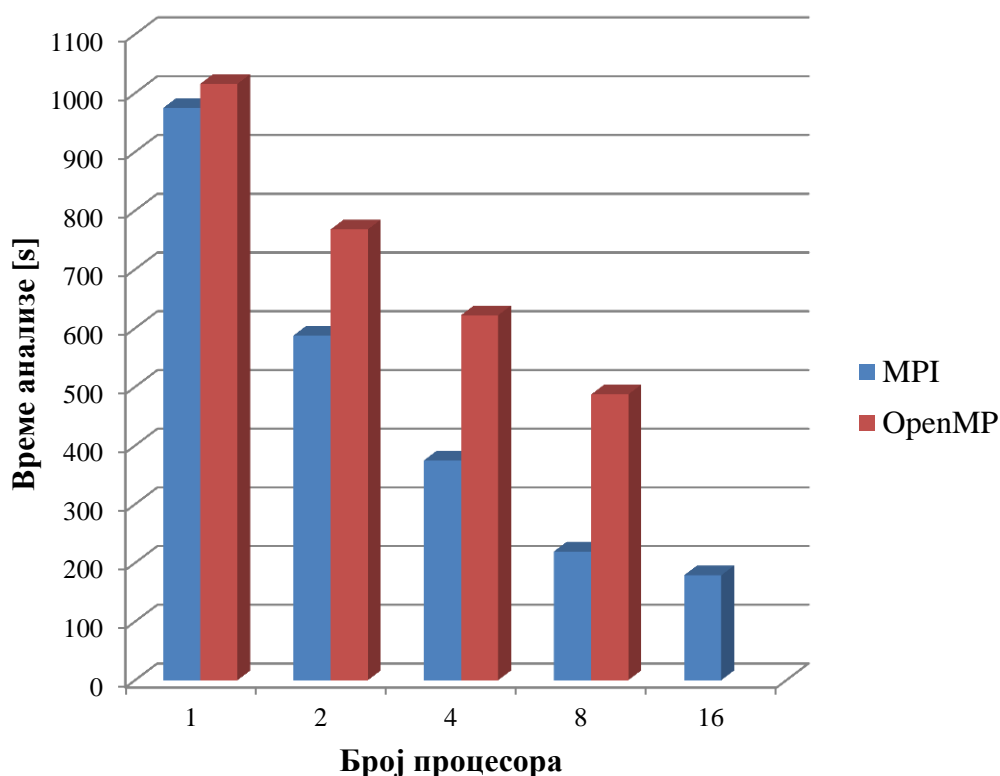
Примери који су овом приликом разматрани су *Poiseuille* струјање и струјање флуида између два коаксијална цилиндра. Резултати су приказани у доњој табели. Наравно, улазни параметри су били исти код обе архитектуре. За случај *Poiseuille* струјања број честица је био 10500 (150 честица у хоризонталном правцу и 70 честица у вертикалном правцу) док је број временских корака постављен на 30000.

**Табела 2.** Струјање флуида између две паралелне плоче (*Poiseuille* струјање)

Број процесора	MPI	OpenMP
1	974.50 s	1015.72 s
2	587.40 s	768.03 s
4	374.48 s	622.00 s
8	219.55 s	487.06 s
16	178.88 s	/

На слици 53. је приказана зависност времена анализе прорачуна у односу на број процесора код примера струјања флуида између две паралелне плоче.





**Слика 53.** Време анализе у зависности од броја процесора за случај струјања флуида између две паралелне плоче

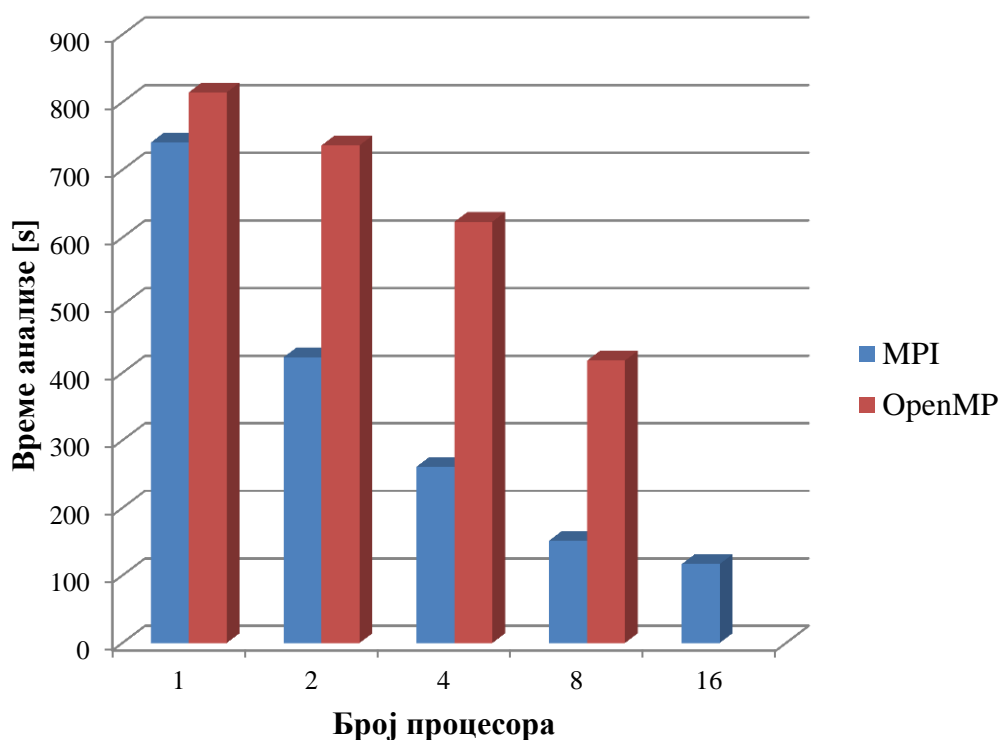
Као што се са слике види, дуплирањем броја процесора време трајања анализе се не скраћује за половину, дакле зависност није линеарна. Нелинеарност се јавља услед повећане комуникације међу процесорима што доводи до успоравања самог рачуна. Међупроцесорску комуникацију треба свести на најмању могућу меру и оптимизовати програмски код тако да се уместо сваког податка понаособ шаље пакет података одједном.

Приликом тестирања другог примера, струјање флуида између два коаксијална цилиндра, добијени су резултати који су приказани у табели 3. Број честица је био 7800 (130 честица у аксијалном правцу и 60 честица у радијалном правцу), а број временских корака је био 30000.

Табела 3. Струјање флуида између два коаксијална цилиндра

Број процесора	MPI	OpenMP
1	740.45 s	948.58 s
2	423.19 s	736.32 s
4	261.05 s	623.35 s
8	151.64 s	418.13 s
16	116.90 s	/

На слици 54. је приказано време трајања анализе у зависности од броја процесора.

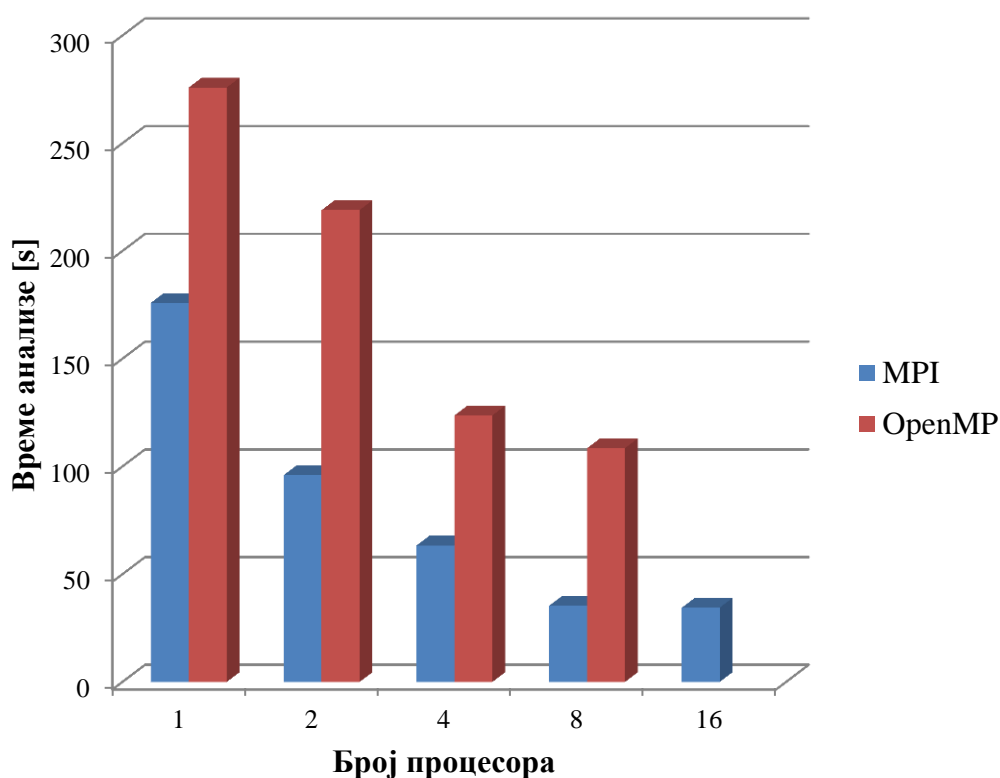


Слика 54. Време анализе у зависности од броја процесора за пример струјања флуида између два коаксијална цилиндра

За оба тестирана примера, када је број процесора 16, прорачун је извршен на рачунарима који су повезани у кластер помоћу *ethernet* мреже. Овде се види предност модела порука (MPI) у односу на модел дељене меморије (OpenMP) јер се у кластер може повезати велики број рачунара који међусобно комуницирају помоћу порука.

**Табела 4.** Време трајања анализе код модела „self – healing“ - а

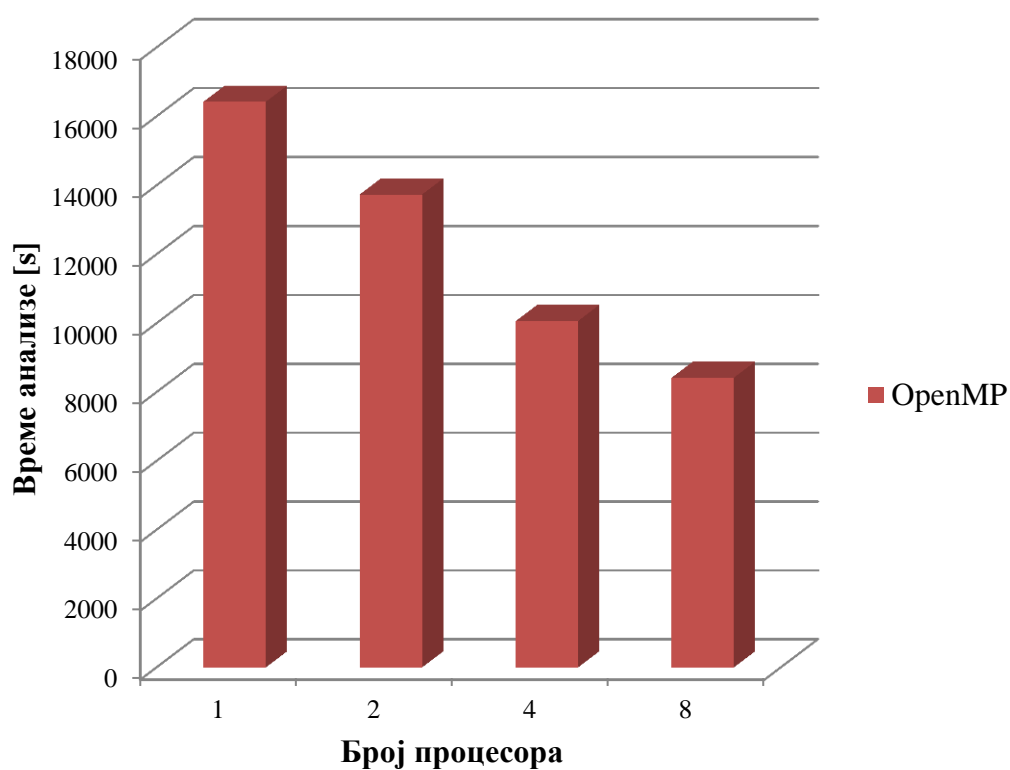
Број процесора	MPI	OpenMP
1	175.96 s	275.91 s
2	96.00 s	219.00 s
4	63.34 s	123.71 s
8	35.39 s	108.49 s
16	34.47 s	/

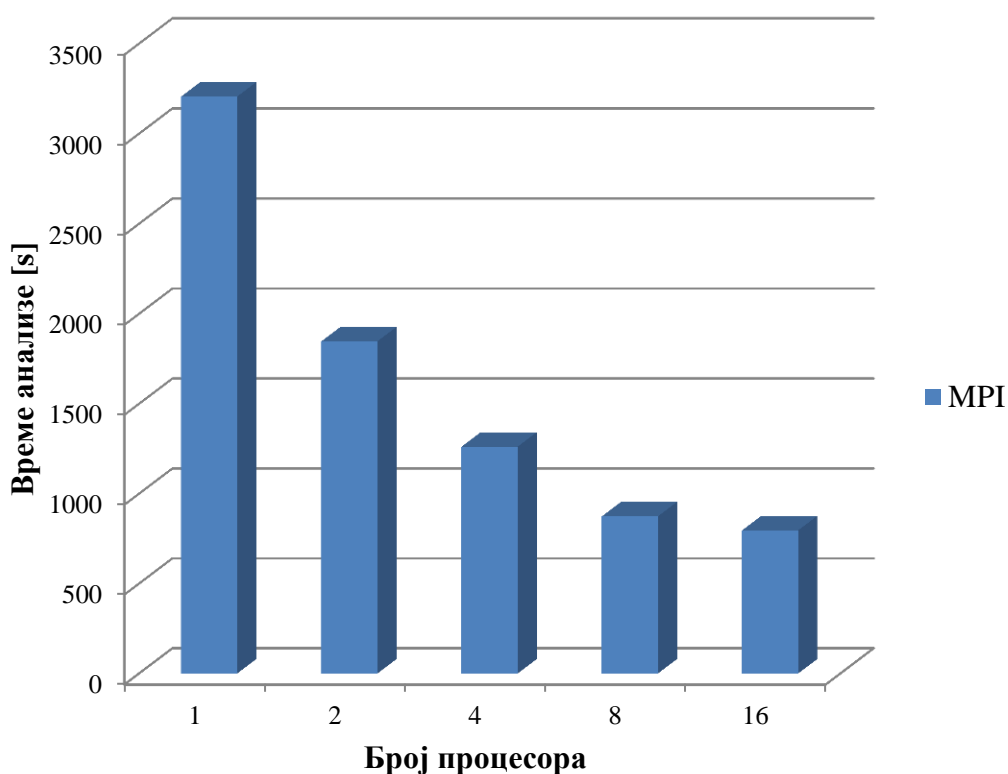
**Слика 55.** Зависност трајања анализе од броја процесора код модела „self – healing“ – а

Како се из табеле 4. може уочити, највеће убрзање, за случај архитектуре дељене меморије, постиже се када посао поделимо на два процесора. Код овог модела треба напоменути да се само честице унутар пукотине крећу, док остале честице мирују осим честице унутар наноконтејнера (слика 33. и слика 34.). Исти је случај и код модела инхибиције (слика 40. и слика 41.), тј. имамо кретање честица само унутар пукотине.

**Табела 5.** Време трајања анализе код модела инхибиције

Број процесора	MPI	OpenMP
1	3206.11 s	16423.18 s
2	1847.25 s	13734.34 s
4	1261.64 s	10063.45 s
8	873.94 s	8417.81 s
16	796.15 s	/

**Слика 56.** Зависност трајања анализе од броја процесора код модела инхибиције код архитектуре дељене меморије (OpenMP)



**Слика 57.** Зависност трајања анализе од броја процесора код модела инхибиције код архитектуре дистрибуиране меморије (MPI)

На слици 55. је приказана зависности трајања анализе од броја процесора код модела „self – healing“ – а, а на сликама 56. и 57. поменута зависност код модела инхибиције. Као и код примера на којима су ове две архитектуре тестиране, *Poiseuille* и струјање флуида између два коаксијална цилиндра, тако су и код поменутих модела резултати добијени паралелним верзијама били у складу са резултатима који су приказани на сликама 35. и 42, наравно уз минималне разлике услед утицаја насумичне силе.

На основу резултата који су добијени паралелизацијом јасна је предност паралелних у односу на секвенцијалне програме.

Са друге стране, модел дељене меморије је ограничен на ресурсе које поседује један рачунар и по питању процесора и по питању радне меморије. Како је цена таквих рачунара по правилу увек висока, модел порука се намеће као боље решење.

Као и увек, треба направити баланс између метода које су овде представљене. Помоћу OpenMP платформе паралелизација програмског кода је једноставна и брза али на уштрб убрзања прорачуна, јер се комуникација на магистрали знатно повећава са већим бројем процесора. Насупрот OpenMP платформи, програмирање кода коришћењем MPI архитектуре је спорије и са програмерског аспекта захтевније али су користи ове методе јасно уочљиви.

## 7. Закључна разматрања

Досадашњи радови из области симулације дисипативном честичном динамиком су се углавном ослањале на моделирање проблема са слободном површином флуида и сличних. У овој дисертацији је искоришћен основни концепт DPD методе коме је додата додатна вредност репулзивне силе чиме се постиже ефекат лепљења честица инхибитора на третирану металну површину.

Главни циљ дисертације био је креирање модела инхибиције и полимеризације као и њихово прилагођавање за коришћење од индустријских партнера у оквиру Европског пројекта MUST. У ту сврху креиран је кориснички интерфејс који је јако једноставан за коришћење и разумљив крајњем кориснику.

Поред овог циља, извршена су тестирања DPD методе и поређење тачности и ефикасности у односу на MD методу. Где је било могуће решења добијена DPD симулацијом су била упоређивана и са аналитичким решењима посматраног проблема. Постигнути циљеви дисертације су изложени у следећем поглављу.

### 7.1. Постигнути циљеви

- Објашњени су основни појмови који се тичу самовезујућих материјала и основне идеје заштите материјала од оштећења приликом њихове експлоатације.
- Поменуте су математичке основе MD методе као представника дискретних метода
- Извршена је детаљна математичка анализа DPD методе и приказ сила које се користе у моделу.
- Највише времена и рада уложено је у развој објектно-оријентисаних програмских пакета DPDOnline и FEMInhibition. Као узор за DPDOnline пакет коришћен је SPH07 софтвер који је развио Милош Ивановић у Центру за научна истраживања САНУ и Универзитета у Крагујевцу.
- Апликације DPDOnline и FEMInhibition су првенствено развијане на Microsoft WPF (*Windows Presentation Foundation*) платформи у програмском језику C# (*C sharp*) а затим су оба пакета прилагођена за Microsoft Silverlight. WPF платформа омогућава рад на Windows оперативним системима али софтвер који је креиран

на овој платформи је могуће креирати за рад на интернету и на локалном рачунару уз веома мале измене конфигурационих параметара. Microsoft Silverlight платформа је предвиђена за рад на интернету али је подржана од стране свих познатијих оперативних система и интернет претраживача.

- Поменути софтвери служе за креирање модела, визуелизацију резултата, приказ дијаграма, анимација кретања честица итд.
- Извршена је паралелизација класичне DPD методе што представља један од значајнијих успеха развоја DPD методе. Коришћена су два прилаза, модел прослеђивања порука између процеса и модел код кога сви процеси деле исти меморијски простор. Код првог је коришћен MPI стандард који може да ради на свим паралелним платформама, од персоналних рачунара са вишејезгарним процесорима, до супер-рачунара. Модел код кога сви процеси деле исти меморијски простор је урађен на почетку јер је пуно лакши за имплементацију али је такође и ограничен бројем језгара на једном рачунару.
- Поређена су решења добијена DPD и MD методом где се резултати поклапају са задовољавајућом тачношћу.
- Два основна примера која су овде представљена, *Poiseuille* струјање и струјање флуида између два коаксијална цилиндра, искоришћена су за поређење DPD методе и аналитичких решења поменутих примера. Добијена решења су врло слична и може се закључити да се DPD метода може успешно користити за моделирање примера на мезо – скали.
- Креиран је FEM модел за предвиђање ширења корозије око механичког оштећења као и концентрација инхибитора дуж самог канала тј. оштећења.
- Извршена је процена ризика заштите материјала, коришћењем мапе ризика, где су у обзир узимане геометријске промене модела, промене концентрације наноконтејнера као и промене процента испуњености наноконтејнера инхибиторима.
- Резултати добијени креирањем мапе ризика се у великој мери поклапају са експерименталним резултатима.



## 7.2. Смернице за даљи рад

Дисертација је у највећој мери испунила очекивања која су се у, току рада на њој, константно ширила али, као и свуда, има места за даља унапређења и побољшања.

Побољшања која се тичу самог апарата за моделирање је могуће извршити на пример у делу који се тиче претраге суседних честица, које је овде извршено методом најближих суседа, тако што би се имплементирао неки други метод као што је метод претраге помоћу стабла и слично. Такође је могуће направити помак који се тиче и паралелизације а то је коришћење све популарнијих GPGPU (*General-Purpose computing on Graphics Processing Units*) графичких мулти-процесора. Управо честичне методе су идеалне за имплементацију на овим процесорима због понављања операција које се рачунају за сваку честицу (налажење суседа, рачунање силе, рачунање брзина и померања итд.) а и сам приступ паралелизацији је једноставнији јер се ради о моделу са дељеном меморијом која се у овом случају налази на самој графичкој картици.

Нека од побољшања која је могуће урадити се могу кретати у правцу креирања 3D модела што представља далеко једноставнији изазов од горе поменуте паралелизације.

Како се у развијеним моделима, почетна геометрија, почетни пречници DPD честица и слично, иницијализују самим извршним кодом, било би више него згодно у досадашњем улазном фајлу додати и поменуте иницијалне вредности ради лакшег креирања примера и коришћења истог извршног кода за различите моделе наравно уз постављање одговарајућих граничних услова, почетних сила итд.

Смернице за побољшање DPDOnline и FEMInhibition софтвера би могле да иду у смеру читавања резултата који су записани бинарно, наравно такву промену је потребно претходно извршити у самом DPD коду. Оваквом променом би се знатно уштедео заузети простор у радној меморији рачунара јер резултати прорачуна умеју бити јако велики што може довести до нежељених последица у колико се превиди могућност самог хардвера, а и само читавање резултата би се обавило много брже.



---

**Литература**

- [1] "MUST (Multi - level protection of materials for vehicles by "smart" nanocontainers); FP7 - NMP3-LA-2008-214261 financed by European Commission; Project coordinator: Theo Hack, senior expert EADS," 2008 - 2012.
- [2] M. L. Zheludkevich, M. Salvado, and M. G. S. Ferreira, "Sol-gel coatings for corrosion protection of metals," *J. Mater. Chem.*, vol. 15, pp. 5099-5111, 2005.
- [3] M. L. Zheludkevich, D. G. Shchukin, K. A. Yasakau, K. Mohwald, and M. G. S. Ferreira, "Anticorrosion Coatings with Self-Healing Effect Based on Nanocontainers Impregnated with Corrosion Inhibitor," *Chem. Mater.*, vol. 19, pp. 402-411, 2007.
- [4] A. Jovanovic, D. Balos, S. Jovanovic, N. Filipovic, D. Petrovic, and N. Masooleh, "Use of modern risk appraisal and modeling tools in nanotechnology applications," in *1st iNTeg-Risk Conference: Dealing with Risks of Tomorrow's Technologies*, Stuttgart, 2009.
- [5] M. F. Montemor, D. V. Snihirova, M. G. Taryba, S. V. Lamaka, I. A. Kartsonakis, A. C. Balaskas, G. C. Kordas, J. Tedim, A. Kuznetsova, M. L. Zheludkevich, and M. G. S. Ferreira, "Evaluation of self-healing ability in protective coatings modified with combinations of layered double hydroxides and cerium molybdate nanocontainers filled with corrosion inhibitors," *Electrochimica Acta*, vol. 60, pp. 31-40, 2012.
- [6] M. L. Zheludkevich, S. K. Poznyak, L. M. Rodrigues, D. Raps, T. Hack, L. F. Dick, T. Nunes, and M. G. S. Ferreira, "Active protection coatings with layered double hydroxide nanocontainers of corrosion inhibitor," *Corrosion Science*, vol. 52, no. 2, pp. 602-611, 2010.
- [7] ISO-International Organization for Standardization, Corrosion tests in artificial atmospheres - Salt spray tests, 2006, ISO 9227.
- [8] A. Salak, J. Tedim, A. Kuznetsova, M. L. Zheludkevich, and M. Ferreira, "Anion exchange in Zn-Al layered double hydroxides: In situ X-ray diffraction study," *Chemical Physics Letters*, vol. 495, no. 1-3, pp. 73-76, 2010.
- [9] M. Taryba, S. V. Lamaka, D. Snihirova, M. G. S. Ferreira, M. F. Montemor, W. K. Wijting, S. Toews, and G. Grundmeier, "The combined use of scanning vibrating electrode technique and micro-potentiometry to assess the self-repair processes in defects on "smart" coatings applied to galvanized steel," *Electrochimica Acta*, vol. 56, no. 12, pp. 4475-4488, 2011.
- [10] B. J. Alder and T. E. Wainwright, "Studies in Molecular Dynamics. I. General Method," *J. Chem. Phys.*, vol. 31, no. 2, p. 459, 1959.
- [11] A. Rahman, "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon," *Phys Rev*, vol. 136, no. 2A, pp. A405-A411, 1964.
- [12] D. Rapaport, *The art of Molecular Dynamics*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 2004.
- [13] P. Espanol, "Hydrodynamics from dissipative particle dynamics," *Physical Review E*, vol. 52, no. 2, pp. 1734-1742, 1995.
- [14] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, "Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics," *Europhysics Letters*, vol. 19, no. 3, pp. 155-160, 1992.
- [15] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau, "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation," *Physical Review Letters*, vol. 56, no. 14, pp. 1505-1508, 1986.

- [16] D. Raabe, "Overview of the lattice Boltzmann method for nano- and microscale fluid dynamics in materials science and engineering," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 12, no. 6, pp. 13-46, 2004.
- [17] J. M. V. A. Koelman and P. J. Hoogerbrugge, "Dynamic simulations of hard-sphere suspensions under steady shear," *Europhysics Letters*, vol. 21, no. 3, pp. 363-368, 1993.
- [18] W. G. Madden, Y. Kong, C. M. Manke, and A. G. Schlijper, "Simulation of a confined polymer in solution using the dissipative particle method," *Int. J. Thermophys.*, vol. 15, p. 1093, 1994.
- [19] A. G. Schlijper, P. J. Hoogerbrugge, and C. W. Manke, "Computer simulations of dilute polymer solutions with the dissipative particle dynamics method," *J. Rheol.*, vol. 39, no. 3, pp. 567-579, 1995.
- [20] P. Espanol and P. Warren, "Statistical Mechanics of Dissipative Particle Dynamics," *Europhys. Lett.*, vol. 30, no. 4, pp. 191-196, 1995.
- [21] R. D. Groot and P. B. Warren, "Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation," *J. Chem. Phys.*, vol. 107, no. 11, pp. 4423-4435, 1997.
- [22] I. Lee, K. Lee, and C. Torpelund-Bruin, "Raster voronoi tessellation and its application to emergency modeling," *Geo-spatial Information Science*, vol. 14, no. 4, pp. 235-245, 2011.
- [23] K. Boryczko, W. Dzwiniel, and D. Yuen, "Dynamical clustering of red blood cells in capillary vessels," *J. Mol. Model.*, vol. 9, pp. 16-33, 2003.
- [24] N. Filipovic, M. Kojic, and A. Tsuda, "Modeling thrombosis using dissipative particle dynamics method," vol. 366, pp. 3265-3279, 2008.
- [25] A. Jovanovic and N. Filipovic, "Innovative modelling methods in damage assessment: application of dissipative particle dynamics to simulation of damage and self-healing of polymer coated surfaces," *J. Theoretical and Applied Mechanics*, vol. 44, pp. 637-648, 2006.
- [26] Adam MacDonald and David Pink, *Fundamentals of Dissipative Particle Dynamics*. Antigonish, Canada/Nova Scotia: St. Francis Xavier University, 2008.
- [27] J. C. Shillcock and R. Lipowsky, "Equilibrium structure and lateral stress distribution of amphiphilic bilayers from dissipative particle dynamics simulations," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 117, no. 10, pp. 5048-5062, 2002.
- [28] L. Gao, J. Shillcock, and R. Lipowsky, "Improved dissipative particle dynamics simulations of lipid bilayers," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 126, no. 1, pp. 015101-015109, 2007.
- [29] E. A.J. F. Peters, "Elimination of time step effects in DPD," *Europhysics Letters*, vol. 66, no. 3, pp. 311-317, 2004.
- [30] M. Kojic, N. Filipovic, B. Stojanovic, and N. Kojic, *Computer Modeling in Bioengineering: Theoretical Background, Examples and Software*. West Sussex, England: John Wiley & Sons, 2008.
- [31] N. Filipovic, S. Haber, M. Kojic, and A. Tsuda, "Dissipative Particle Dynamics Simulation of Flow Generated by Two Rotating Concentric Cylinders. Part II: Lateral Dissipative and Random Forces," *J. Phys. D, Appl. Phys.*, vol. 41, no. 3, p. 035504, 2008.
- [32] M. Ivanovic, *Glatka cesticna hidrodinamika-paralelizacija algoritama i primena u*

- dinamici fluida*. Kragujevac, Srbija: doktorska disertacija, 2010.
- [33] S. Haber, N. Filipovic, M. Kojic, and A. Tsuda, "Dissipative particle dynamics simulation of flow generated by two rotating concentric cylinders: Boundary conditions," *Physical Review E*, vol. 74, no. 4, pp. 046701-046709, 2006.
- [34] N. Filipovic, M. Kojic, and M. Ferrari, "Dissipative Particle Dynamics Simulation of Circular and Elliptical Particles Motion in 2D Laminar Shear Flow," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 10, no. 5, pp. 1127-1134, 2010.
- [35] B. Fornberg, "A numerical study of steady viscous flow past a circular cylinder," *J. Fluid Mech.*, vol. 98, pp. 819-855, 1980.
- [36] A. T. Chwang and T. Y. Wu, "Hydromechanics of low – Reynolds – number flow. Part 4. Translation of spheroids," *J. Fluid Mech.*, vol. 75, no. 4, pp. 677-689, 1976.
- [37] N. Filipovic, *Osnovi bioinzenjeringa*. Kragujevac, Srbija: Fakultet inzenjerskih nauka, 2012.
- [38] G. B. Jeffery, "The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid," *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 102, pp. 161-180, 1922.
- [39] M. J. Flynn, "Very high-speed computing systems," *Proceedings of the IEEE*, vol. 54, no. 12, pp. 1901-1909, 1966.
- [40] R. Chandra, L. Dagum, D. Kohr, D. Maydan, J. McDonald, and R. Menon, *Parallel Programming in OpenMP*. San Francisco, California, USA: Academic Press, 2001.
- [41] D. Rapaport and E. Clementi, "Eddy Formation in Obstructed Fluid Flow: A Molecular-Dynamics Study," *Physical Review Letters*, vol. 57, no. 6, pp. 695-698, 1986.
- [42] M. Mareschal, M. Malek Mansour, A. Puhl, and E. Kestemont, "Molecular Dynamics versus Hydrodynamics in a Two-Dimensional Rayleigh-Benard System," *Physical Review Letters*, vol. 61, no. 22, pp. 2550-2553, 1988.
- [43] D. Rapaport, "Molecular-Dynamics Study of Rayleigh-Benard Convection," *Physical Review Letters*, vol. 60, no. 24, pp. 2480-2483, 1988.
- [44] N. Filipovic, A. Jovanovic, D. Petrovic, M. Obradovic, S. Jovanovic, D. Balos, and M. Kojic, "Modelling of self-healing materials using discrete and continuum methods," *Surface Coatings International*, vol. 95, no. 2, pp. 74-79, 2012.
- [45] D. Krsmanovic, N. Filipovic, I. Koncar, L. Davidovic, D. Petrovic, and D. Milasinovic, "Computer Modeling of Maximal Displacement Forces in Endoluminal Thoracic Aortic Stent-Graft," *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, DOI 10.1080/10255842.2012.735661.