



# INMOST: конечно-объемные схемы для уравнений Навье-Стокса

Кирилл Терехов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт Вычислительной Математики им. Г.И. Марчука Российской Академии Наук

<sup>2</sup>Московский Физико-Технический Институт

## CFD-Weekend 2020

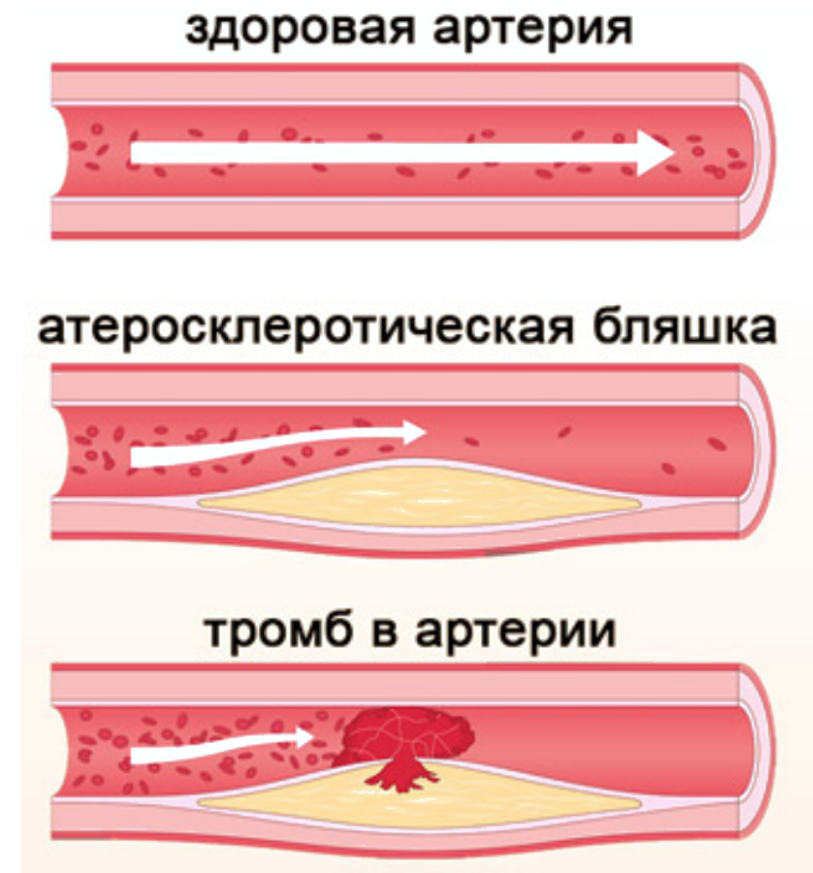
# Цель

актуальность и сложность



# Цель:

- Построение **трехмерной** модели течения и свертываемости крови, образования тромба в результате повреждения сосуда

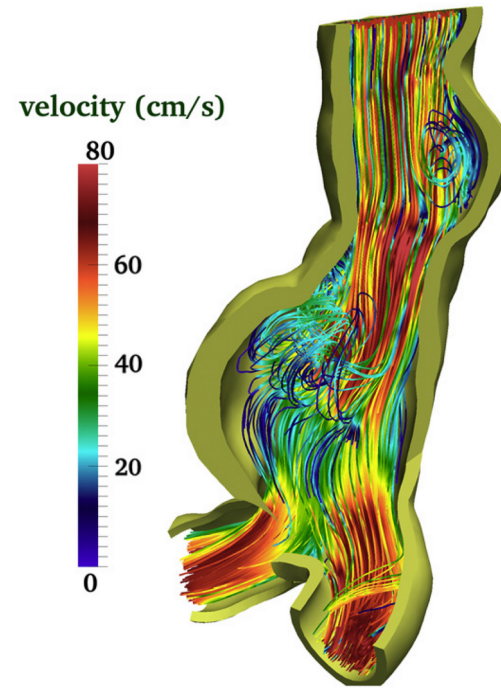


Образование тромба  
(иллюстрации из интернета)

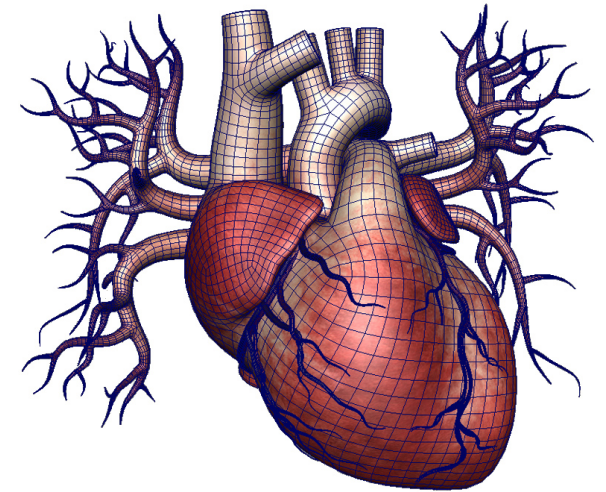


# Зачем?

- **Трехмерная** модель необходима для принятия решений при анализе сложной пациенто-ориентированной геометрии сосуда или артерии.
- Сердечно-сосудистые заболевания - **основная** причина смертности, в основном из-за тромбоэмболических осложнений.



Моделирование  
аневризма  
(из работ Квартерони)



Модель сердца



# Система уравнений

- **Сохранение момента:**

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu \nabla \mathbf{u} + p \mathbb{I}) = - \frac{\mu}{k(F_p, \phi_c)} \mathbf{u}$$

- **Условие непрерывности:**

$$\operatorname{div} (\mathbf{u}) = 0$$

- Протромбин:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div} (P \mathbf{u} - D \nabla P) = - (k_1 \phi_c + k_2 B_a + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P$$

- Тромбин:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} (T \mathbf{u} - D \nabla T) = (k_1 \phi_c + k_2 B_a + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P - k_6 AT$$

- Тромбирующие факторы FIXa, Fxa:

$$\frac{\partial B_a}{\partial t} + \operatorname{div} (B_a \mathbf{u} - D \nabla B_a) = (k_7 \phi_c + k_8 T) (B^0 - B_a) - k_9 AB_a$$

- Антитромбин:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \operatorname{div} (A \mathbf{u} - D \nabla A) = -k_6 A - k_9 AB_a$$

- Фибриноген:

$$\frac{\partial F_g}{\partial t} + \operatorname{div} (F_g \mathbf{u} - D \nabla F_g) = - \frac{k_{10} T F_g}{K_{10} + F_g}$$

- Фибрин:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \operatorname{div} (F \mathbf{u} - D \nabla F) = \frac{k_{10} T F_g}{K_{10} + F_g} - k_{11} F$$

- Фибрин-полимер:

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} = k_{11} F$$

- Неактивные тромбоциты:

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \tanh \left( \pi \left( 1 - \frac{\phi_c + \phi_f}{\phi_{max}} \right) \right) (\phi_c \mathbf{u} - D_p \nabla \phi_c) \right) = - (k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f$$

- Активные тромбоциты:

$$\frac{\partial \phi_f}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \tanh \left( \pi \left( 1 - \frac{\phi_c + \phi_f}{\phi_{max}} \right) \right) (\phi_f \mathbf{u} - D_p \nabla \phi_f) \right) = (k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f$$

- Проницаемость среды:

$$\frac{1}{k(F_p, \phi_c)} = \frac{16}{a^2} \tilde{F}_p^{\frac{3}{2}} \left( 1 + 56 \tilde{F}_p \right) \frac{\phi_{max} + \phi_c}{\phi_{max} - \phi_c} \quad \text{with} \quad \tilde{F}_p = \min \left( \frac{7}{10}, \frac{F_p}{7000} \right)$$

Bouchnita, A., Terekhov, K., Nony, P., Vassilevski, Y., & Volpert, V.: **A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous flow conditions.** PloS one, 15(7), e0235392, 2020

# Конечно-объемный метод

для систем уравнений



# Конечно-объемный метод

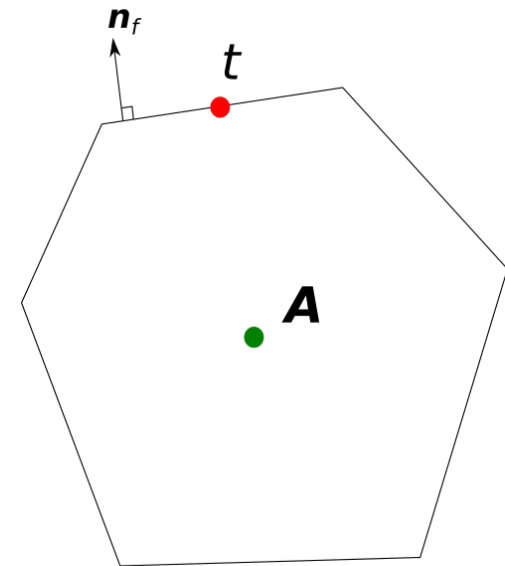
- Теорема Остроградского-Гаусса:

$$\operatorname{div}(\mathbf{A}) = \mathbf{g} \implies \oint_{\partial V} \mathbf{A} d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{g} dV$$

$$\implies \sum_{f \in \mathcal{F}(V)} |f| \mathbf{A} \mathbf{n}|_{\mathbf{x}_f} = |V| \mathbf{g}|_{\mathbf{x}_V}$$

- Требуется **аппроксимация потока**:

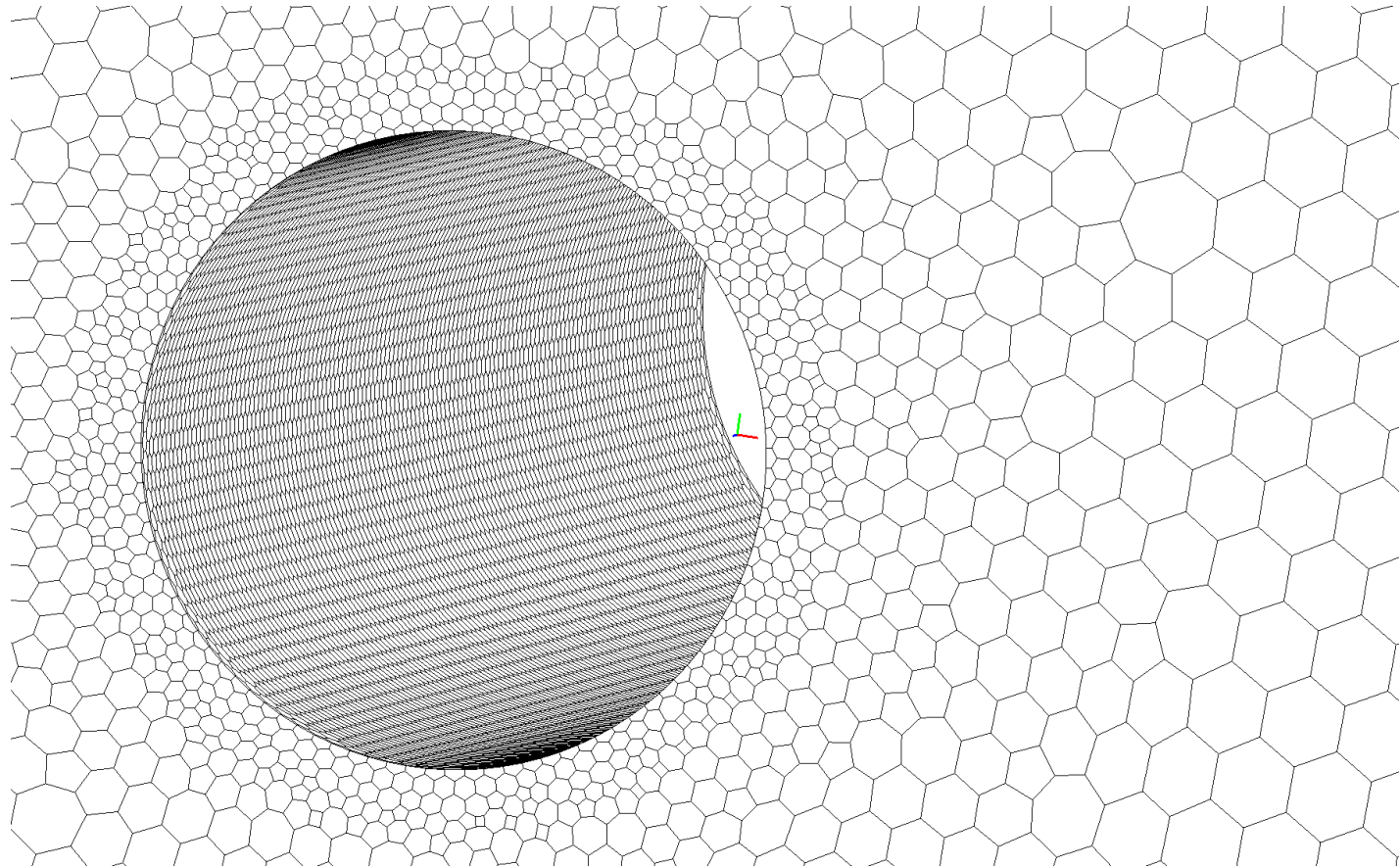
$$\mathbf{t} = \mathbf{A} \mathbf{n}|_{\mathbf{x}_f}$$





# Почему совмещенный МКО?

- **ПЛЮСЫ:**
  - 1) **многогранные** сетки,
  - 2) локальная **консервативность**,
  - 3) **удобное** расположение степеней свободы.
- **МИНУСЫ:**
  - 1) требуются **плоские** грани,
  - 2) **неустойчивость** Ладыженской-Бабушки-Брецци.

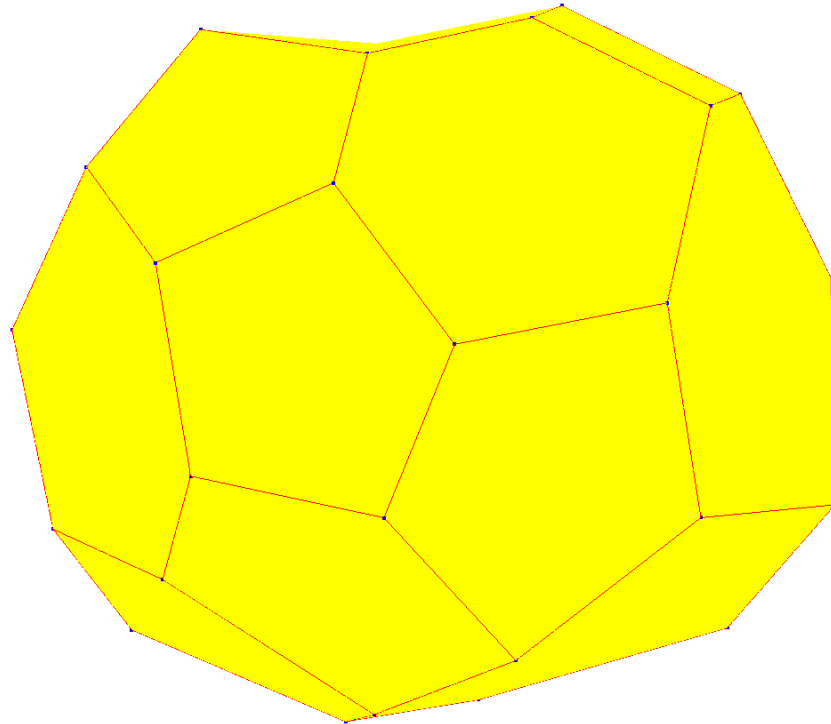


Дуальная от сетки построенной GMSH с оптимизацией Netgen

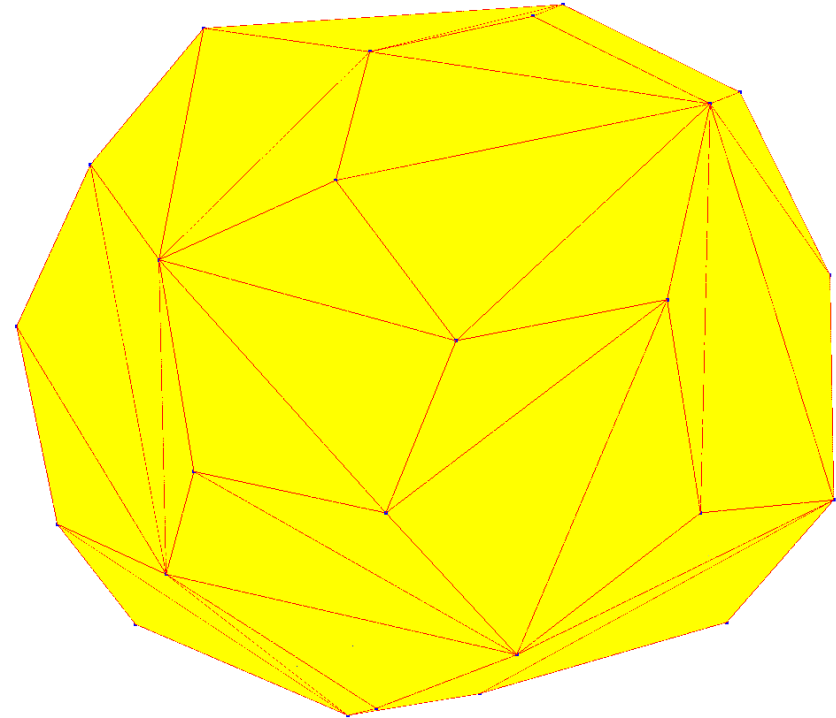




# Проблема МКО: неплоские грани



Плохой многогранник 

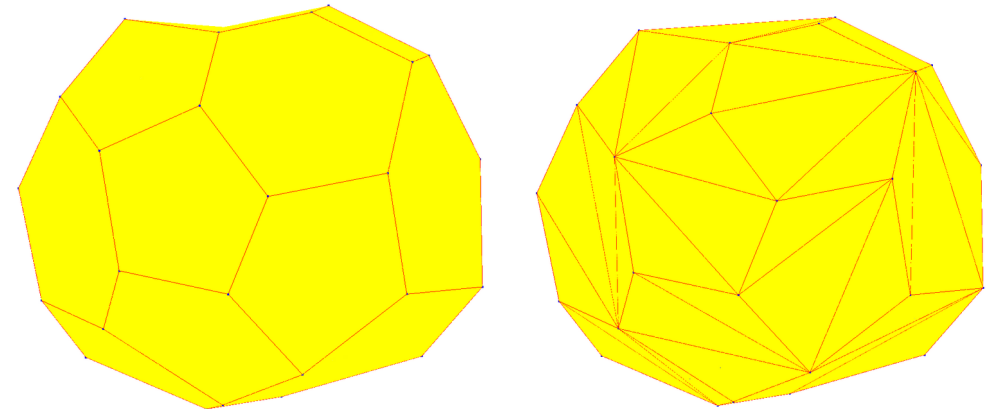


Хороший многогранник 

Wang, N., Li, M., Ma, R. et al. Accuracy analysis of gradient reconstruction on isotropic unstructured meshes and its effects on inviscid flow simulation. Adv. Aerodyn. 1, 18, 2019



# Проблема МКО: неплоские грани



- Дивергенция от градиента:

$$\int_V \operatorname{div}(\nabla \mathbf{x}) dV = \oint_{\partial V} d\mathbf{S}^T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \approx \sum_{f \in \mathcal{F}(V)} \mathbf{n}^T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} |f| = 0$$



- Дивергенция от вектора:

$$\int_V \operatorname{div}(\mathbf{x}) dV = \oint_{\partial V} d\mathbf{S}^T \mathbf{x} \approx \sum_{f \in \mathcal{F}(V)} \mathbf{n}^T \mathbf{x}_f |f| = 3|V|$$



- Градиент от вектора (формула Грина-Гаусса):

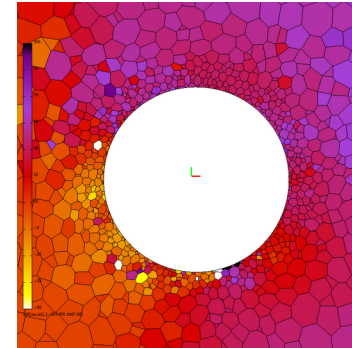
$$\int_V \mathbf{x} \nabla^T dV = \oint_{\partial V} \mathbf{x} d\mathbf{S}^T \approx \sum_{f \in \mathcal{F}(V)} \mathbf{x}_f \mathbf{n}^T |f| = |V| \mathbb{I}$$





# Проблема МКО: неплоские грани

- Сетка с неплоскими гранями



Модуль скорости ~~X~~



Давление ~~X~~

- Сетка с плоскими гранями



Модуль скорости ✓



Давление ✓

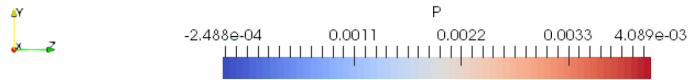
- Решение первой Ньютоновской итерации от нулевых начальных условий с малым шагом
- Проблемы как с линейным, так и нелинейным методами решения в первом случае



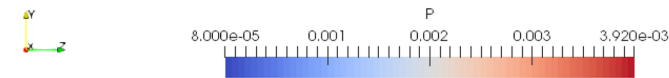
# Проблема МКО: неустойчивость ЛББ



Простая аппроксимация для div-grad ❌



Положительно-определенная аппроксимация div-grad ✔



- Индустриальный стандарт: **интерполяция Ри-Чоу**
- **Гипотеза:** метод ЛББ устойчив, собственные значения не отрицательны и не положительны в матричных коэффициентах при векторах неизвестных против потока и по потоку, соответственно.
- Пример:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \mathbf{n}p \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} = \begin{bmatrix} & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{n}\mathbf{n}^T & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^* \\ p^* \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\mathbf{n}\mathbf{n}^T & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_* \\ p_* \end{bmatrix}$$

Неопределенная
Положительно-определенная
Отрицательно-определенная

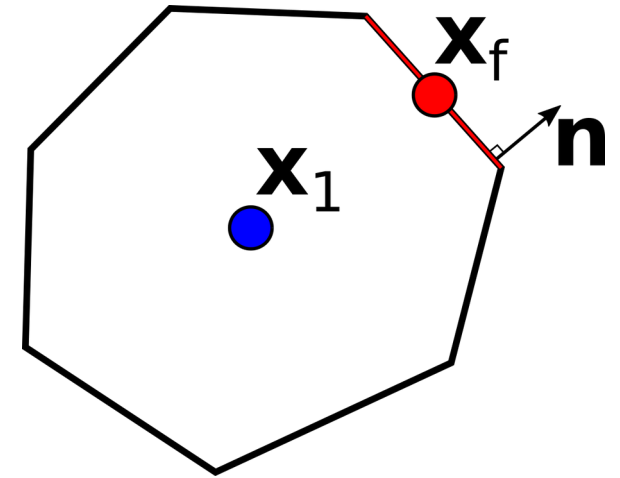
Terekhov, K. M., & Vassilevski, Y. V. **Finite volume method for coupled subsurface flow problems, I: Darcy problem.** *Journal of Computational Physics*, 395, 298-306, 2019

# МКО дискретизация

с **кусочно-постоянным** полем давления



# МКО для Навье-Стокса



- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$

- Разложение в ряд Тейлора **второго порядка**:

$$\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_f} \approx \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_1} + \rho \frac{\partial \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n}}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{x}_1} \nabla \mathbf{u} (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)$$

- **Положительная** аппроксимация:

$$\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_f} \approx \frac{\rho}{2} (\mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T + \mathbf{n}^T \mathbf{u}_1 \mathbb{I})$$

3x3 матрица  $Q(\mathbf{u}_1)$ , с\3  $\mathbf{n}^T \mathbf{u}_1, 2\mathbf{n}^T \mathbf{u}_1, 0$

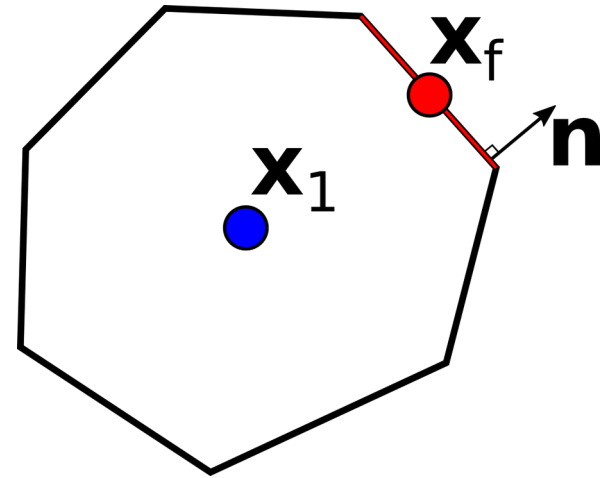
$$\times \begin{cases} 3\mathbf{u}_1 - 2\mathbf{u}_f + 4\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1), & \mathbf{n}^T \mathbf{u}_1 > 0, \\ 2\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_1, & \mathbf{n}^T \mathbf{u}_1 < 0. \end{cases}$$



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Расщепление **второго порядка**:

$$-\mu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_f} \approx \underbrace{\mu (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_f) / r_1}_{\text{Двухточечная часть}} - \underbrace{\mu \nabla \mathbf{u} (\mathbf{n} - (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) / r_1)}_{\text{Поперечная коррекция}}$$

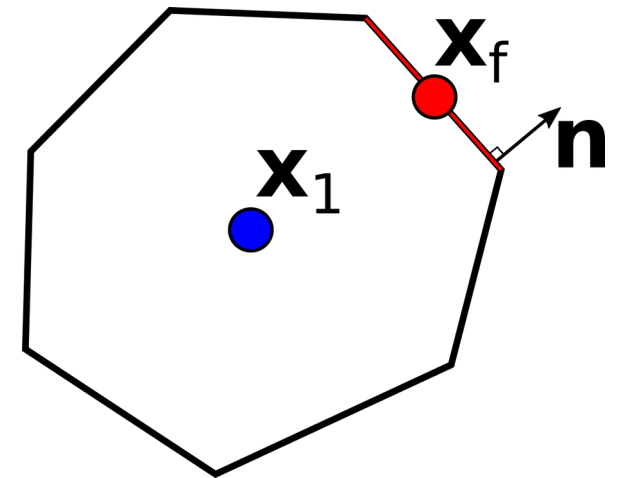
- Двухточечная часть дает **положительные** матричные коэффициенты.
- Поперечная коррекция **исчезает** на ортогональной сетке.



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Аппроксимация:

$$\left\{ \begin{array}{l} p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} = \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T & \mathbf{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} \\ \approx \begin{bmatrix} \xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T & \mathbf{n} \\ \mathbf{0}^T & \mathbf{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{n}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} \\ + \begin{bmatrix} \xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla \mathbf{u} (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

- Параметр  $\xi$  контролирует **аппроксимацию**, но не **устойчивость**!

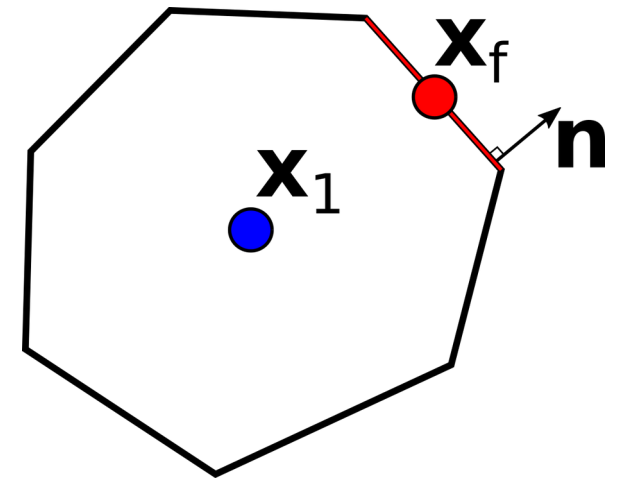




# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

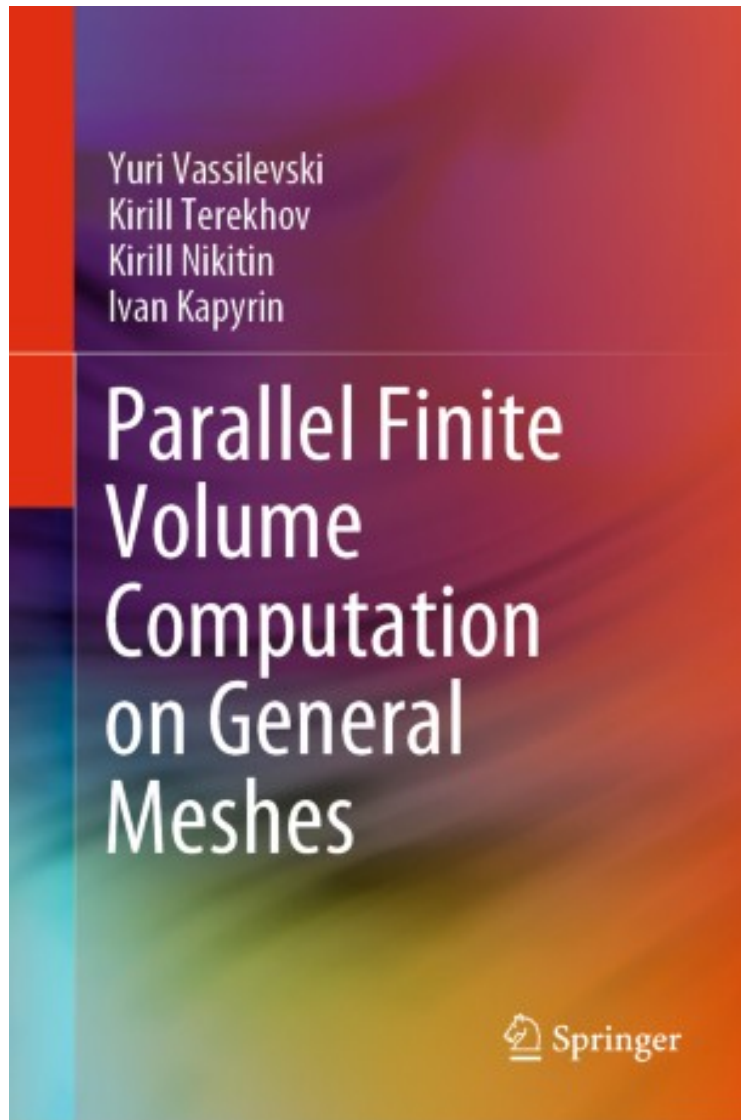
$$\mathbf{t} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Комбинация аппроксимаций на **МОМЕНТ**:

$$\mathbf{t}_M \approx \left( \frac{3}{2} Q(\mathbf{u}_1)^+ - \frac{1}{2} Q(\mathbf{u}_1)^- + \frac{\mu}{r_1} \mathbb{I} + \xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T \right) \mathbf{u}_1 - \left( Q(\mathbf{u}_1)^+ - Q(\mathbf{u}_1)^- + \frac{\mu}{r_1} \mathbb{I} + \xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T \right) \mathbf{u}_f - \nabla \mathbf{u} \left( \mu \mathbf{n} - \left( \frac{\mu}{r_1} \mathbb{I} + \xi \mathbf{n} \mathbf{n}^T + 2Q(\mathbf{u}_1)^+ \right) (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) + p_1 \mathbf{n} \right)$$

- **Неизвестную на грани** можно получить из непрерывности потоков.
- Нормальная проекция **неизвестной на грани** дает **ПОТОК МАССЫ**.



- Terekhov, K. **Collocated Finite-Volume Method for the Incompressible Navier-Stokes Problem.** Journal of Numerical Mathematics, 2020
- Vassilevski, Y., Terekhov, K., Nikitin, K., & Kapyrin, I. **Parallel Finite Volume Computation on General Meshes.** Springer Nature, 2020

# МКО дискретизация

с **кусочно-линейным** полем давления



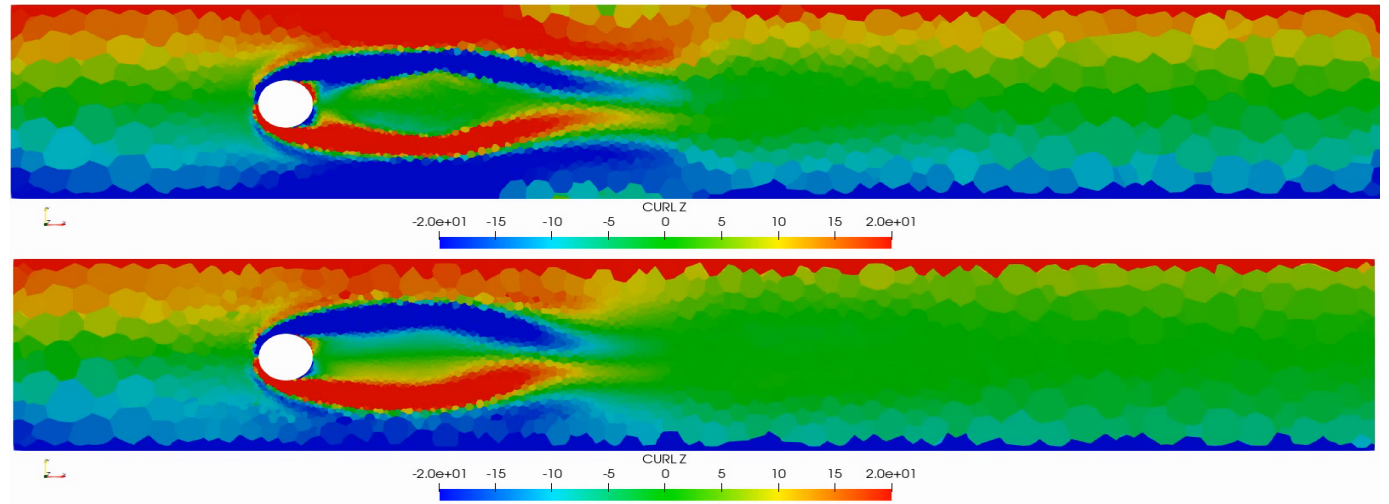
# Мотивация

- **ПЛЮСЫ:**

- 1) нет ГУ на давление,
- 2) расчеты **установление**,
- 3) **меньше** шаблон.

- **МИНУСЫ:**

- 1) **существенная** численная вязкость,
- 2) свободный **параметр**.



Z-компонента завихренности  
**Кусочно-линейное давление** (сверху)  
**Кусочно-постоянное давление** (снизу)



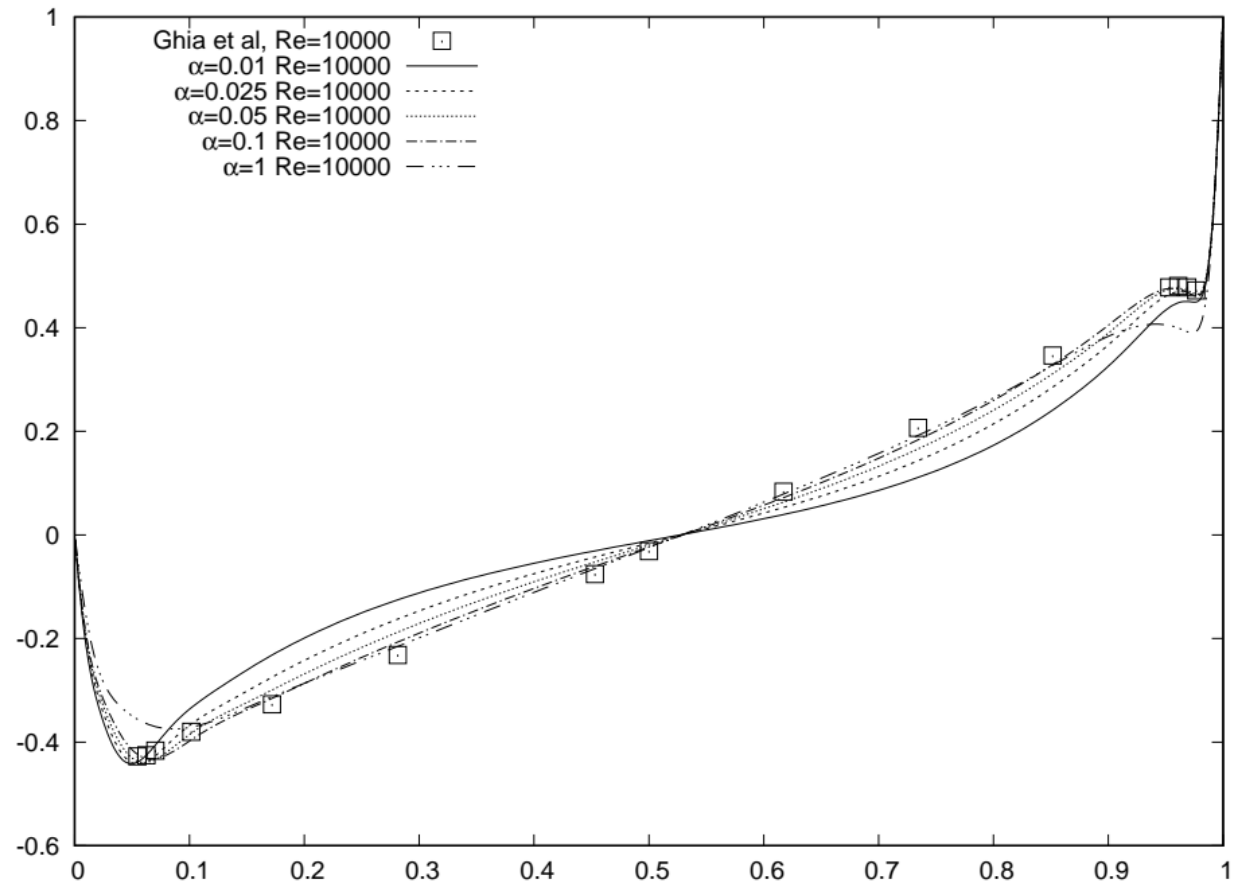
# Мотивация

- **ПЛЮСЫ:**

- 1) нет ГУ на давление,
- 2) расчеты **установление**,
- 3) **меньше** шаблон.

- **МИНУСЫ:**

- 1) **существенная** численная вязкость,
- 2) свободный **параметр**.



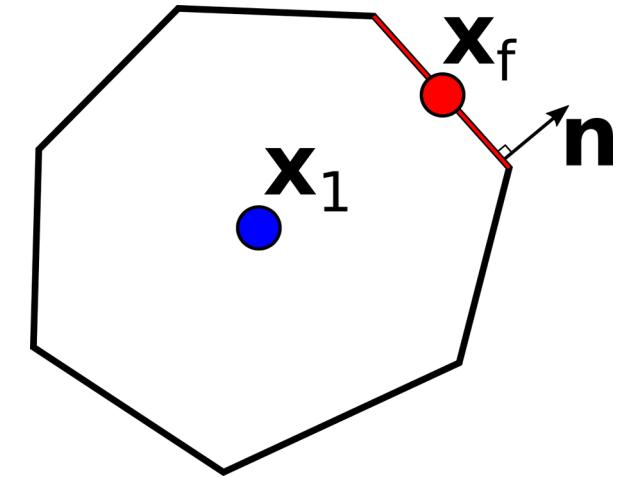
Зависимость решения от параметра



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Разложение в ряд Тейлора **второго порядка**:

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_f} &\approx \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_1} + \rho \frac{\partial \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n}}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{x}_1} \nabla \mathbf{u} (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) \\ &\approx \frac{\rho}{2} (\mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T + \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} \mathbb{I}) (2\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_1). \end{aligned}$$

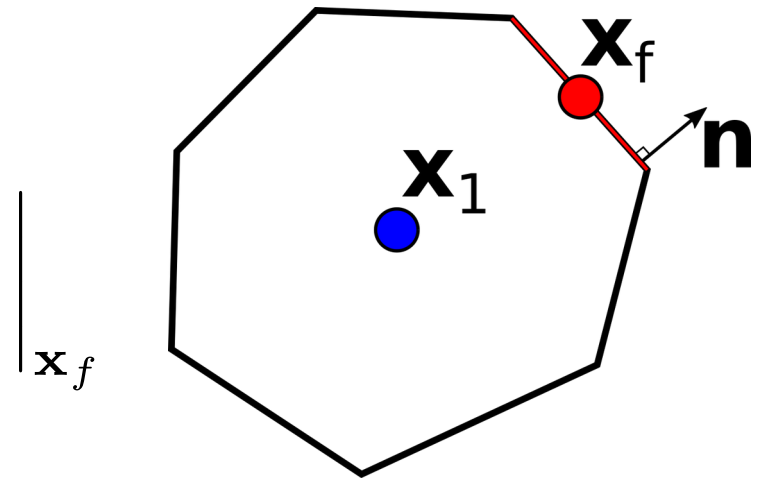
- На данном этапе расщепление не требуется.



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Расщепление **второго порядка**:

$$\begin{aligned}
 - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} \Big|_{\mathbf{x}_f} &\approx \mu (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_f) / r_1 \\
 &\quad - \mu \left( \mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T + \mathbf{n}^T \otimes \mathbb{I} - (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T / r_1 \right) \nabla \otimes \mathbf{u}_1
 \end{aligned}$$

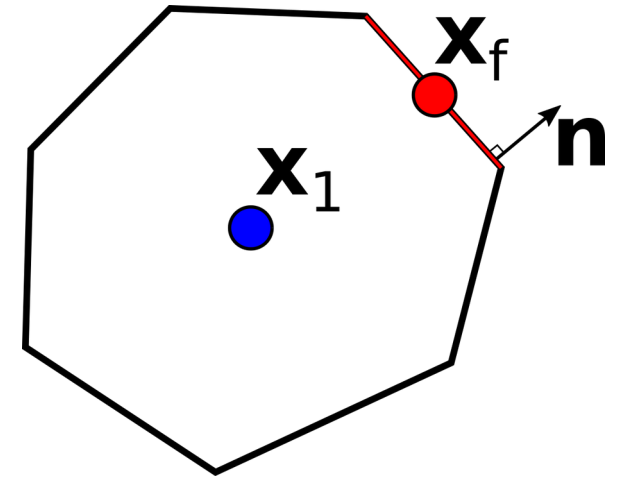
- Поперечная поправка **не исчезает** на ортогональных сетках.



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Аппроксимация:

$$\begin{cases} p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} = \begin{bmatrix} & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} \\ \approx \begin{bmatrix} a (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) & c \mathbf{n} \\ c \mathbf{n}^T & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) & (c-1) \mathbf{n} \\ (c-1) \mathbf{n}^T & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} \\ + \begin{bmatrix} a (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) & c \mathbf{n} \\ c \mathbf{n}^T & b \end{bmatrix} \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}$$

- Параметры **a**, **b**, **c** контролируют **ЛББ устойчивость!**

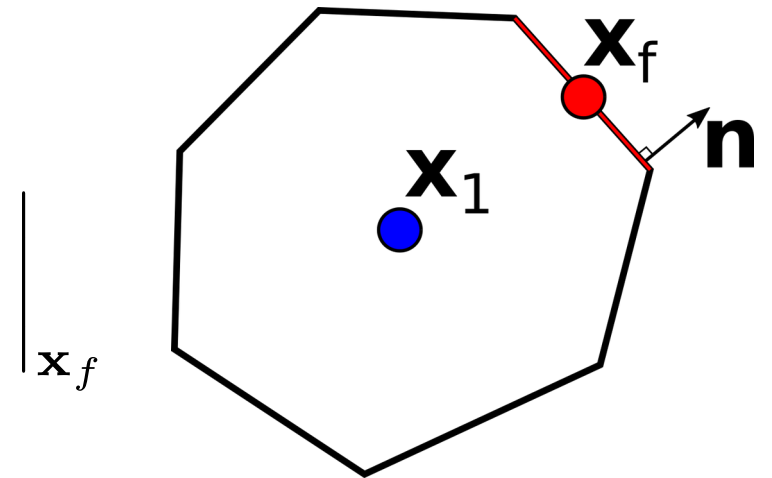




# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases}$$



- Комбинация аппроксимаций:

$$\mathbf{t} \approx (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - (T_1 - S_1 - 2Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} + \left( T_1 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T - W_1 \right) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}$$

- Матричные коэффициенты:

$$T_1 = \begin{bmatrix} (a + \mu/r_1) (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) & c \mathbf{n} \\ c \mathbf{n}^T & b \end{bmatrix}, \quad Q_1 = \begin{bmatrix} \frac{\rho}{2} (\mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T + \mathbf{u}_1^T \mathbf{n} \mathbb{I}) & \\ & \end{bmatrix},$$

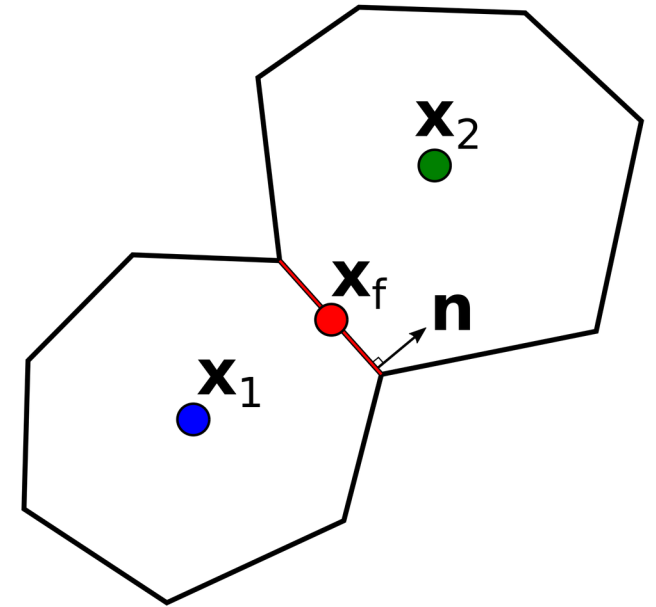
$$S_1 = \begin{bmatrix} & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & \end{bmatrix}, \quad W_1 = \begin{bmatrix} \mu (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T + \mathbf{n}^T \otimes \mathbb{I}) & \\ & \end{bmatrix}$$



# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} \Big|_{\mathbf{x}_f}$$



- Неизвестная на грани:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} = (T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \times \left( \begin{aligned} & (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + (T_1 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T - W_1) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \\ & + (T_2 - Q_2) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ p_2 \end{bmatrix} + (T_2 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_2)^T - W_2) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ p_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \right)$$

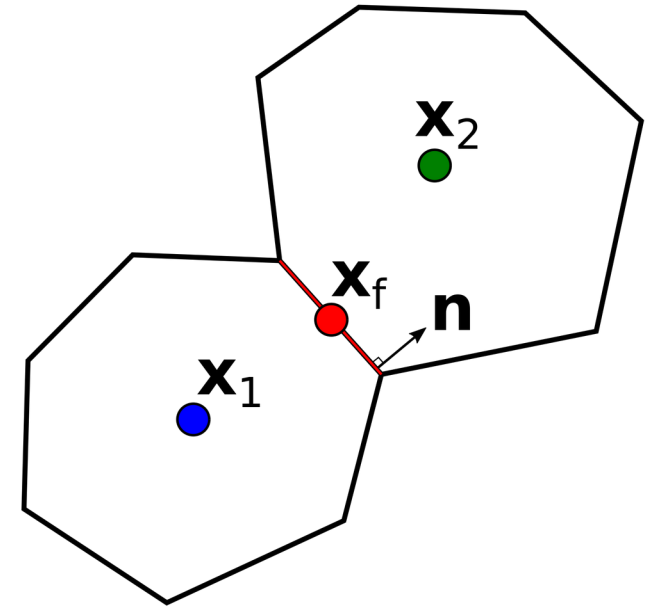


# МКО для Навье-Стокса

- Выражение на поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} - \mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases}$$

$\mathbf{x}_f$



- Аппроксимация потока:

$$\begin{aligned} \mathbf{t} \approx & (T_2 - S_2 - 2Q_2) (T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \\ & \times \left( (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + (T_1 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T - W_1) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \right) \\ & - (T_1 - S_1 - 2Q_2) (T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \\ & \times \left( (T_2 - Q_2) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ p_2 \end{bmatrix} + (T_2 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_2)^T - W_2) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ p_2 \end{bmatrix} \right) \end{aligned}$$



# Анализ собственных значений

- Одностороннее выражение на поток:

$$\mathbf{t} \approx (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - (T_1 - S_1 - 2Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} + \left( T_1 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T - W_1 \right) \nabla \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}$$

- **Собственные значения для  $T_1 - Q_1$ :**

$$\lambda_{1,2} = a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2 + b/2 \pm \sqrt{(a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2 - b/2)^2 + c^2},$$

$$\lambda_{3,4} = a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2.$$

- **Собственные значения для  $T_1 - S_1 - 2Q_1$ :**

$$\lambda_{1,2} = a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 + b/2 \pm \sqrt{(a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 - b/2)^2 + (c - 1)^2},$$

$$\lambda_{3,4} = a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1.$$



# Анализ собственных значений

- Найти **МИНИМАЛЬНО ВОЗМОЖНЫЕ** параметры:

$$a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 \geq 0, \quad a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2 \geq 0,$$
$$2b (a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1) \geq (c - 1)^2, \quad 2b (a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2) \geq c^2.$$

- Приводит к:

$$a = \max (\rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 - \mu r_1^{-1}, 0) + \theta > 0$$
$$b \geq \frac{1}{2} \max \left( \frac{(1 - c)^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1}, \frac{c^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2} \right)$$

- Если **a** — **мало**, то **b** — **велико**!

- Чтобы сбалансировать, введем  $\theta = \rho \sqrt{\mathbf{u}_1 (\mathbb{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}^T) \mathbf{u}_1} + \varepsilon$



# Анализ собственных значений

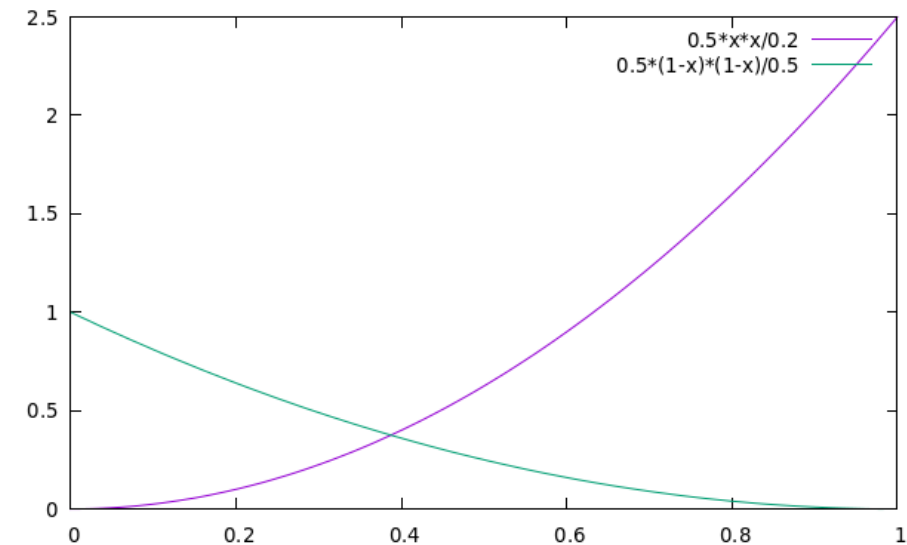
- Найти **МИНИМАЛЬНО ВОЗМОЖНЫЕ** параметры:

$$b \geq \frac{1}{2} \max \left( \frac{(1-c)^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1}, \frac{c^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2} \right)$$

- Решение

$$c = \begin{cases} 1 + t - \sqrt{t + t^2}, & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 > 0, \\ 1/2, & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 = 0, \\ 1 + t + \sqrt{t + t^2}, & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 < 0, \end{cases}$$

- Где  $t = 2 \left( \frac{a + \mu r_1^{-1}}{\rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1} - 1 \right)$



Пересечение двух парабол для  $c$



# Анализ собственных значений

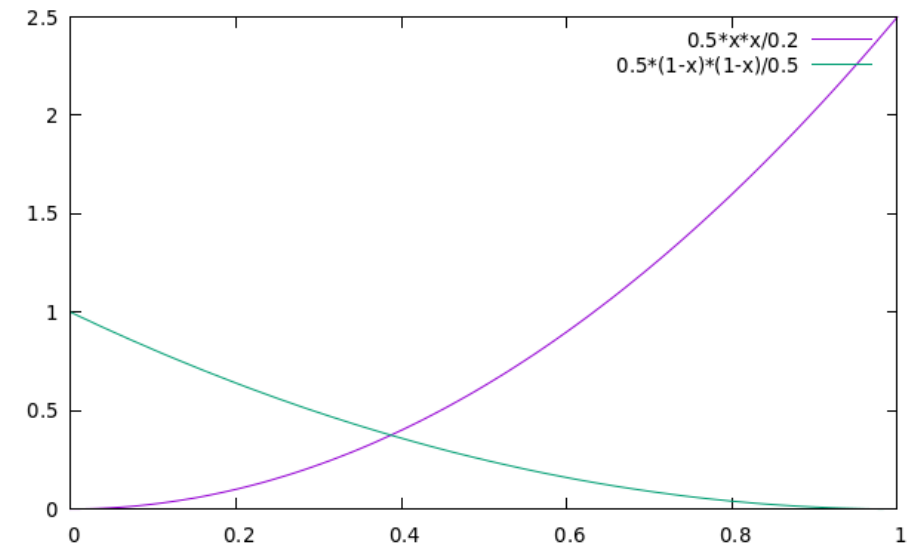
- Найти **МИНИМАЛЬНО ВОЗМОЖНЫЕ** параметры:

$$b \geq \frac{1}{2} \max \left( \frac{(1-c)^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1}, \frac{c^2}{a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 / 2} \right)$$

- Решение  $b (a + \mu r_1^{-1} - \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1) =$

$$\begin{cases} t (1/2 + t - \sqrt{t + t^2}), & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 > 0, \\ 1/8, & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 = 0, \\ t (1/2 + t + \sqrt{t + t^2}), & \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1 < 0, \end{cases}$$

- Где  $t = 2 \left( \frac{a + \mu r_1^{-1}}{\rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1} - 1 \right)$



Пересечение двух парабол для c

# Верификация и сравнение

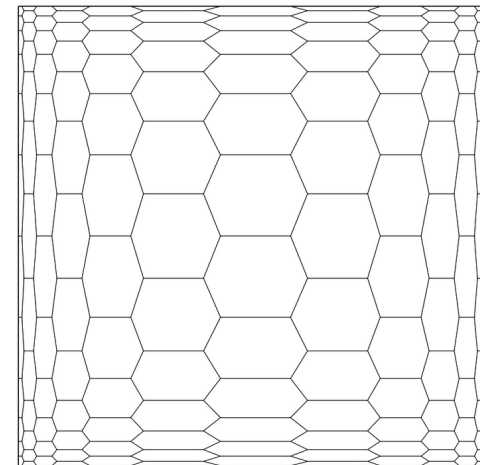
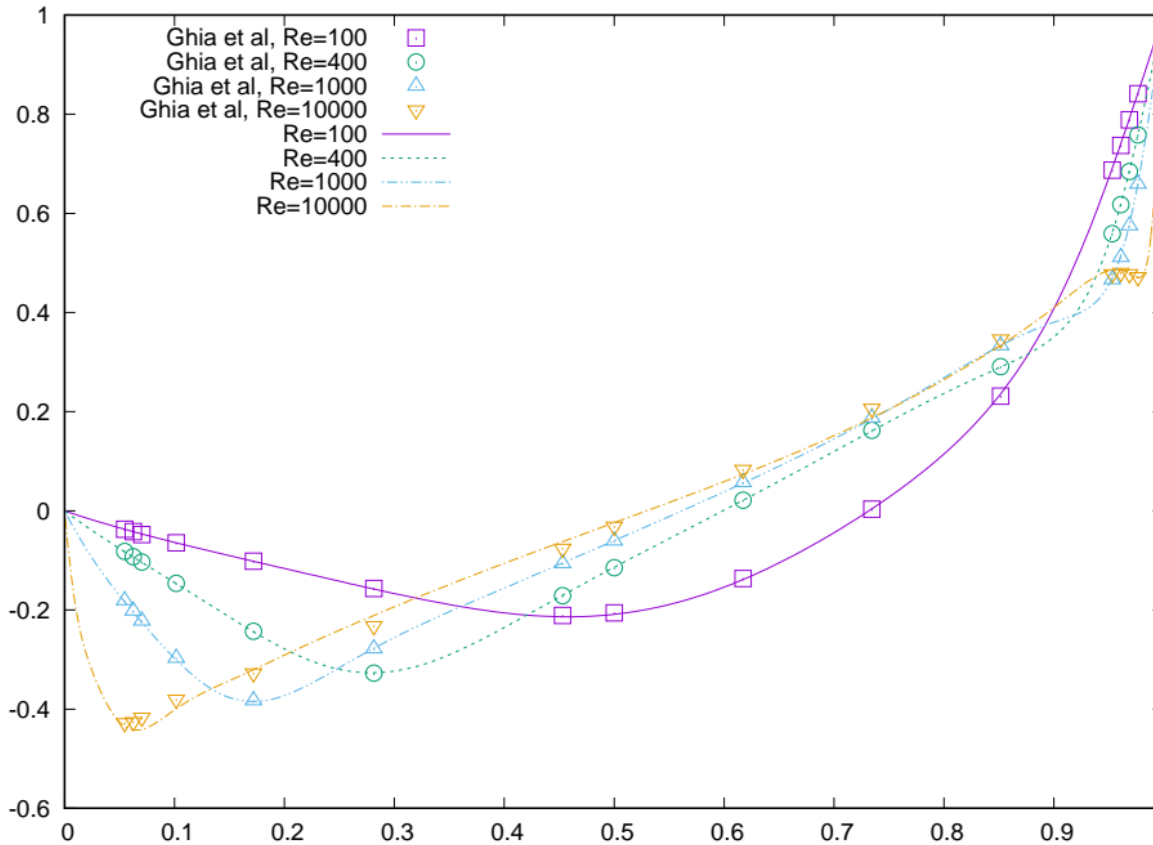
двух методов



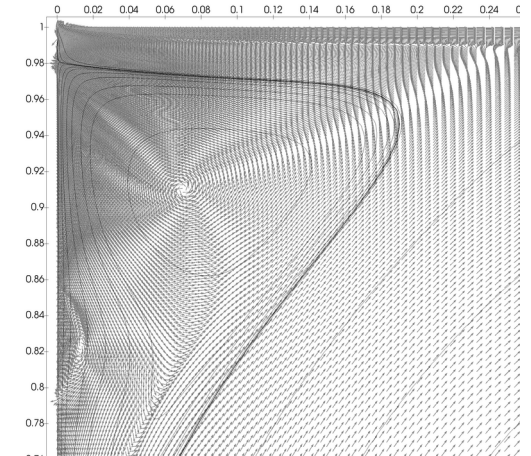


# Течение в каверне, $Re \leq 16000$

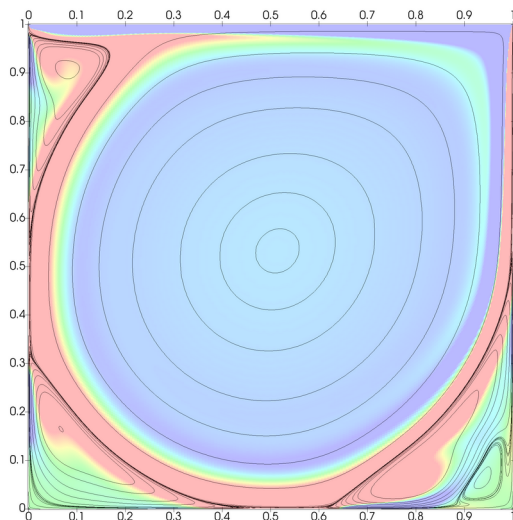
- Сравнение с данными Ghia et al.



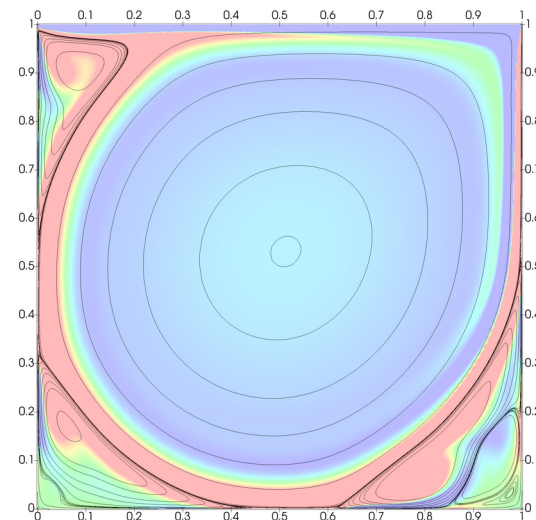
Гексагональная сетка



Третичный вихрь



Re = 10000



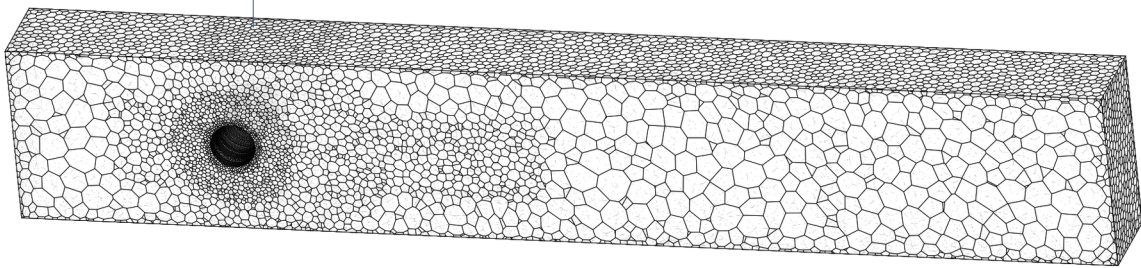
Re = 16000

Результаты МКО с кусочно-**постоянной** аппроксимацией давления

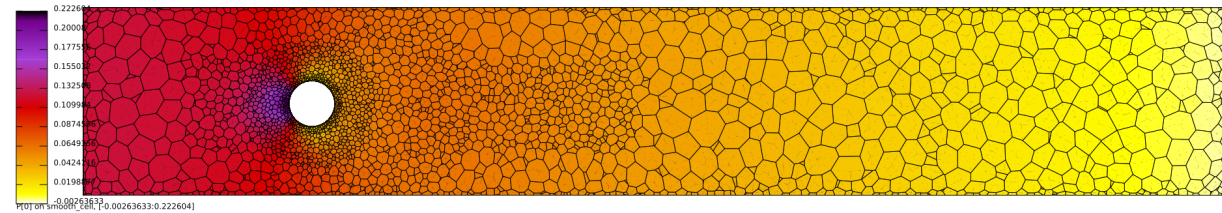


# Обтекание цилиндра, $Re=20$

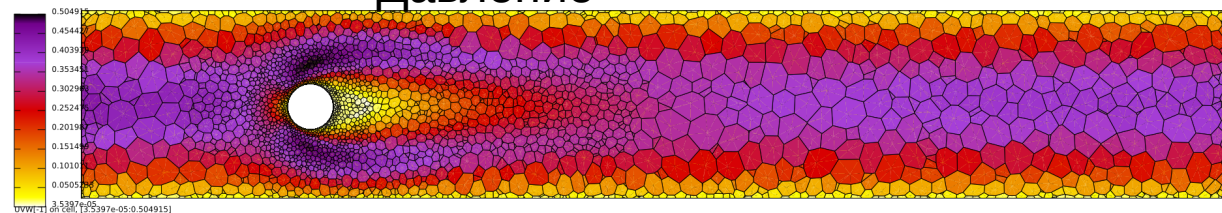
Разрешение	Ячейки	Тяга	Подъем	Падение давления
1	910	3.862	-0.08556	0.1481
2	4328	4.964	-0.02525	0.1854
3	24687	5.515	0.07256	0.1672
4	164806	5.876	0.00803	0.1890
3†	53211	6.064	0.01015	0.1801
3‡	98517	6.155	0.01006	0.1792
Schäfer & Turek [23]	-	6.05-6.25	0.008-0.01	0.165-0.175
Braack & Richter [7]	-	<u>6.185331</u>	<u>0.00940</u>	<u>0.1713</u>



Многогранная сетка с локальным сгущением



Давление



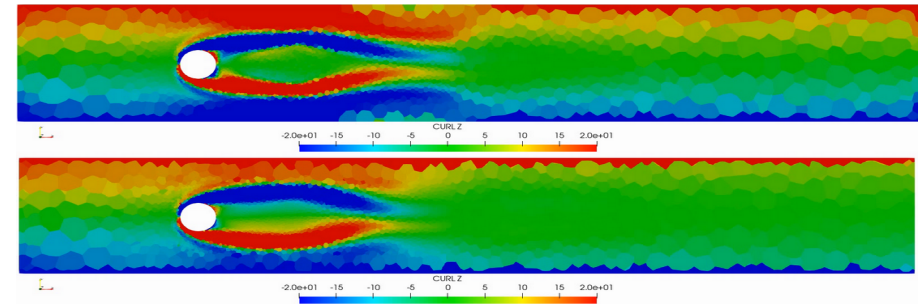
Модуль скорости

Результаты МКО с кусочно-**постоянной** аппроксимацией давления

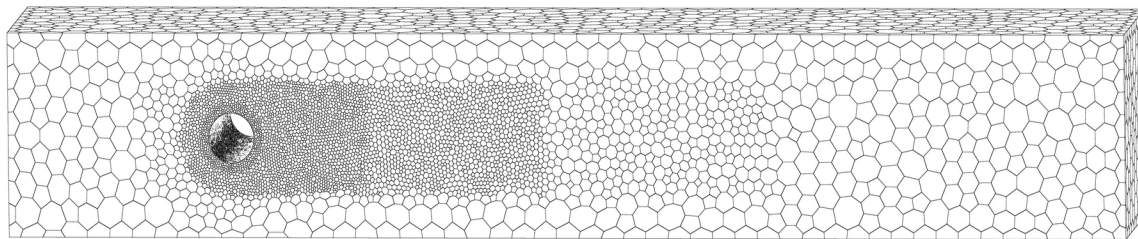


# Обтекание цилиндра, $Re=100$

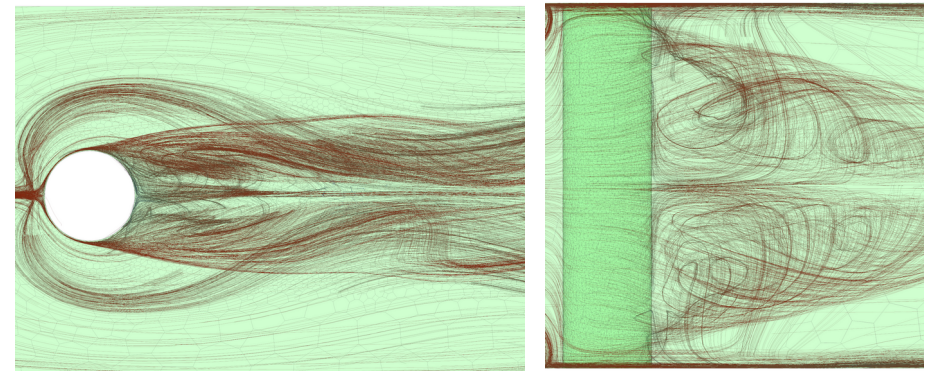
Method	$\max(C_D)$	$-\max(C_L)$	$St$
piecewise- <b>linear</b> pressure	<b>3.303</b>	<b>0.011</b>	<b>0.29</b>
piecewise- <b>constant</b> pressure	<b>3.172</b>	<b>0.0219</b>	<b>0.305</b>
Schäfer & Turek	3.29 – 3.31	0.008 – 0.011	0.29 – 0.35



Z-компонента завихренности в срезе  
**Кусочно-линейное давление** (сверху)  
**Кусочно-постоянное давление** (снизу)



Многогранная сетка с  
локальным сгущением  
(115491 ячейки)

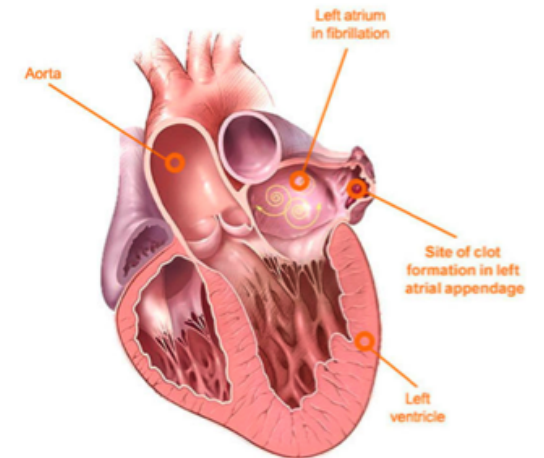


Линии тока, взгляд сбоку и сверху



# Дальнейшие шаги

- Учет жидкостей с **нелинейной реологией**:
  - кровь — **не-Ньютоновская жидкость**.
- 4-х мерный МКО для **подвижных сеток**:
  - учет **движения** стенок сосуда,
  - **движение** левого ушка предсердия.
- Переток с областями, описываемыми уравнениями **Дарси** или **Био**:
  - учет просачивания крови,
  - гидроразрыв пласта.



**Спасибо за внимание!**

**Контакты**

- [KIRILL.TERENOV@GMAIL.COM](mailto:KIRILL.TERENOV@GMAIL.COM)
- [YURI.VASSILEVSKI@GMAIL.COM](mailto:YURI.VASSILEVSKI@GMAIL.COM)

**Ссылки**

- [WWW.INMOST.ORG](http://WWW.INMOST.ORG)
- [WWW.INMOST.RU](http://WWW.INMOST.RU)

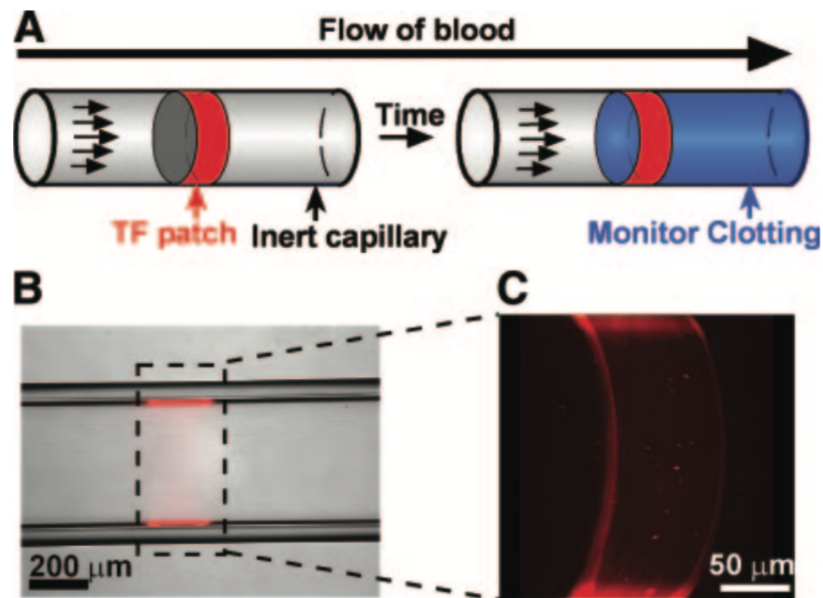




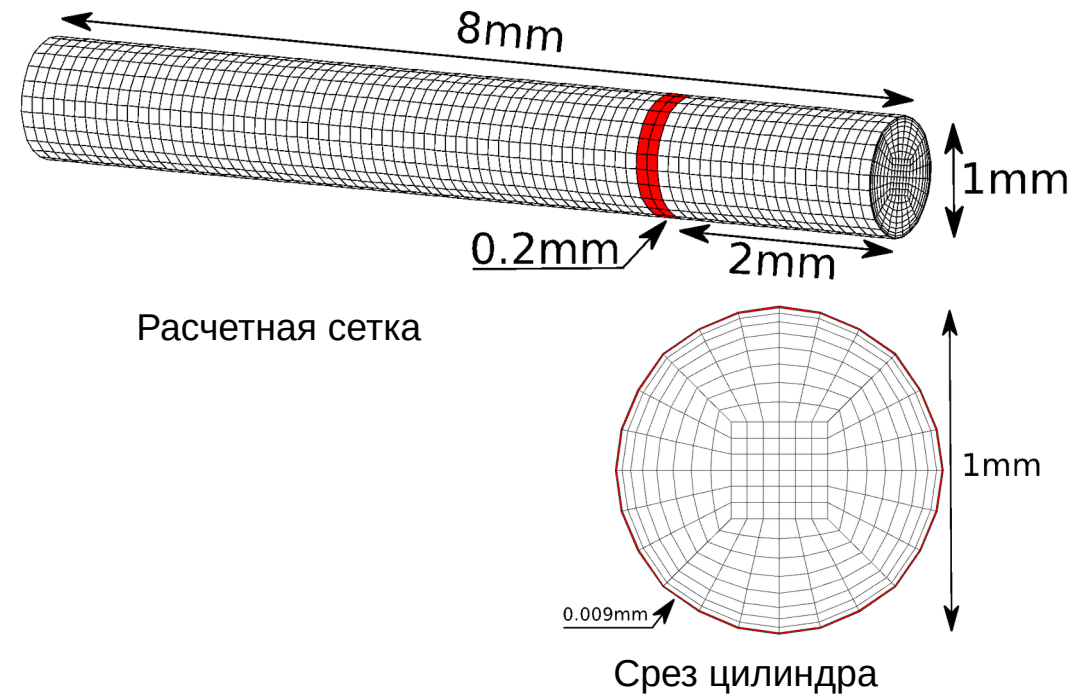
# Сравнение с экспериментом

- Из **эксперимента**:

- Shen F., Kastrup C.J., Liu Y., Ismagilov R.F.: *Threshold response of initiation of blood coagulation by tissue factor in patterned microfluidic capillaries is controlled by shear rate*. *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*, 28(11): 2035–2041, 2008



Иллюстрации эксперимента



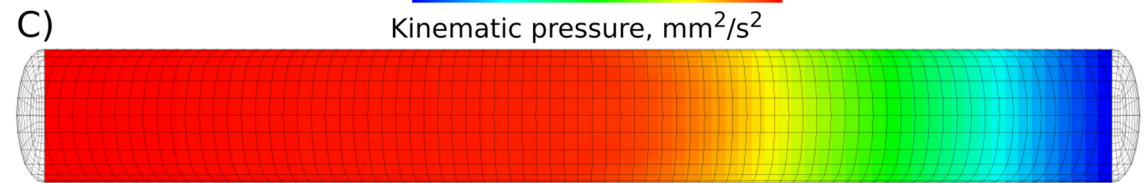
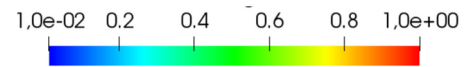
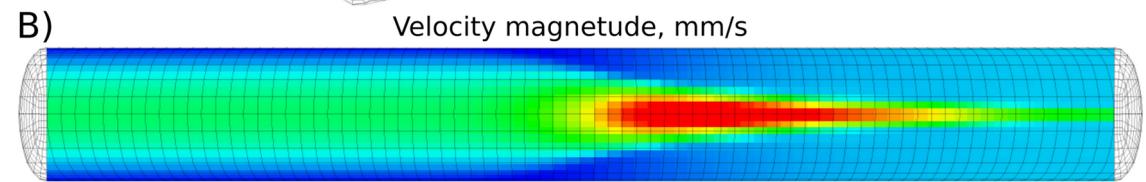
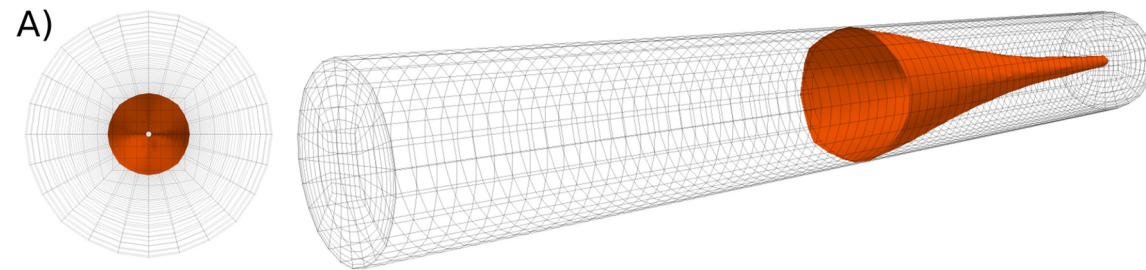
Расчетная сетка

Срез цилиндра

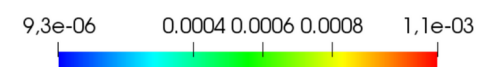
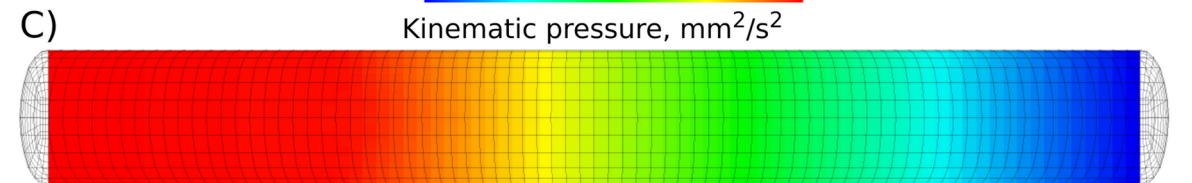
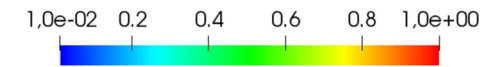
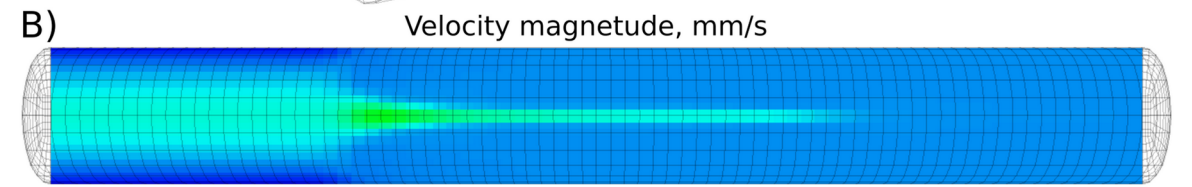
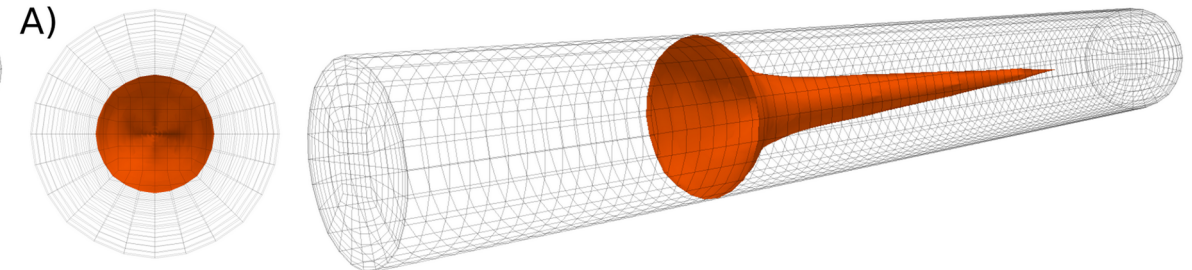


# Сравнение с экспериментом

T=60s



T=70s

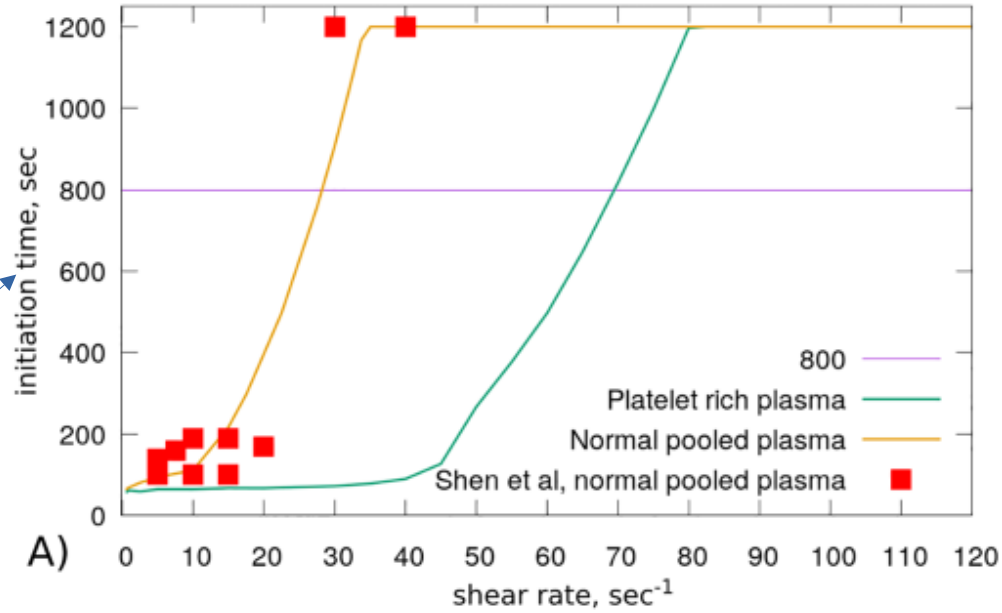


Качественное воспроизведение эксперимента

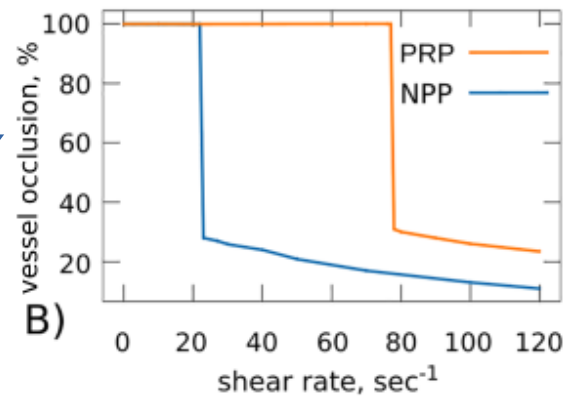


# Сравнение с экспериментом

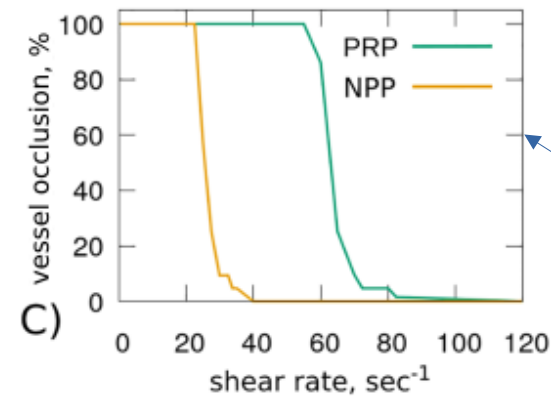
A) Валидация 3-х мерной модели



B) Упрощенная 1-0 мерная модель



C) Полная 3-х мерная модель



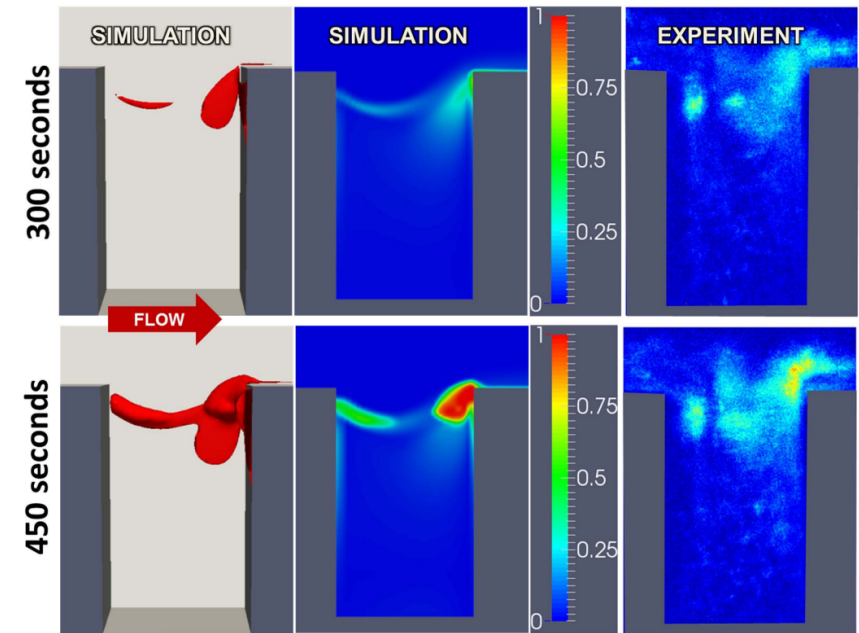
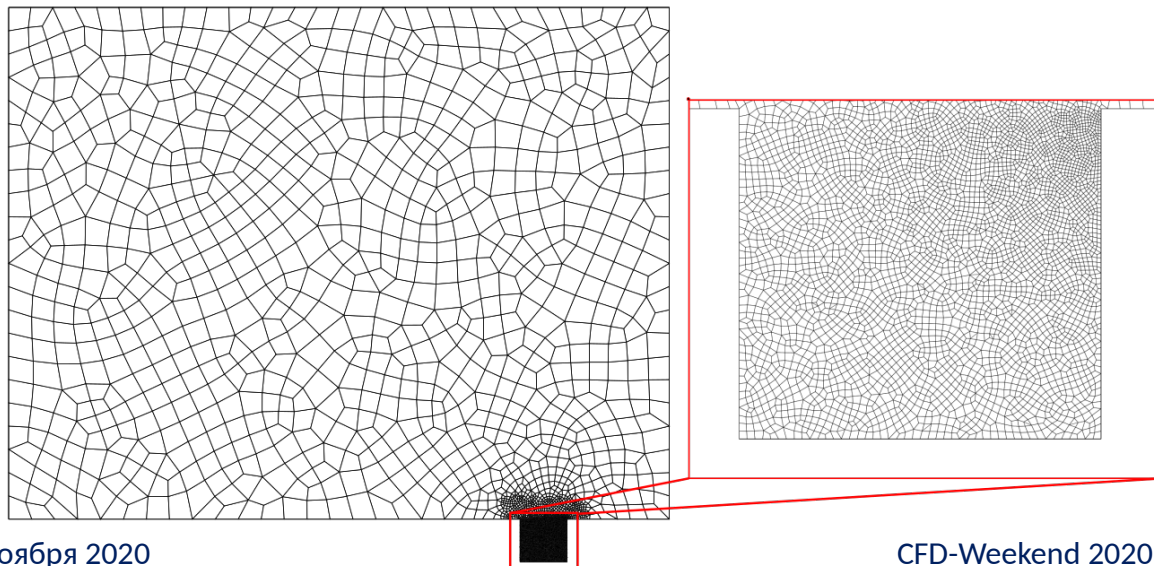
Bouchnita, A., Terekhov, K., Nony, P., Vassilevski, Y., & Volpert, V.: **A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous flow conditions.** PloS one, 15(7), e0235392, 2020





# Дальнейшие шаги

- Образование тромба из-за фактора фон Виллебранта в течениях с большими сдвиговыми скоростями (Надежда Сулова)
- Автоматическая стабилизация химических реакций (Иван Бутаков)



из Wei-Tai Wu et al,  
Multi-Constituent Simulation  
Of Thrombus Deposition



# Компоненты метода решения

- **Предобусловленный** метод **BiCGStab(I)**<sup>1</sup>.
- **Параллелизация** предобуславливателя на основе **аддитивного** метода Шварца.
- **Многоуровневый предобуславливатель** основан на **неполной факторизации Краута** второго порядка<sup>2,3</sup>.
- Рост числа **обусловленности** факторов определяет **грубую систему** и позволяет настроить параметры отбрасывания<sup>4,5</sup>.
- **Масштабирование** и **переупорядочивание** системы на каждом уровне<sup>6,7,8</sup>.



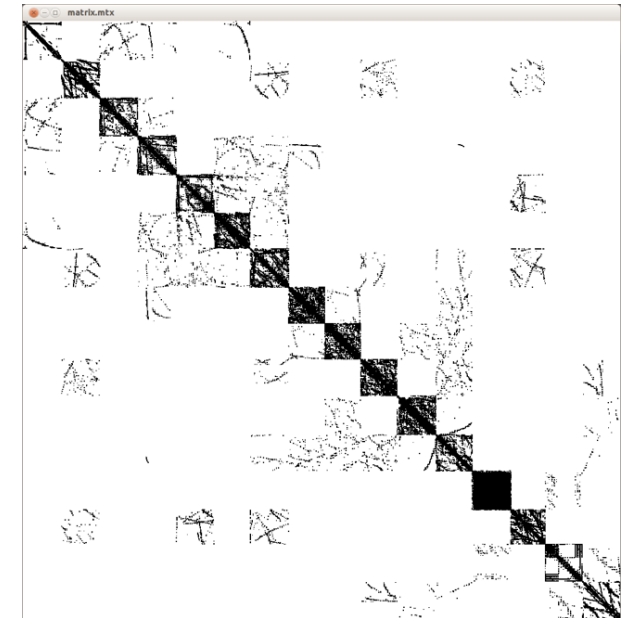
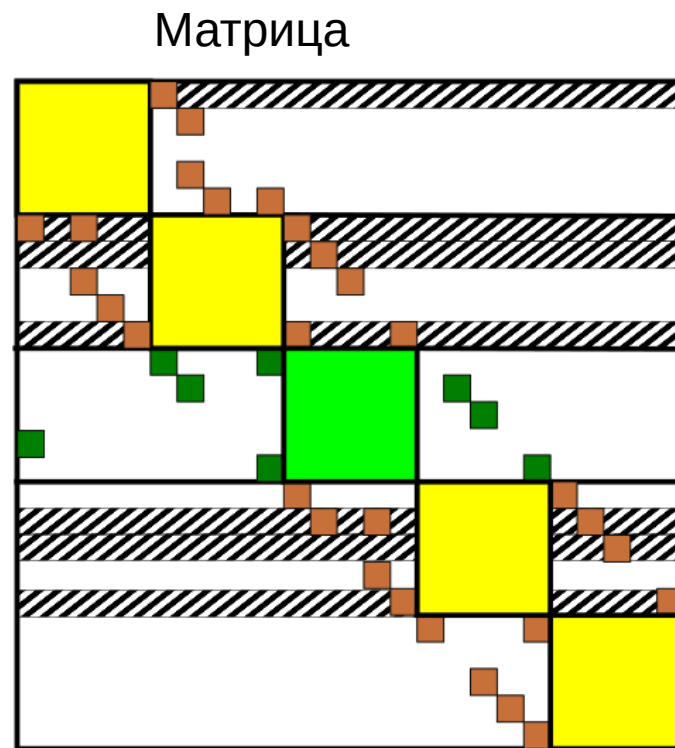
# Литература

- 1) Sleijpen, G.L.G., Diederik R. F.: *BiCGstab (l) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum*. *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 1.11 (1993): 2000. (метод Крылова)
- 2) Li N., Saad Y., Chow E.: *Crout versions of ILU for general sparse matrices*. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25.2 (2003): 716-728. (неполная факторизация типа Краута)
- 3) Kaporin, I.E.: *High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its UTU+ UTR+ RTU-decomposition*. *Numerical linear algebra with applications* 5.6 (1998): 483-509. (неполная факторизация второго порядка)
- 4) Bollhöfer, M.: *A robust ILU with pivoting based on monitoring the growth of the inverse factors*. *Linear Algebra and its Applications* 338.1-3 (2001): 201-218. (настройка параметров отбрасывания)
- 5) Bollhöfer, M., Saad Y.: *Multilevel preconditioners constructed from inverse-based ILUs*. *SIAM Journal on Scientific Computing* 27.5 (2006): 1627-1650. (определение грубой системы)
- 6) Cuthill, E., McKee J.: *Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices*. *Proceedings of the 1969 24th national conference*. 1969. (переупорядочивание для уменьшения ширины графа)
- 7) Olschowka, M., Arnold N.: *A new pivoting strategy for Gaussian elimination*. *Linear Algebra and its Applications* 240 (1996): 131-151. (максимизация диагонального произведения)
- 8) Kaporin, I.E.: *Scaling, reordering, and diagonal pivoting in ILU preconditionings*. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling* 22.4 (2007): 341-375. (масштабирование для уменьшения числа обусловленности)



# Аддитивный метод Шварца

- Глобальная матрица состоит из локальных **блоков**.
- Расширение блоков для локализации **связей**.
- Версия с **ограничением**.



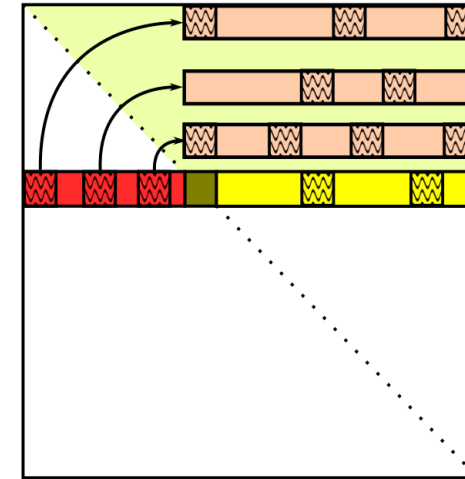
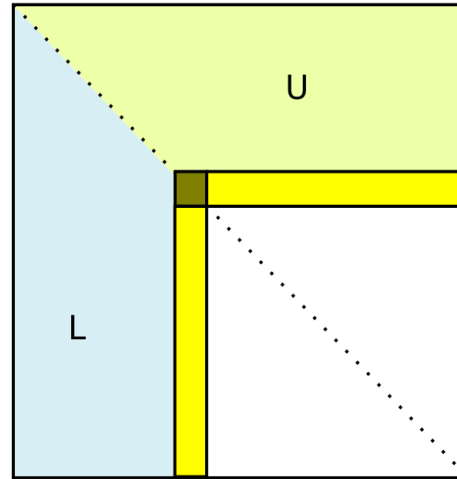
Распределенная система

- - Local partition outlier
- - Remote partition outlier
- - Local partition
- - Remote partitions
- ▨ - Extended rows

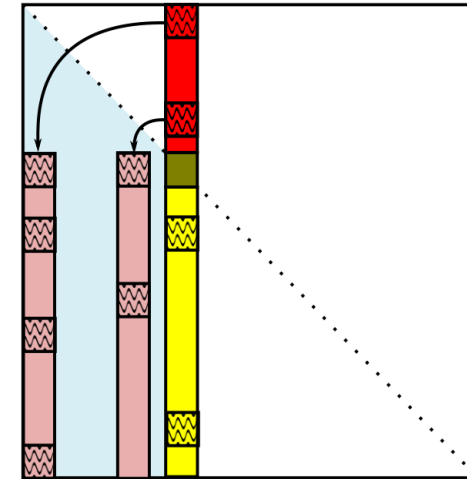


# Метод Краута второго порядка

- Двойной параметр:
  - $\tau^2$  при факторизации.
  - $\tau$  для итераций.
- Определение числа обусловленности «на лету»:
  - $\kappa = \max(\|L^{-1}\|, \|U^{-1}\|)$
  - $\tau/\kappa = \text{const}$  настройка.
  - Ограничение роста  $\kappa$ .

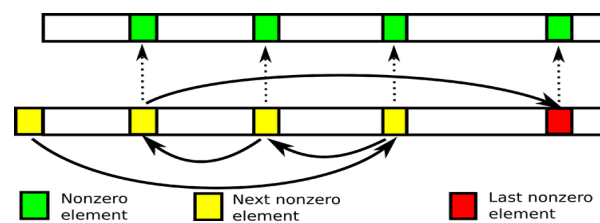


U-factor elimination



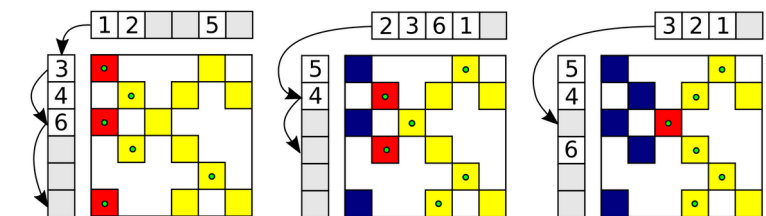
L-factor elimination

Плотный аккумулятор:



Legend:   
■ Nonzero element   
■ Next nonzero element   
■ Last nonzero element

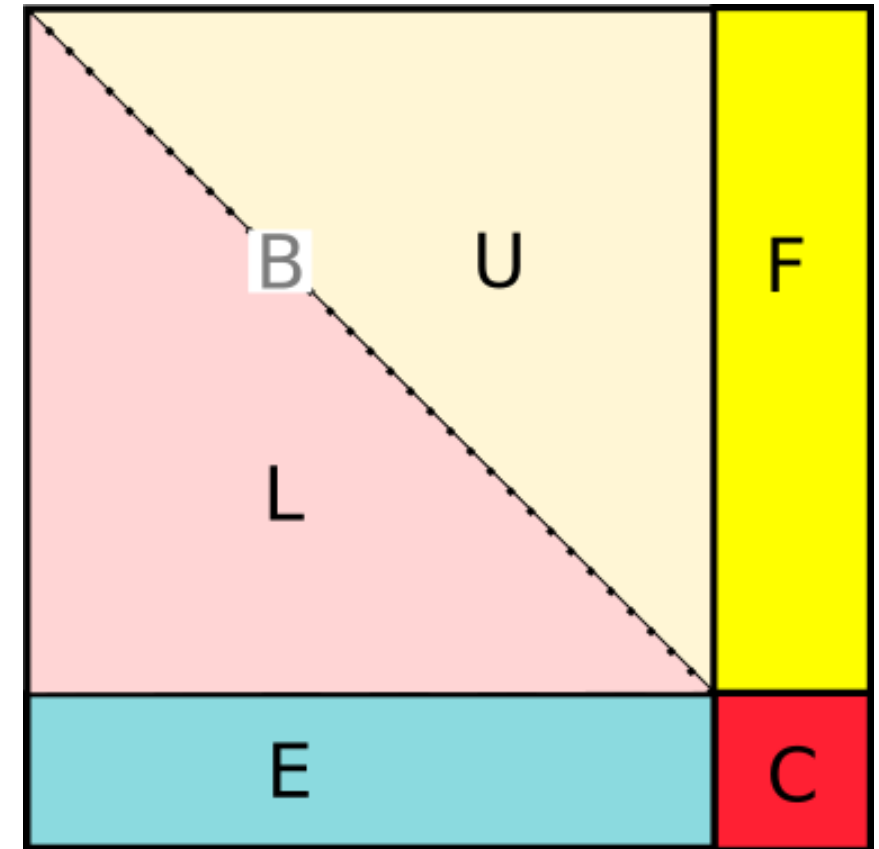
Обход транспонированной матрицы:





# Дополнение по Шуру

- Часть, которая ведет к росту  $\kappa$  аккумулируется в  $C$ :
  - Сбор после факторизации.
- Система следующего уровня — дополнение по Шуру:
  - $S = C - E L^{-1} U^{-1} F$ .
  - Вычисления требуют прямой и обратной подстановок со многими разреженными векторами.
  - Контроль заполнения имеет критичное значение.



Partially factorized matrix.



# Аналогия с AMG

- **Грубая** система должна содержать **наибольшую ошибку** метода **сглаживания**.
- Метод определения обусловленности выявляет **ошибку** в методе **сглаживания** и позволяет расщепить систему (CF-splitting).
- Идеальные интерполяция  $P = (-EB^{-1}, I)$  и сужение  $R = (-FB^{-1}, I)^T$ .
  - **(не выполняется методом в данный момент)**.
- Дополнение по Шуру соответствует **грубой** системе.
- Универсальный но вычислительно сложный подход.



# Упорядочивание и масштабирование

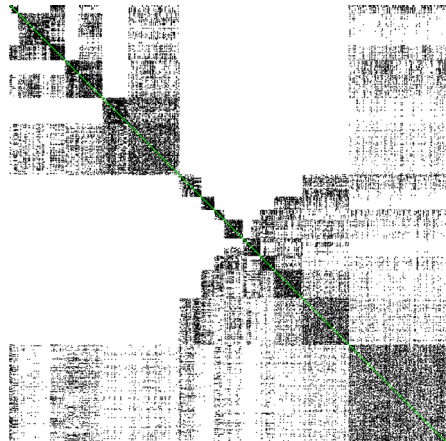
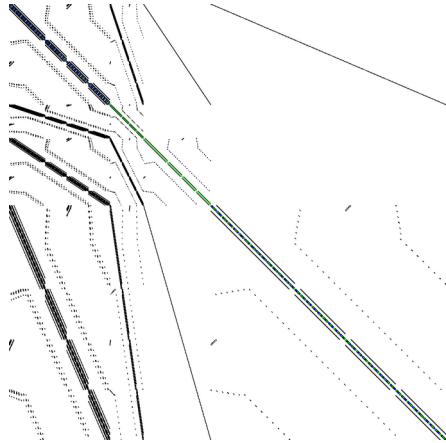
- Каждый последующий уровень переупорядочивается и масштабируется:
  - Упорядочивание для максимизации диагонального произведения.
  - Масштабирование в I-доминантную матрицу.
  - Повторное масштабирование для выравнивания норм строк и столбцов к единице.
  - Упорядочивание для уменьшения ширины графа или заполнения при факторизации.





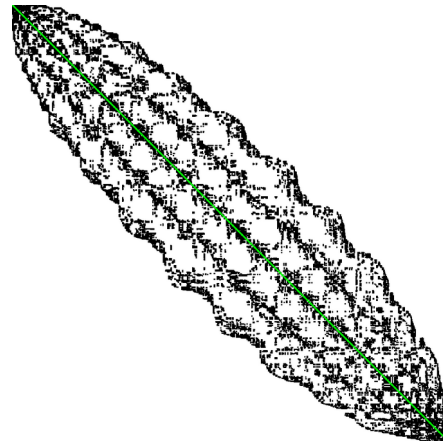
# Упорядочивание системы

Начальная система



Уменьшение  
заполнения (METIS)

Сокращение ширины



Сокращение ширины

- Полная задача **свертываемости крови**.
- 13 уравнений на ячейку.
- Только **Навье-Стокс**.
- 4 уравнения на ячейку.
- Уменьшение заполнения (METIS) в 4 раза медленнее, чем сокращение ширины (RCM).
- Довольно плотная система, широкий сепаратор.



# Масштабируемость

Table 1. Performance of the multi-physics model of blood flow coagulation.

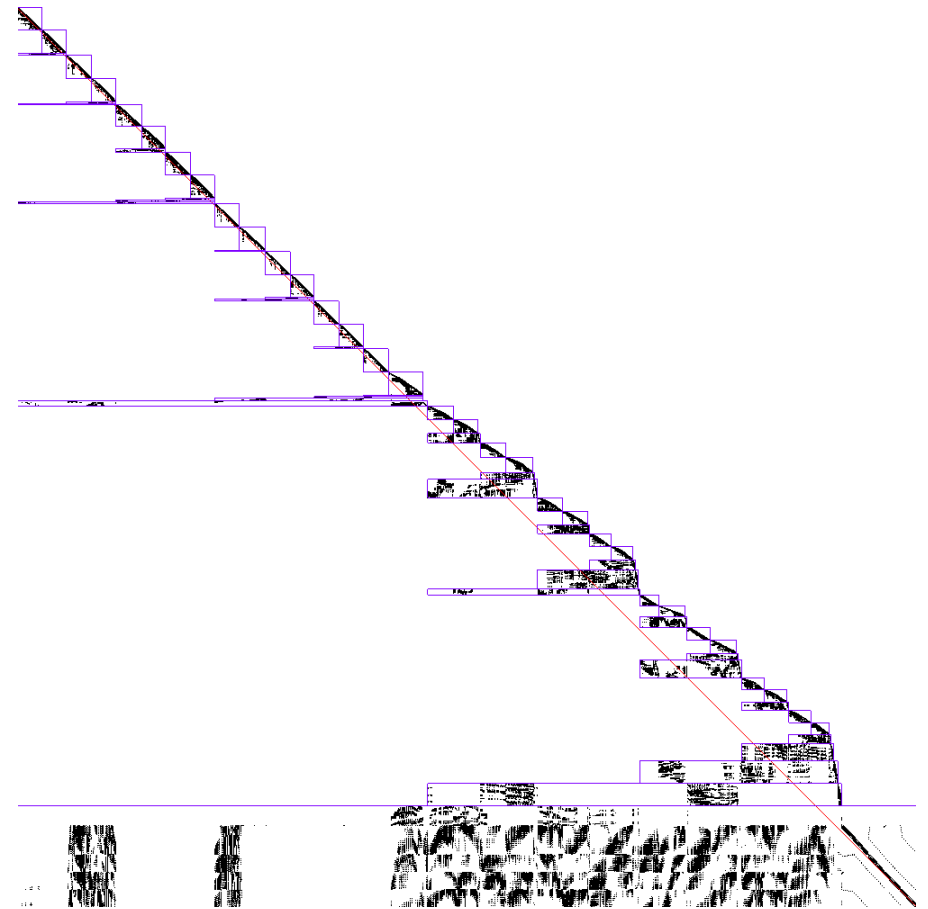
Processors number	Total time		Assembly time		Solution time		Setup time		Iterations time		Linear Iterations
1	30406.1	-	6256.4	-	24137.1	-	21648.6	-	2470.1	-	13372
24	1109.1	27x	415.4	15x	688.7	35x	243.3	88x	444.2	6x	32009
48	548.7	55x	241.1	26x	340.6	71x	80.9	268x	259.2	10x	38773
72	420.5	72x	171.2	37x	247.1	98x	45.5	476x	201.4	12x	41297
96	329.8	92x	130.5	48x	197.4	122x	30.6	707x	166.7	15x	43230
120	282.9	108x	111.2	56x	169.4	142x	22.6	958x	146.7	17x	46604
144	309.7	98x	93.3	67x	214.5	112x	17.9	1210x	196.5	13x	48548
168	248.5	122x	85.0	74x	161.7	149x	14.6	1483x	147.0	17x	50274

- 262080 уравнений (до 1560 на ядро)
- 136 шагов по времени и 348 итераций Ньютона (до 4 итераций на шаг)
- Установка солвера очень дорога, но быстро улучшается с уменьшением блока.



# Далнейшие шаги

- Контроль заполнения Шура.
  - Исследование подходов к отбрасыванию.
- Параллелизм на общей памяти.
  - Алгоритм вложенного рассечения.
- Увеличить точность расчета дополнения по Шуру.
  - По аналогии к идеальным интерполяции и сужения.



Вложенное рассечение гиперграфа