



## Трехмерное моделирование медленных течений вокруг недеформируемых структур с использованием FMM/GPU ускоренного МГЭ

### Абрамова Ольга Александровна \*,

Питюк Ю. А.<sup>\*</sup>, Гумеров Н. А.<sup>\*,\*\*</sup>, Ахатов И.Ш.<sup>\*,\*\*\*</sup>

\* Центр Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем, Башкирский Государственный Университет, Уфа

\*\* Institute for Advanced Computer Studies, University of Maryland, USA

\*\*\* Центр Сколтеха по проектированию, производственным технологиям и материалам, Москва

Москва, 2018

#### Мотивация

- Композиционные материалы играют важнейшую роль в авиастроении, ветряной энергетике, автомобилестроении, ракетно-космической технике для решения задач облегчения конструкций при сохранении прочностных характеристик.
- Исследование стоксовых течений имеет большое значение для микрогидродинамики при создании лабораторий-на-чипе, систем диагностики in vitro в микробикологии, при регулировании микропотоков
- большого объема Моделирование динамики дисперсной сложной В среды геометрии необходимо более ДЛЯ точного описания особенностей картины течения и микроструктуры дисперсной среды при различных параметрах.



#### Постановка задачи и математическая модель

**Цель:** разработка и реализация эффективного численного инструмента на основе метода граничных элементов и быстрого метода мультиполей для изучения особенностей трехмерных течений Стокса вокруг недеформируемых неподвижных структур



#### Граничные условия

на границе раздела жидкостей

на боковой поверхности недеформируемых структур

#### Кинематическое условие

Рассматривается течение вязкой жидкости и динамика деформируемых капель одной вязкой жидкости в объеме другой вязкой жидкости при малых числах Рейнольдса в неограниченной области

Движение жидкостей описывается уравнениями Стокса

$$-\nabla p_i + \mu_i \nabla^2 \mathbf{u}_i = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u}_i = 0, \quad i = 1, 2$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2, \quad \mathbf{f} = \mathbf{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n} - \mathbf{\sigma}_2 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2 = f\mathbf{n},$$
  
$$f = 2\gamma k(\mathbf{x}) + (\rho_1 - \rho_2)(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in S_d$$

 $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \qquad \mathbf{x} \in S_s$  $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ 

Применение метода граничных элементов<sup>1</sup> позволяет уменьшить размерность рассматриваемой задачи на единицу, поскольку все расчеты связаны только с границей.

<sup>1</sup> *Pozrikidis C.* Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow, 1992

#### Метод граничных элементов Гранично-интегральная формулировка

Граничные интегральные уравнения для жидкости, занимающей объем *V*, ограниченный поверхностью *S*, могут быть записаны в следующем виде<sup>\*</sup>

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{y} \in V, \qquad \begin{array}{c} \text{Stokeslet} & \text{Stresslet} \\ (\text{CTOKCLET}) & \downarrow \\ \mathbf{y} = \frac{1}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{y} \in S, \\ - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{y} \notin S, V, \qquad \begin{array}{c} \text{Stokeslet} & \text{Stresslet} \\ (\text{CTOKCLET}) & \downarrow \\ \mathbf{y} = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{rr}}{r^3} \right), \qquad \mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = -\frac{3}{4\pi} \frac{\mathbf{rr}}{r^5}, \\ - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{y} \notin S, V, \qquad \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{x}, \quad r = |\mathbf{r}|, \end{array}$$

Задача о течении смеси двух вязких жидкостей в неограниченной области вокруг неподвижных недеформируемых структур

$$\begin{array}{c} \mathbf{y} \in \mathbf{V}_1, \quad \mathbf{u}(\mathbf{y}) - 2\mathbf{u}_{\infty}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in \mathbf{V}_2, \quad \lambda \mathbf{u}(\mathbf{y}) \end{array} \right) \qquad 1 \quad \left( \begin{array}{c} \mathbf{y} \in S_d \\ \mathbf{y} \in S_d \end{array} \right)$$

$$\mathbf{y} \in \mathbf{S}, \frac{1+\lambda \cdot \beta(\mathbf{y})}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}_{\infty}(\mathbf{y}) \bigg\} = -\frac{1}{\mu_1} \int_{S_s} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \, dS_s(\mathbf{x}) + \mathbf{S} = S_s \cup S_d$$

$$\lambda = \mu_0/\mu_1$$

$$+ \int_{S_d} \left\{ -\frac{1}{\mu_1} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) - (1 - \lambda) \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \right\} dS_d(\mathbf{x}) \qquad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) - \mathbf{f}_2(\mathbf{x})$$



-1 -1

0 x

-0.5

Задача об обтекании неподвижных структур вязкой жидкостью

$$\mathbf{y} \in \mathbf{V}_{1}, \quad \mathbf{u}(\mathbf{y}) - 2\mathbf{u}_{\infty}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in S_{s}, \frac{1}{2}\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}_{\infty}(\mathbf{y})$$
 =  $-\frac{1}{\mu_{1}} \int_{S_{s}} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}_{1}(\mathbf{x}) \ dS_{s}(\mathbf{x})$ 

Вычисление сингулярных частей поверхностных интегралов производится на основе известных интегральных тождеств для течений Стокса и метода линейных тестовых решений.

Трехмерное моделирование течений вязкой жидкости и жидкости с большим количеством дисперсных включений в областях со сложной геометрией невозможно с применением стандартного МГЭ подхода и требует использования высокопроизводительных вычислений и современных эффективных алгоритмов

• Замена прямого метода решения СЛАУ итерационным (GMRES)

если N – количество неизвестных СЛАУ, то сложность матрично-векторного произведения (МВП)  $O(N^2)$ ,  $O(N^3) \rightarrow O(N_{iter}N^2)$ ,  $N_{iter} \ll N$ 

- ♦ Использование в GMRES модуля МВП без хранения матрицы, реализованного на GPU Необходимая память  $O(N^2) \rightarrow O(N)$  необходимое количество операций  $O(N^2)$ 
  - Ускорение матрично-векторного произведения (МВП) в GMRES, используя гетерогенный быстрый метод мультиполей (FMM)

 $O(N^2) \rightarrow O(NlogN) \sim O(N)$ 

 Применение гетерогенного иерархического FMM в предобуславливателе flexible версии GMRES

 $N_{iter} \rightarrow min$ 

Все это позволяет значительно снизить вычислительную сложность всего алгоритма

 $\mathcal{O}(N^3) \to \mathcal{O}(N_{iter}N) {\sim} \mathcal{O}(N)$ 

#### Тестирование модуля МВП на GPU

$$G_{mn}{}^{ij} = S_n G(x_m - x_n) = \frac{1}{8\pi} S_n \left( \frac{\delta_{ij}}{|x_m - x_n|} - \frac{(x_m{}^i - x_n{}^i)(x_m{}^j - x_n{}^j)}{|x_m - x_n|^3} \right)$$

 $n, m = \overline{1, N},$  i, j = 1, 2, 3,Размер матрицы= $3N \times 3N$ 

$$K_{mn}^{ij} = S_n \mathbf{K} (\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n) = -\frac{3}{4\pi} S_n \frac{(\mathbf{x}_m^{i} - \mathbf{x}_n^{i})(\mathbf{x}_m^{j} - \mathbf{x}_n^{j})}{|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n|^3} \sum_{k=1}^3 (\mathbf{x}_m^{k} - \mathbf{x}_n^{k}) n_n^{k}$$



# Сравнение времени вычисления МВП для NVIDIA Tesla K20

М	Matlab	GPU	Ускорение
1024	0.2195	0.082	26.8
2048	0.7748	0.0103	75.2
4096	4.7752	0.0147	324.8
8192	133	0.0236	5635

Возможность решения задач для уравнений Стокса размером до 300000 расчетных узлов на одной рабочей станции

1: 2x Intel Xeon X5660, NVIDIA Tesla C2050 2: 2x Intel Xeon X5660, NVIDIA Tesla K20

## Быстрый Метод Мультиполей (FMM)



Традиционный МГЭ подход  $O(N^2)$ 

FMM МГЭ подход O(N)

Применяется FMM, предложенный в работах<sup>\*\*</sup>, где суммирование фундаментальных решений уравнений Стокса сводится к суммированию фундаментальных решений трехмерного уравнения Лапласа

\*\* *Tornberg A.K., Greengard L.* A fast multipole method for the three-dimensional Stokes equations. 2008 \*\* *Wang H<sup>-</sup> et al* A parallel fast multipole accelerated integral equation scheme for 3D Stokes equations. 2007 \**Gumerov N.A., Duraiswami R.* Fast multipole method for the Helmholtz equation in three dimensions. 2005

### Тестирование гетерогенного FMM для уравнений Стокса



M=15342 капель  $N\sim170$  Размер задачи  $\sim2.5\cdot10^6$  Размер матрицы  $\sim7.5\cdot10^6$ 

За один временной шаг ~ 11 вызовов FMM Вычисление геометрических характеристик: кривизна, нормали, площади

 $\lambda = 1.5, \ 0.25 \le Ca \le 0.5 \ \alpha = 8.8 \cdot 10^{-3} p = 8$ 

Время выполнения одного МВП для ядра **G** в зависимости от размера матрицы



СРU+GPU FMM ~5.1 с MBП GPU ~ 239 с Ускорение ~ 46.8 MBП CPU ~ 2379.3 с Ускорение ~ 466 Формирование

N = 1.048576

иерархической структуры данных на CPU ~1.39 s

Один вызов FMM ~7 с Один шаг по времени ~ 4 мин 100 шагов по времени ~7 ч



Сложность алгоритма O(N)

**CPU** 2x Intel Xeon X5660 **GPU** NVIDIA Tesla K20 8

#### Результаты моделирования



![](_page_8_Figure_2.jpeg)

9

 $N_{\Delta filaments} = 13720$ 

CM I 2 3 4

Общее количество расчетных узлов N=428360 у = 0

![](_page_8_Figure_5.jpeg)

Экспериментальный канал

$$R = 7 \cdot 10^{-4}$$
$$r = 10^{-4}$$
M

![](_page_8_Figure_8.jpeg)

#### Результаты моделирования

![](_page_9_Figure_1.jpeg)

![](_page_9_Figure_2.jpeg)

 $N_{\Delta filaments} = 13720$  Общее количество расчетных узлов N=428360

 Re= 0.45 Результаты представлены в плоскости y = 0 

#### Результаты моделирования

![](_page_10_Figure_1.jpeg)

11

#### Сопоставление с экспериментом

![](_page_11_Picture_1.jpeg)

![](_page_11_Picture_2.jpeg)

 $N_{\Delta filaments} = 1544$  Общее количество расчетных узлов N=2471392 Re= 0.1 n= 666

![](_page_11_Picture_4.jpeg)

![](_page_11_Picture_5.jpeg)

![](_page_11_Picture_6.jpeg)

![](_page_11_Picture_7.jpeg)

![](_page_11_Picture_8.jpeg)

![](_page_11_Picture_9.jpeg)

# Течение вязкой жидкости в канале переменного кругового сечения

отношение глубины расширения к

h

![](_page_12_Figure_1.jpeg)

Taneda S., Visualization of separating Stokes flow. 1979

![](_page_12_Figure_3.jpeg)

13

Режимы течения в пространстве параметров W-K

![](_page_12_Figure_5.jpeg)

# Применение подхода для моделирования течения эмульсий в различных областях

![](_page_13_Figure_1.jpeg)

14

- Сформулирована гранично интегральная формулировка для случая обтекания неподвижных недеформируемых структур. Предложен и протестирован оригинальный алгоритм для решения краевых задач для уравнений Стокса высокой вычислительной сложности. Алгоритм основан на методе граничных элементов, ускоренным как за счет быстрого метода мультиполей, так и за счет использования многоядерных СРU и GPU.
- Продемонстрирована возможность применения реализованного подхода для моделирования трехмерной динамики деформируемых дисперсных включений в объеме вязкой жидкости при обтекании неподвижных недеформируемых структур.
- Проведены численные эксперименты по изучению полей скоростей при обтекании вязкой жидкостью отдельных волокон, а также рассмотрены структуры с двойной пористостью. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными в лабораториях Центра Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем.

# Спасибо за внимание

#### Демонстрационные расчеты

![](_page_16_Figure_1.jpeg)

 $Ca = \mu_1 a G / \gamma \quad N_{\Delta filaments} = 13896 \quad \tilde{t} = \gamma t_{dim} / (\mu_1 a)$ 

## 17

## Верификация результатов

![](_page_17_Figure_1.jpeg)

Сравнение с аналитическим решением для обтекания неподвижной твердой сферы

18

Относительная погрешность f на границе ~1.8 %, *N*=642

 $U_x$ ,  $U_z \sim 0.08$ -0.1%

![](_page_17_Figure_5.jpeg)

## Динамика двух деформируемых капель в сдвиговом потоке

![](_page_18_Figure_1.jpeg)

![](_page_18_Figure_2.jpeg)

![](_page_18_Figure_3.jpeg)

![](_page_18_Figure_4.jpeg)

![](_page_18_Figure_5.jpeg)

 $\tilde{t} = 3$ 

$$\lambda = 1$$
  $Ca = 0.05$ 

 $a = a_1 = a_2$ 

Количество вершин на поверхности каждой капли

19

N = 163842

Количество треугольных элементов на поверхности каждой капли

 $N_{\Delta} = 327\ 680$ 

Начальное относительное расположение центров капель

> $\Delta x = 2.4a, \Delta y = 0,$  $\Delta z = 0.7a$

#### Динамика 512 деформируемых капель в сдвиговом потоке

![](_page_19_Picture_1.jpeg)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \mathbf{w}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in S ,$$

Численная поправка на тангенциальную составляющую скорости<sup>\*</sup>  $\mathbf{w}^{i} = \frac{N_{\Delta}^{\frac{3}{2}}}{300(1+\lambda)} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{i}\mathbf{n}_{i}) \sum_{j=1}^{N} \left(1 + |2k_{j}|^{\frac{3}{2}}\right) \Delta S_{j} \left(\mathbf{x}^{j} - \mathbf{x}^{i}\right)$ 

\*Loewenberg M., Hinch E. J. Numerical simulation of a concentrated emulsion in shear flow. 1996.

Условие численной устойчивости\*

 $\Delta \tilde{t} \le K \mu_1 \Delta x_{min} / \gamma$ 

 $K \sim 0.1 - 0.2$ ,  $\Delta x_{min}$  – минимальное расстояние между узлами сетки

\**Zinchenko A.Z., Davis R.H.,* An efficient algorithm for hydrodynamical interaction of many deformable drops. 2000

 $\lambda = 2,$   $0.8 \le Ca \le 1.6,$ N = 642,  $\alpha = 1.5 \cdot 10^{-2}$ 

## Обзор состояния проблемы

#### Метод граничных элементов (МГЭ) для уравнений Стокса

- МГЭ формулировка Rallison J.M., Acrivos A., 1978; Pozrikidis C., 1992
- Моделирование деформируемых капель Zinchenko A.Z. и др., 2003

Быстрый метод мультиполей (FMM) для уравнений Стокса Wang H. И др., 2007; Sangani A. И др., 1996

![](_page_20_Figure_5.jpeg)

• недеформируемые границы

• без GPUs

#### Численное моделирование капельных течений в различных областях

Coulliette C., Pozrikidis C., 1998; Roca J.F., Carvalho M.S., 2013; Tsai T.M., Miksis M.J., 1994; Zinchenko A.Z., Davis R.H., 2009

- симметричные области
- ограничен размер задачи

## Настоящая работа

- МГЭ для деформируемых капель
- FMM
- ✤ GPU
- ✤ fGMRES + FMM

Моделирование динамики десятков тысяч деформируемых капель и капельных течений в каналах произвольной формы

## Тестирование гетерогенного FMM для уравнений Стокса

Применяется FMM, предложенный в работах<sup>\*</sup>, где суммирование фундаментальных решений уравнений Стокса сводится к суммированию фундаментальных решений трехмерного уравнения Лапласа

![](_page_21_Figure_2.jpeg)

Время выполнения одного МВП для ядра **G** в зависимости от размера матрицы

Точность МВП для ядра **G** в зависимости от размера матрицы

10<sup>6</sup>

CPU 2x Intel Xeon X5660, 2.8GHz, 12 cores, 12 GB RAMGPU NVIDIA Tesla K20, 448 cores, 5GB, 1.03 Tflops single, 0.515 Tflops double

\**Tornberg A.K., Greengard L.* A fast multipole method for the three-dimensional Stokes equations. 2008 \* *Wang H et al* A parallel fast multipole accelerated integral equation scheme for 3D Stokes equations. 2007

![](_page_22_Picture_0.jpeg)

![](_page_22_Picture_1.jpeg)

From the finest to the coarsest level

Get S-expansion for all nonempty boxes

S-expansion means singular, or multipole, or far field expansion

1. S-exp for Max Level

![](_page_22_Figure_6.jpeg)

2. S-exp for other levels S|S-translations

![](_page_22_Figure_8.jpeg)

![](_page_23_Picture_0.jpeg)

![](_page_23_Picture_1.jpeg)

From the coarsest to the finest level

Get R-expansion for all nonempty boxes

R-expansion means regular, or local, or near field expansion

1. R-exp from S-exp's of the boxes in the neighborhood S|R-translations

![](_page_23_Figure_6.jpeg)

2. R-exp from parent R|R-translations

![](_page_23_Figure_8.jpeg)

![](_page_24_Picture_0.jpeg)

![](_page_24_Picture_1.jpeg)

Evaluate R-expansion for boxes at Max Level Direct summation of sources contribution in the neighborhood of receivers

1. Evaluate R-expansion

![](_page_24_Figure_4.jpeg)

2. Direct summation

![](_page_24_Figure_6.jpeg)

## **FMM** алгоритм

![](_page_25_Picture_1.jpeg)

## Блок-схема гетерогенного алгоритма FMM

![](_page_25_Figure_3.jpeg)

## **FMM алгоритм**

![](_page_26_Picture_1.jpeg)

## Блок-схема гетерогенного алгоритма FMM

![](_page_26_Figure_3.jpeg)

**FMM** 

![](_page_27_Picture_1.jpeg)

a) (5)

![](_page_27_Figure_3.jpeg)

![](_page_27_Figure_4.jpeg)

![](_page_27_Figure_5.jpeg)

![](_page_27_Figure_6.jpeg)

![](_page_27_Figure_7.jpeg)

## **FMM для уравнений Стокса**

Stokeslet factorization

$$\mathbf{v} = \mathbf{f}\frac{1}{r} + (\mathbf{f} \cdot \mathbf{r})\frac{\mathbf{r}}{r^3} = \sum_{k=1}^3 \left[\mathbf{i}_k \frac{f_k}{r} - y_k \nabla_y \frac{f_k}{r}\right] + \nabla_y \frac{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{x})}{r}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{x}_k$$

Stresslet factorization

$$\mathbf{v} = -3\frac{\mathbf{r}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{r})(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})}{r^5} = \sum_{k=1}^3 \left[ -\mathbf{i}_k \frac{(\mathbf{d}_k \cdot \mathbf{r})}{r^3} + y_k \nabla_y \frac{(\mathbf{d}_k \cdot \mathbf{r})}{r^3} \right] - \nabla_y \frac{(\mathbf{c}\cdot\mathbf{r})}{r^3}$$

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{2}(\mathbf{n}u_k + \mathbf{u}n_k), \qquad \mathbf{c} = \frac{1}{2}[\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{x})], \qquad \mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{x},$$

#### Stokeslet+stresslet factorization

(total 4 FMMs for the Laplace equation for one summation)

$$\mathbf{v} = \sum_{k=1}^{3} \left( \mathbf{i}_{k} \Phi_{k} - y_{k} \nabla_{y} \Phi_{k} \right) + \nabla_{y} \Phi_{0},$$
$$\Phi_{0} = \frac{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{x})}{r} - \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{r})}{r^{3}}, \ \Phi_{k} = \frac{f_{k}}{r} - \frac{(\mathbf{d}_{k} \cdot \mathbf{r})}{r^{3}}, \ k = 1,2,3$$

\*Wang et al. 2007, Tornberg & Greengard, 2008

# **FMM** алгоритм

![](_page_29_Picture_1.jpeg)

Сравнение времени выполнения МВП прямым методом счета на CPU и на GPU и МВП с применением FMM (CPU/GPU) для стокслетов и стресслетов, p=8.

N	Оптималь	Архитектура	Стокслеты		Стресслеты	
	ный l <sub>max</sub>		Время вычисления, с	Ускорение	Время вычисления, с	Ускорение
4 096	2	CPU	0.14	1	0.08	1
		GPU	0.007	20	0.006	13.3
		FMM CPU/GPU	0.04	3.5	0.035	2.3
32 768	3	CPU	2.486	1	2.18	1
		GPU	0.24	10.4	0.23	9.5
		FMM CPU/GPU	0.11	22.6	0.11	19.8
262144	4	CPU	147.78	1	135.7	1
		GPU	14.5	10.19	14.1	9.6
		FMM CPU/GPU	0.8	185	0.87	156
1 048 576	5	CPU	2379.3	1	2222	1
		GPU	239	9.96	225	9.87
		FMM CPU/GPU	5.1	466	5.3	419.2

Разработанный итеративный решатель flexible GMRES\* основывается на использовании FMM пониженной точности в предобуславливателе и позволяет значительно сократить количество итераций

![](_page_30_Figure_2.jpeg)

Расчеты представлены для течения вязкой жидкости в цилиндрическом канале

Размер матрицы 5196 x 5196 FMM\_p\_in=4, FMM\_p\_out=8

Двойное использование гетерогенного FMM как для ускорения матричновекторного произведения, так и для ускорения сходимости итерационного решателя, позволяет моделировать трехмерные течения в каналах произвольных форм.

\*Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear System. 2003

## Алгоритм flexible GMRES

![](_page_31_Figure_1.jpeg)

12. Вычислить 
$$\mathbf{y}_m$$
 минимизацию  $\|\beta \mathbf{e}_1 - \mathbf{H}_m \mathbf{y}\|_2$  и  $\mathbf{x}_0 := \mathbf{x}_0 + \mathbf{V}_m \mathbf{y}_m$ 

13. Вычислить  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \beta := \|\mathbf{r}_0\|_2$ . Продолжать пока  $\beta > \varepsilon_{GMRES}$ .

![](_page_31_Figure_4.jpeg)

![](_page_31_Figure_5.jpeg)

![](_page_31_Figure_6.jpeg)

## Расчет реологических параметров

Тензор напряжений  $\sigma$  для разбавленной эмульсии в сдвиговом потоке  $u_{\infty} = (Gy, 0, 0)$  в декартовой системе координат определяется как<sup>1,\*</sup>

Вклад непрерывной 
$$\sigma_{ij} = -\delta_{ij}p + 2\mu_1 e_{ij} + \alpha \Sigma_{ij}$$
   
фазы  $\Sigma_{ij} = \frac{1}{V_2} \int_{S} \left[ f_i x_j - \mu_1 (1 - \lambda) (u_i n_j + u_j n_i) \right] dS$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ .

Зависимость реологических функций от Са для одной капли в сдвиговом потоке

![](_page_32_Figure_4.jpeg)

<sup>1</sup> Batchelor G. K. The stress system in a suspension of force-free particles. 1970/

\*Kennedy M.R, et al Motion and deformation of liquid drops and the rheology of dilute emulsions in simple shear flow. 1994

## Расчет реологических параметров

![](_page_33_Figure_1.jpeg)

\* Ward S.G., Whitmore R.L. Studies of the viscosity and sedimentation of suspensions Part 1. The viscosity of suspension of spherical particles 1950

#### Сравнение значений относительной вязкости для упорядоченной монодисперсной системы

$\lambda = 1$	Sangani $\mu_{relative} = 1.30$	$\lambda = 6.4$	Pozrikidis $\mu_{rolating} = 1.03$
Ca = 0.01	$\lambda = 0.08,  Ca = 0.4$	Ca = 0.05	<b>Pacyeta</b> $\mu_{1}$ $\mu_{2}$ $\mu_{3}$ $\mu_{4}$ = 1.03
$\alpha = 17.96\%$	Расчеты $\mu_{relative} = 1.29$	$\alpha = 0.153\%$	ruciciti prelative – 1.05

<sup>1</sup> Sangani A.S., Lu W. Effective viscosity of an ordered suspension of small drops, 1987

<sup>2</sup> Pozrikidis C. On the transient motion of ordered suspensions of liquid drops, 1993

## Динамика двух деформируемых капель в сдвиговом потоке и расчет реологических параметров

![](_page_34_Figure_1.jpeg)

Количество вершин на поверхности каждой капли

35

*N* = 163 842

Количество треугольных элементов на поверхности каждой капли

 $N_{\Delta} = 327\ 680$ 

Значения реологических функций для заданных параметров для одной капли в сдвиговом потоке

 $\Sigma_{12} = 0.0853$   $N_1 = 0.0169$  $N_2 = -0.0043$ 

 $\lambda = 1$  Ca = 0.05  $a = a_1 = a_2$ 

Начальное относительное расположение центров капель

$$\Delta x = 2.4a, \Delta y = 0, \Delta z = 0.7a$$

## Расчет реологических параметров для упорядоченной эмульсии

![](_page_35_Figure_1.jpeg)

![](_page_35_Figure_2.jpeg)

![](_page_35_Figure_3.jpeg)

36

= 6.4

= 2

= 1

0.5

 $\lambda = 0.08$ 

![](_page_35_Figure_4.jpeg)

\*Kennedy M.R, et al. Motion and deformation of liquid drops and the rheology of dilute emulsions in simple shear flow. 1994

# Расчет относительной вязкости полидисперсной эмульсии

![](_page_36_Figure_1.jpeg)

<u>Графики относительной вязкости эмульсии, рассчитанные по различным формулам\*</u>  $\alpha \approx 10\%$ 

![](_page_36_Figure_3.jpeg)

\*Pal R. Viscous behavior of concentrated emulsions of two immiscible Newtonian fluids with interfacial tension. 2003

## Верификация результатов Периодическое течение капель эмульсии в цилиндрическом канале

Сравнение для течения жидкости в цилиндрическом канале с аналитическим решением для течения Пуазейля

Относительная погрешность f на границе ~1.9% внутри канала:  $V_r \sim 1.5\%$   $V_z \sim 1.1\%$ 

![](_page_37_Figure_3.jpeg)

Безразмерные параметры

# Сравнение с результатами экспериментов для капель в канале

![](_page_38_Figure_1.jpeg)

<sup>1</sup> Ho B.P., Leal L.G. The creeping motion of liquid drops through a circular tube of comparable diameter, 1975

\* *Hetsroni G., Habel S., Wacholder E.* The flow field in and around a droplet moving axially within a tube, 1970

1.57

1.6 %

2б

1.545

![](_page_38_Figure_4.jpeg)

Сравнение относительной скорости капли <u>*Udr</u></u> в потоке</u>*  $U_{ch}$ Расчеты Погрешность Эксперимент 1a 1.43 1.46 2 % 1.3 % 16 1.44 1.46 2a 1.514 1.56 2.9 %

## Динамика деформируемых капель в канале переменного сечения

![](_page_39_Figure_1.jpeg)

160

# 41

## Динамика деформируемых капель в канале переменного сечения

![](_page_40_Figure_2.jpeg)

## Метод граничных элементов Гранично-интегральная формулировка

Применение метода граничных элементов (МГЭ)<sup>1</sup> позволяет уменьшить размерность рассматриваемой задачи на единицу, поскольку все расчеты связаны только с границей.

Граничные интегральные уравнения для жидкости, занимающей объем *V*, ограниченный поверхностью *S*, могут быть записаны в следующем виде<sup>\*</sup>

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in V,$$
  

$$\frac{1}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in S,$$
  

$$- \int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \notin S, V,$$
  

$$\mathbf{G}_{ij}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_{i}r_{j}}{r^{3}} \right), \quad \mathbf{T}_{ijk}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = -\frac{3}{4\pi} \frac{r_{i}r_{j}r_{k}}{r^{5}}, \quad r_{i} = y_{i} - x_{i}, \quad i, j, k = 1, 2, 3,$$
  

$$\mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$$
  
Stokeslet  
(стокслет) Stresslet  
(сторесслет)

<sup>1</sup> Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow, 1992

\**Rallison J.M., Acrivos A.* A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. 1978

# 43

# МГЭ для капель в неограниченной области

· · ( · · )

1 >

$$y \in V_{1}, \quad u(y) - u_{s}(y) \\ y \in V_{2}, \quad \lambda u(y) - u_{s}(y) \\ y \in S, \frac{1+\lambda}{2}u(y) - u_{s}(y) \\ \end{bmatrix} = \int_{S} \left\{ -\frac{1}{\mu} G(y, x) \cdot f(x) - (1 - \lambda) [T(y, x) \cdot n(x)] \cdot u(x) \right\} dS(x) \quad (1) \\ G(y, x) = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{I}{r} + \frac{rr}{r^{3}} \right), \quad T(y, x) = -\frac{3}{4\pi} \frac{rrr}{r^{5}}, \\ \mu = \mu_{1}, \quad \lambda = \mu_{2}/\mu_{1}, \quad r = y - x, \quad r = |r|, \\ \int_{S} G(y, x) \cdot n(x) f(x) dS(x) \approx \sum_{i=1}^{N} I_{i}^{(G)}(y) f(x_{i}) \\ \int_{S} [T(y, x) \cdot n(x)] \cdot u(x) dS(x) \approx \sum_{i=1}^{N} I_{i}^{(T)}(y) \cdot u(x_{i}) \\ \end{bmatrix} I_{i}^{(G)}(y) = \int_{S_{i}} G(y, x) \cdot n(x) dS(x), \\ \int_{S} [T(y, x) \cdot n(x)] \cdot u(x) dS(x) \approx \sum_{i=1}^{N} I_{i}^{(T)}(y) \cdot u(x_{i}) \\ \end{bmatrix} I_{i}^{(T)}(y) = \int_{S_{i}} T(y, x) \cdot n(x) dS(x) \\ \end{bmatrix}$$

 $AU = C, (C = U_{\infty} + Bf)$ 

## Оценка погрешности

![](_page_43_Picture_1.jpeg)

#### Оценка погрешности при расчете поля скоростей внутри и вне капли при обтекании ее внешним потоком

 $\mathbf{v_1}$  $\mathbf{v}_2$  $\mathbf{v}_3$ N = 162

 $max|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1|$ 

 $max|\mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_2|$ 

Размытость

N = 642 N = 2562

 $V_x$ 

0.0773

0.0227

0.29

Абсолютная погрешность

Относительная погрешность

$V_{z}$		$V_{x}$	$V_{z}$
0.0849	$max \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 /max \mathbf{v}_1 $	0.0988	0.1086
0.0112	$max \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_2 /max \mathbf{v}_2 $	0.0291	0.0144
0.13	Размытость	0.29	0.13

#### Оценка погрешности при расчете поля скоростей в внутри канала переменного кругового сечения

<b>v</b> <sub>1</sub>	$\mathbf{v}_2$	<b>v</b> <sub>3</sub>	
$N_{\rm A} = 21488$	$N_{\Lambda} = 34684$	$N_{\wedge} = 54968$	

Относительная погрешность

#### Абсолютная погрешность

	$V_{x}$	$V_{\mathcal{Y}}$	$V_{Z}$
$max \mathbf{v}_2-\mathbf{v}_1 $	$0.4963 \cdot 10^{-4}$	$0.167 \cdot 10^{-4}$	$0.411 \cdot 10^{-4}$
$max \mathbf{v}_3-\mathbf{v}_2 $	$0.3935 \cdot 10^{-4}$	$0.085 \cdot 10^{-4}$	$0.293 \cdot 10^{-4}$
Размытость	0.79	0.5	0.7

	$V_x$	$V_{\mathcal{Y}}$	$V_{z}$
$\frac{max \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 }{max \mathbf{v}_1 }$	0.0086	0.003	0.0072
$\frac{max \mathbf{v}_3-\mathbf{v}_2 }{max \mathbf{v}_2 }$	0.007	0.0015	0.0051
Размытость	0.81	0.5	0.7