



Функционал программной платформы INMOST для распределенного математического моделирования

Кирилл Терехов^{1,3,5}, Игорь Коньшин^{1,2,3,4,5}, Юрий Василевский^{1,3,4,5}

¹Институт Вычислительной Математики им. Г.И. Марчука Российской Академии Наук

²Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Российской Академии Наук, ФИЦ ИУ РАН

³Московский Физико-Технический Институт

⁴Сеченовский университет

⁵Университет Сириус

**Объединенный семинар ИВМиМГ СО РАН и кафедры
вычислительной математики ММФ НГУ, 14 ноября 2023**

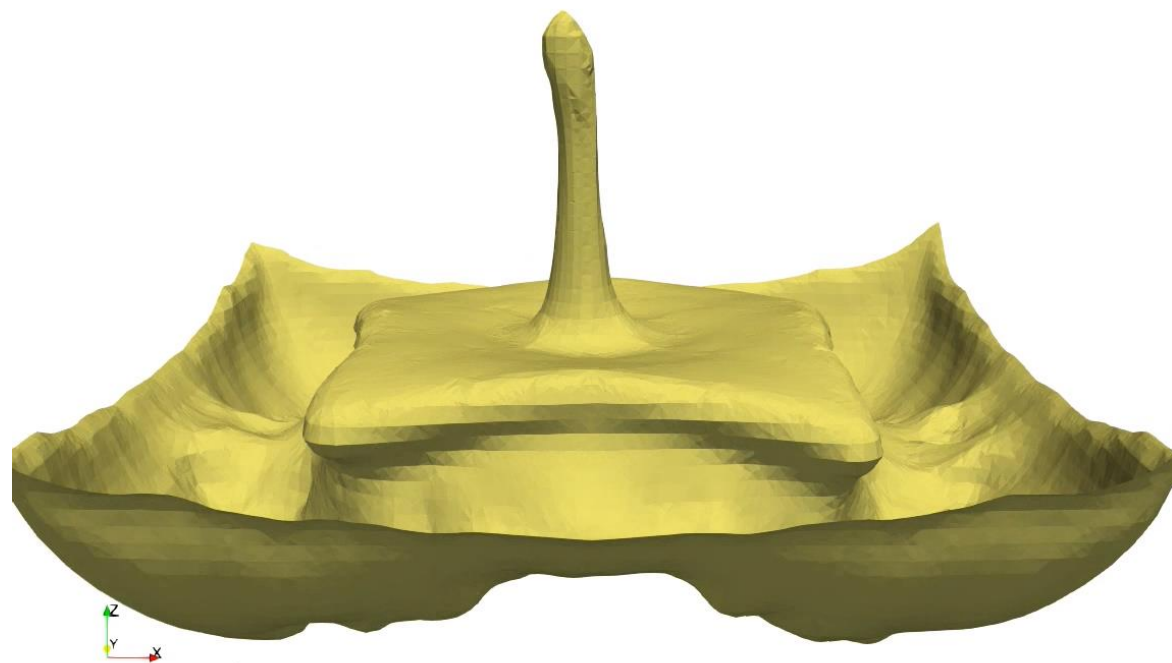


Мотивация

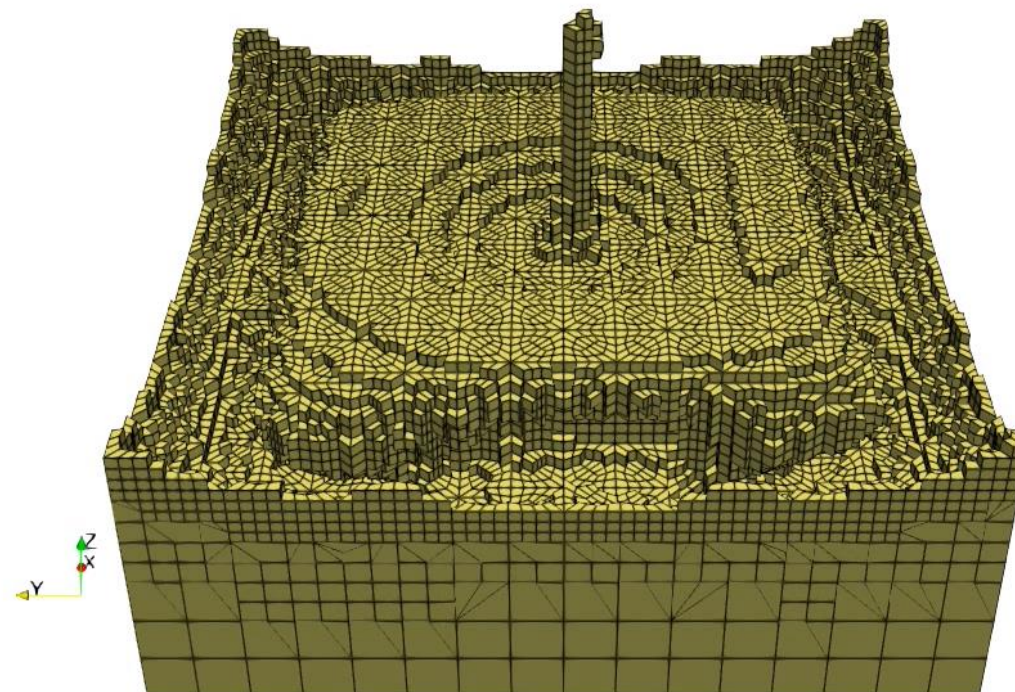
Задачи и приложения



Жидкость со свободной поверхностью



Поверхность



Расчетная сетка

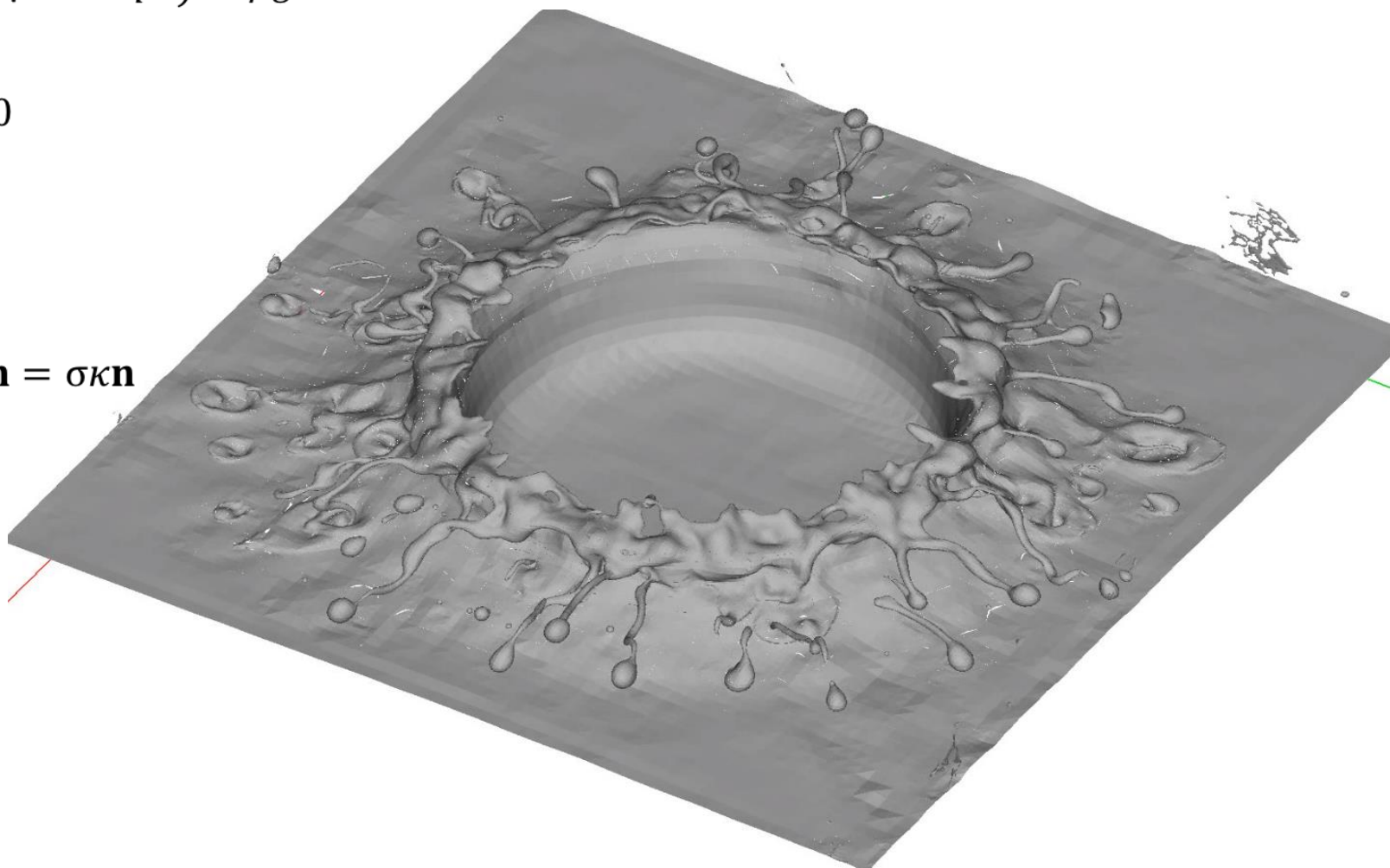


Жидкость со свободной поверхностью

Система:
$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu \nabla \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \rho g \nabla z$$
$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$$
$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{u}) = 0$$
$$|\nabla \varphi| = 1$$

Условие на поверхности:

$$-\frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2} \mathbf{n} + p \mathbf{n} = \sigma \kappa \mathbf{n}$$

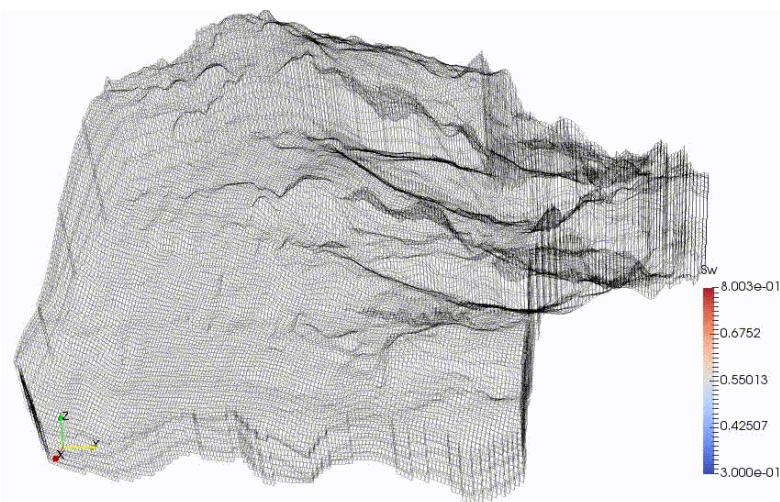
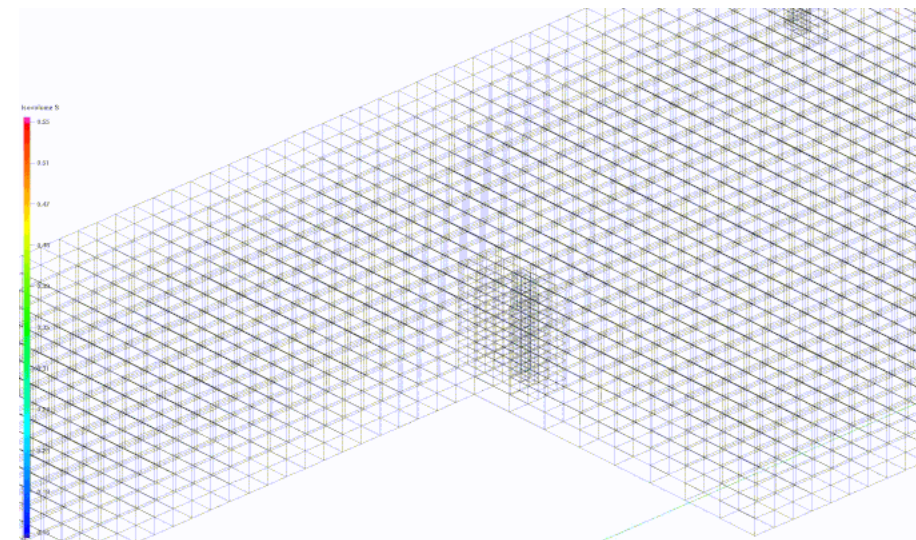




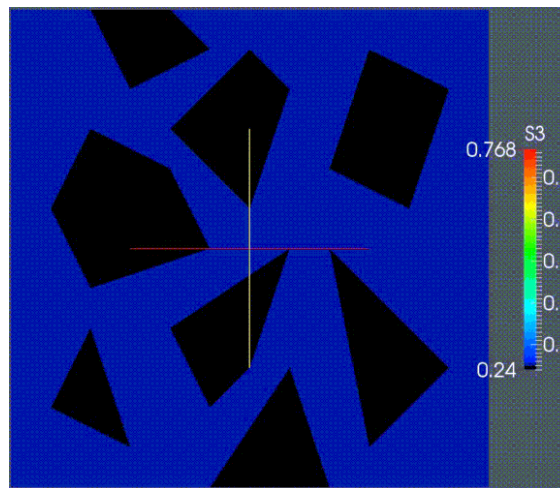
Нефть и Газ

Система:

$$\frac{\partial \rho_w \theta S_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_w \mathbb{K}(\nabla p - \rho_w g \nabla z)) = q_w$$
$$\frac{\partial \rho_o \theta S_o}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_o \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_o - \rho_w g \nabla z)) = q_o$$
$$\frac{\partial \rho_g \theta (R S_o + S_g)}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_g \mathbb{K}(\nabla p - \nabla P c_g - \rho_g g \nabla z)) = q_g$$



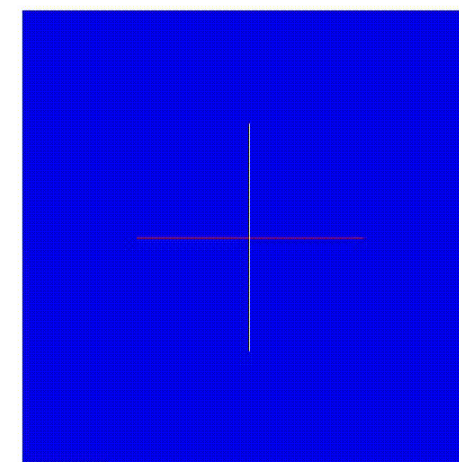
Сложная геология



Экстремальная анизотропия

(video slide)

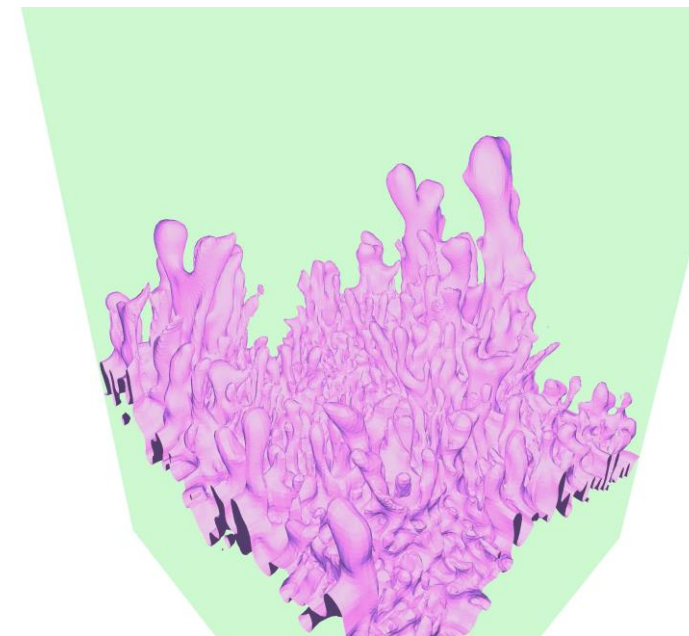
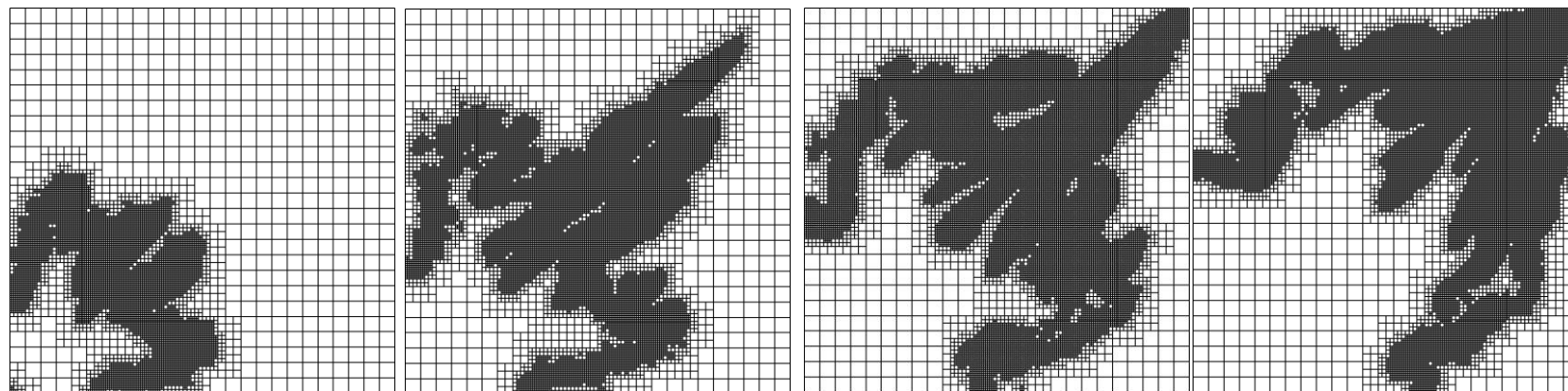
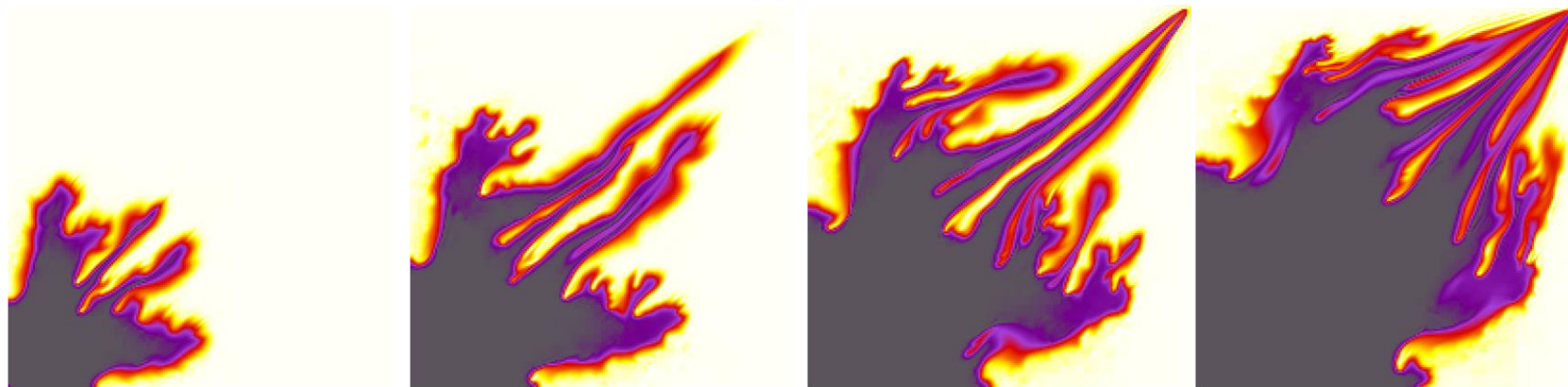
Адаптивные сетки



Трещины



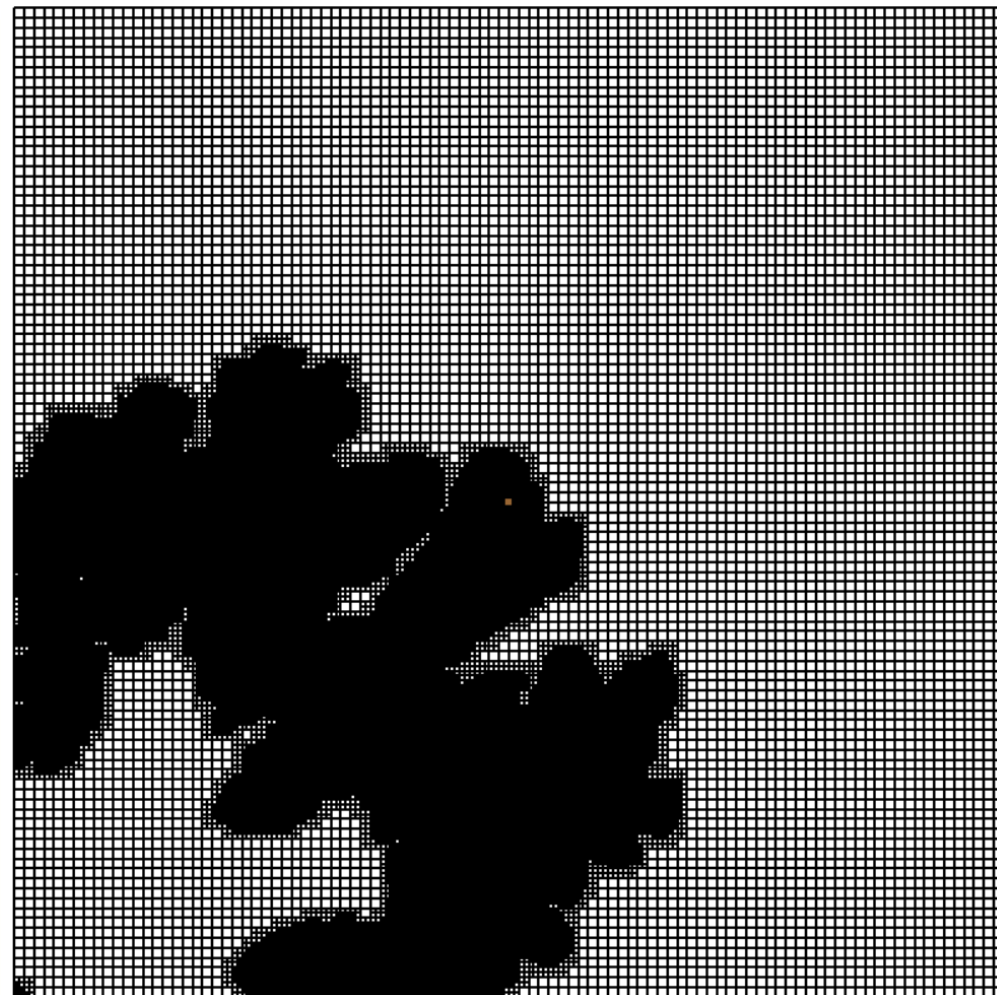
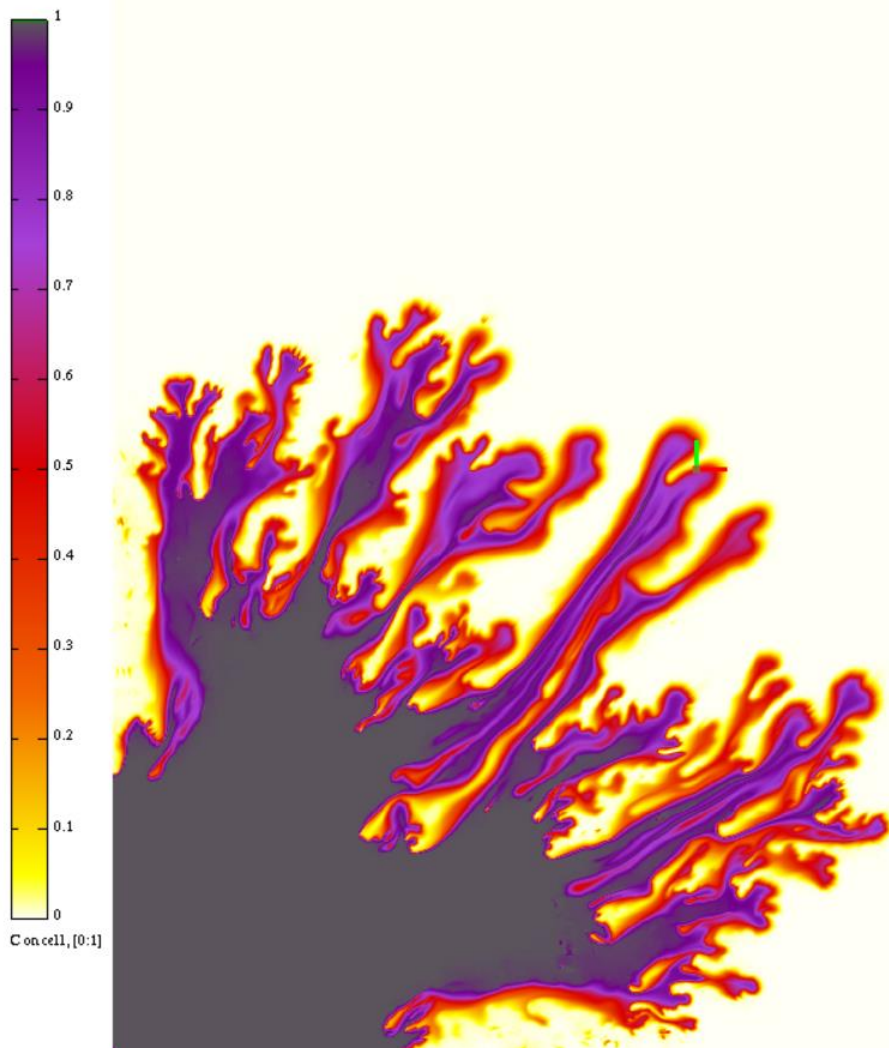
Нефть и Газ



Трёхмерный расчет



Нефть и Газ: Ветвление

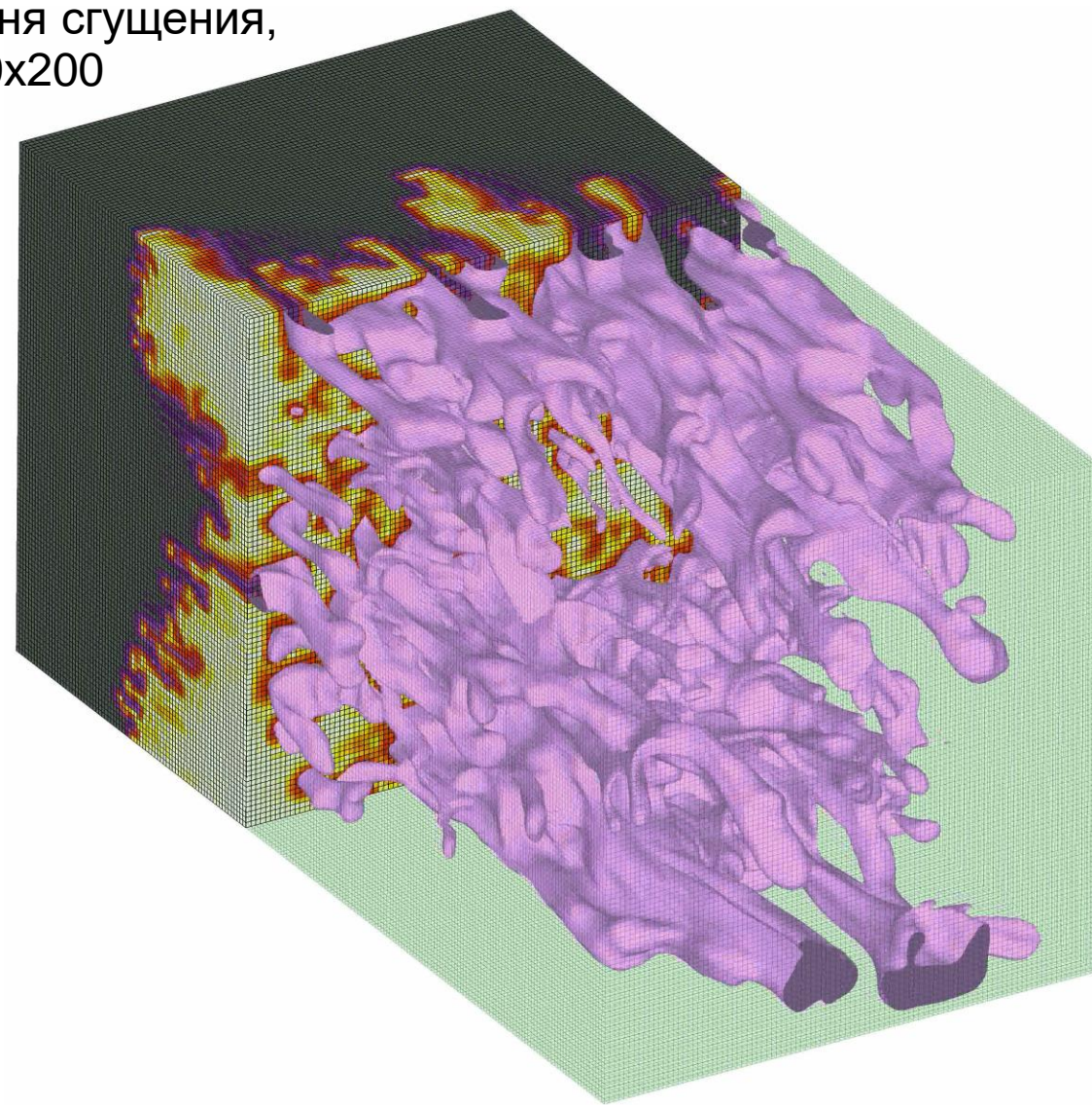
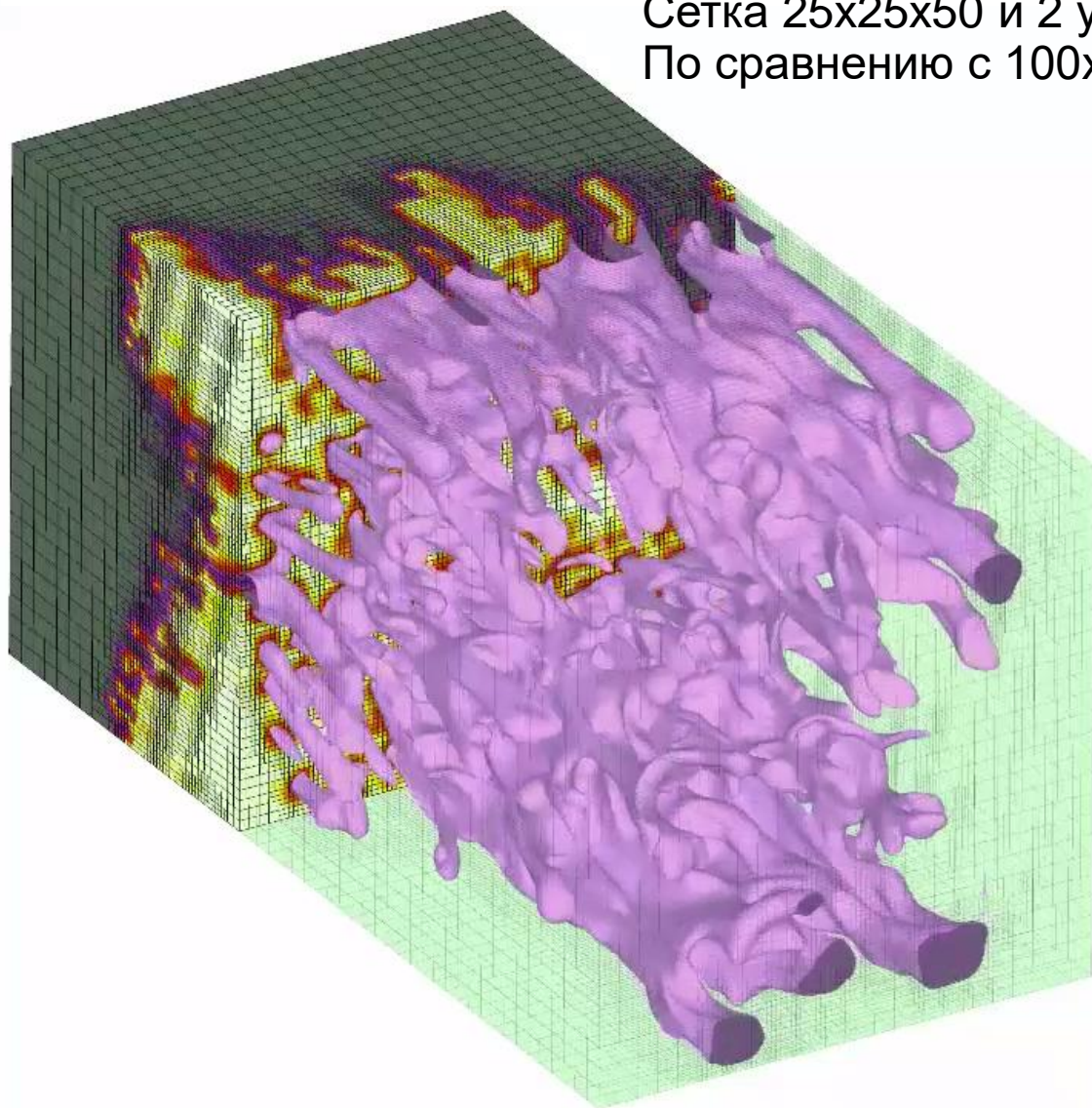


Сетка 100x100 и 4 уровня сгущения,
Параллельный расчет



Нефть и Газ: Ветвление

Сетка 25x25x50 и 2 уровня сгущения,
По сравнению с 100x100x200

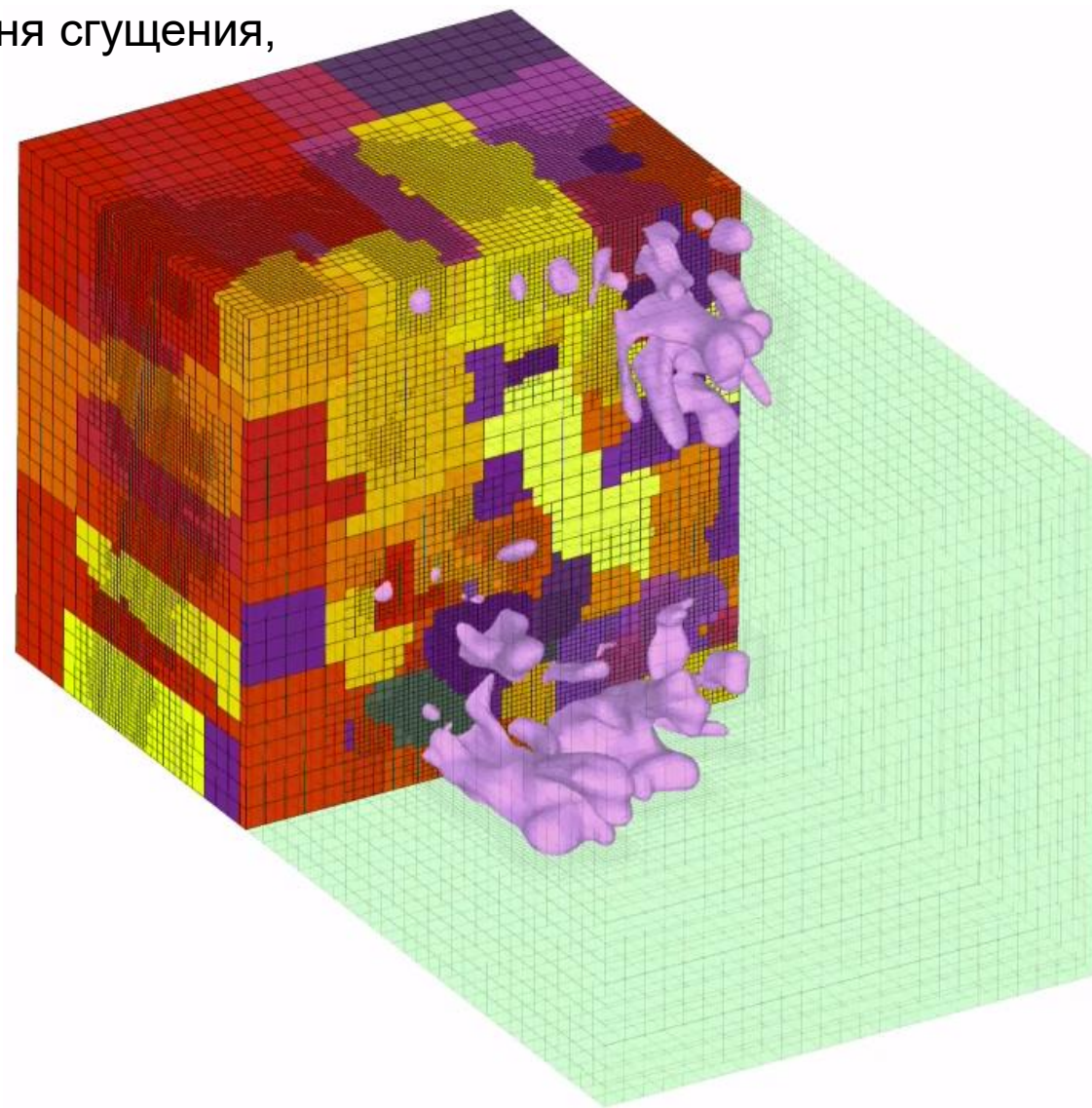
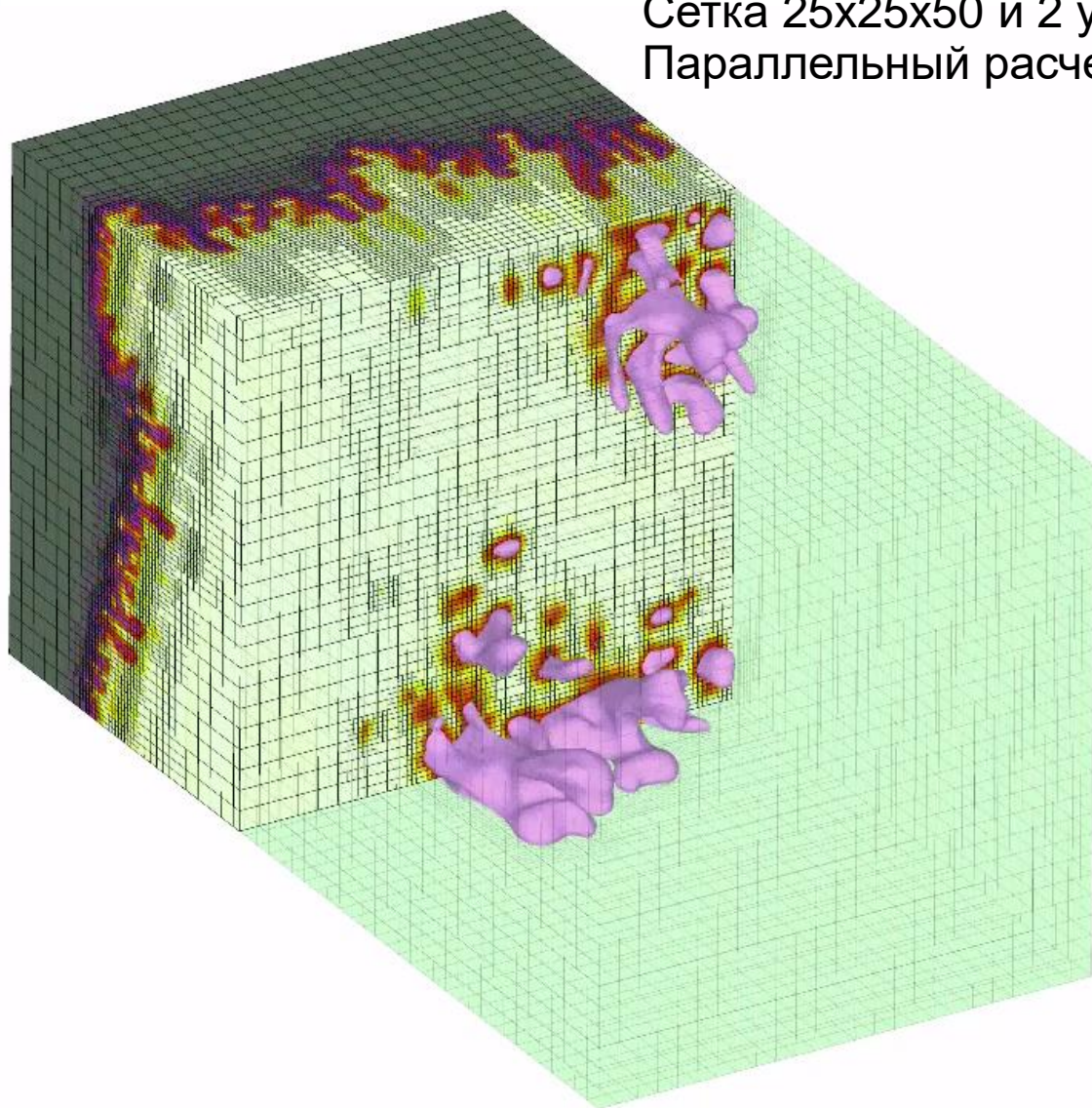


(video slide)



Нефть и Газ: Ветвление

Сетка 25x25x50 и 2 уровня сгущения,
Параллельный расчет



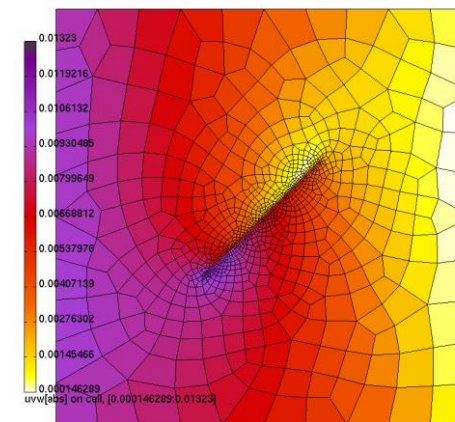
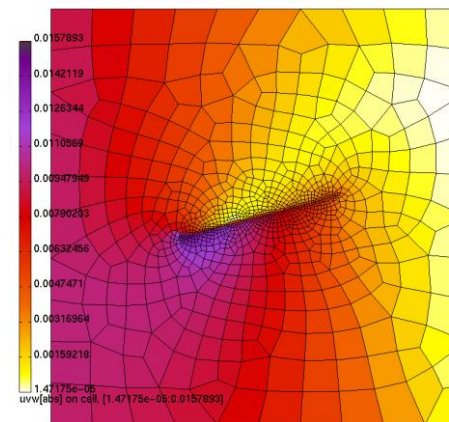
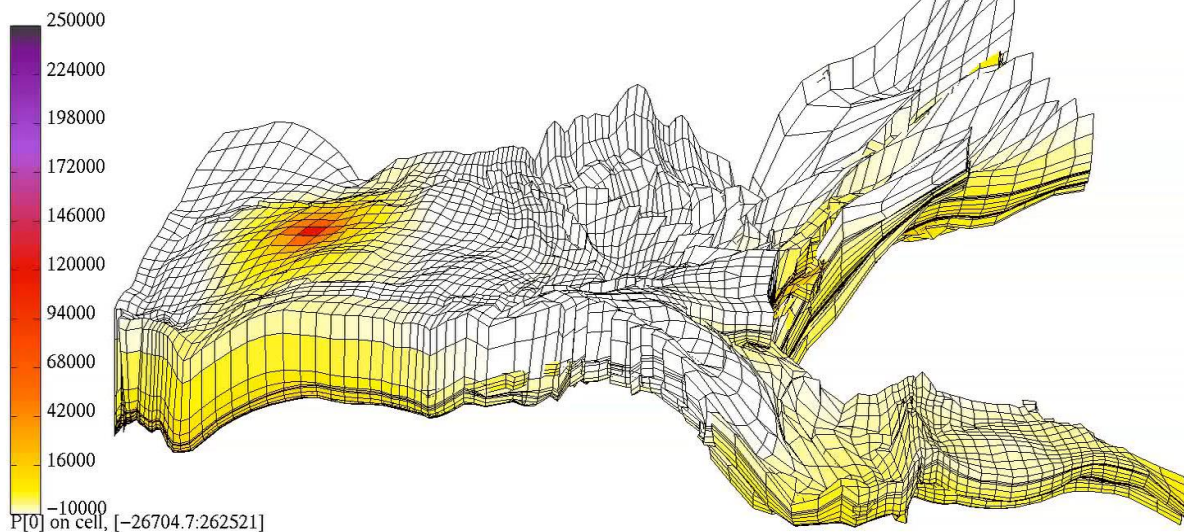
(video slide)



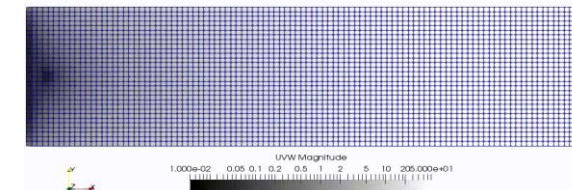
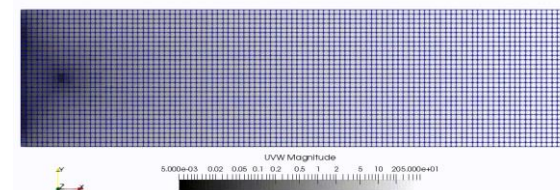
Нефть и газ: пороупругость

- Система:

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\mathbb{C}:\boldsymbol{\epsilon} - \mathbb{B}p) &= \rho g \nabla z, \\ \frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\mu^{-1} \mathbb{K}(\nabla p - \rho_f g \nabla z) \right) + \mathbb{B}:\frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}}{\partial t} &= q. \end{aligned}$$



Контактная механика с трением



Образование трещин

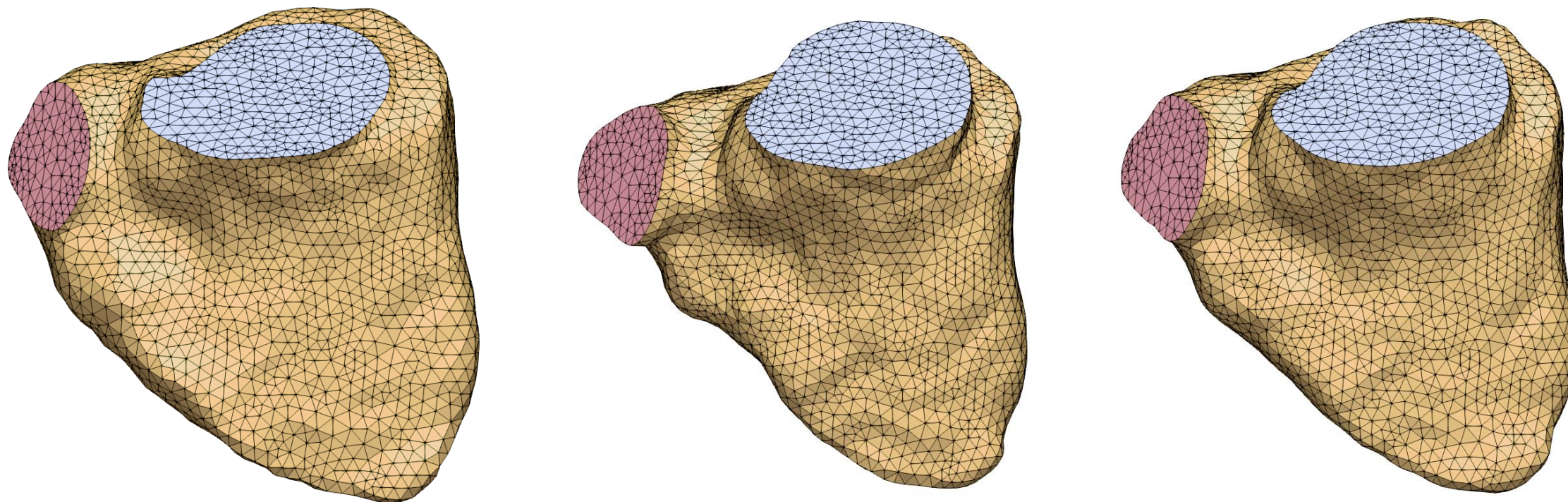


Течение крови в правом желудочке

Размеры области – 122 мм x 64 мм x 116 мм (начальный момент).

Плотность крови – $0.00106 \text{ г*мм}^{-3}$,

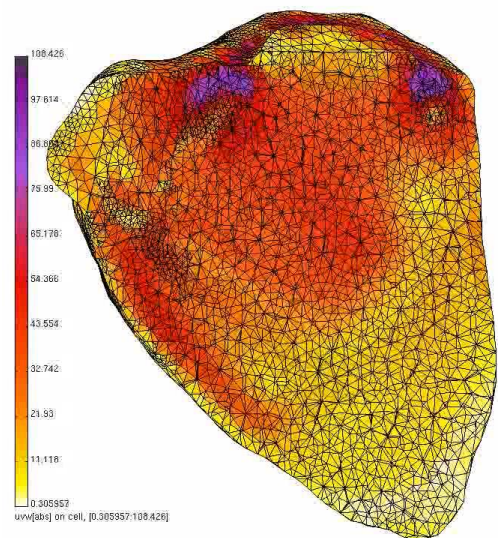
Вязкость крови – $0.0035 \text{ г*мм}^{-1}\text{*с}^{-1}$



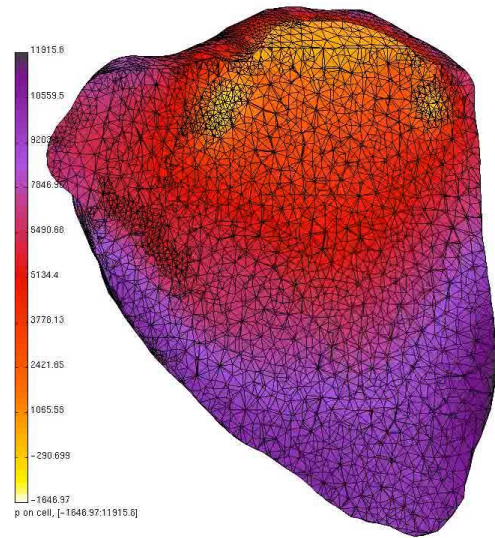
Сетка построена из сегментации последовательности снимков компьютерной томографии (Александр Данилов, ИВМ РАН)



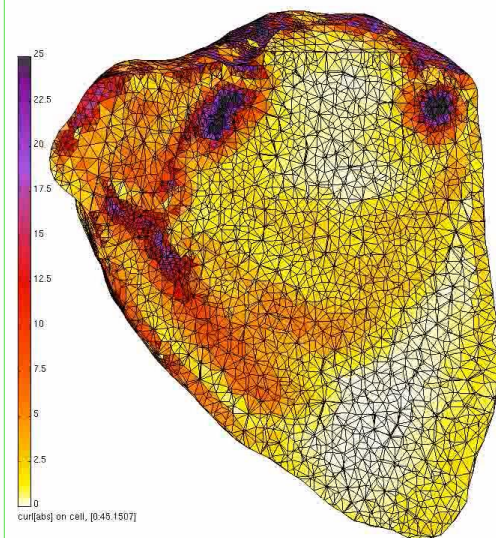
Течение крови в правом желудочке



Модуль
Скорости



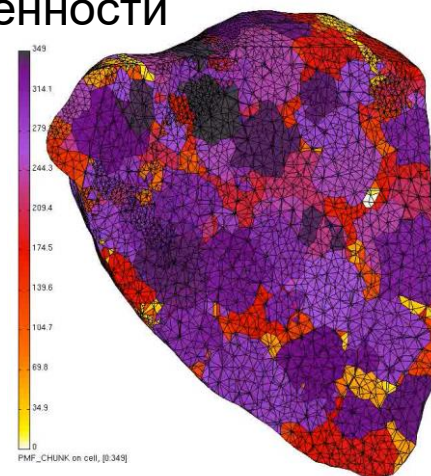
Давление



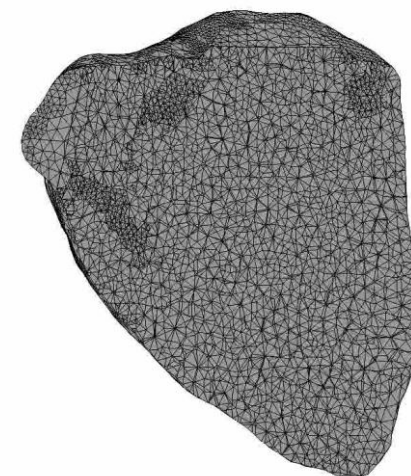
Модуль
Завихренности

Параллельный
расчет на 350 ядрах
суперкомпьютера
«Ломносов» 2

Особенность движения крови вызвана
движением сетки и переключением клапанов



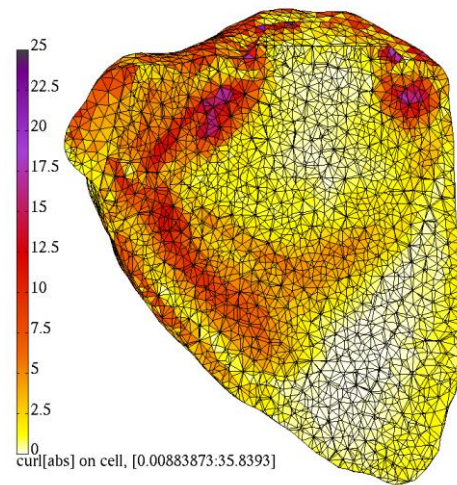
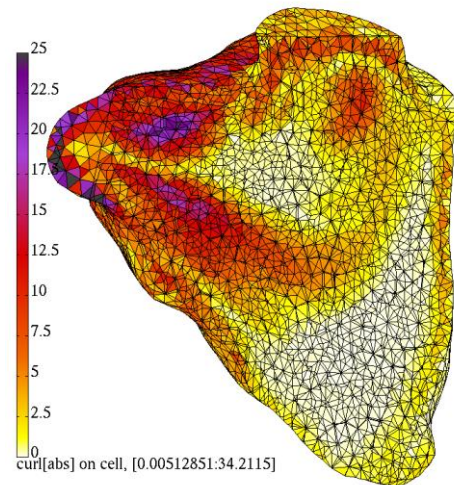
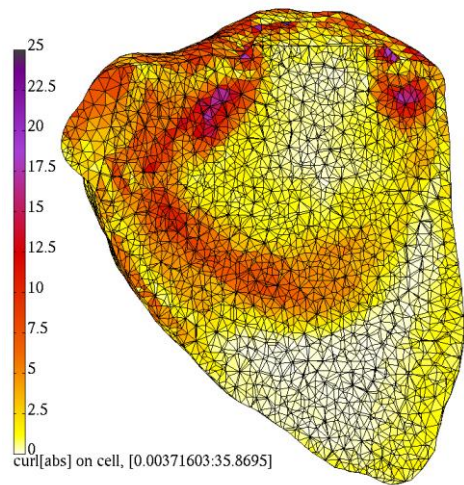
Распределение



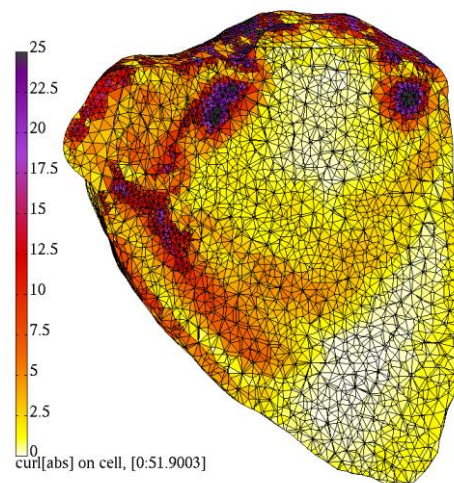
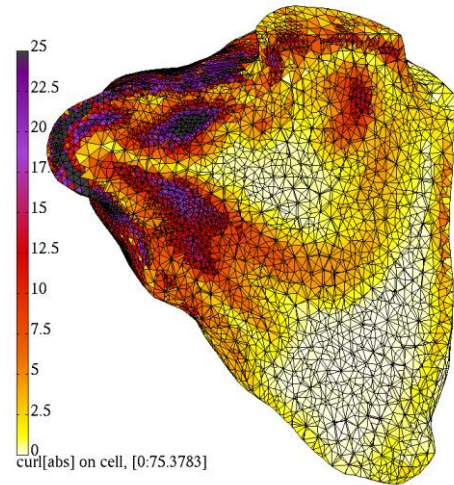
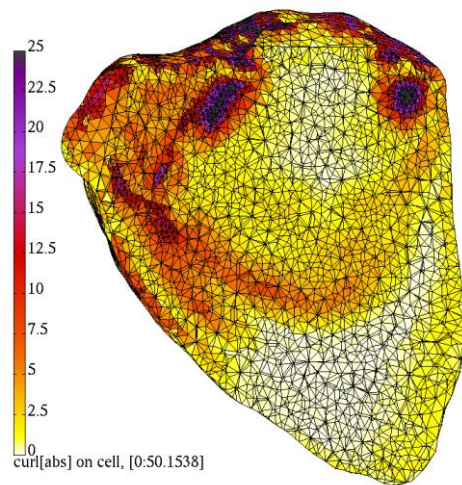
Сетка



Течение крови в правом желудочке



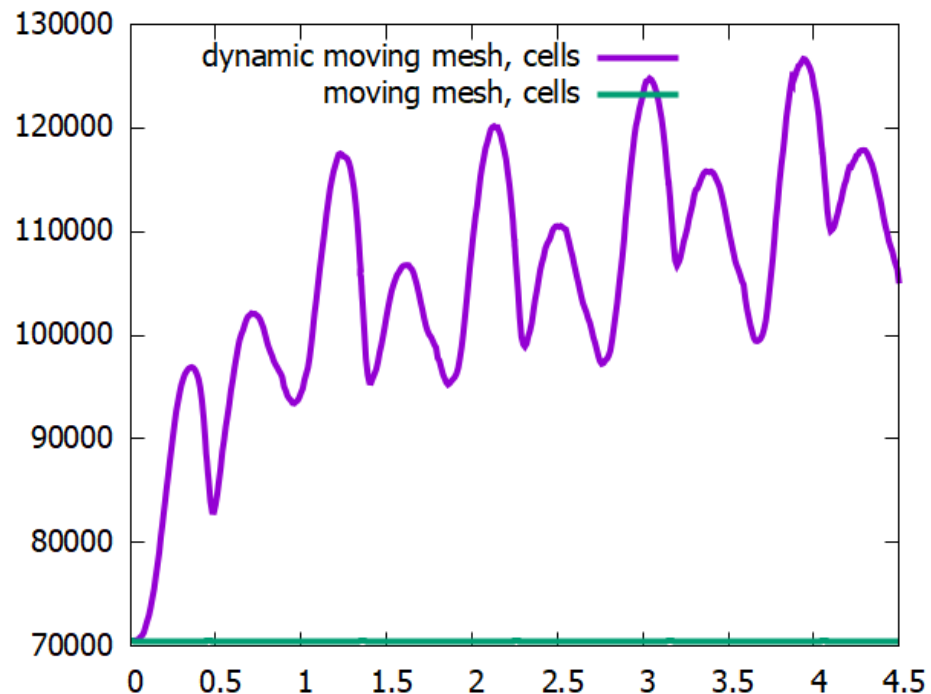
Завихренность
без адаптации
сетки



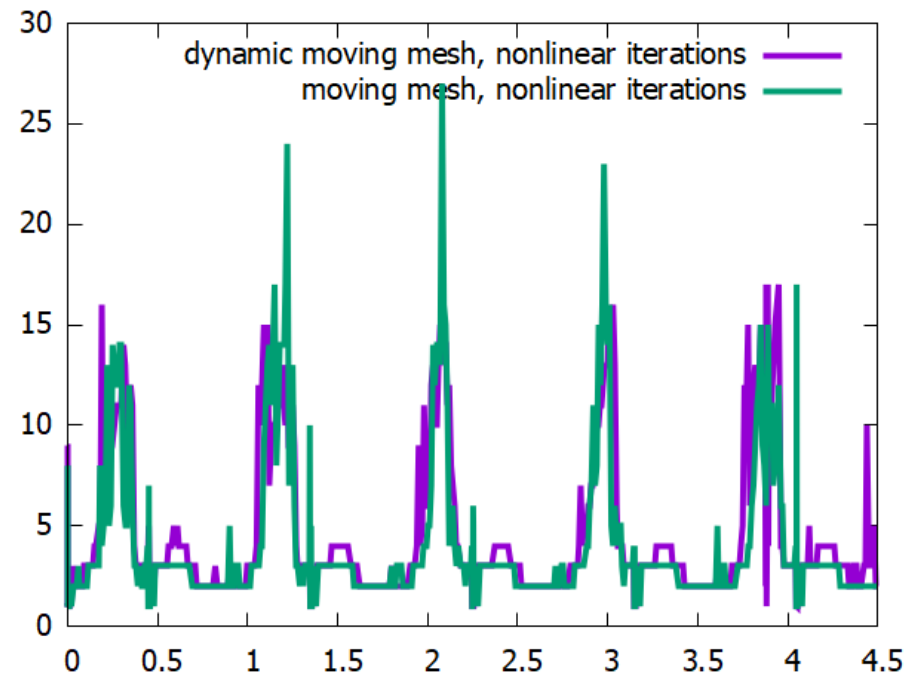
Завихренность
с адаптацией
сетки



Течение крови в правом желудочке



Изменение числа ячеек при адаптации



Число нелинейных итераций

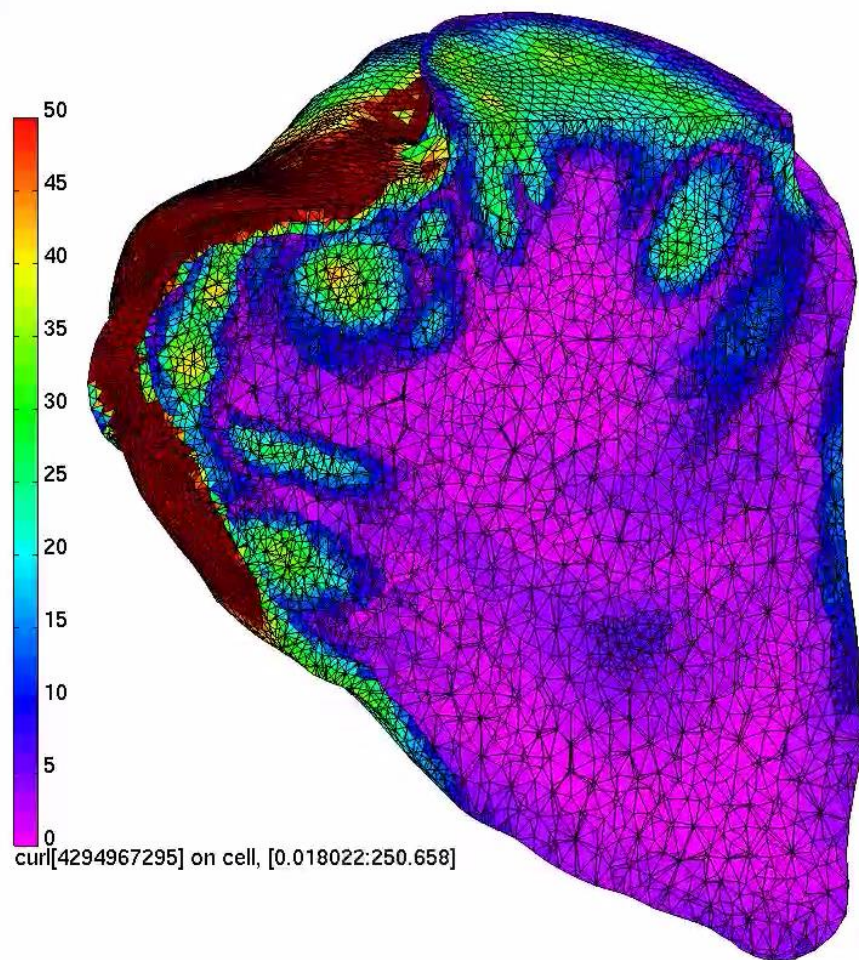
Рост числа нелинейных итераций при открытии и закрытии клапанов



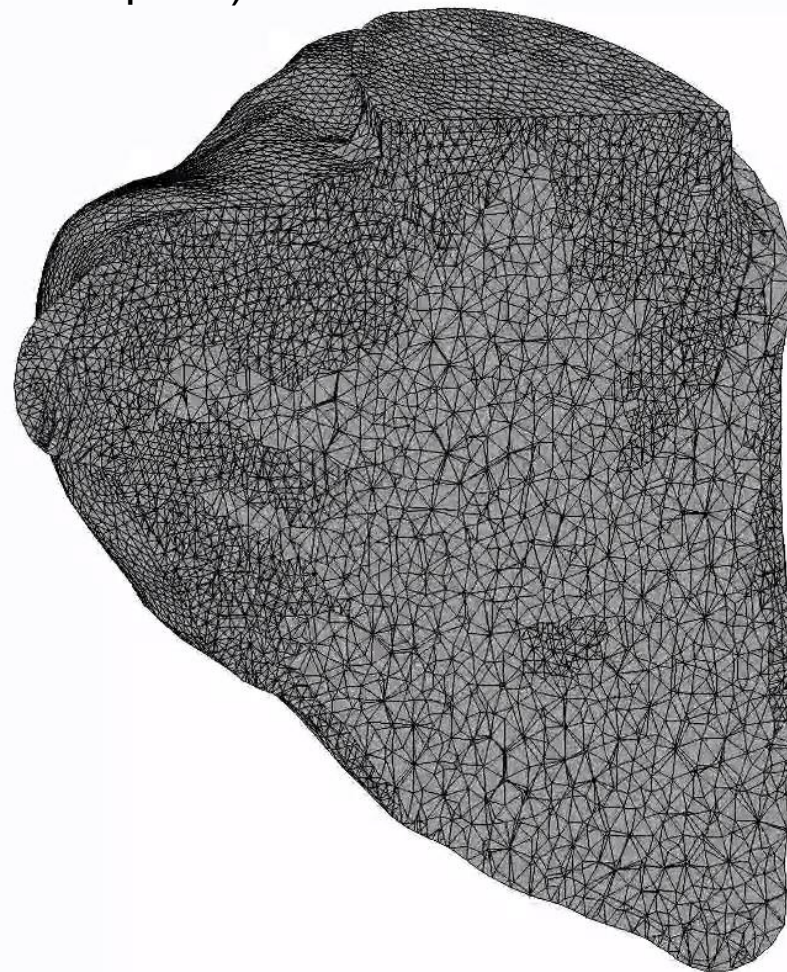
Подвижные динамические сетки

Плотность – $0.00105 \text{ г*мм}^{-3}$,

Вязкость – $0.000042 \text{ г*мм}^{-1}\text{*с}^{-1}$ (в сто раз менее вязкая, чем кровь)



Сгущение к модулю завихренности



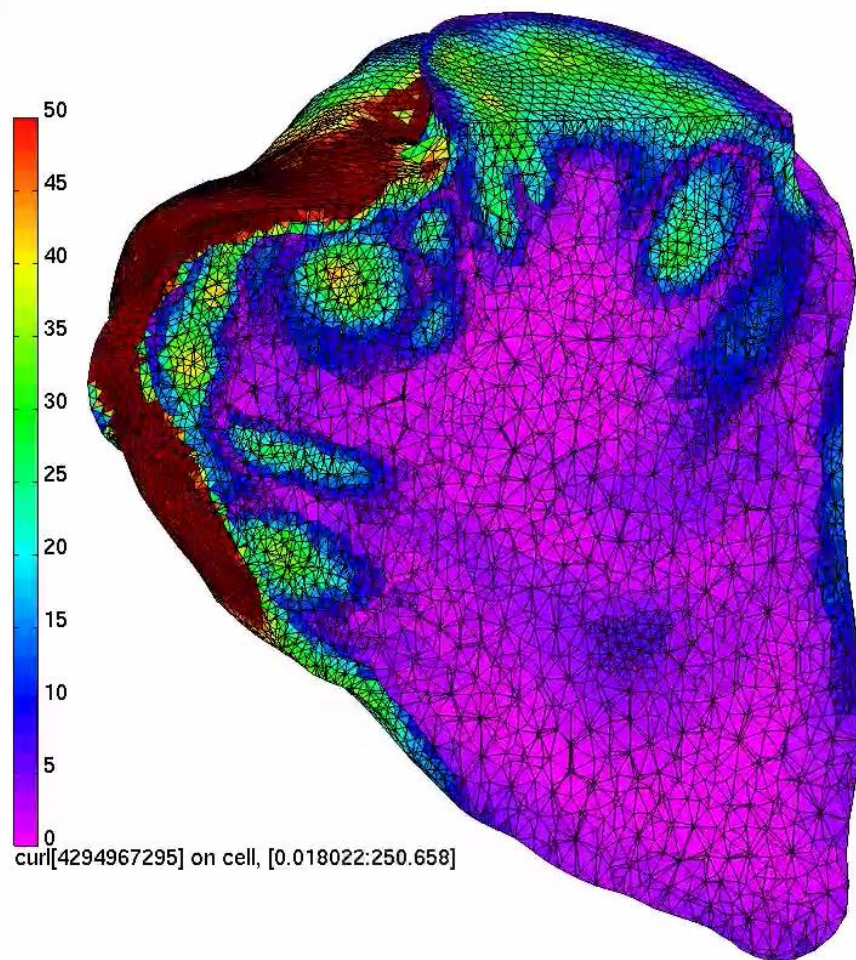
Сетка



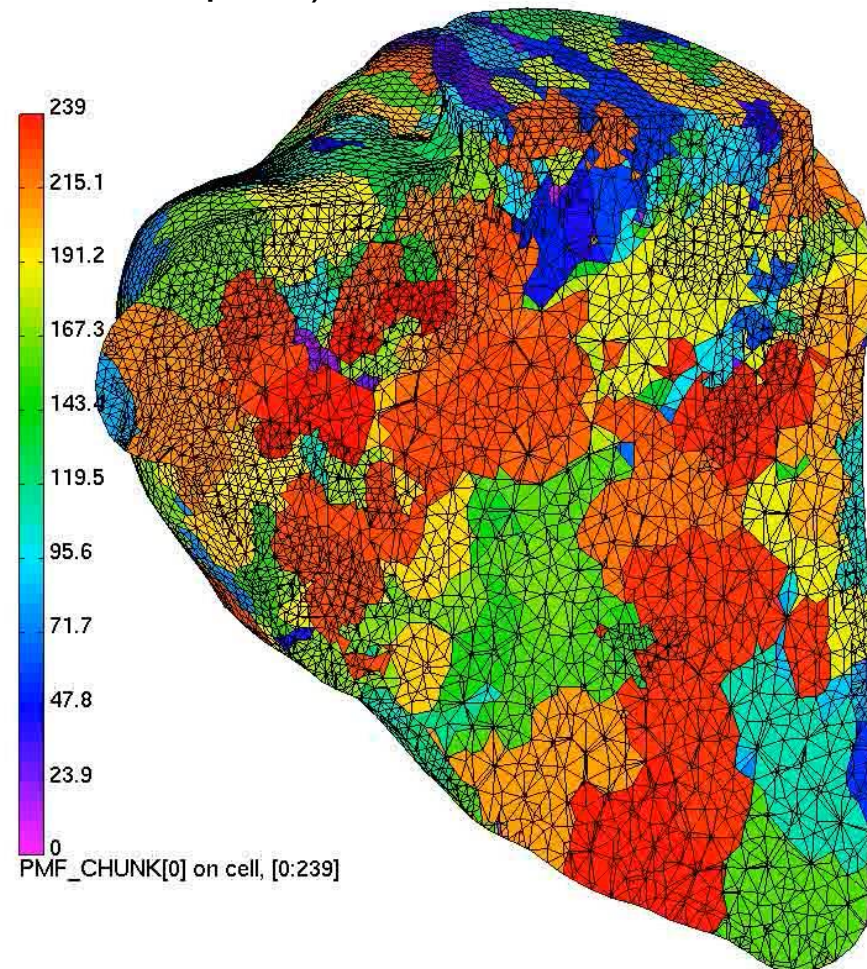
Подвижные динамические сетки

Плотность – $0.00105 \text{ г*мм}^{-3}$,

Вязкость – $0.000042 \text{ г*мм}^{-1}\text{*с}^{-1}$ (в сто раз менее вязкая, чем кровь)



Сгущение к модулю завихренности



Распределение сетки

(video slide)



Течение и коагуляция крови

- Система уравнений Навье-Стокса:

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

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

- Протромбин (II):

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

- Тромбин (IIa):

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

- Факторы свертываемости (IXa, Xa):

$$\frac{\partial B_a}{\partial t} + \operatorname{div}(B_a \mathbf{u} - D \nabla B_a) = (k_7 \phi_c + k_8 T)(B_0 - B_a) - k_9 A B_a,$$

- Антитромбин (ATIII):

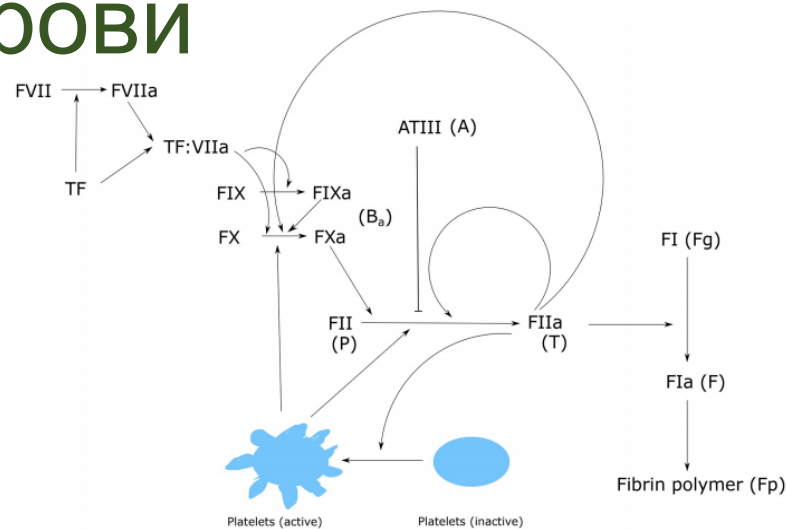
$$\frac{\partial A}{\partial t} + \operatorname{div}(A \mathbf{u} - D \nabla A) = -k_6 A - k_9 A B_a,$$

- Фибриноген (I):

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

- Фибрин (Ia):

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



- Фибрин-полимер:

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

- Неактивные тромбоциты:

$$\frac{\partial \phi_f}{\partial t} + \operatorname{div}(k(\phi_c, \phi_f)(\phi_f \mathbf{u} - D_p \nabla \phi_f)) = (k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f,$$

- Активные тромбоциты:

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \operatorname{div}(k(\phi_c, \phi_f)(\phi_c \mathbf{u} - D_p \nabla \phi_c)) = -(k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f,$$

- Мобильность тромбоцитов:

$$k(\phi_c, \phi_f) = \tanh\left(\pi \left(1 - \frac{\phi_c + \phi_f}{\phi_{max}}\right)\right),$$

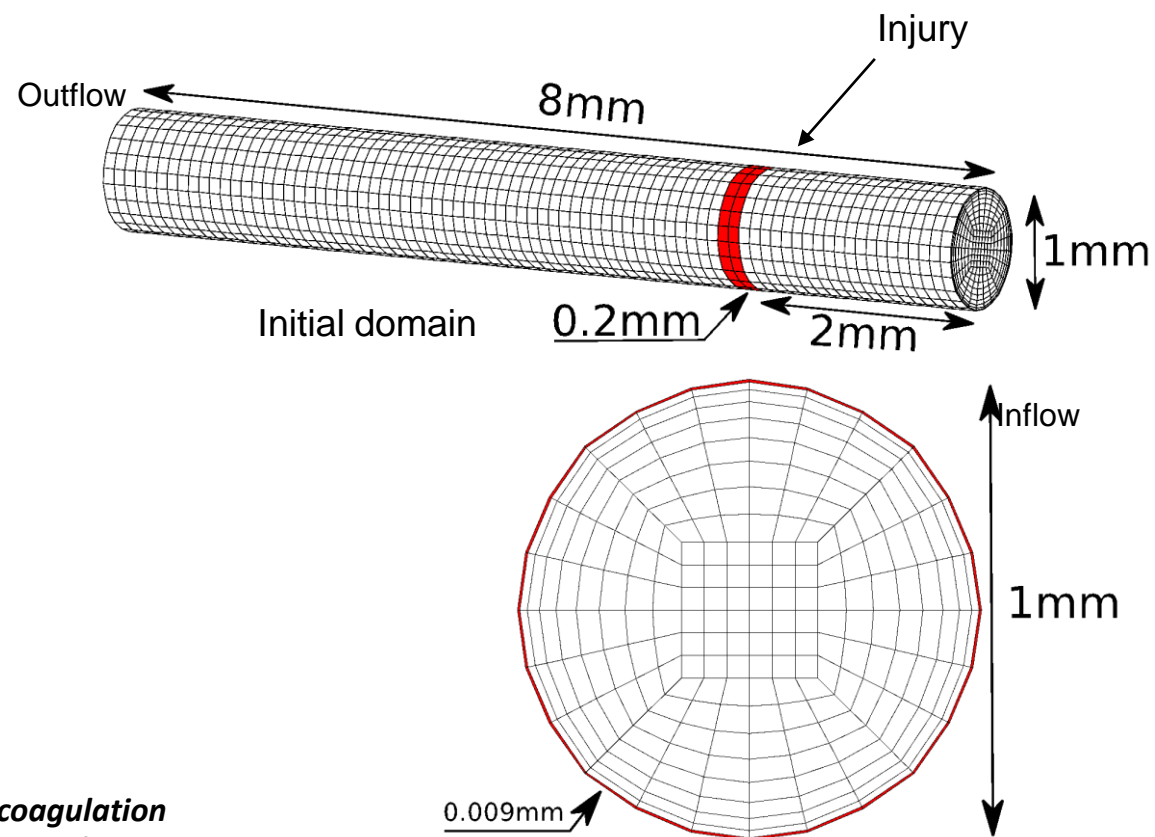
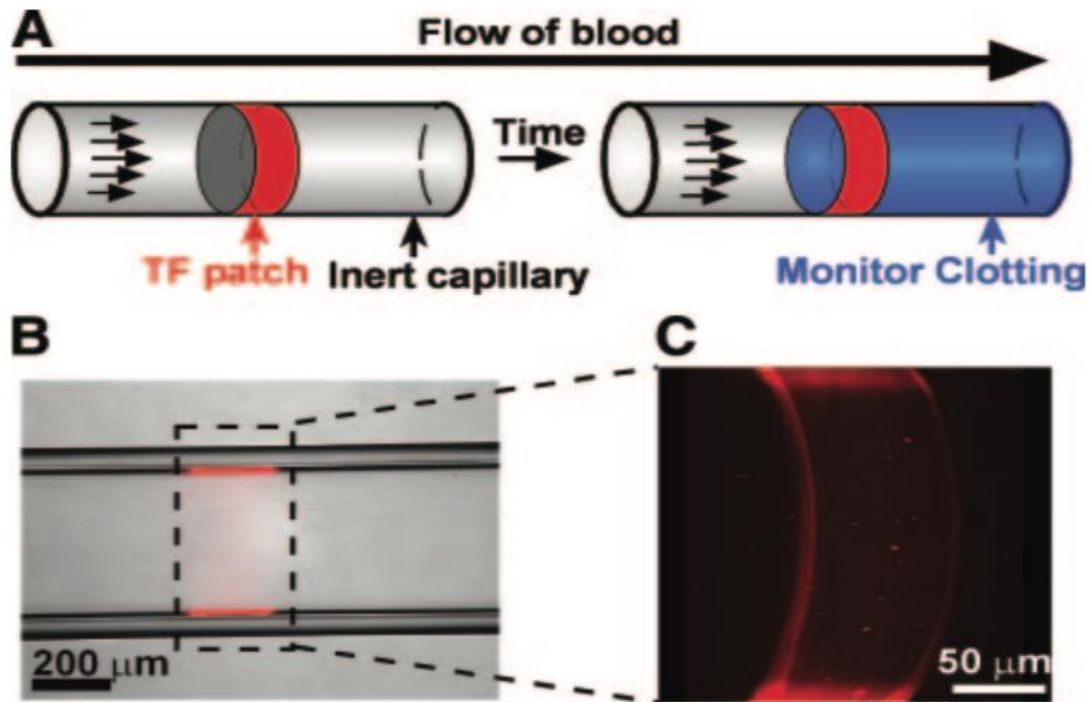
- Проницаемость тромба:

$$\frac{1}{K_f} = \frac{16}{\alpha^2} \phi_p^{\frac{3}{2}} (1 + 56 \phi_p) \frac{\phi_{max} + \phi_c}{\phi_{max} - \phi_c}, \quad \phi_p = \min\left(\frac{7}{10}, \frac{F_p}{7000}\right).$$

Совместное полностью неявное решение приводит к огромной **седловой** системе



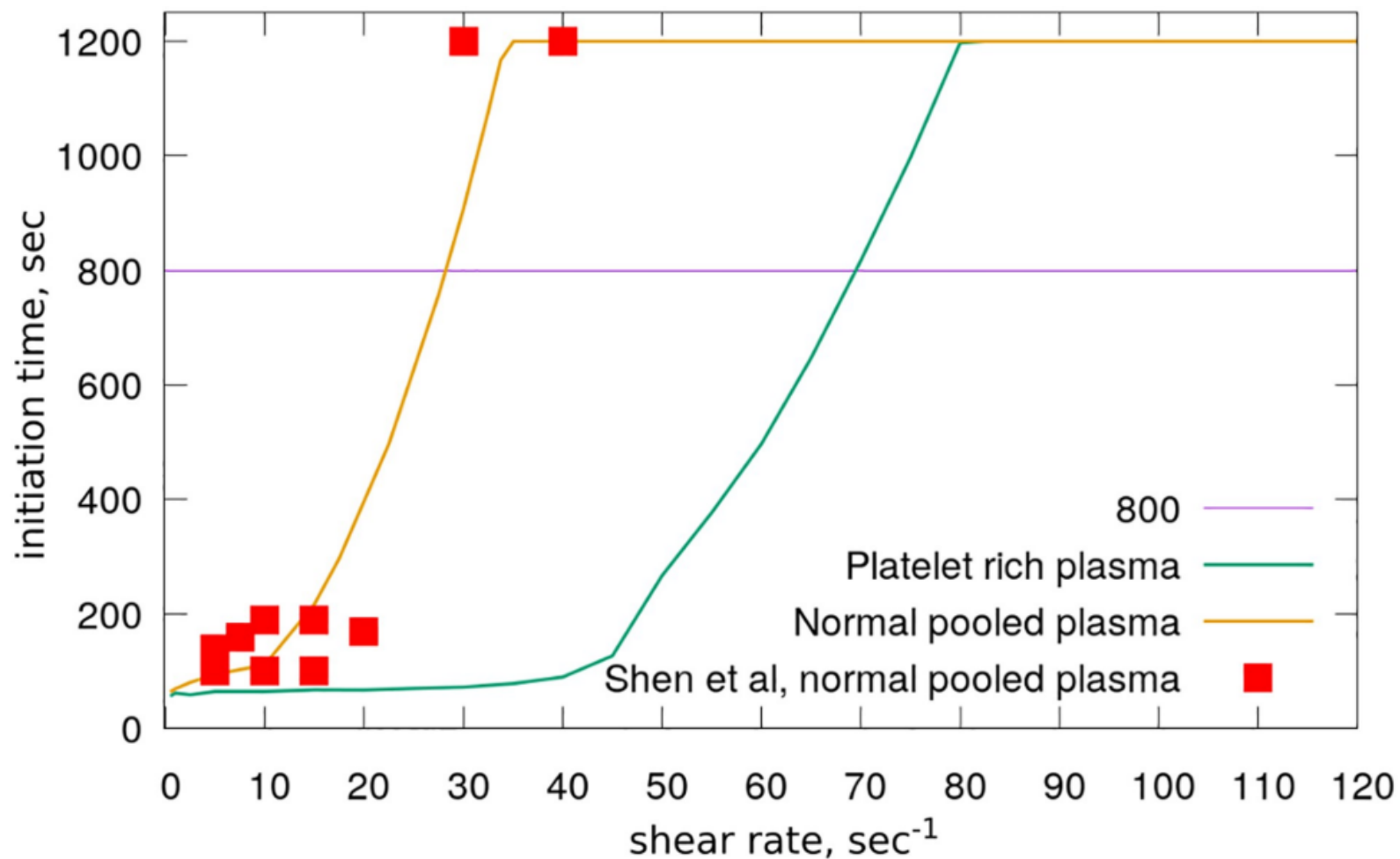
Течение и коагуляция крови



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.* 2008, 28(11): 2035–2041.



Течение и коагуляция крови

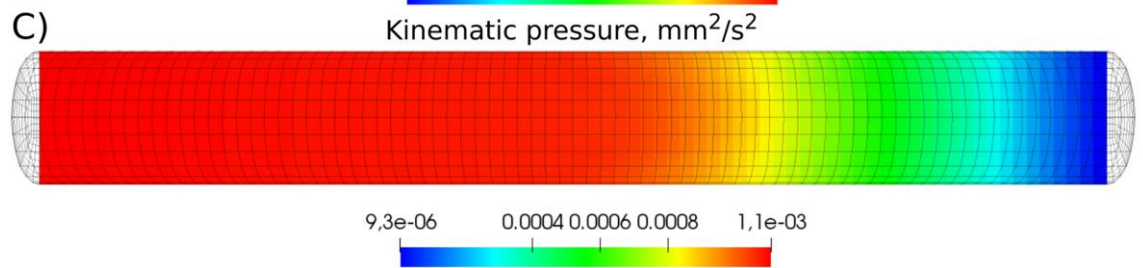
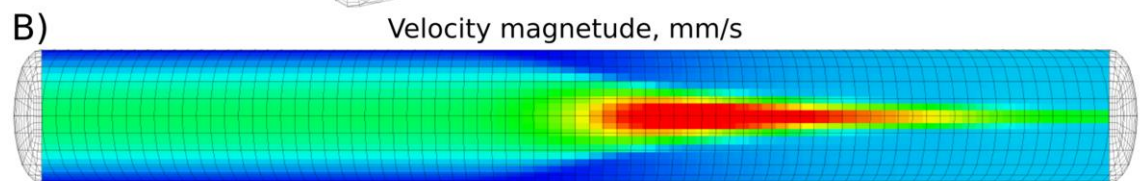
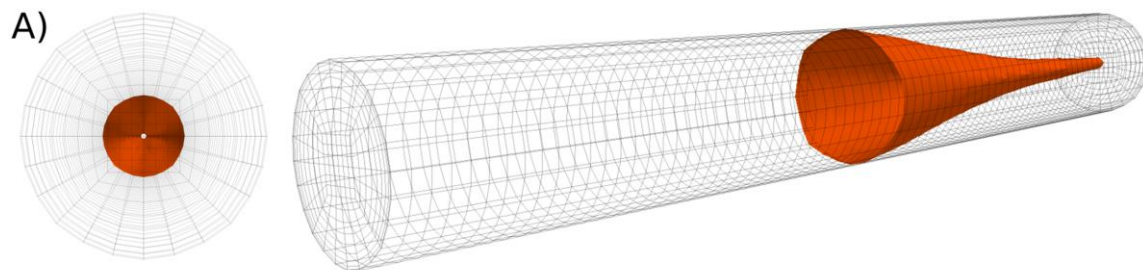


Bouchnita, A., Terekhov, K., Nony, P., Vassilevski, Y., & Volpert, V.: ***A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous flow conditions.*** PloS one, 15(7), e0235392, 2020

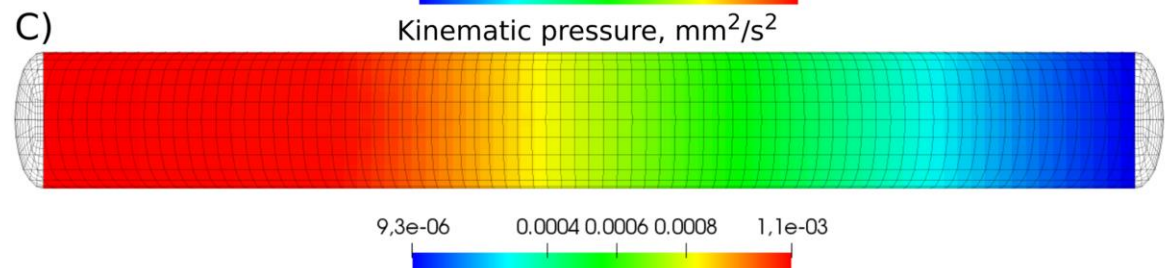
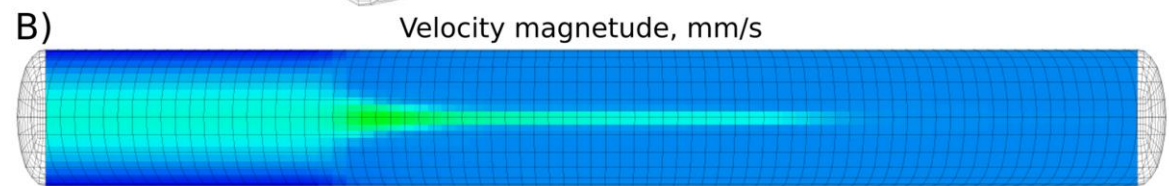
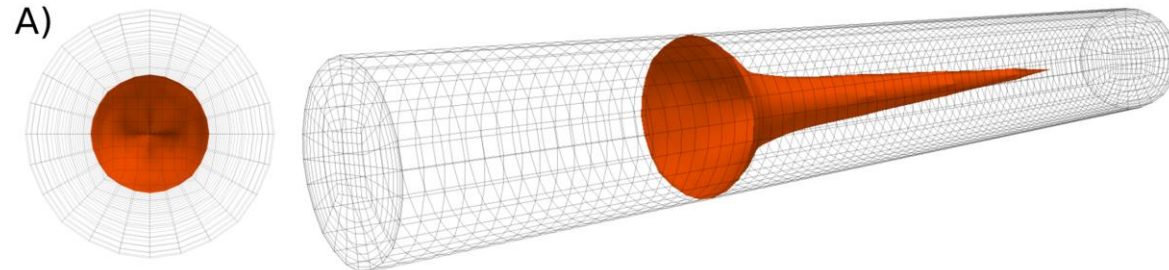


Течение и коагуляция крови

T=60s

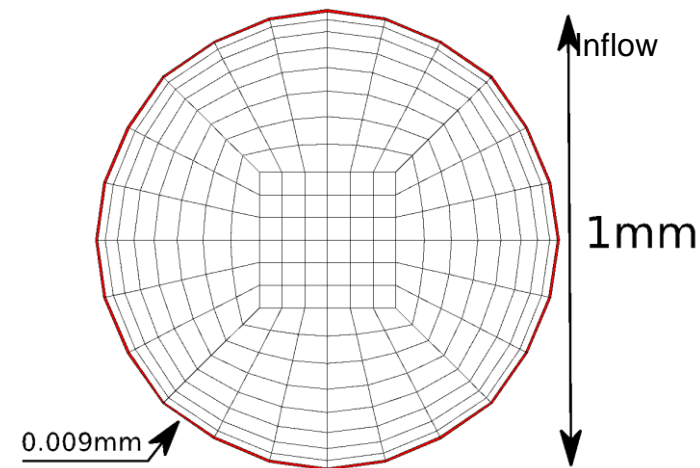
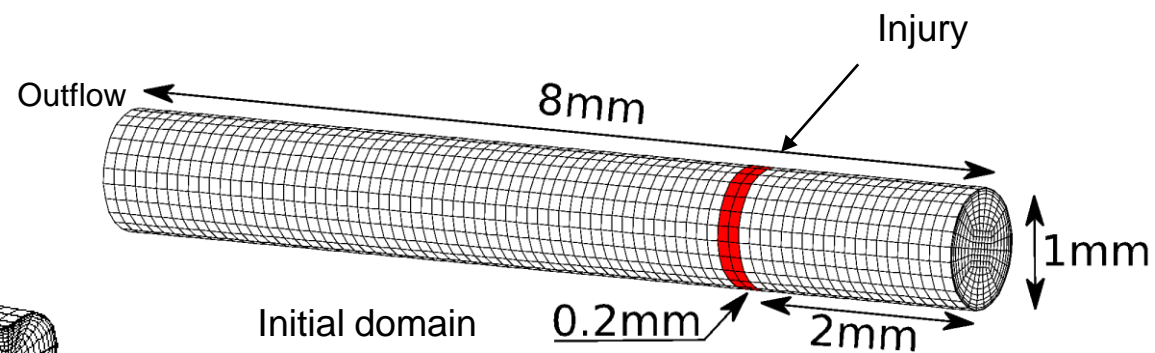
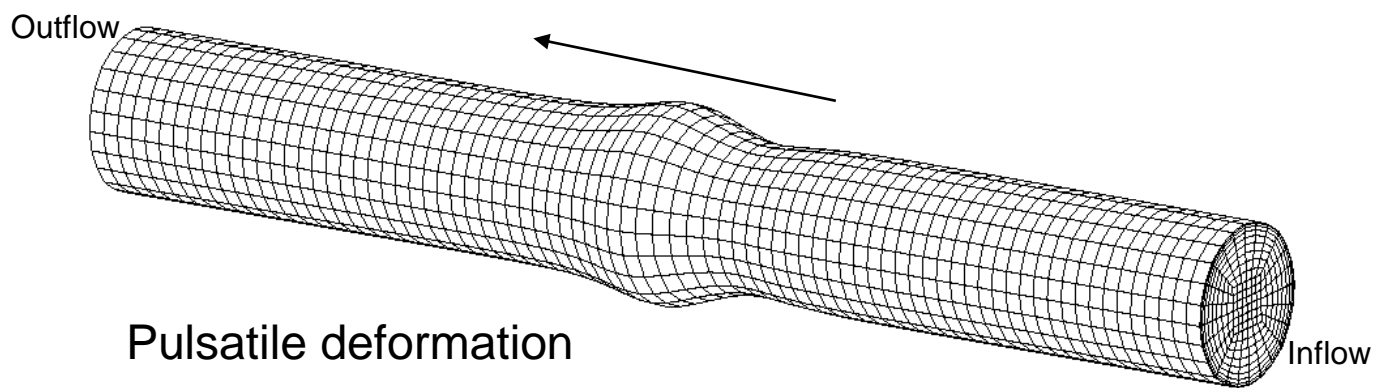
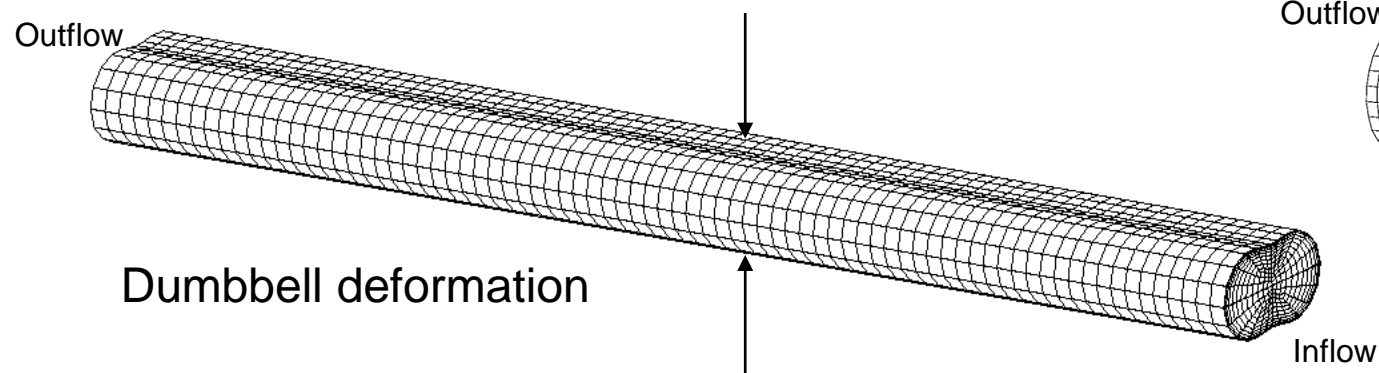


T=70s





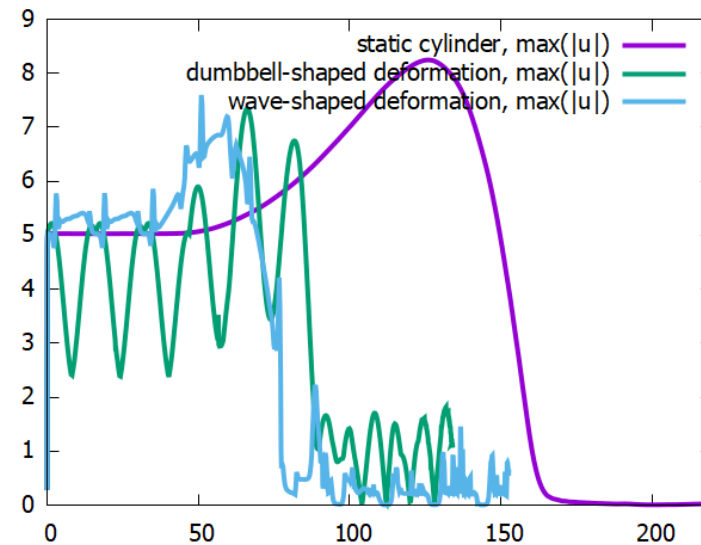
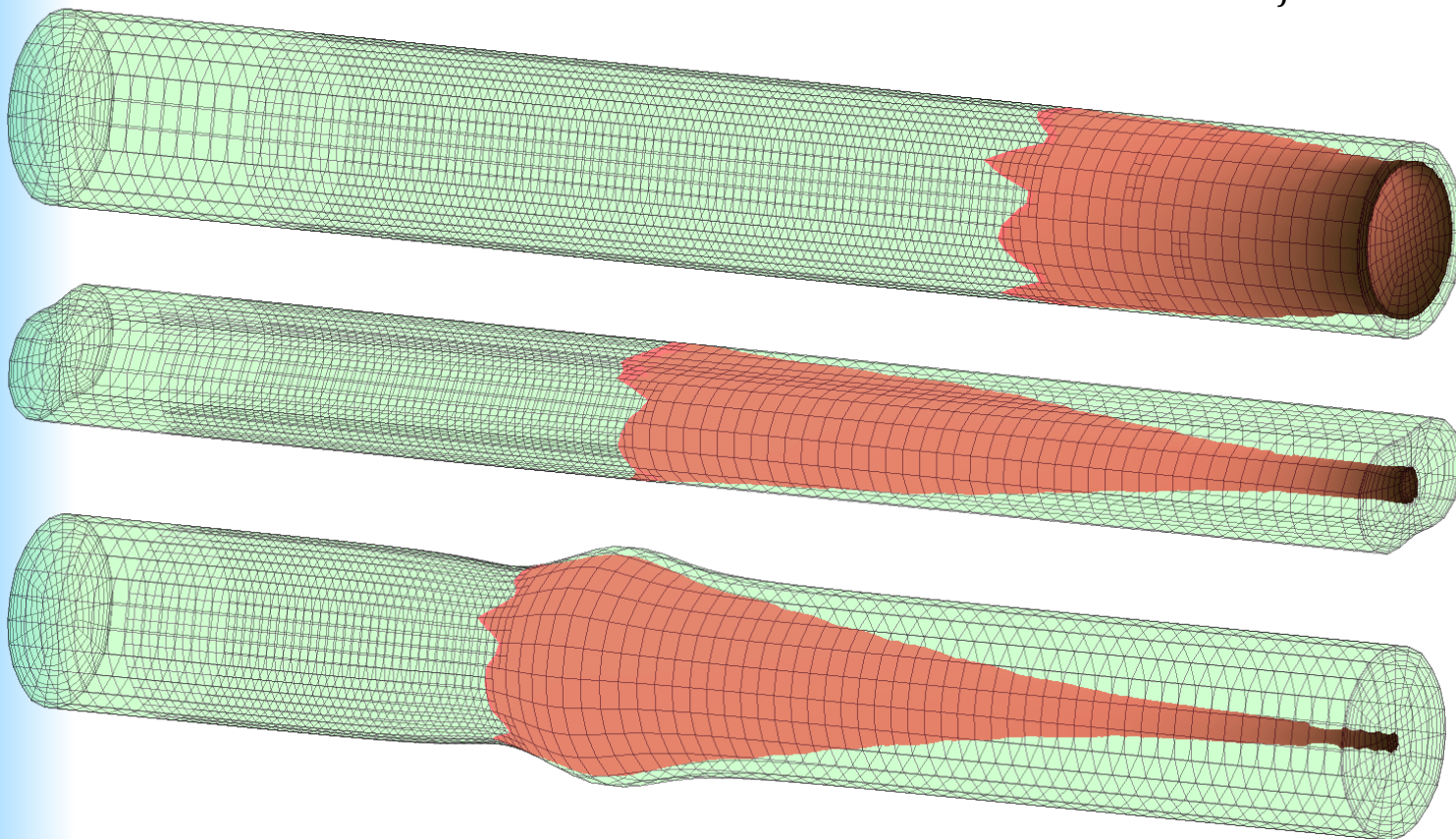
Течение и коагуляция крови



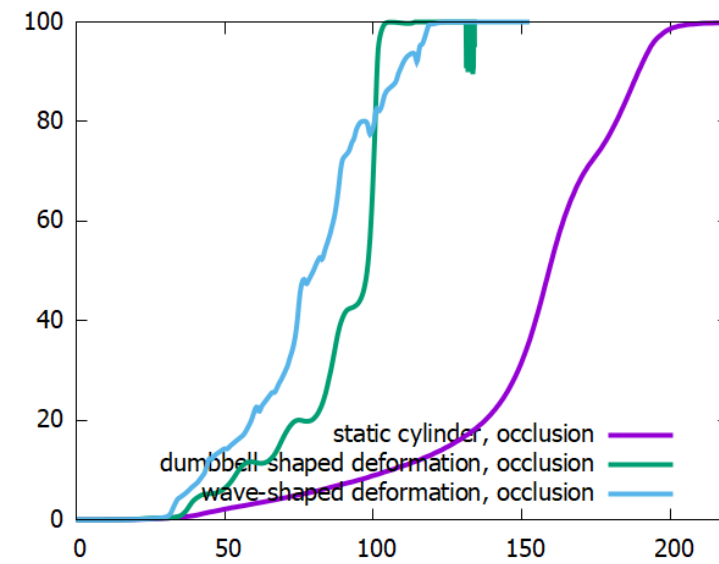


Течение и коагуляция крови

Сдвиговая скорость 20 s^{-1} ,
Нормальная плазма крови,
 $\tau = 79 \text{ с}$,
Изоповерхность $K_f^{-1} = 100 \text{ mm}^{-2}$



Maximal velocity

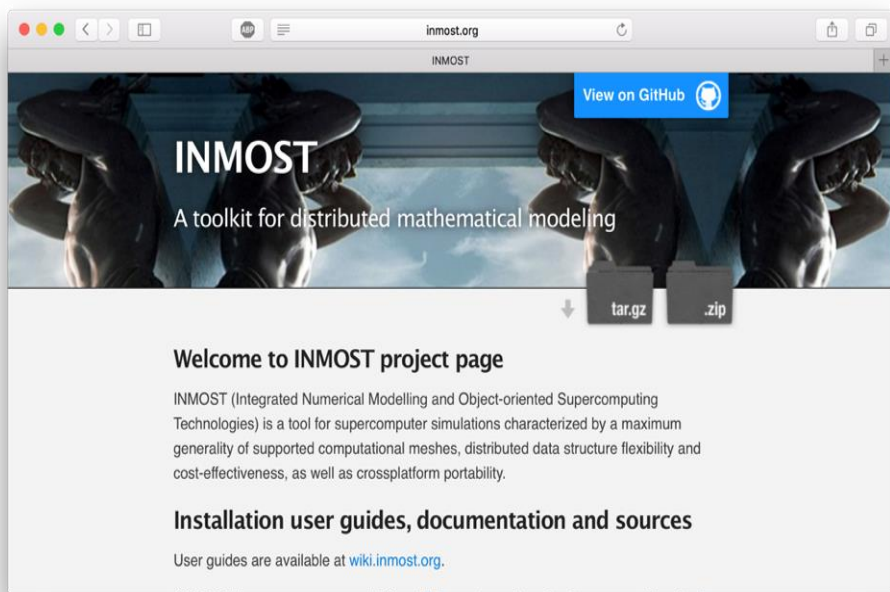


Volumetric occlusion



INMOST

Платформа для математического моделирования



Websites:

www.inmost.org

www.inmost.ru



More than **20** articles



INMOST

INMOST (www.inmost.org, www.inmost.ru) это аббревиатура:

Integrated

Numerical

Modeling and

Object-oriented

Supercomputing

Technologies

Интегрированные

Объектно-ориентированные

Суперкомпьютерные

Технологии

Численного

Моделирования

- Распределенные сетки
 - **подвижные**
 - **адаптивные**
- Сборка распределенных СЛАУ
- Параллельное решение СЛАУ
- Автоматическое дифференцирование
- Сборка нелинейных систем
- Совмещение неизвестных и моделей
- Дискретизации: **МКЭ**, **МКО**

Первая версия появилась в 2012 году во время стажировки в Exxon-Mobil

Разработчики: Кирилл Терехов, Кирилл Никитин, Александр Данилов, Иван Капырин, Алексей Чернышенко (ИВМ РАН, ИБРАЭ РАН), Игорь Коньшин, Игорь Капорин (ВЦ РАН) Дмитрий Багаев, Андрей Бурачковский (МГУ), Руслан Янбарисов, Алексей Лёгкий, Сергей Петров, Иван Бутаков (МФТИ), Тимур Гарипов, Павел Томин, Кристина Майер (Стэнфорд), Акмад Абушаика (НВКУ), Лонглонг Ли (ИМ КАН), и др.



Востребованность

Пользователи:

- **ИВМ РАН** - в нашей группе (Юрия Василевского), кардио-электрофизиология совместно с **НИИ Механики МГУ**, в группе геофизиков (Николая Яковлева)
- **ИБРАЭ РАН** – лаборатория Ивана Капырина, код GeRa (коммерческий код для захоронения ядерных отходов и гидрологии)
- **НОЦ Газпромнефть-НГУ** – группа Сергея Головина, задачи авто-ГРП, **курс лекций по INMOST (<https://boogie.inm.ras.ru/INMOST-DEV/INMOST-lectures>)**
- **Стэнфорд**, США – группа Хамди Челепи, встроен в код AD-GPRS (дискретизации)
- **НВКУ**, Qatar – группа Ахмада Абушаики, код QASR, **расчет 3-х фазной модели нефти и газа на 1 млрд ячеек и 10 тысячах ядрах**
- **ТУ Дельфт**, Голландия – группа Дениса Воскова (дискретизации)
- **ИМ КАН**, Китай – Лонглонг Ли

Использовалось в проектах с:

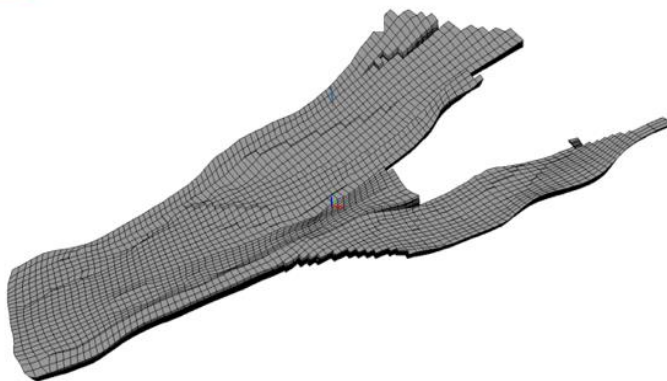
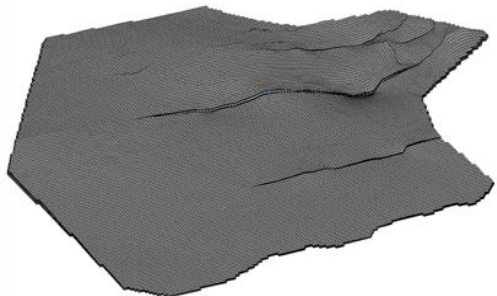
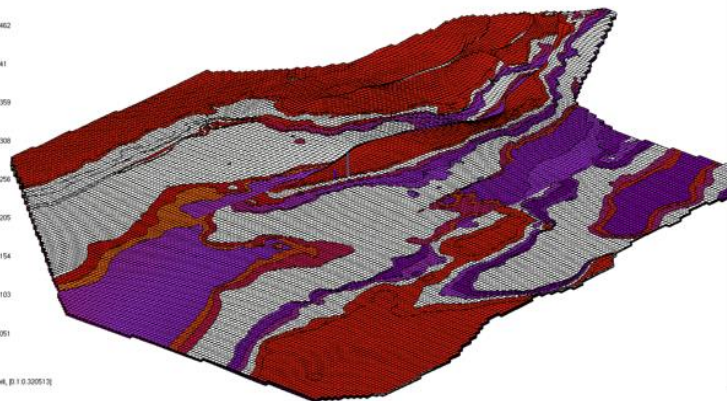
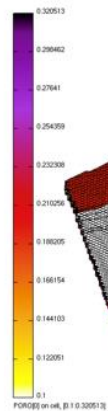
Total, Chevron, Storengy, INPEX – в **Стэнфорде**,
Exxon-Mobil, Роснефть, Samsung, Saudi Aramco – at **ИВМ РАН**,
Росатом – в **ИБРАЭ РАН**.



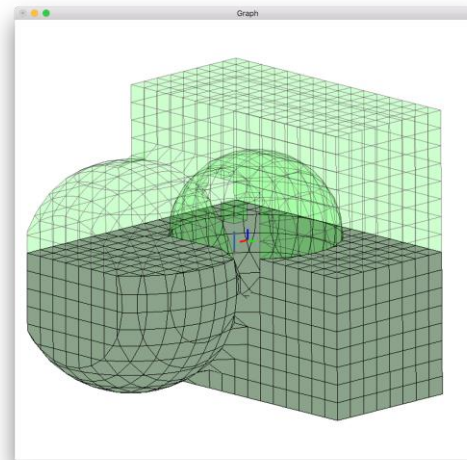
Расчетные сетки



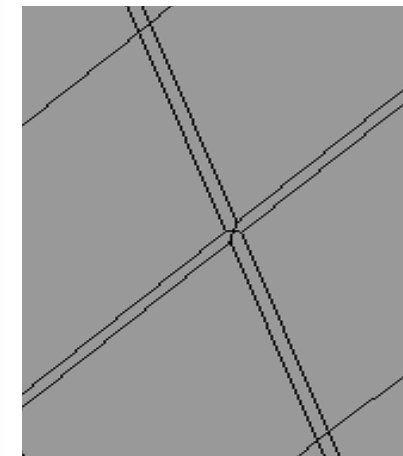
Модель
человеческого тела



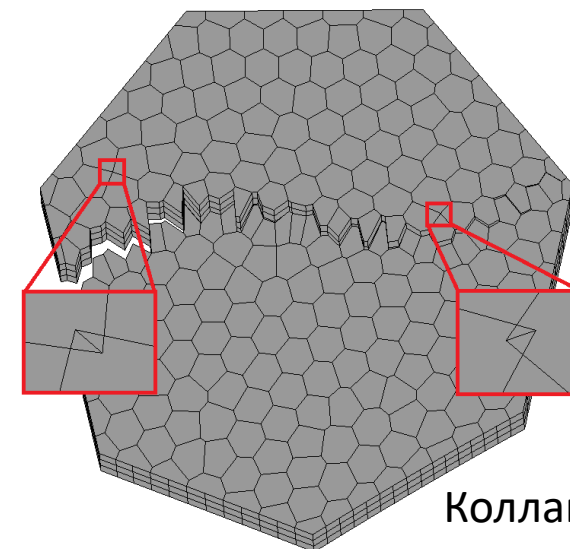
Геологические сетки с выклиниванием,
поддержка входных данных коммерческих
симуляторов нефти и газа



Сложные модификации



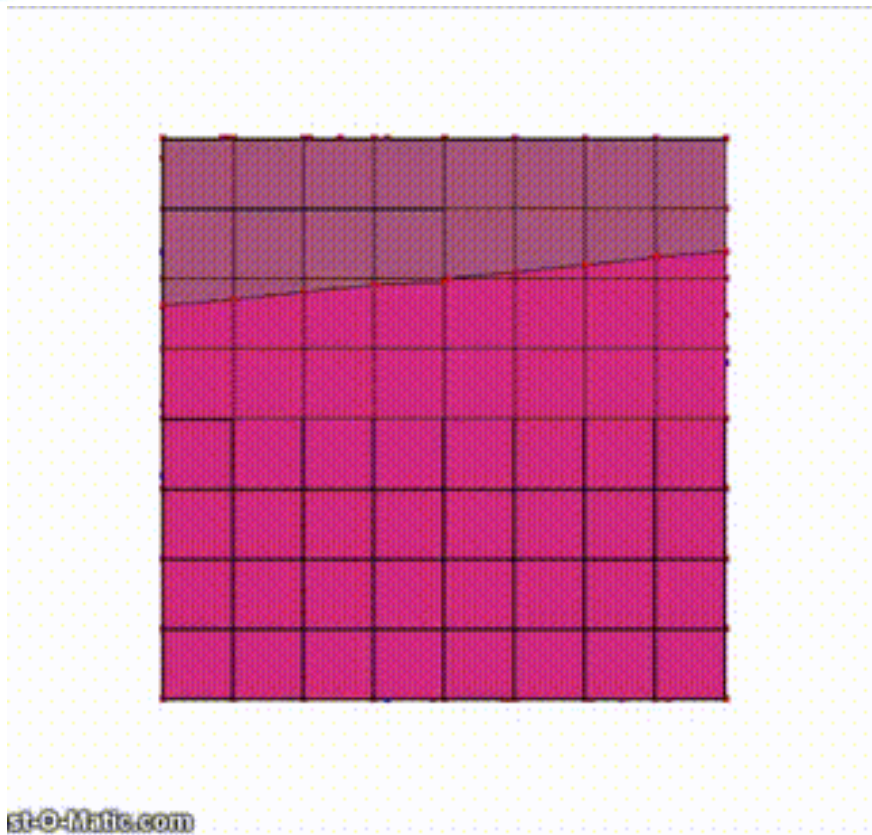
Вскрытие трещин



Коллапс ребер

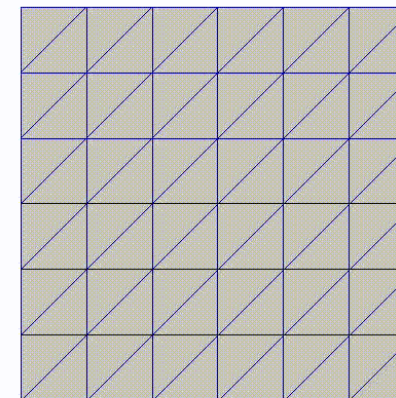
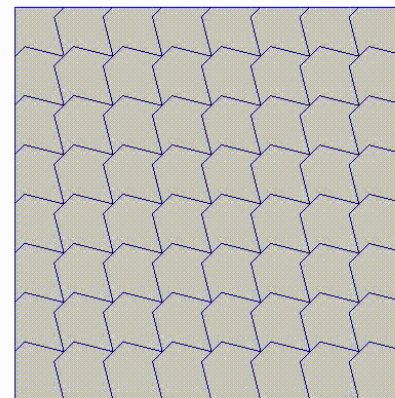
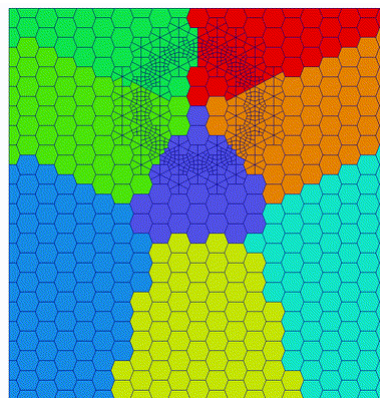


Динамические сетки

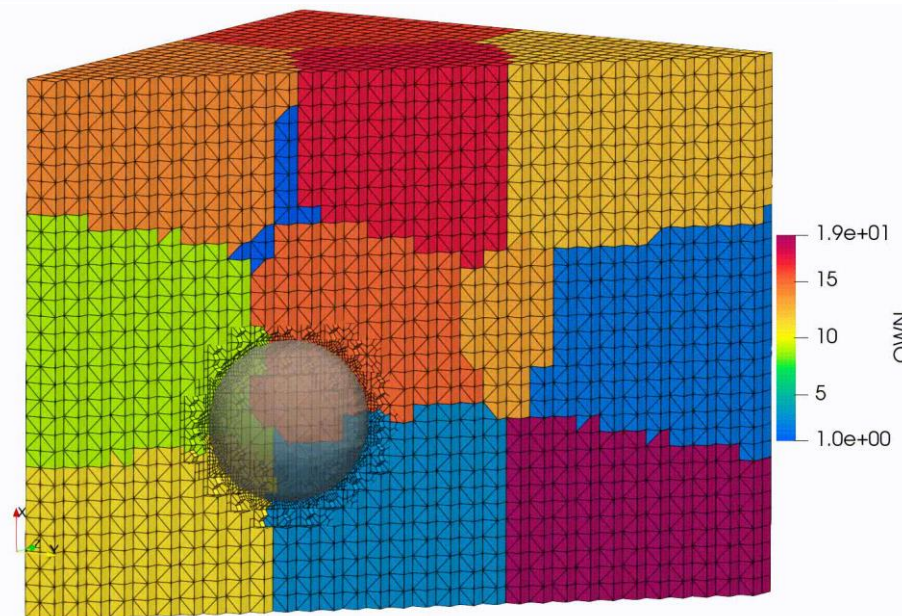
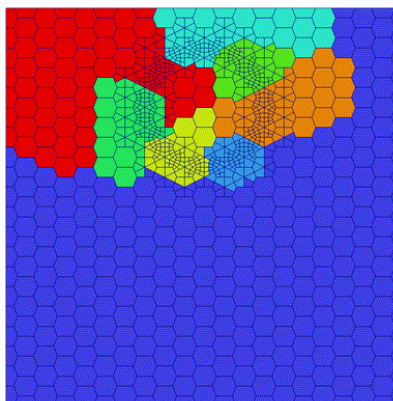


st-0-11111.com

Пример **OctreeCutcell** в репозитории INMOST-Graphics



Пример **AdaptiveMesh** для адаптации сеток общего вида



Parmetis_AdaptiveRepart



Расчетные сетки

Поддержка полного набора

элементов:

ячеек, граней, ребер, узлов.

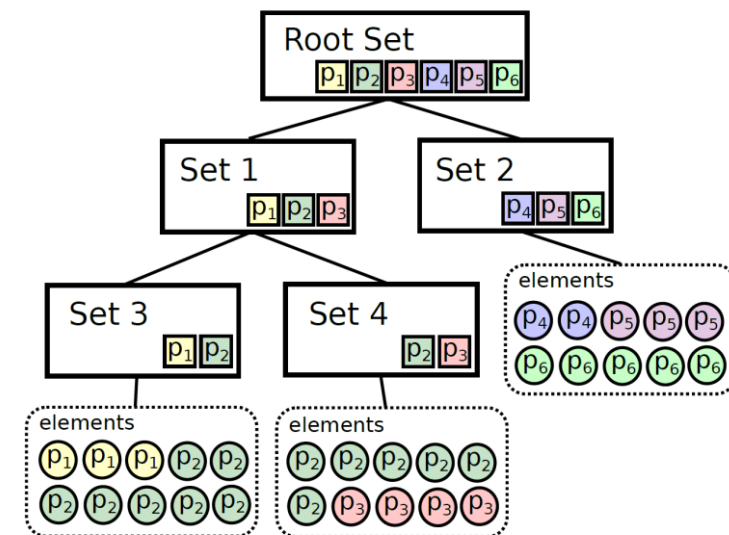
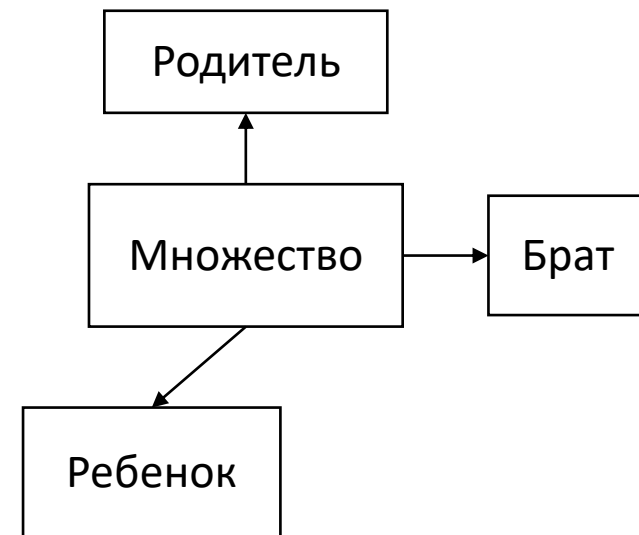
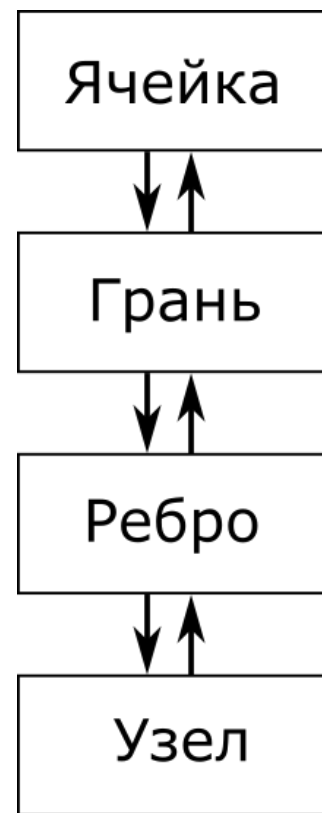
Расчет **геометрических данных:**

объем, площадь, нормаль, центр масс,
исправление ориентации.

Контроль топологической
корректности:

вырожденность, замкнутость,
конформность, выпуклость, плоскость,
звездность и т.п.

Задание распределенных **множеств**
элементов и организация множеств
в иерархию.





Декомпозиция области

Методы декомпозиции области:

внешние: ParMetis, Zoltan,

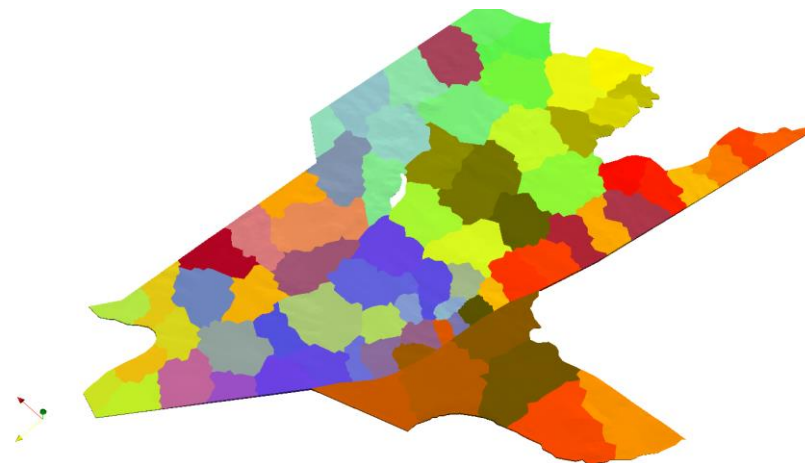
встроенные: упорядочивание Cuthill-McKee, метод K-средних.

Сеточный функционал:

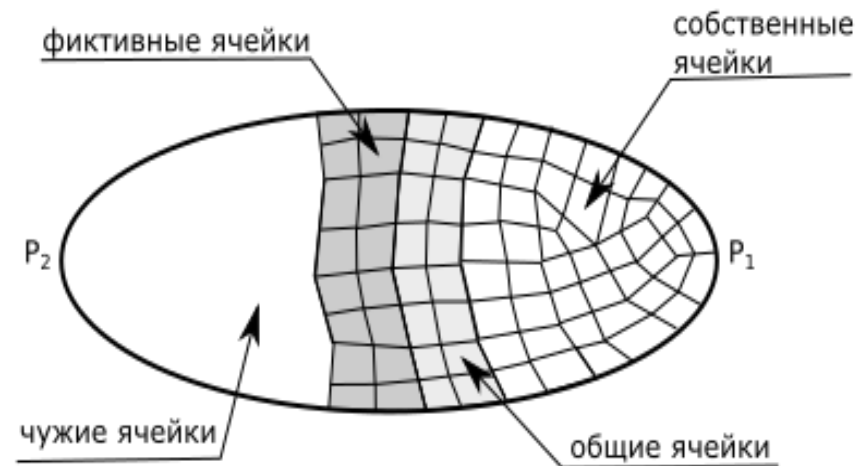
миграция элементов сетки для **декомпозиции** и **балансировки**,

любое количество слоев перекрытия между сетками на процессорах,

обмен сеточными данными: разреженные и плотно заданные, постоянной и переменной длины, действительные, целочисленные, бинарные, ссылки на элемент, значения с производными.



Пример декомпозиции области на 64 процессора



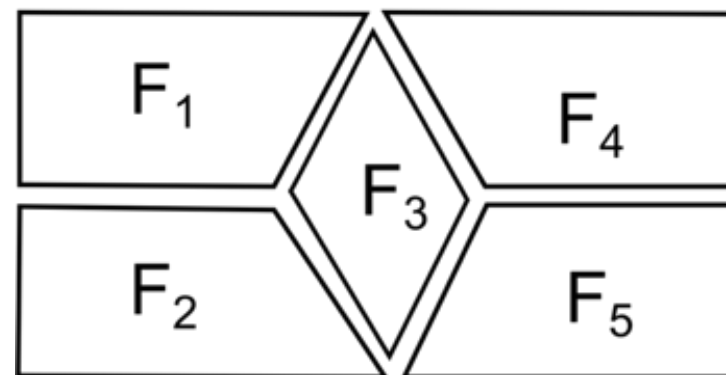
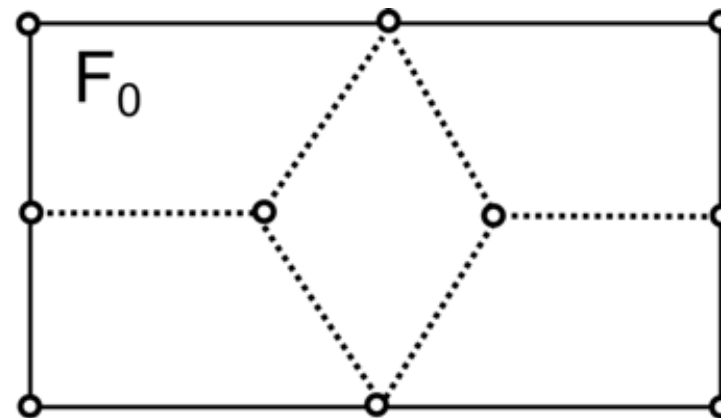


Модификация сеток

Можно отсоединять и **удалять** элементы, а затем **создавать** новые

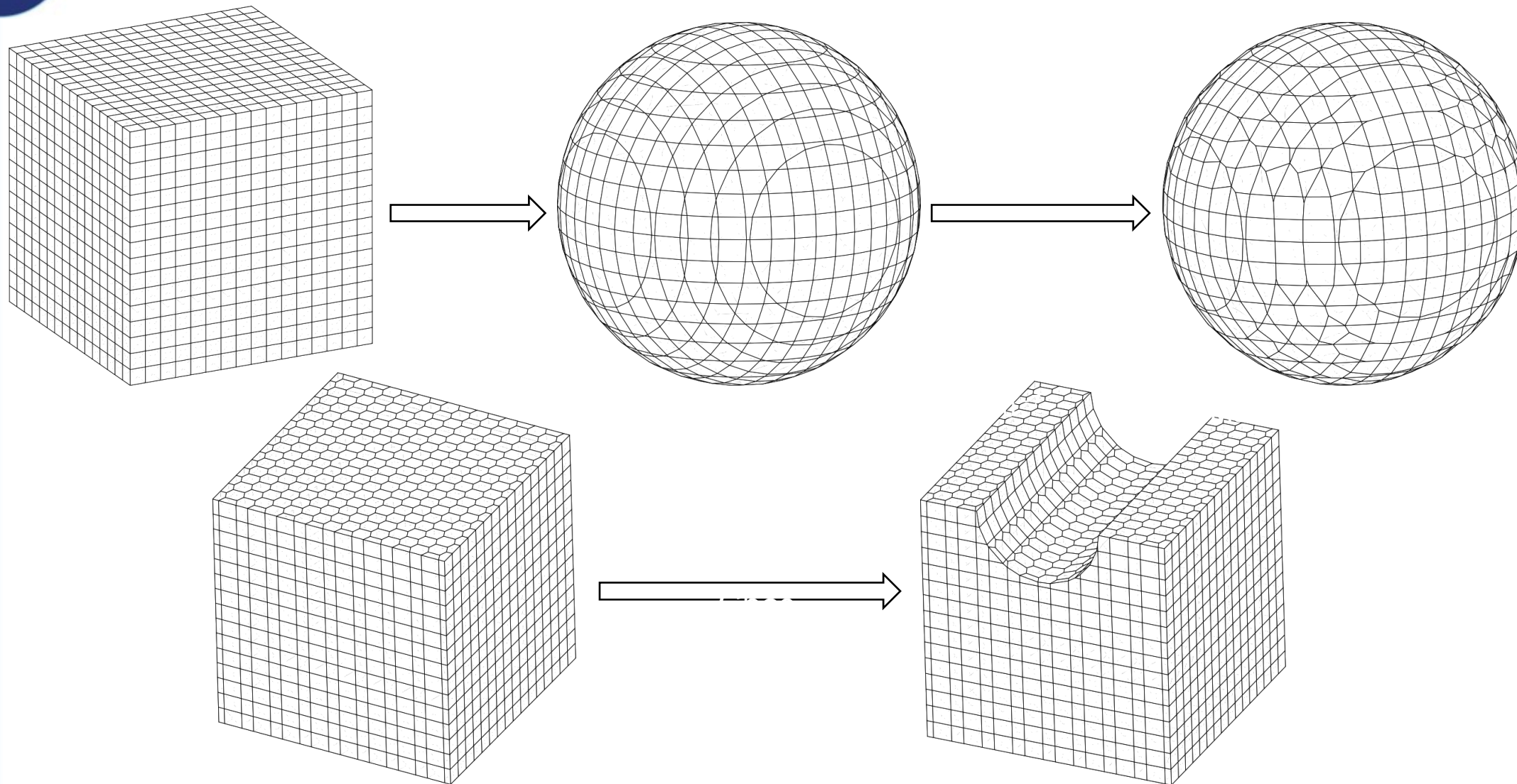
Вспомогательный функционал:

- разделить** ребро по узлам,
- разделить** грань по ребрам,
- разделить** ячейку по граням,
- схлопывание** ребра,
- объединить** элементы.





Модификация сеток

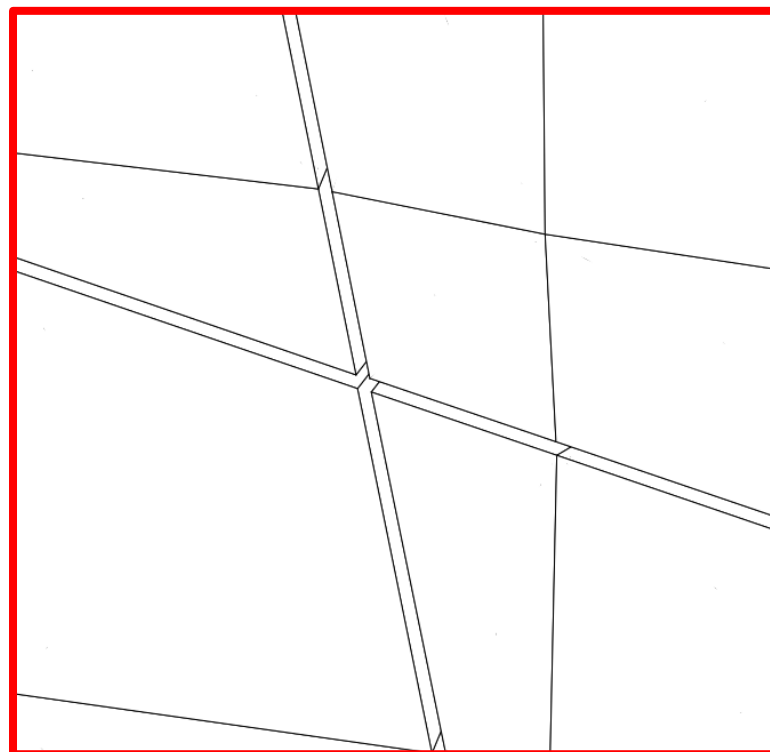
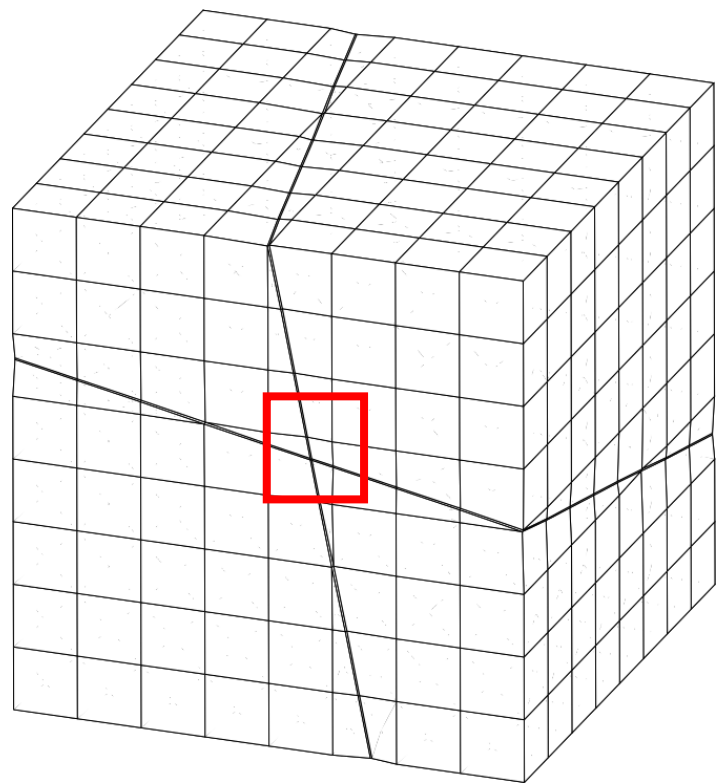


(<http://github.com/INMOST-DEV/INMOST-GridTools>)

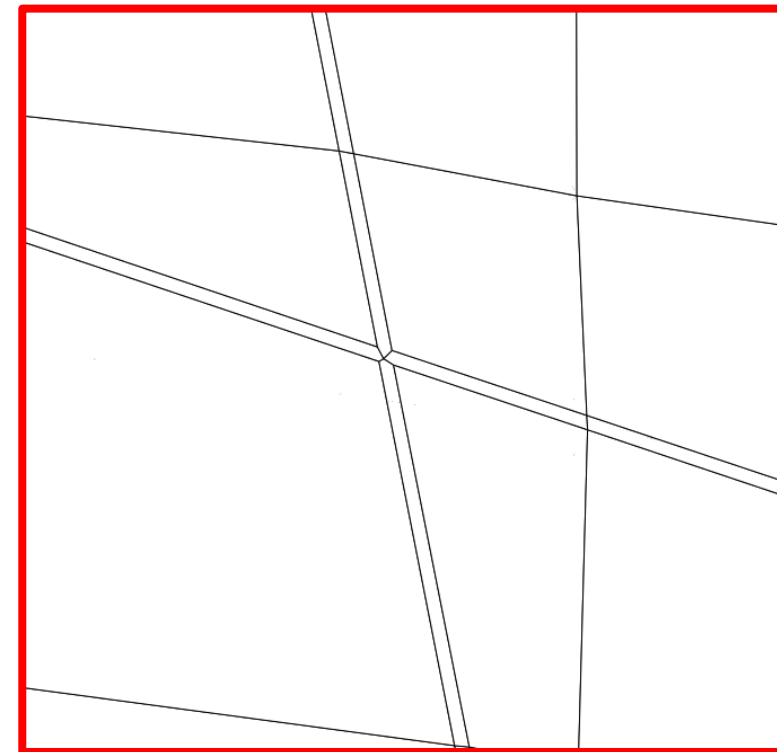


Модификация сеток

Вскрытие сетки по двум срезам:



Открытая трещина



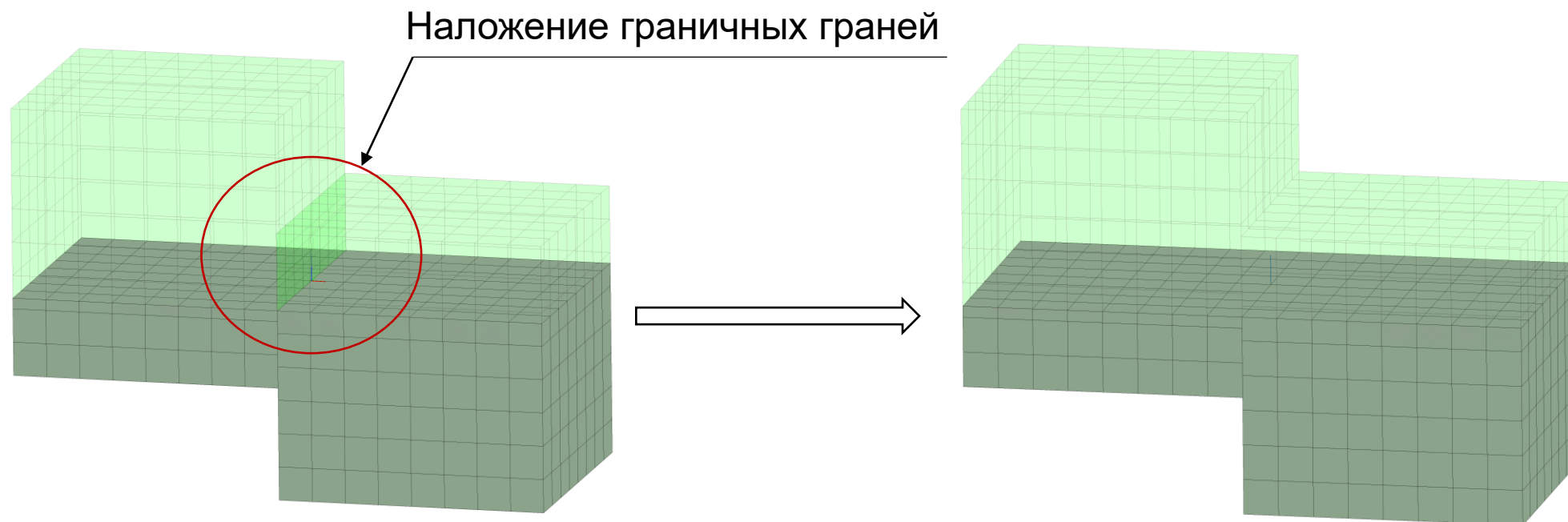
Заполненная трещина



Модификация сеток

Несвязная область:

Связная область:



(<http://github.com/INMOST-DEV/INMOST-GridTools>)



Автоматическое дифференцирование

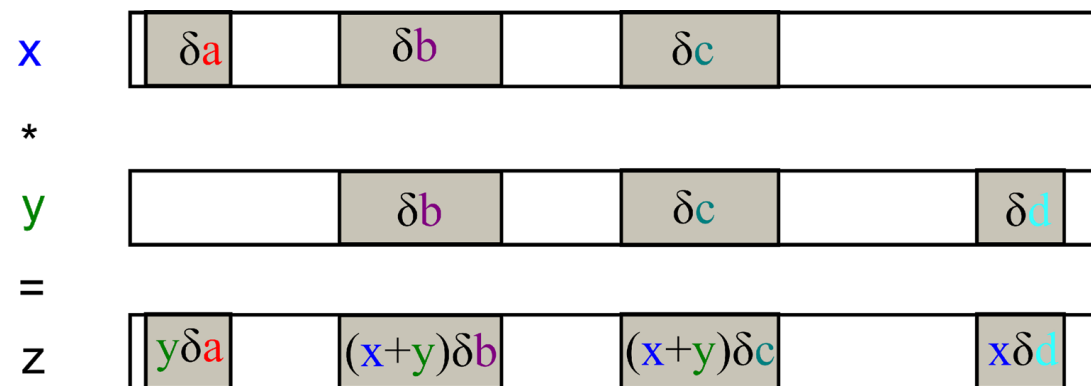
Позволяет одним кодом
получить:

невязку,

Якобиан,

Гессиан.

Очень **полезно** для **сложных**
нелинейных задач.



$$x\{\partial a + \partial b + \partial c\} * y\{\partial b + \partial c + \partial d\} = x * y\{y\partial a + (x+y)\partial b + (x+y)\partial c + x\partial d\}$$



Автоматическое дифференцирование

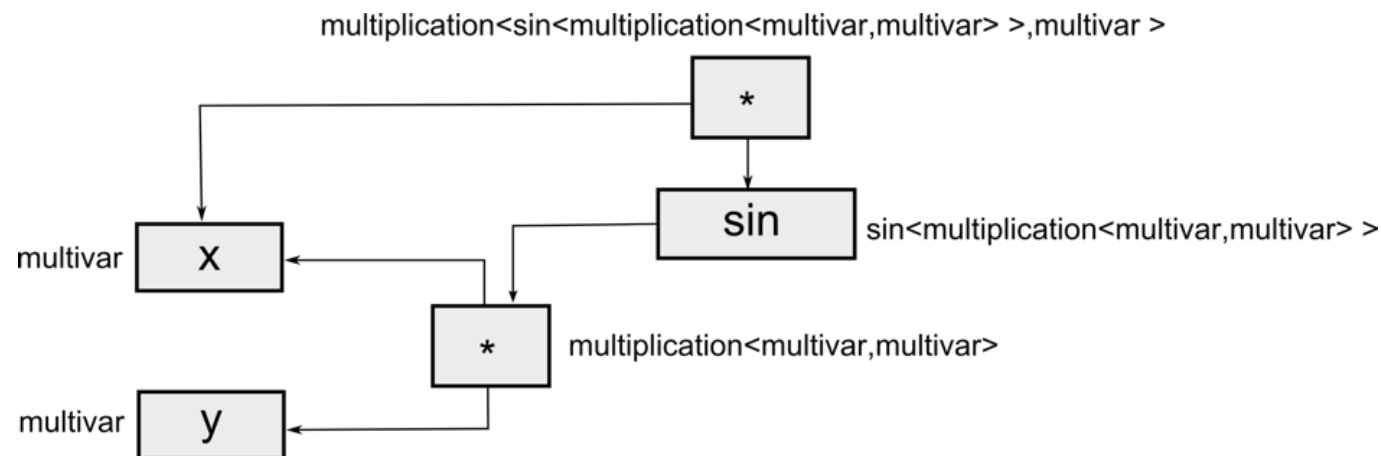
Реализовано посредством шаблонных выражений в C++.

Большая часть кода формируется и оптимизируется на этапе компиляции.

Поддерживает матрично-векторные операции, подмножество функционала **BLAS-LAPACK** в стиле **Eigen**.

Простота использования.

```
variable x, y, z;  
...  
z = x*sin(x*y)
```



внутреннее представление выражения $x*\sin(x*y)$

```
yield = Yield<variable>(stress);  
for (int k = 0; k < 6; ++k) dyield[k] = yield.GetDerivative(k);  
Cp = C - 0.5 * dlambd * Cdyield.Transpose().Kronecker(Cdyield);
```



Решение линейных систем

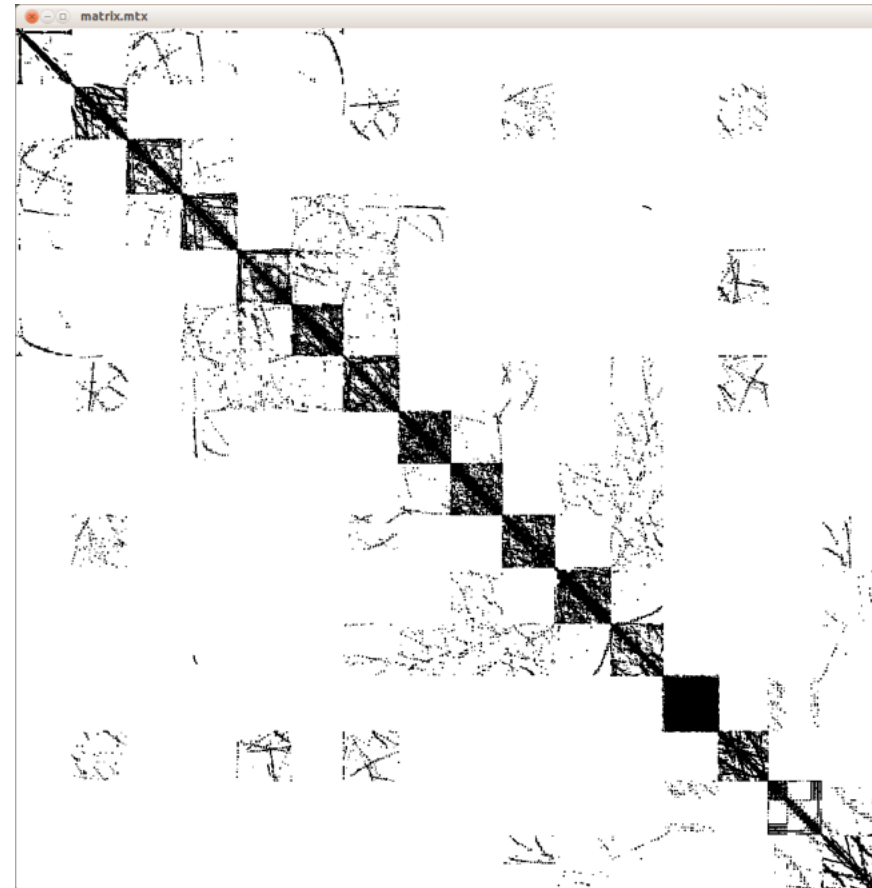
Простые структуры для сборки распределенных систем линейных уравнений.

Параллельные методы решения:

внешние PETSc, Trilinos, SuperLU, Hypre,

встроенные:

- $ILU(\tau, \tau^2)$ и Crout- $ILU(\tau, \tau^2)$ второго порядка,
- максимизация произведения на диагонали,
- масштабирование Синкхорна или I-доминирование,
- динамический подбор τ по числу обусловленности LU,
- многоуровневое вычисление дополнения по Шуру,
- откладывание факторизации с малым диагональным элементом или по числу обусловленности LU,
- параллельные исключения на основе k-направленной диссекции, многослойный аддитивный метод Шварца.





Мультифизика

Расщепление симулятора на отдельные **модели**

Модели соединяются через

функции: мобильность, плотность, пористость,

потоки: член Био, условие несжимаемости, капиллярное давление,

правую часть: реакции.

Возможно **управлять:**

моделями, неизвестными, функциями, связывающими соотношениями, сборкой невязки и якобиана.

Допускает **полностью неявное** решение.



Расщепление на модели в симуляторе резервуара



Визуализация

Репозиторий INMOST-Graphics

Функционал:

срез сетки,

изоповерхности,

отображение объема,

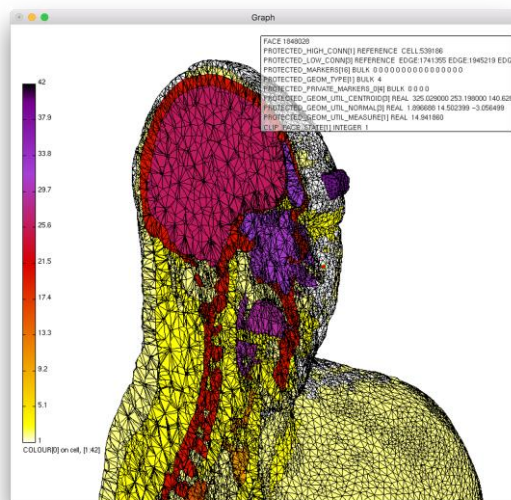
линии тока,

вектора,

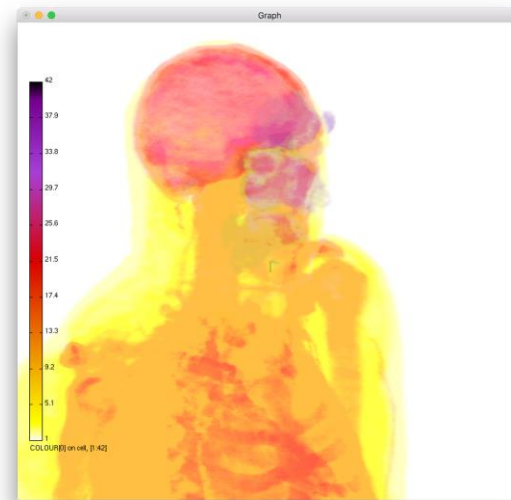
...

вывод в векторном формате
.svg.

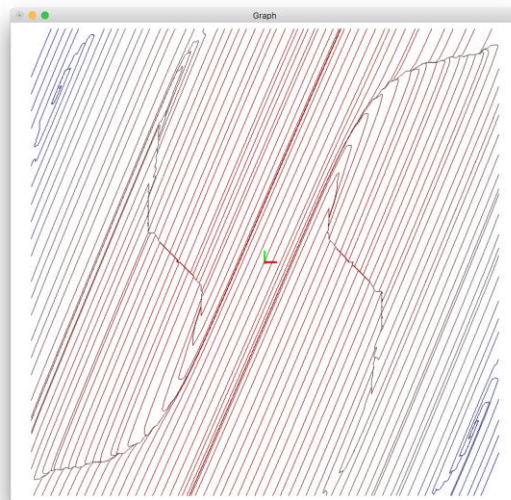
Планируется как подключаемый
модуль



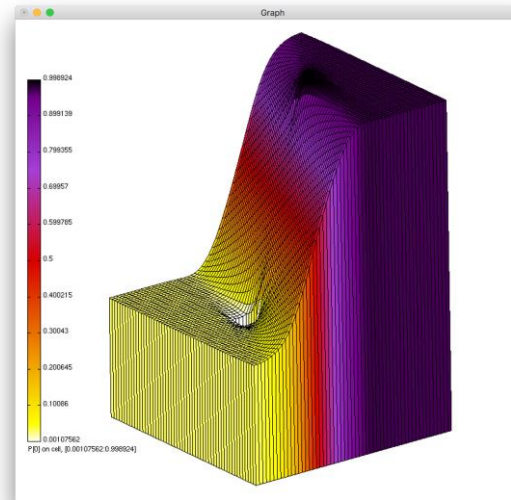
Отображение данных в срезе



Объемное отображение данных



Линии тока



Подъем решения над срезом



Методы решения СЛАУ

- Метод **BiCGStab(I)**¹ с переобуславливателем.
- **MPI-распараллеливание** на основе аддитивного метода Шварца
- **OpenMP-распараллеливание** на основе дважды-окаймленной блочно-диагональной формы^{9,10}
- Многоуровневый **предобуславливатель** на основе метода неполной факторизации Краута второго порядка^{2,3}
- Оценка обусловленности обратных факторов определяет **грубую систему** и подстраивает параметры отбрасывания^{4,5}
- Масштабирование и переупорядочивание локальных систем на каждом уровне^{6,7,8}



Ссылки на литературу

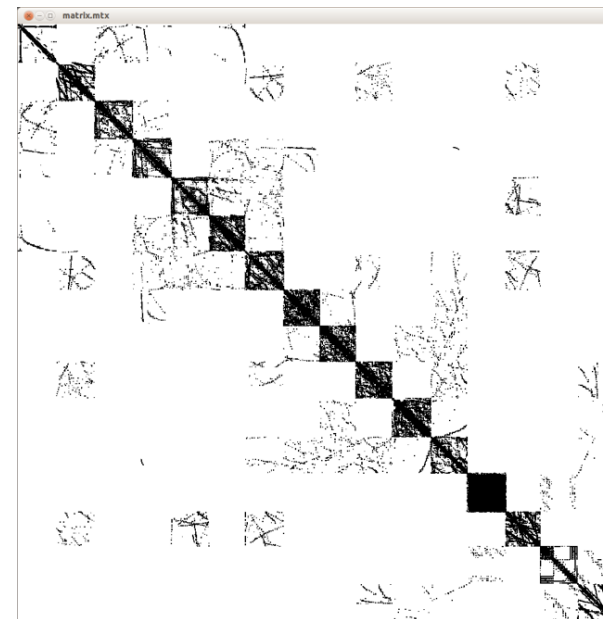
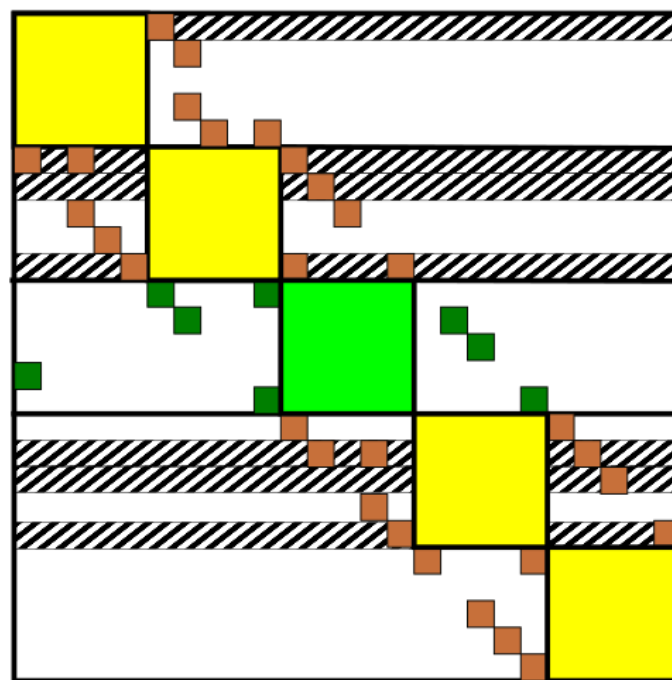
- 1) Sleijpen, G.L.G., Diederik R. F.: *BiCGstab(l) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum*. Electronic Transactions on Numerical Analysis 1.11 (1993): 2000. **(Метод Крылова)**
- 2) Li N., Saad Y., Chow E.: *Crout versions of ILU for general sparse matrices*. SIAM Journal on Scientific Computing 25.2 (2003): 716-728. **(неполная факторизация 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. **(подстройка параметров отбрасывания)**
- 5) Bollhöfer, M., Saad Y.: *Multilevel preconditioners constructed from inverse-based ILUs*. SIAM Journal on Scientific Computing 27.5 (2006): 1627-1650. **(вычисление грубой подсистемы)**
- 6) Cuthill, E., McKee J.: *Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices*. Proceedings of the 1969 24th national conference. 1969. **(переупорядочивание)**
- 7) Olschowka, M., Arnold N.: *A new pivoting strategy for Gaussian elimination*. Linear Algebra and its Applications 240 (1996): 131-151. **(масштабирование и переупорядочивание для максимизации 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)**
- 9) Grigori, L., Boman, E. G., Donfack, S., Davis, T. A.: *Hypergraph-based unsymmetric nested dissection ordering for sparse LU factorization*. SIAM Journal on Scientific Computing, 32.6 (2010): 3426-3446. **(блочно-диагональная форма)**
- 10) Duff, I. S., Scott, J. A.: *Stabilized bordered block diagonal forms for parallel sparse solvers*. Parallel Computing, 31.3-4 (2005): 275-289. **(блочно-диагональная форма)**



Аддитивный метод Шварца

- Глобальная система разбивается на **блоки**.
- Расширение блоков для локализации связей.
- **Ограниченная версия (RAS).**
- **Число итерация растет с числом блоков**

Перекрытие матрицы



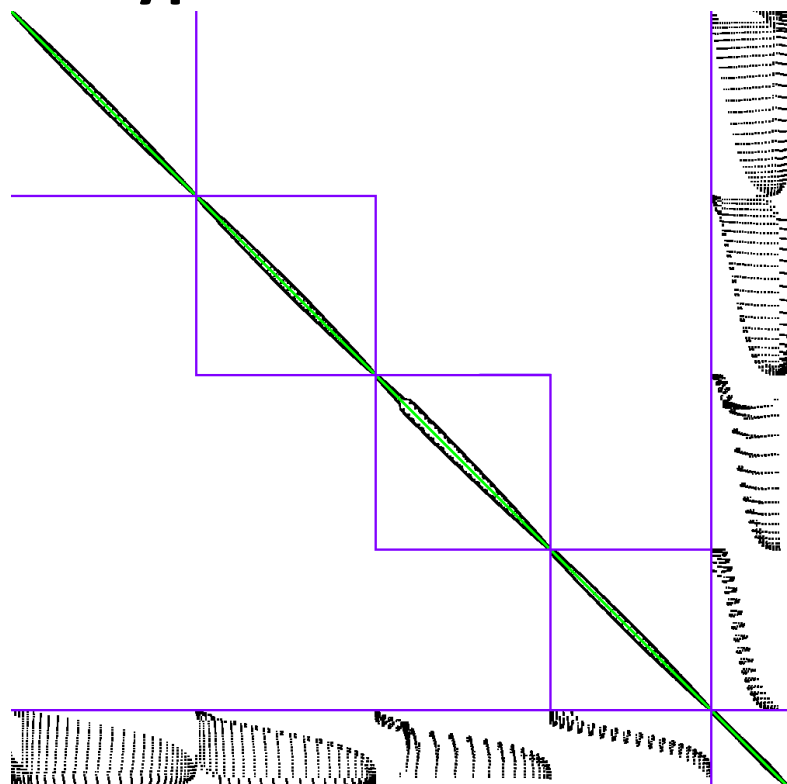
Распределенная система

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

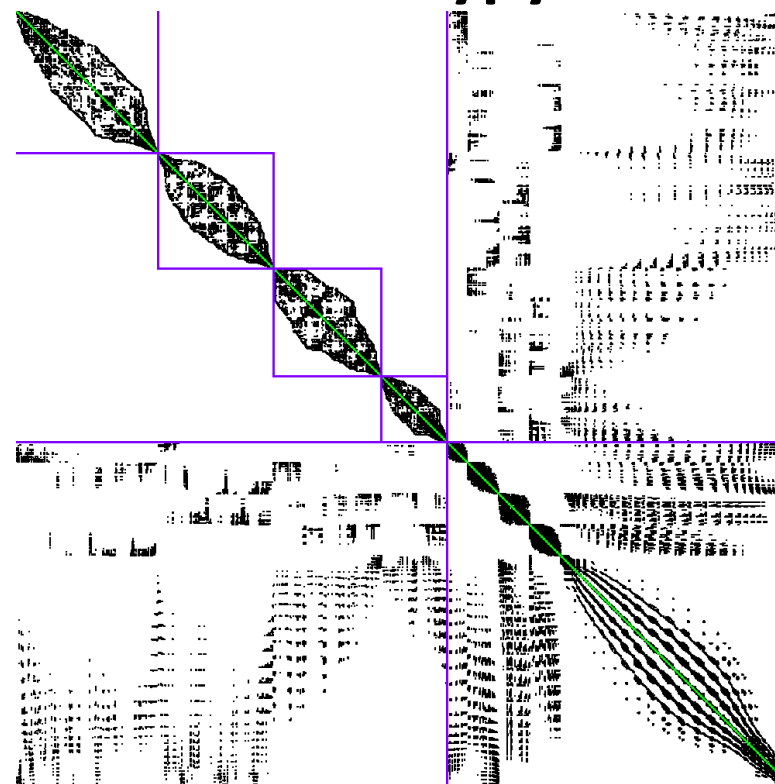


Дважды-окаймленная блочно-диагональная форма

Первый уровень



Дополнение по Шуру

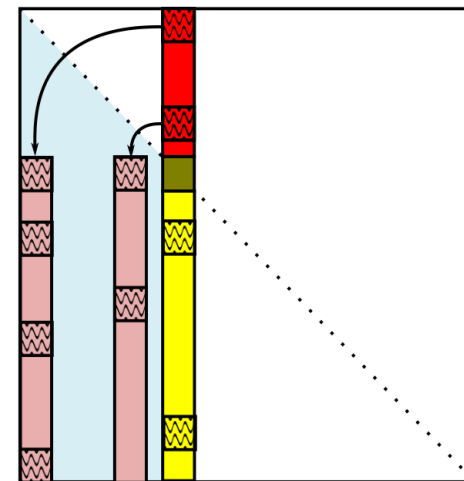
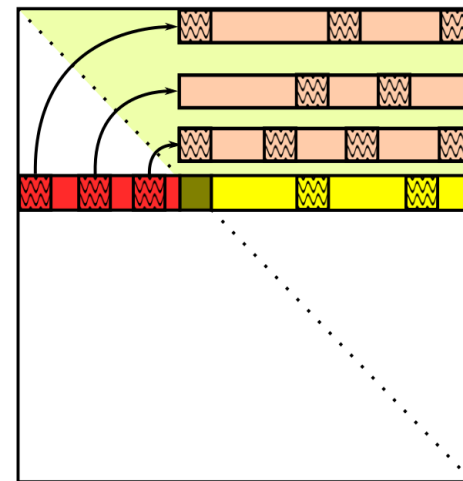
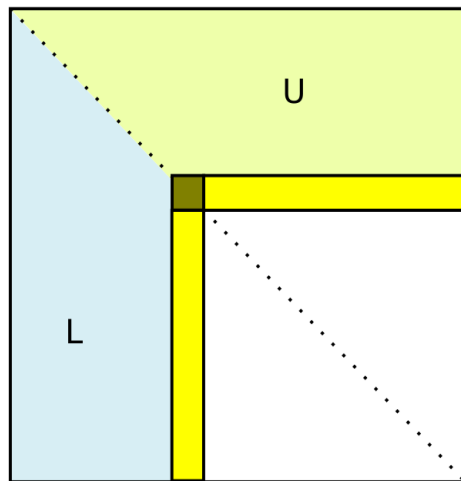


Шур становится больше при большем числе блоков



Метод неполной факторизации Краута

- Двойной критерий отбрасывания:
 - τ^2 при факторизации.
 - τ во время итераций.
- Оценка обусловленности в процессе расчета:



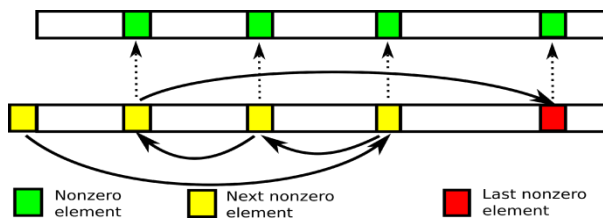
U-factor elimination

L-factor elimination

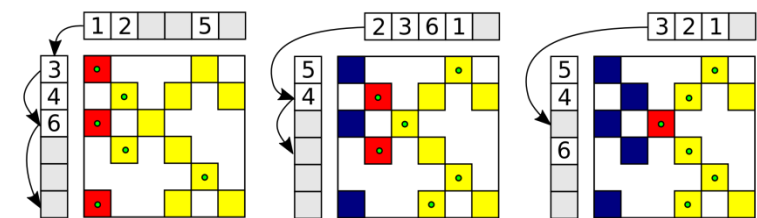
- $\kappa = \max(\|L^{-1}\|, \|U^{-1}\|)$

- $\tau/\kappa = \text{const tuning}$.

- Ограничим рост κ .



Аккумуляция разреженных строк

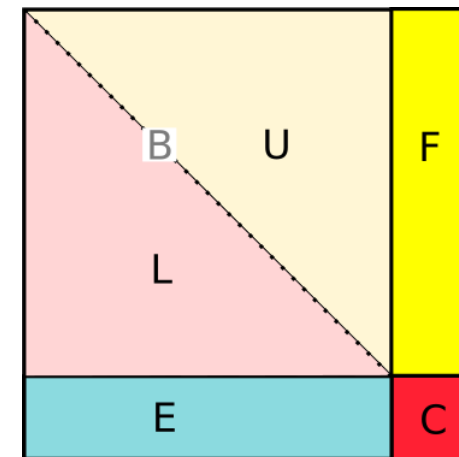


Обход транспонированной системы

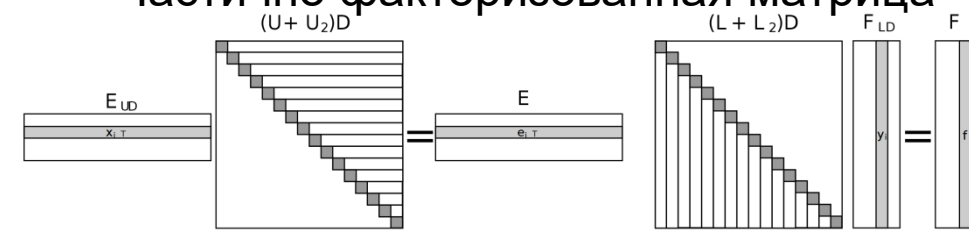


Дополнение по Шуру

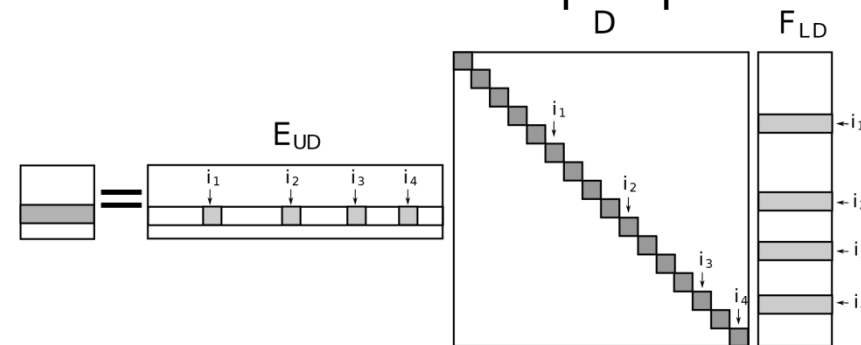
- Строки, приводящие к увеличению **к** аккумулируются в **С**:
 - **переупорядочивание** системы после факторизации.
- Система на следующем уровне – дополнение по **Шуру**:
 - $S = C - E (DU)^{-1} D(LD)^{-1}F$.
 - Требуется прямой и обратной подстановки с **разреженной** правой частью.
 - **Контроль заполнения** критичен.
 - **Второй порядок** ILU критичен.



Частично факторизованная матрица



Вычисление операторов



Вычисление дополнения по Шуру



Аналогия с многосеточным методом

- Грубая система содержит **наибольшую ошибку** метода **сглаживания**.
- Оценка обусловленности определяет **ошибку** в методе **сглаживания** и дает расщепление на **точную-грубую** системы.
- Идеальная пролонгация $P=(-EB^{-1}, I)$ и сужение $R=(-FB^{-1}, I)^T$.
 - **(данный метод это не выполняет).**
- Дополнение по Шуру соответствует **грубой** системе.
- **Универсально, но вычислительно дорого.**
 - **(точно не линейная сложность от размера задачи)**

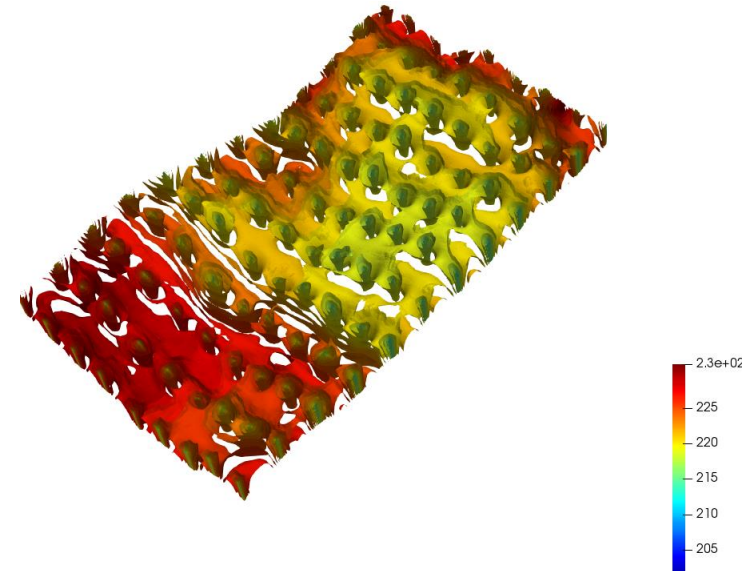
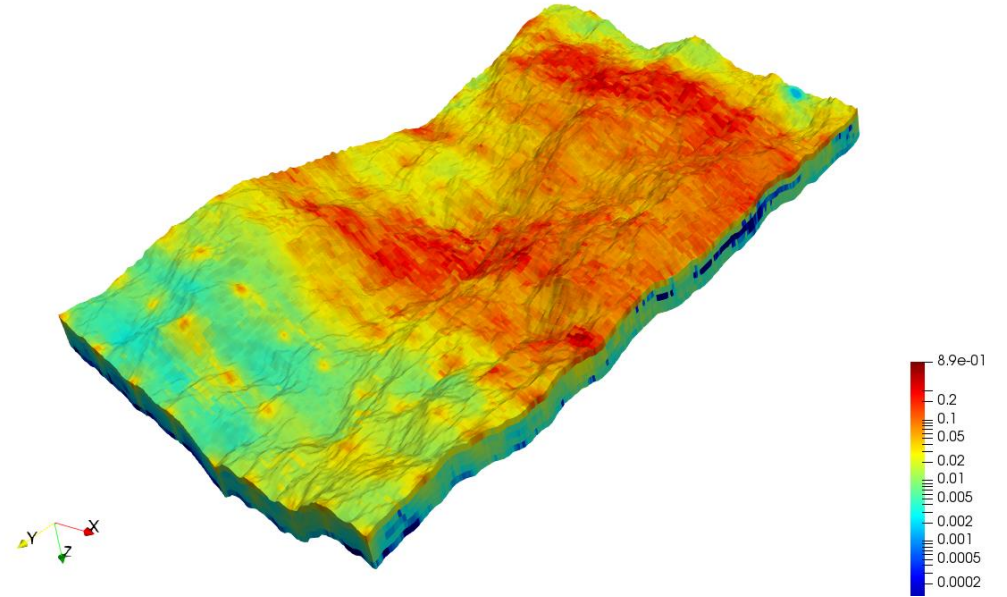


Нефть и газ

- Подходит для решения больших систем:
 - Задача черной нефти
 - **×3** неизвестных на ячейку
 - **100М** и **200М** ячеек (320 ядер, кластер ИВМ РАН):

Case	T_{mat}	T_{prec}	T_{iter}	T_{sol}	T_{upd}	N_n	N_l
SPE10_100M	14	18.5	55.4	78.6	0.2	402	3.5
SPE10_200M	29.6	34.7	64.1	107.5	0.38	428	3.96

- Протестировано до **1 млрд ячеек** на 9600 ядрах Cray Ахмадом Абушаика в HBKU, Катар.
- В литературе: **Constrained pressure residual method with AMG**



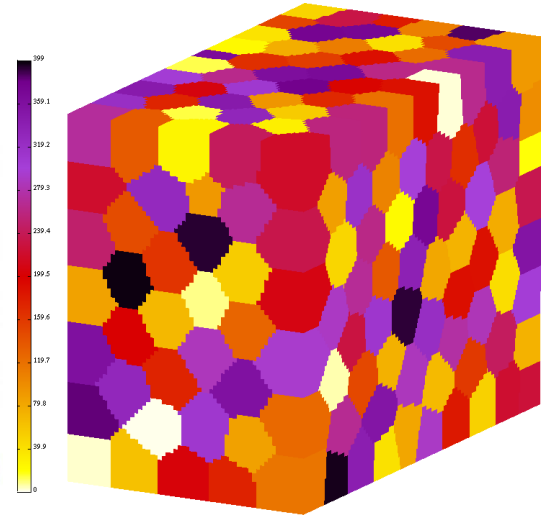
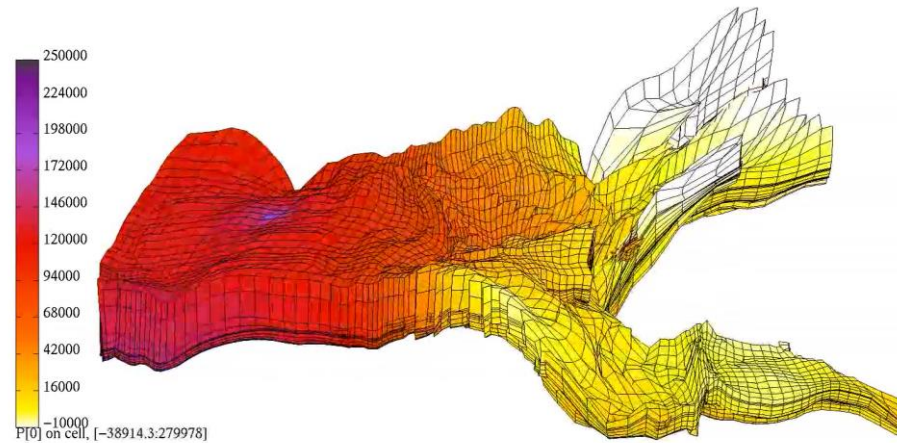


Нефть и Газ: пороупругость

- Система:

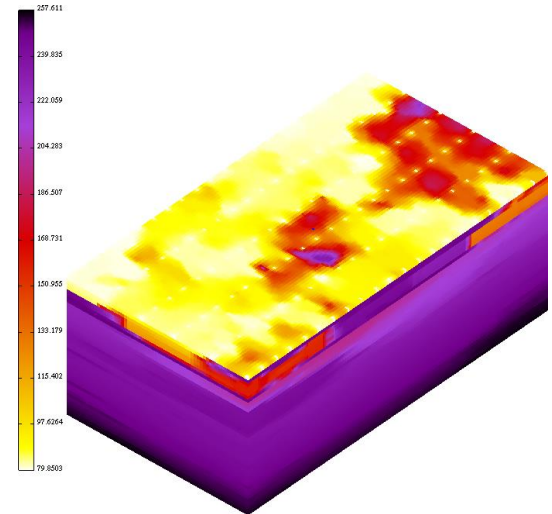
$$\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\mathbb{K}(\nabla p - \rho g \nabla z) - \mathbb{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) = q$$

$$- \operatorname{div} \left(\varepsilon: \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} + \mathbb{B} p \right) = \rho g \nabla z$$



- ×4 неизвестных на ячейку
- 1.2M ячеек (кластер ИВМ РАН, Ломоносов-2):

Machine	N_{proc}	T_{tot}	T_{asm}	T_{prec}	T_{iter}	T_{upd}
INM RAS cluster	100	15079.4	1119.8	7245.2	4463	479.7
	200	8791.2	582.9	3926.2	2800.9	252.4
	400	4637	300.3	1965.6	1374.2	127
Lomonosov supercomputer	700	3536	234.1	1071.1	1112.42	70.5



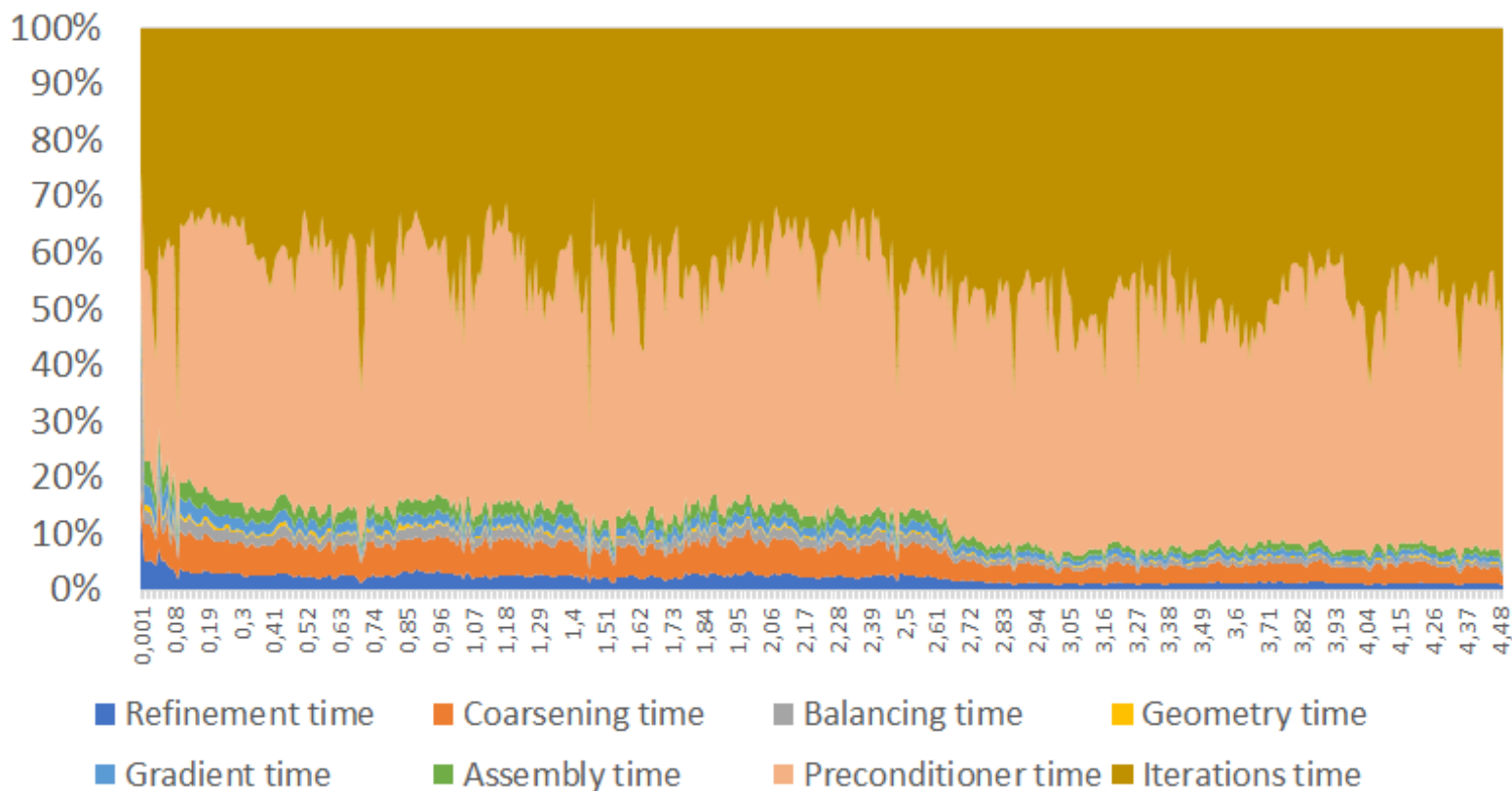
Решение **седловой** системы.

В литературе: **Fixed-stress splitting with AMG**

(video slide)



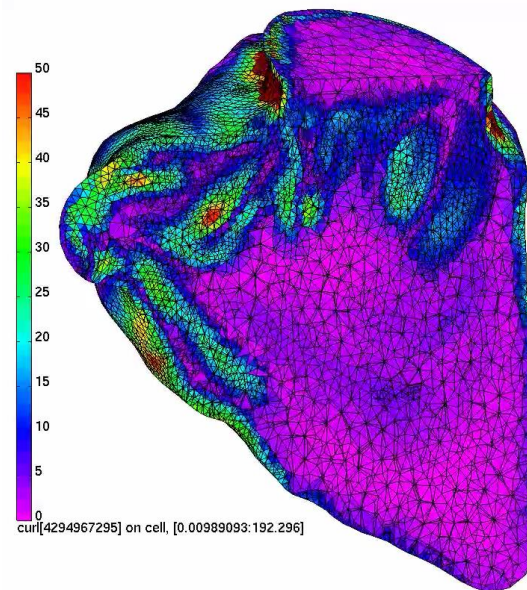
Течение крови



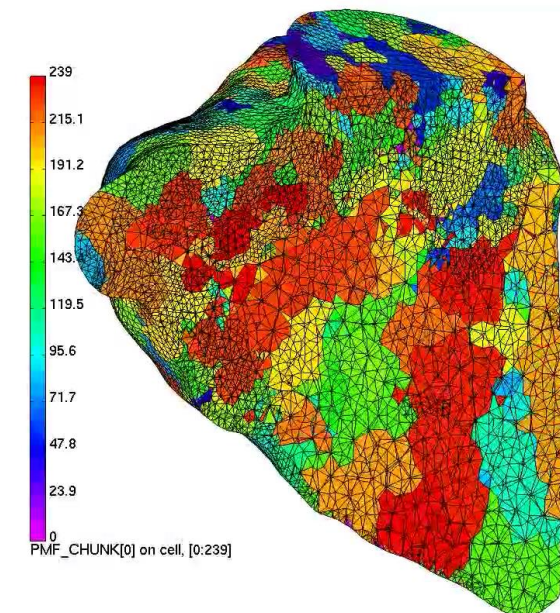
Каждый шаг мы перестраиваем и балансируем сетку, пересчитываем геометрию, дискретизацию, но самой сложной частью оказывается решение **седловой** системы.

Альтернатива: **блочный AMG (+слайды)**

(video slide)



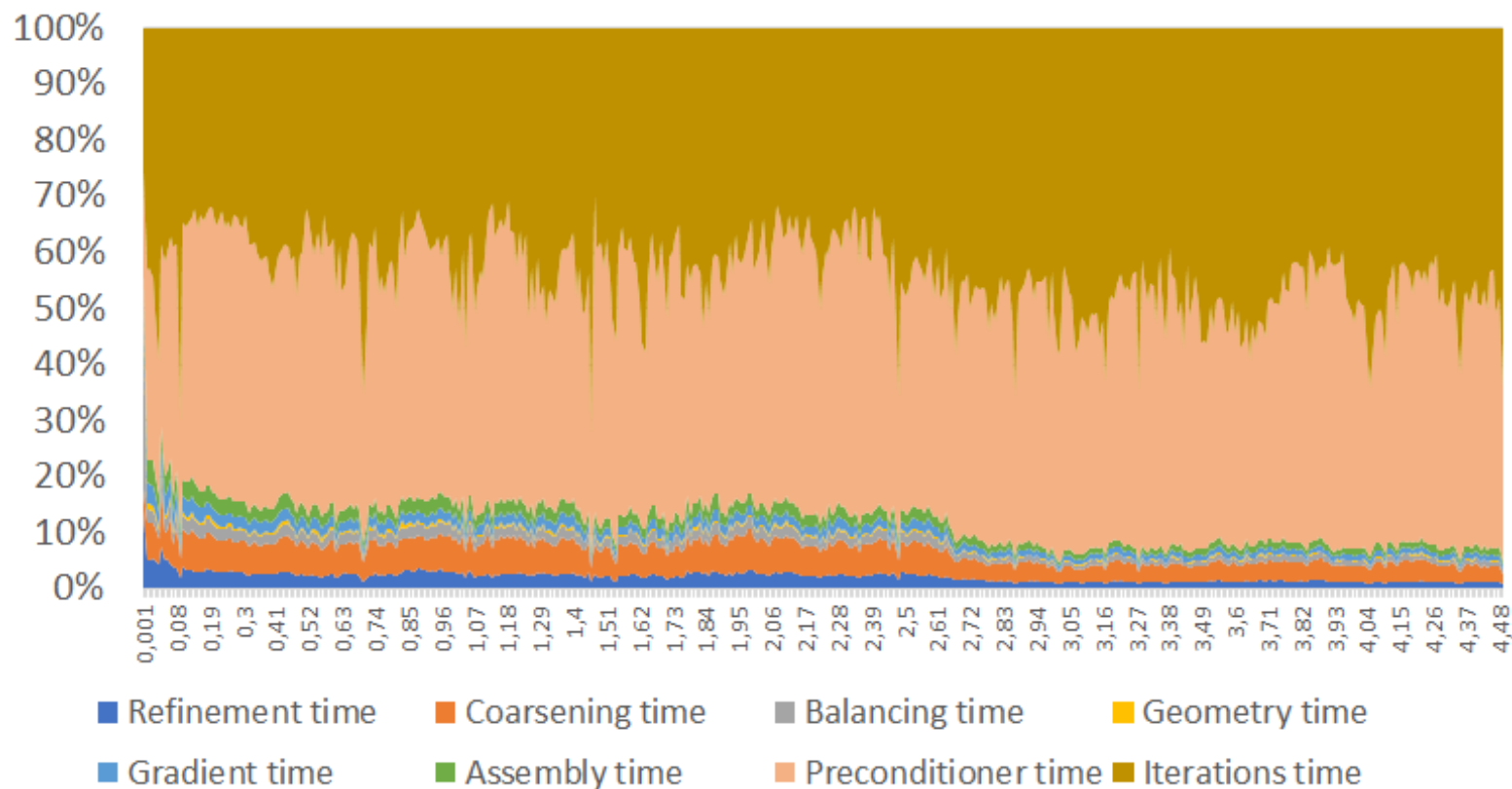
завихренность



ДЕКОМПОЗИЦИЯ

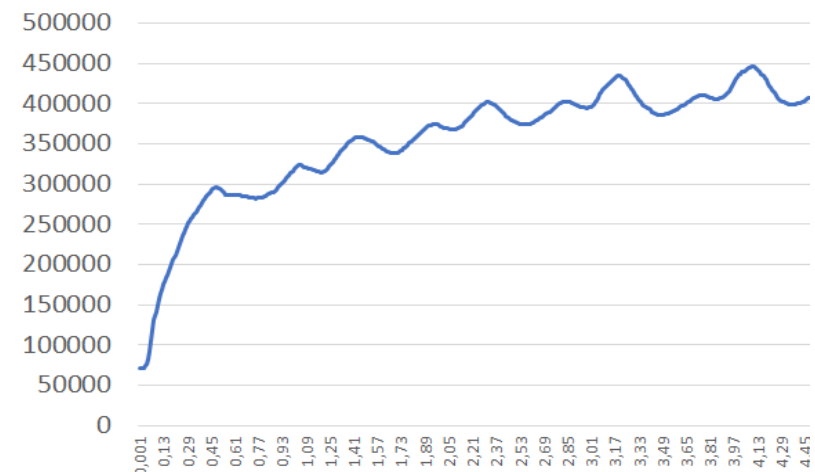


Течение крови

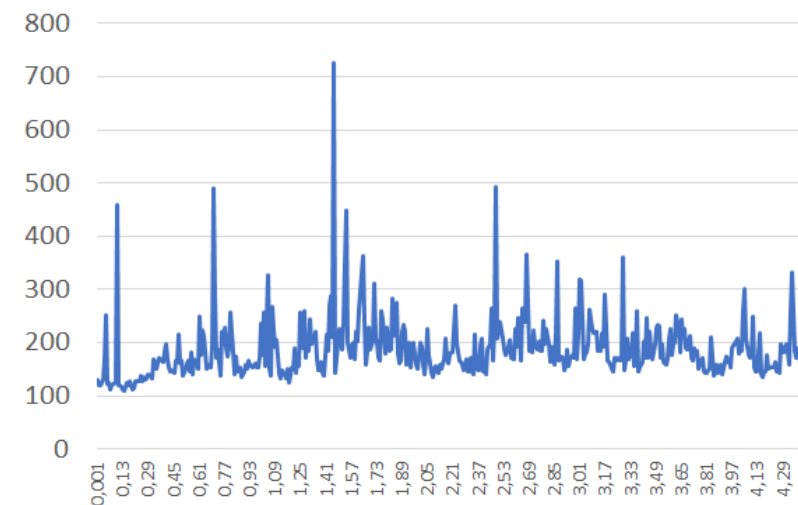


Каждый шаг мы перестраиваем и балансируем сетку, пересчитываем геометрию, дискретизацию, но самой сложной частью оказывается решение **седловой** системы.

Альтернатива: **блочный AMG (+слайды)**



Число ячеек



Линейных итераций



Конечно-объемный метод

Для разных процессов и на подвижных сетках



Публикации по МКО

- K. Terekhov, B. Mallison, and H. Tchelepi. **Cell-centered nonlinear finite-volume methods for the heterogeneous anisotropic diffusion problem.** Journal of Computational Physics, 2017.
- K. Terekhov, and Yu. Vassilevski. **Finite volume method for coupled subsurface flow problems, I: Darcy problem.** Journal of Computational Physics, 2019
- K. Terekhov, and H. Tchelepi. **Cell-centered finite-volume method for elastic deformation of heterogeneous media with full-tensor properties.** Journal of Computational and Applied Mathematics, 2020
- K. Terekhov. **Cell-centered finite-volume method for heterogeneous anisotropic poromechanics problem.** Journal of Computational and Applied Mathematics, 2020
- K. Terekhov. **Collocated Finite-Volume Method for the Incompressible Navier-Stokes Problem,** Journal of Numerical Mathematics, 2020
- Yu. Vassilevski, K. Terekhov, K. Nikitin, I. Kapyrin. **Parallel finite volume computation on general meshes,** Springer Book, 2020
- K. Terekhov. **Multi-physics flux coupling for hydraulic fracturing modelling within INMOST platform.** Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 2020
- K. Terekhov. **Fully-Implicit Collocated Finite-Volume Method for the Unsteady Incompressible Navier-Stokes Problem,** Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2021
- K. Terekhov. **General finite-volume framework for saddle-point problems of various physics.** *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling,* 2021
- K. Terekhov, and Yu. Vassilevski. **Finite volume method for coupled subsurface flow problems, II: Poroelasticity.** Journal of Computational Physics, 2022
- K. Terekhov **Pressure boundary conditions in the collocated finite-volume method for the steady Navier–Stokes equations.** Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2022
- I. Butakov and K. Terekhov **Two Methods for the Implicit Integration of Stiff Reaction Systems.** Computational Methods in Applied Mathematics, 2022
- K. Terekhov, I. Butakov., A. Danilov, Yu. Vassilevski, **Dynamic adaptive moving mesh finite-volume method for the blood flow and coagulation modeling.** *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering,* e3731, 2023



Метод конечных объемов

Система УЧП уравнений:

$$\frac{\partial \tau(q)}{\partial t} + \mathbf{div}(\mathcal{A}(q)) = \mathcal{R}(q),$$

Где

- q это $N \times 1$ вектор основных неизвестных системы,
- $\tau(q)$ соответствует аккумуляции,
- $\mathcal{R}(q)$ соответствует **объемным силам и реакциям** – дискретизация при помощи взвешенного матрицей метода Эйлера:
 - I. Butakov, K. Terekhov. **Two Methods for the Implicit Integration of Stiff Reaction Systems**. CMAM, submitted.
- $\mathcal{A}(q)$ представляет **поверхностные силы** – дискретизация при помощи МКО:
 - K.Terekhov. **General finite-volume framework for saddle-point problems of various physics**. RJNAMM, 2021

Конечная цель: автоматическая МКО дискретизация для заданной системы УЧП.

Сложности: неустойчивость Ладыженской-Бабушки-Брецци, конвективная неустойчивость, и др...

Получаем систему с $N \times N$ блоками. В основе симметричная **квази-определенная** СЛАУ.



Метод конечных объемов

- Теорема Остроградского-Гаусса:

$$\operatorname{div}(\mathcal{A}(q)) = g \Rightarrow \oint_{\partial V} \mathcal{A}(q) d\mathbf{S} = \int_V g dV \Rightarrow \frac{1}{|V|} \sum_{f \in \partial V} \mathcal{A}_f \mathbf{n} |f| = g_V$$

- Требуется аппроксимация потока на грани:

$$\mathbf{t} = \mathcal{A}_f \mathbf{n}$$

- Какого потока?

- фильтрация:

$$\mathcal{A} = -\mu^{-1}(\nabla p - \rho g \nabla z)^T \mathbb{K}$$

- упругость:

$$\mathcal{A} = -\mathbb{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2}$$

- пороупругость:

$$\mathcal{A} = \begin{cases} -\mathbb{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} + \mathbb{B} p \\ -\mu^{-1} \mathbb{K}(\nabla p - \rho g \nabla z) + \mathbb{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \end{cases}$$

- несжимаемая жидкость:

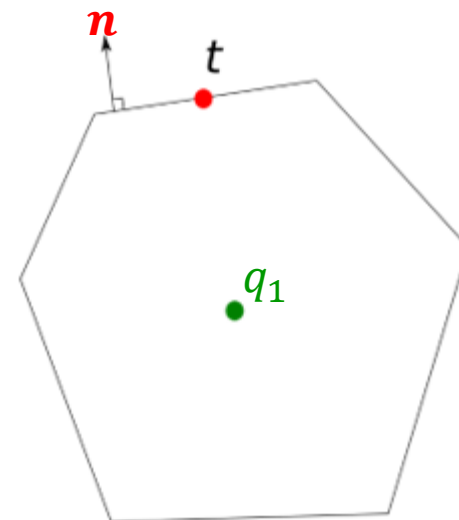
$$\mathcal{A} = \begin{cases} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu \nabla \mathbf{u} + \mathbb{I} p \\ \rho \mathbf{u}^T \end{cases}$$

- электромагнетизм:

$$\mathcal{A} = \begin{cases} -R(\mathbf{H} \otimes \mathbb{I}) \\ R(\mathbf{E} \otimes \mathbb{I}) \end{cases}, R = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

- $\mathbb{C}, \mathbb{K}, \mathbb{B}$ – тензора,

- и другие задачи...





Метод конечных объемов

- Теорема Остроградского-Гаусса:

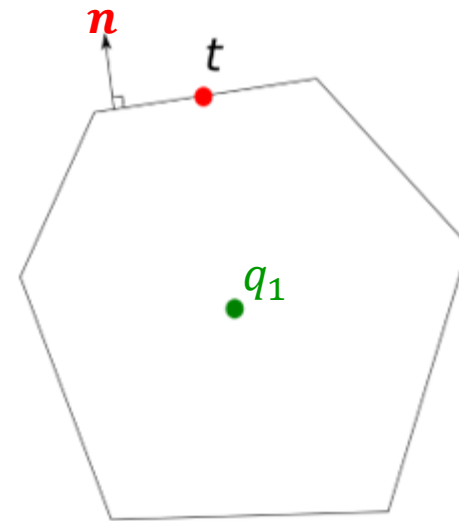
$$\operatorname{div}(\mathcal{A}(q)) = g \Rightarrow \oint_{\partial V} \mathcal{A}(q) d\mathbf{S} = \int_V g dV \Rightarrow \frac{1}{|V|} \sum_{f \in \partial V} \mathcal{A}_f \mathbf{n} |f| = g_V$$

- Поток на грани:

$$\mathbf{t} = \mathcal{A}_f \mathbf{n} = \mathcal{A}(q_f) \mathbf{n} = M(\mathbf{n}) q_f + W(\mathbf{n})(q \otimes \nabla) + R,$$

- где

- q_f - $m \times 1$ вектор неизвестных на грани,
- $(q \otimes \nabla)$ - $md \times 1$ градиент неизвестных в центре ячейки,
- $M(\mathbf{n})$ - $m \times m$ матрица «гиперболического» компонента,
- $W(\mathbf{n})$ - $m \times md$ матрица «эллиптического» компонента,
- R - $m \times 1$ дополнительные члены (гравитация, предыдущий шаг по времени и др.)



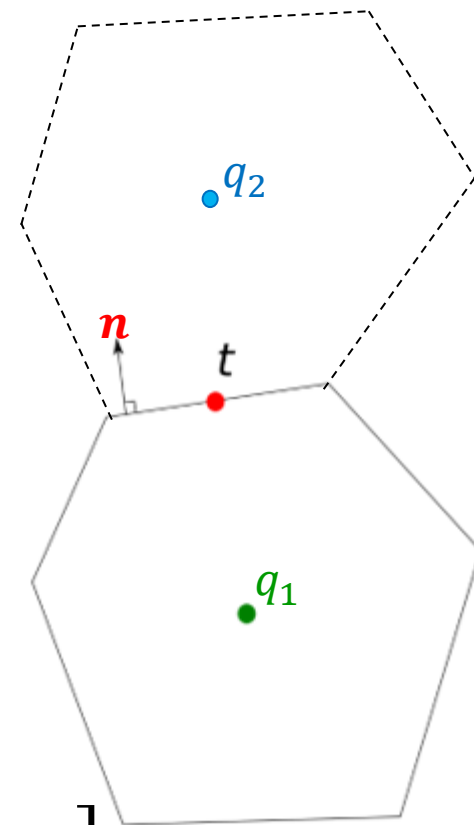


Метод конечных объемов

- Выражение на поток: $\mathbf{t}_i = M_i \mathbf{q}_f + W_i (q_i \otimes \nabla) + R_i$.
 - $M_i = M_i^+ + M_i^-$ - некоторое расщепление (в идеале по $s \setminus z$),
 - $W_i = r_i \Lambda_i \otimes \mathbf{n}^T + \Gamma_i$ - нормальная и тангенциальная проекция,
 - $(q_i \otimes \nabla) \approx \frac{1-2i}{r_i} (q_{fi} - q_i) \mathbf{n} + \left(\mathbb{I} - \frac{1-2i}{r_i} \mathbb{I} \otimes \mathbf{n} (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_i)^T \right) (q_\tau \otimes \nabla)$.
- Система условий:

$$\begin{bmatrix} \Lambda_1 + M_1^+ & & \mathbb{I} \\ & \Lambda_2 - M_2^- & -\mathbb{I} \\ \mathbb{I} & -\mathbb{I} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{f_1} \\ q_{f_2} \\ \mathbf{t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\Lambda_1 - M_1^-) q_1 \\ (\Lambda_2 + M_2^+) q_2 \end{bmatrix}$$

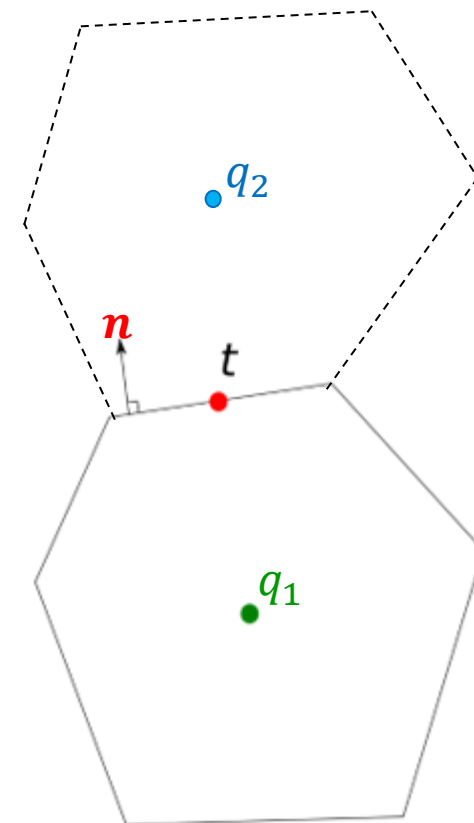
$$+ \begin{bmatrix} \left((\Lambda_1 - M_1^-) \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{y}_1)^T - \Gamma_1 \right) (q_\tau \otimes \nabla) - r_1 M_1^- \otimes \mathbf{n}^T (q_1 \otimes \nabla) - R_1 \\ \left((\Lambda_2 + M_2^+) \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{y}_2)^T + \Gamma_2 \right) (q_\tau \otimes \nabla) - r_2 M_2^+ \otimes \mathbf{n}^T (q_2 \otimes \nabla) + R_2 \end{bmatrix}$$





Метод конечных объемов

- Формально решая систему:
 - Получим выражение на поток t , состоящий из
 - двухточечной части,
 - поперечной коррекции и
 - стабилизации против потока.
 - Можно использовать векторную гармоническую точку, чтобы исключить $(q_\tau \otimes \nabla)$ и получить интерполяцию.



- Похожий метод для получения q_f из граничных условий:

$$\alpha q_f + \beta (q_1 \otimes \nabla) = \gamma$$



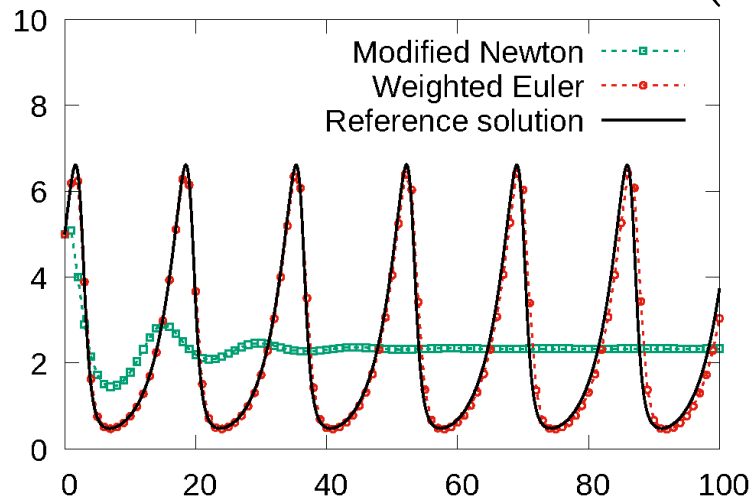
Система реакций

- Система реакций:

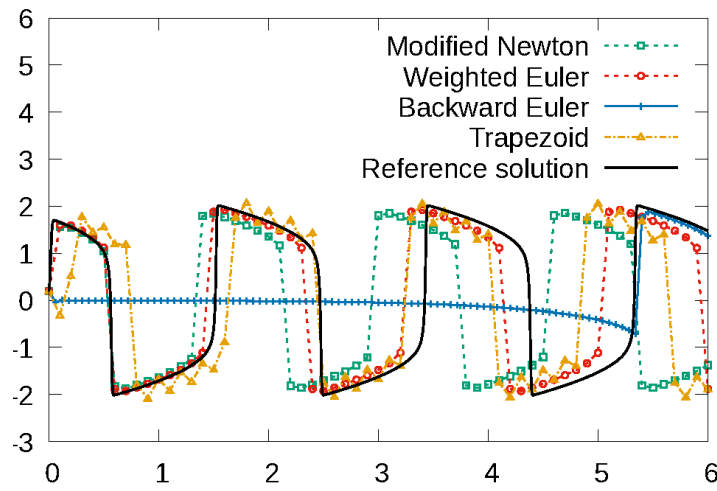
$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{r}, \rightarrow |V^{n+1}| \mathbf{x}^{n+1} - |V^n| \mathbf{x}^n = |V(t)| (\mathbf{W} \mathbf{r}^{n+1} + (\mathbb{I} - \mathbf{W}) \mathbf{r}^n),$$

- где \mathbf{W} матрица, фильтрующая собственные значения в $\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{r}^{n+1}}{\partial \mathbf{x}^T}$, и воспроизводящая экспоненциальный интегратор:

$$\mathbf{W} = \phi \left(\frac{|V(t)|}{|V^{n+1}|} \mathbf{J} \right), \quad \phi(z) = z^{-1} - (e^z - 1)^{-1}.$$



Система Лотки-Вальтерры



Система Ван дер Поля

I. Butakov and K. Terekhov **Two Methods for the Implicit Integration of Stiff Reaction Systems**. Computational Methods in Applied Mathematics, 2022



Метод конечных объемов

- **Не представлено выше, но есть в литературе:**
 - Контакт пористых сред, подчиненных законам Дарси, Био, Бринкмана, Бринкмана-Хазена-Дюпьи-Дарси, Навье-Стокса.
 - Контактная механика. (+слайды)
 - Нелинейный «гиперболический» компонент потока. (+слайды)
 - Четырехмерные подвижные сетки. (далее)
- **Еще не пошло в печать, но есть на бумаге:**
 - Закон Кулона для трения на механическом контакте. (+слайды)
 - Интеграция условий Биверса-Джозефа-Саффмана для взаимодействия свободно текущей жидкости и пороупругого тела. (+слайды)
 - Нелинейный «эллиптический» коэффициент потока.



МКО для Дарси в смешанном виде

- Система:

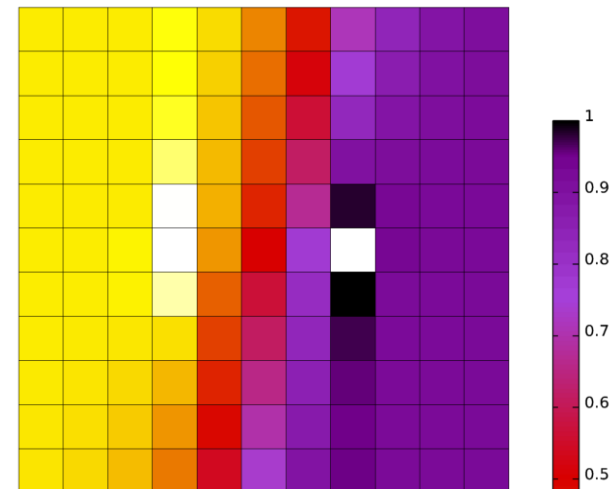
$$-\mathbf{div}(\mathbf{u}) = q, \quad \mathbf{u} = \mathbb{K}\nabla p \Rightarrow \begin{bmatrix} \nabla^T & \mathbb{K}\nabla \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{u} \\ q \end{bmatrix}.$$

- Поток:

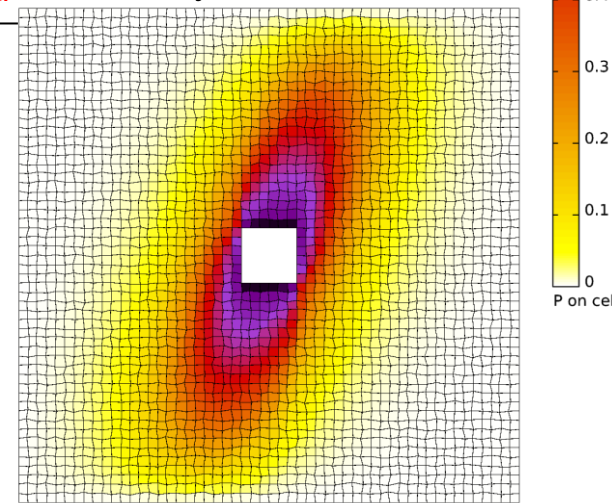
$$\mathbf{t} = \begin{cases} p\mathbb{K}\mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} = \begin{bmatrix} \mathbb{K}\mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{K} & \\ & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T & \mathbf{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix}$$

Неопределенная матрица

- Без учета градиентов скорости и давления:
- Двухточечная часть дает **первый порядок** по точности и удовлетворяет на численных тестах **дискретному принципу максимума**.
- С учетом ГУ общего вида доказана **квази-определенность** и **существование** решения системы.



Тест с двумя скважинами



Тест с одной скважиной



МКО для Навье-Стокса

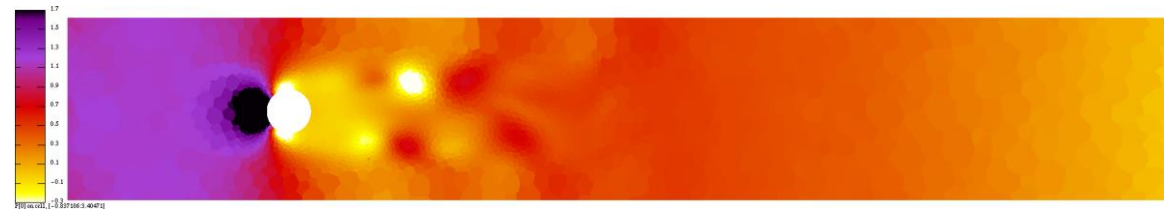
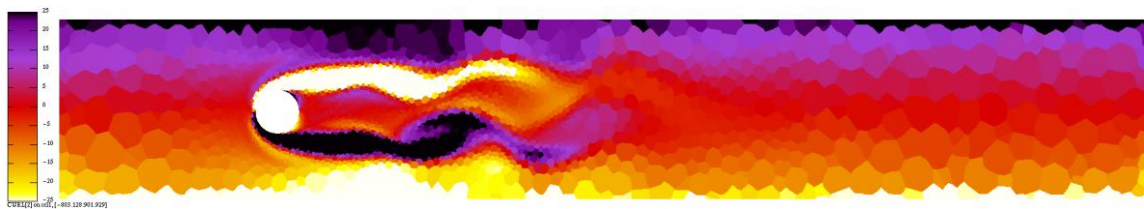
- Система:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{div}(\mathbf{u}\mathbf{u}^T - \nu \nabla \mathbf{u} + p\mathbb{I}) = \mathbf{g}, \\ \mathbf{div}(\mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

- Поток:

$$\mathbf{t} = \begin{cases} \mathbf{u}\mathbf{u}^T \mathbf{n} - \nu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{cases} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}\mathbf{u}^T \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \nu \nabla \mathbf{u} \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T \mathbf{u} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{n} \\ p \end{bmatrix}$$

Неопределенная матрица





Система Навье-Стокса в 4D

- Система уравнений **Навье-Стокса**:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu(\mathbf{u} \nabla^T + \nabla \mathbf{u}^T)) + \nabla p = \mathbf{g}, \\ \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

- Формулировка в терминах **четыре-градиента**:

$$\begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu(\mathbf{u} \nabla^T + \nabla \mathbf{u}^T) + p \mathbb{I} & \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u}^T & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla \\ \partial_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{g} \\ 0 \end{pmatrix},$$

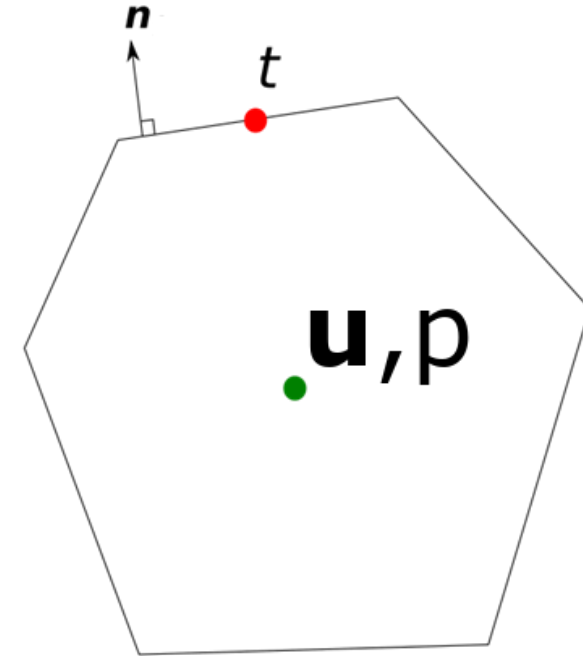
- Формула **Остроградского-Гаусса** для интеграла:

$$\oint \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mu(\mathbf{u} \nabla^T + \nabla \mathbf{u}^T) + p \mathbb{I} & \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u}^T & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{n} \\ n_t \end{pmatrix} dS = \int \begin{pmatrix} \mathbf{g} \\ 0 \end{pmatrix} dV,$$

- Дискретизация по граням:

$$\sum_f |f(t)| \mathbf{t} = |V(t)| \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{t} = \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{n} + n_t) - \mu(\mathbf{u} \nabla^T + \nabla \mathbf{u}^T) \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \rho \mathbf{u}^T \mathbf{n} \end{pmatrix},$$

- Требуется аппроксимация потока \mathbf{t} на гранях.





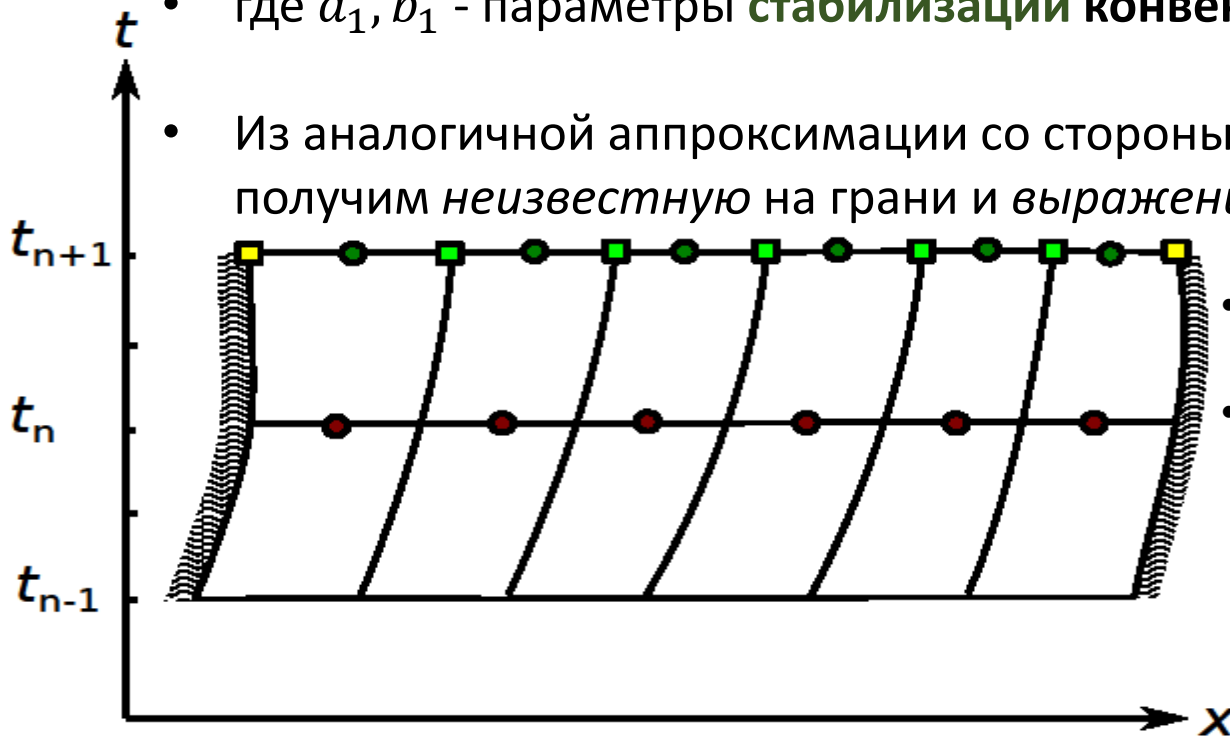
Аппроксимация потока

- **Аппроксимация** потока t на грани из ячейки V_1 с помощью разложения Тейлора:

$$t \approx \begin{bmatrix} \left(a_1 + \frac{\mu}{d_1} \right) (\mathbb{I} + \mathbf{nn}^T) - \frac{\rho}{2} (\mathbf{n}^T \mathbf{u}_1 \mathbb{I} + \mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T) \\ b_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \left(a_1 + \frac{\mu}{d_1} \right) (\mathbb{I} + \mathbf{nn}^T) - \rho (\mathbf{n}^T \mathbf{u}_1 \mathbb{I} + \mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T) - \rho n_t \mathbb{I} & -\mathbf{n} \\ -\rho \mathbf{n} & b_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} + \left(\begin{bmatrix} \left(a_1 + \frac{\mu}{d_1} \right) (\mathbb{I} + \mathbf{nn}^T) \\ b_1 \end{bmatrix} \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) - \begin{bmatrix} \mu \mathbb{I} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes [\mathbf{n}^T \ 0] - [\mathbf{n}^T \ 0] \otimes \begin{bmatrix} \mu \mathbb{I} & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla,$$

- где a_1, b_1 - параметры **стабилизации конвективной** и **седловой** неустойчивостей.

- Из аналогичной аппроксимации со стороны соседней ячейки или из граничных условий получим *неизвестную на грани и выражение на поток.*



- Расчет градиентов методом наименьших квадратов.
- Метод **первого порядка** дискретизации по времени (аналог обратного метода Эйлера)



Другие команды

1. Agélas, L., Eymard, R., & Herbin, R. **A nine-point finite volume scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media.** *Comptes Rendus. Mathématique*, 2009 – **Идея гармонических точек**
2. Novikov A, Voskov D, Khait M, Hajibeygi H, Jansen JD. **A collocated finite volume scheme for high-performance simulation of induced seismicity in geo-energy applications.** *SPE RSC* 2021.
3. Novikov A, Voskov D, Hajibeygi H, Jansen JD. **Collocated Finite Volume Scheme for Scalable Simulation of Induced Seismicity.** *ECMOR* 2022
4. Novikov A, Voskov D, Khait M, Hajibeygi H, Jansen JD. **A scalable collocated finite volume scheme for simulation of induced fault slip.** *J Comput Phys.* 2022;469:111598.
5. S. R. T. Tripuraneni, Aleksei Novikov, Denis Voskov: **Non-linear finite volume discretization for subsurface flow and mechanics problem.** MSc thesis, Delft University of Technology, Netherlands; 2021.
6. S. R. T. Tripuraneni, Aleksei Novikov, Denis Voskov: **Nonlinear finite volume discretization of geomechanical problem.** *Numerical and analytical methods in geomechanics*, 2023
7. P. V. P. Albuquerque **Finite Volume Method with Multipoint Flux and Stress Approximations Using Harmonic Points for Solving Poroelasticity Problems** MSc thesis, Universidade Federal de Pernambuco.



Дальнейшие направления

- Развитие **МКО**: автоматизация построения с учетом особенностей задач, исследование подходов для нелинейных систем.
- Развитие методов решения для схем: блочный **AMG**.
- Оптимизация работы с матрицами с учетом автоматического дифференцирования.
- Внедрение методов решения нелинейных систем.
- **Приложения...**
 - Взаимодействие жидкости с подвижными пороупругими границами.
 - Течение жидкости в разрушаемой упругопластичной среде.
 - Течение и свертываемость крови.

Спасибо за внимание

Контакты:

- kirill.terehov@gmail.com
- igor.konshin@gmail.com
- yuri.vassilevski@gmail.com

Поддержано:

РНФ 21-71-20024 (численные методы)

Минобрнауки 075-15-2022-286 (адаптивные сетки)





Дополнительные слайды

По МКО схемам



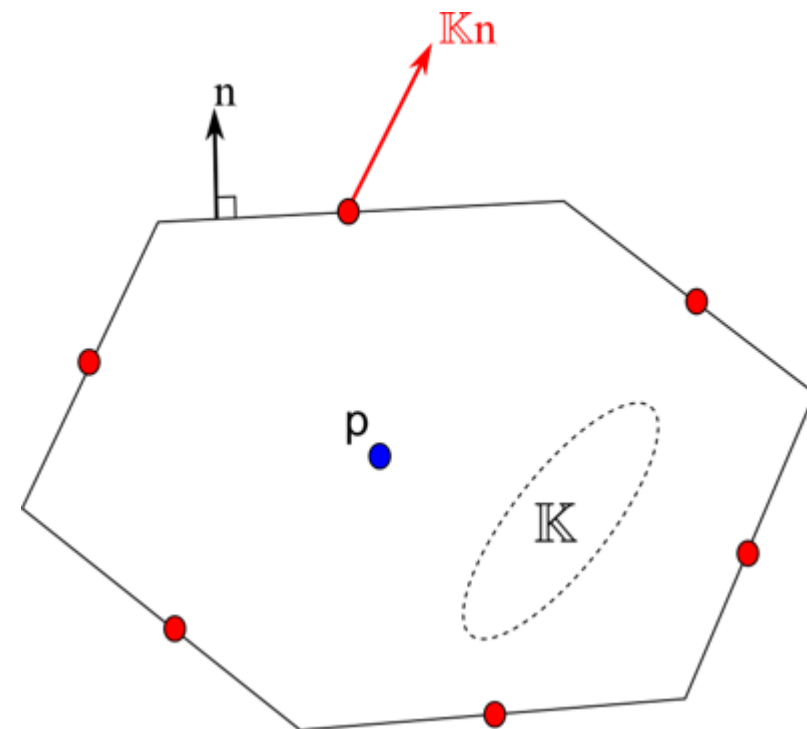
МКО для анизотропной диффузии

- Применим теорему Остроградского-Гаусса:

$$-\int \operatorname{div}(\mathbb{K}\nabla p) dV = -\oint \mathbb{K}\nabla p \cdot \mathbf{n} dS \approx \sum_f \mathbb{K}\nabla p \cdot \mathbf{n} |f|$$

- Требуется найти выражение на поток:

$$\mathbb{K}\nabla p \cdot \mathbf{n} = \nabla p \cdot \mathbb{K}\mathbf{n}$$





МКО для анизотропной диффузии

- Запишем непрерывность потока:

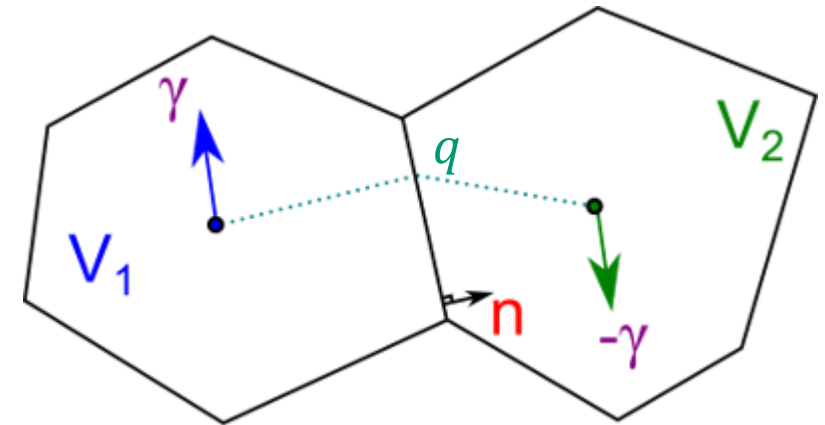
$$t = -\nabla p_1 \cdot \mathbb{K}_1 \mathbf{n} = -\nabla p_2 \cdot \mathbb{K}_2 \mathbf{n} = q + \tau,$$

- Получим двухточечную часть:

$$q = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 d_2 + \lambda_2 d_1} (p_1 - p_2),$$

- и поперечную поправку:

$$\tau = \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla p_{1,2} = \frac{\lambda_1 \lambda_2 (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) + \lambda_2 d_1 \boldsymbol{\gamma}_1 + \lambda_1 d_2 \boldsymbol{\gamma}_2}{\lambda_1 d_2 + \lambda_2 d_1} \cdot \nabla p_{1,2}.$$



$$\lambda_i = \mathbf{n} \cdot \mathbb{K}_i \mathbf{n}$$

$$\boldsymbol{\gamma}_i = \mathbb{K}_i \mathbf{n} - \lambda_i \mathbf{n}$$



МКО для анизотропной диффузии

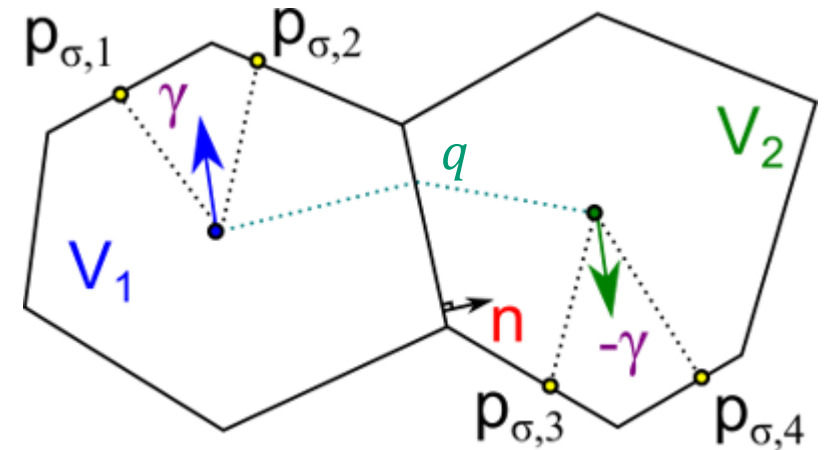
- Аппроксимация поперечных компонент:

$$\begin{aligned}\tau_1 &= \alpha_1(p_{\sigma,1} - p_1) + \alpha_2(p_{\sigma,2} - p_1), \\ \tau_2 &= \beta_1(p_{\sigma,3} - p_2) + \beta_2(p_{\sigma,4} - p_2).\end{aligned}$$

- Линейная комбинация:

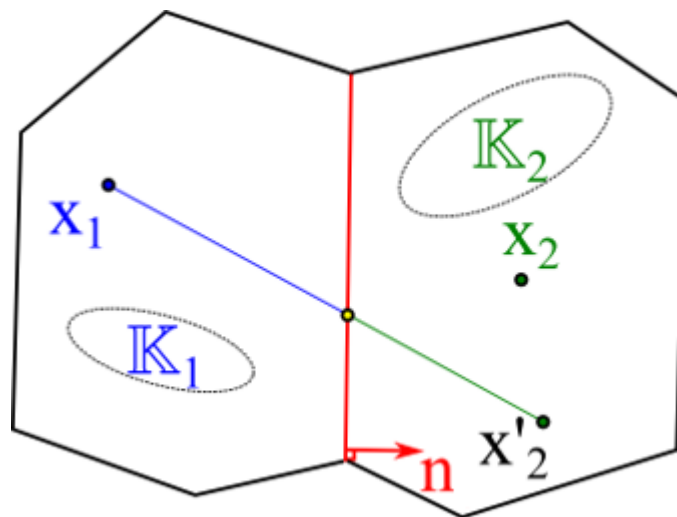
$$\tau = \mu_1\tau_1 + \mu_2\tau_2, \quad \mu_1 + \mu_2 = 1.$$

- Простой выбор: $\mu_1 = \mu_2 = \frac{1}{2}$.
- Некоторые формулы для μ_1, μ_2 приводят к **неотрицательным** схемам или схемам, удовлетворяющим **дискретному принципу максимума**.





Интерполяция через разрыв



$$p(\mathbf{x}_2) = p_1 + \nabla p_1 \cdot \left(\left[\mathbb{I} + \frac{1}{\lambda_2} [\mathbb{K}_1 - \mathbb{K}_2] \mathbf{n} \mathbf{n}^T \right] (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) - \frac{d_1}{\lambda_2} [\mathbb{K}_1 - \mathbb{K}_2] \mathbf{n} \right)$$

Степени свободы для аппроксимации τ .



Адвекция-диффузия компонент крови

- Система уравнений **переноса-диффузии**:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}c - D\nabla c) = r, \rightarrow (\mathbf{u}^T c - D\nabla c \cdot \mathbf{n}) \left(\frac{\nabla}{\partial t} \right) = r, \rightarrow \oint (\mathbf{u}^T c - D\nabla c \cdot \mathbf{n}) \left(\frac{\nabla}{\partial t} \right) dS = \int r dV, \rightarrow \sum_f |f(t)|q = |V(t)|r,$$

$$q = c(\mathbf{n}^T \mathbf{u} + n_t) - D\mathbf{n}^T \nabla c.$$

- Нелинейный перенос-диффузия** для тромбоцитов:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \phi_f \\ \phi_c \end{bmatrix} + \text{div} \left(k(\phi_c, \phi_f) \begin{bmatrix} \mathbf{u}^T \phi_f - D_p \nabla \phi_f^T \\ \mathbf{u}^T \phi_c - D_p \nabla \phi_c^T \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} r_{\phi_f} \\ r_{\phi_c} \end{bmatrix}, \rightarrow \left(k(\phi_c, \phi_f) \begin{bmatrix} \mathbf{u}^T \phi_f - D_p \nabla \phi_f^T \\ \mathbf{u}^T \phi_c - D_p \nabla \phi_c^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_f \\ \phi_c \end{bmatrix} \right) \left(\frac{\nabla}{\partial t} \right) = \begin{bmatrix} r_{\phi_f} \\ r_{\phi_c} \end{bmatrix},$$
$$\rightarrow \oint \left(k(\phi_c, \phi_f) \begin{bmatrix} \mathbf{u}^T \phi_f - D_p \nabla \phi_f^T \\ \mathbf{u}^T \phi_c - D_p \nabla \phi_c^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_f \\ \phi_c \end{bmatrix} \right) \left(\frac{\nabla}{\partial t} \right) dS = \int \begin{bmatrix} r_{\phi_f} \\ r_{\phi_c} \end{bmatrix} dV, \rightarrow \sum_f |f(t)|\mathbf{q}_p = |V(t)| \begin{bmatrix} r_{\phi_f} \\ r_{\phi_c} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{q}_p = (k(\phi_c, \phi_f)\mathbf{n}^T \mathbf{u} + n_t) \begin{bmatrix} \phi_f \\ \phi_c \end{bmatrix} - k(\phi_c, \phi_f) D_p \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T \nabla \phi_f \\ \mathbf{n}^T \nabla \phi_c \end{bmatrix}.$$

- Требуется аппроксимация потоков q и \mathbf{q}_p на гранях. Нелинейный коэффициент аппроксимируется с помощью **метода Тейлора**. В обоих случаях применяется **стабилизация**.



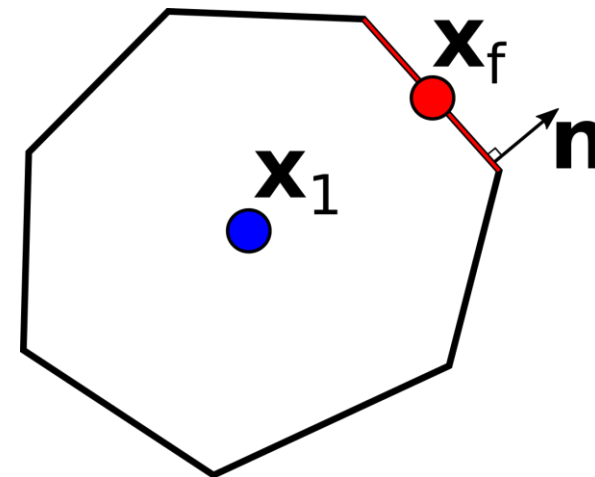
МКО для Навье-Стокса

- Поток:

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

- Аппроксимация второго порядка по формуле Тейлора:

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{x_f} &\approx \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} \Big|_{x_1} + \rho \frac{\partial \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n}}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{x_1} \nabla \mathbf{u} (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1) \\ &\approx \frac{\rho}{2} (\mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T + \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} \mathbb{I}) (2 \mathbf{u}_f - \mathbf{u}_1) \end{aligned}$$

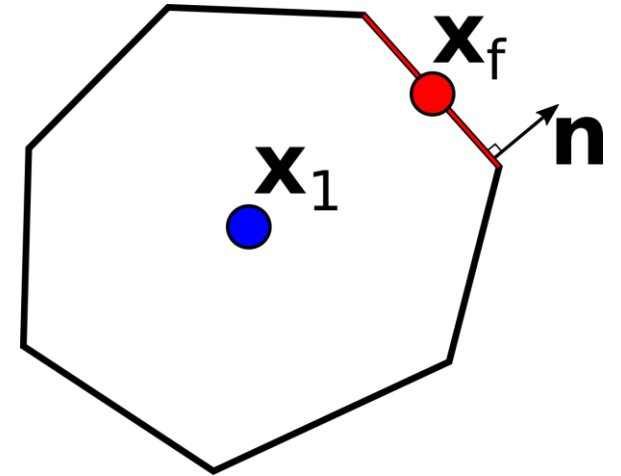




МКО для Навье-Стокса

- Поток:

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



- Расщепление диффузионного члена (как в упругости):

$$-\mu (\nabla \mathbf{u}^T + \mathbf{u} \nabla^T) \mathbf{n} \Big|_{x_f} \approx \frac{\mu}{r_1} (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_f)$$

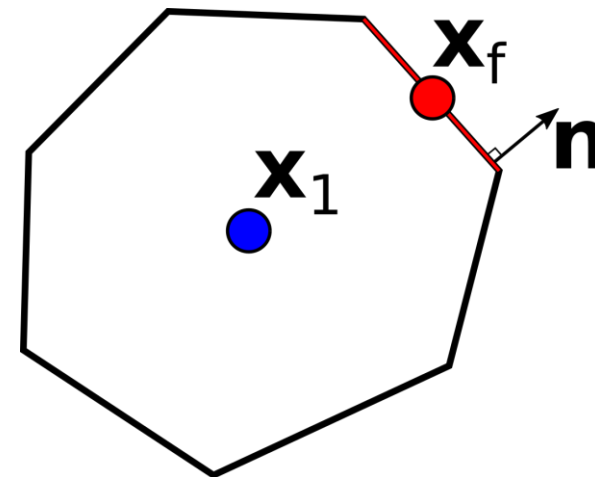
$$-\mu \left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T + \mathbf{n} \otimes \mathbb{I} - \frac{1}{r_1} (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T \right) (\mathbf{u}_1 \otimes \nabla)$$



МКО для Навье-Стокса

- Поток:

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



- Расщепление неопределенной части:

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

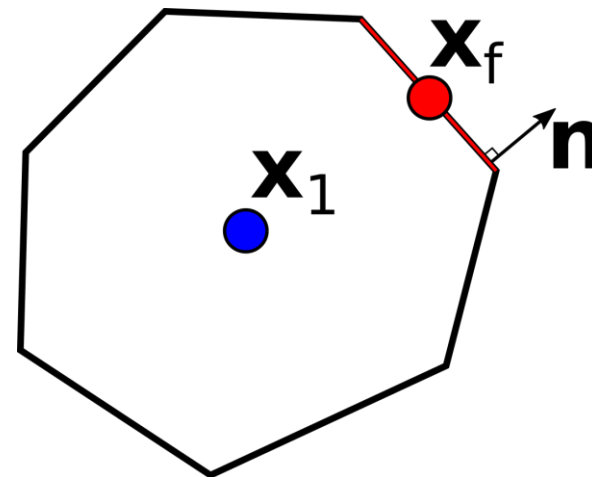
- Коэффициенты подбираются из анализа всего выражения на поток для ЛВВ-устойчивости.



МКО для Навье-Стокса

- 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:

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

- Где матричные коэффициенты имеют вид:

$$T_1 = \begin{bmatrix} \left(a + \frac{\mu}{r_1} \right) (\mathbb{I} + \mathbf{n} \mathbf{n}^T) & \mathbf{c} \mathbf{n} \\ \mathbf{c} \mathbf{n}^T & b \end{bmatrix}, \quad Q_1 = \begin{bmatrix} \frac{\rho}{2} (\mathbf{u}_1 \mathbf{n}^T + \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} \mathbb{I}) & \\ & \end{bmatrix}, \quad S_1 = \begin{bmatrix} & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & \end{bmatrix},$$

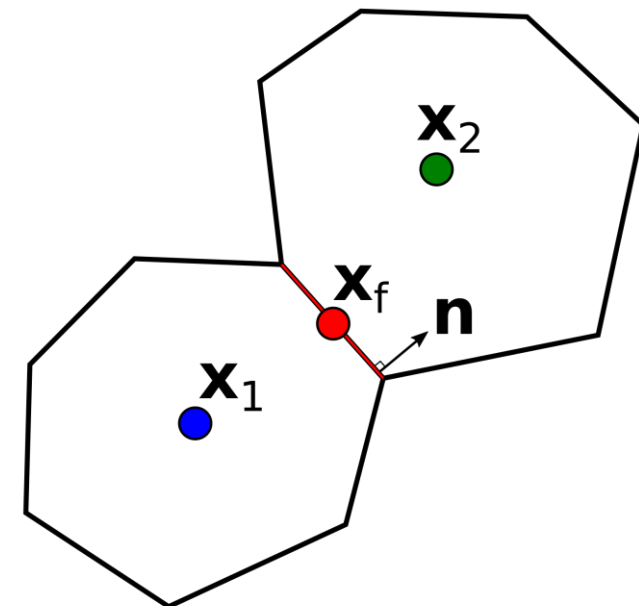
$$W_1 = \begin{bmatrix} \mu (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T + \mathbf{n} \otimes \mathbb{I}) & \\ & \end{bmatrix}.$$



МКО для Навье-Стокса

- Поток:

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



- Из непрерывности потоков:

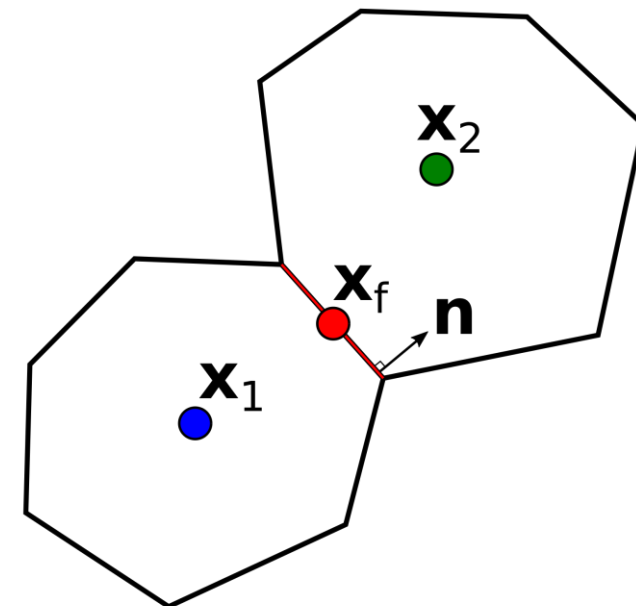
$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_f \\ p_f \end{bmatrix} \approx (T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \times \begin{pmatrix} (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + (T_1 \otimes (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_1)^T - W_1) \left(\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes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



МКО для Навье-Стокса

- Поток:

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



- Из непрерывности потоков:

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



МКО для упругости и контактной задачи

- Система:

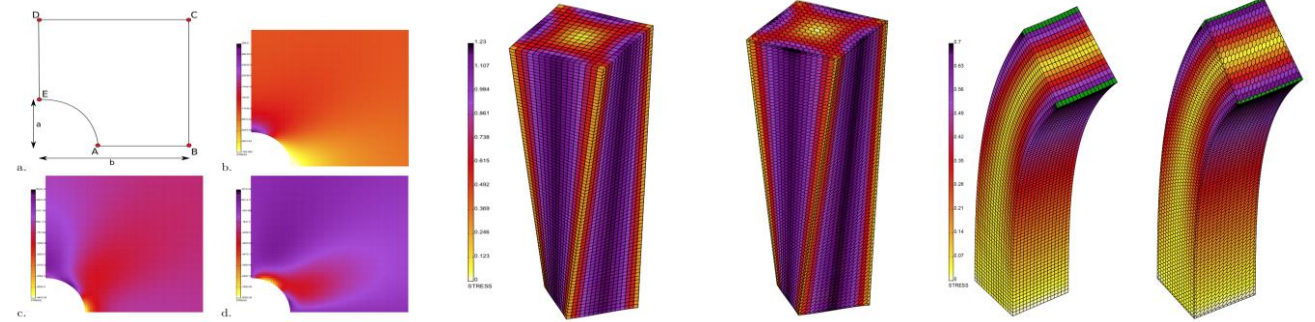
$$-\mathbf{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathcal{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2}.$$

- Поток:

$$\mathbf{t} = (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \mathcal{C}(\mathbf{u} \otimes \nabla).$$

- По аналогии Дарси:

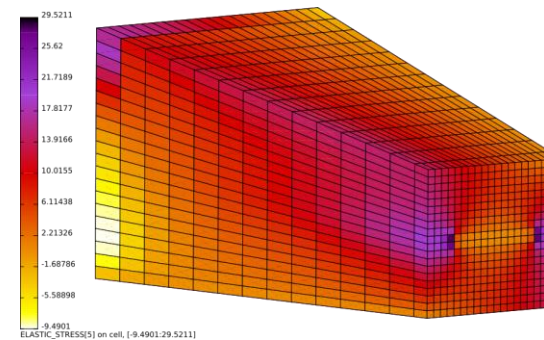
- Выражение на поток.
- Метод интерполяции.



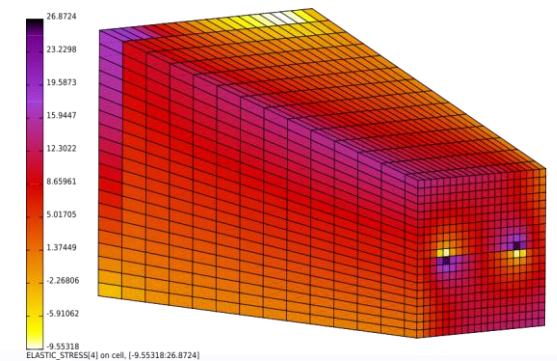
Load

Twist

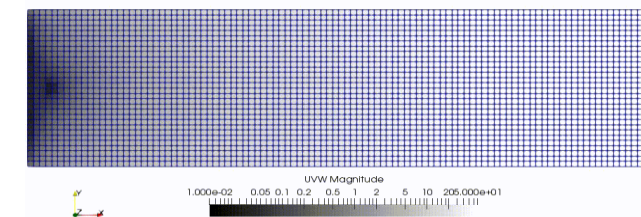
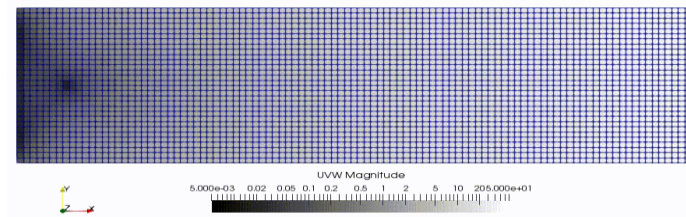
Bend



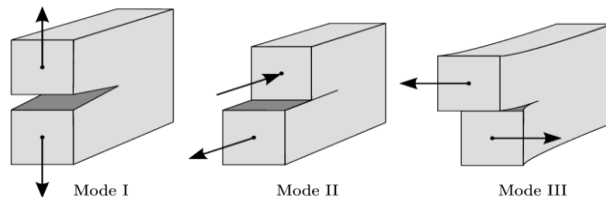
σ_{xy}



σ_{xz}



Типы контакта:





МКО для упругости

- Поток (вектор внутреннего трения) для упругости:

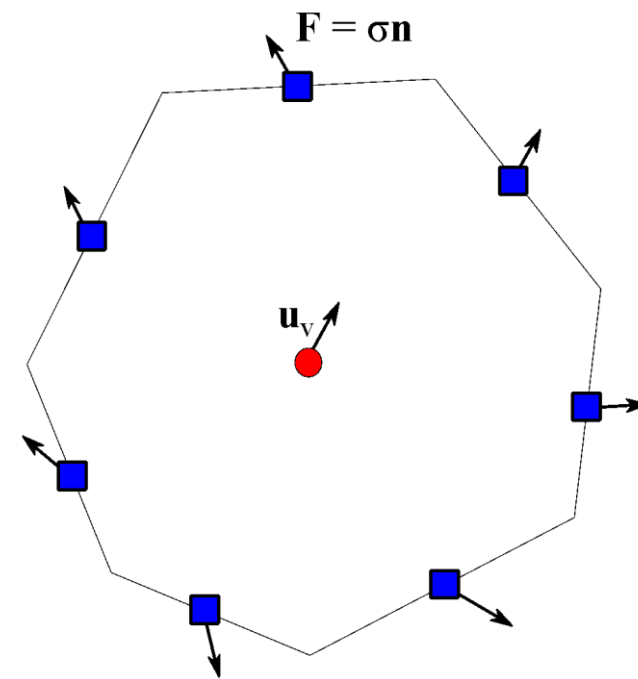
$$\mathbf{t} = \mathbf{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} \mathbf{n}$$

- В терминах Войта:

$$\mathbf{t} = \mathbf{N} \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon}$$

- Нормаль:

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} n_x & & & n_z & n_y \\ & n_y & & n_z & n_x \\ & & n_z & n_y & n_x \end{pmatrix}$$





МКО для упругости

- Переход с терминологии Войта:

$$\mathbf{t} = \mathbf{NC}\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{11}\mathbf{n} & \mathbf{C}_{12}\mathbf{n} & \mathbf{C}_{13}\mathbf{n} \\ \mathbf{C}_{12}^T\mathbf{n} & \mathbf{C}_{22}\mathbf{n} & \mathbf{C}_{23}\mathbf{n} \\ \mathbf{C}_{13}^T\mathbf{n} & \mathbf{C}_{23}^T\mathbf{n} & \mathbf{C}_{33}\mathbf{n} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{bmatrix} = (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \mathbf{C} (\mathbf{u} \otimes \nabla)$$

- Непрерывность потоков дает двухточечную часть:

$$\mathbf{q} = \underbrace{T_1(d_1 T_2 + d_2 T_1)^{-1} T_2}_{\text{Тензорное гармоническое среднее}} (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2), \quad T_i = (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \mathbf{C}_i (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}).$$

- Поперечная поправка (в скобках 3x3 матрица векторов, $\Gamma_i = (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \mathbf{C}_i - T_1 (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T)$):

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} T_1(d_1 T_2 + d_2 T_1)^{-1} T_2 \otimes (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1)^T \\ + d_1 T_2 (d_1 T_2 + d_2 T_1)^{-1} \Gamma_1 \\ + d_2 T_1 (d_1 T_2 + d_2 T_1)^{-1} \Gamma_2 \end{pmatrix} (\mathbf{u} \otimes \nabla)_{1,2}.$$



МКО для контактной задачи

- Контакт I типа: ГУ Неймана
- Контакты II и III типов **без трения**:
 - Дополнительные условия на поток:

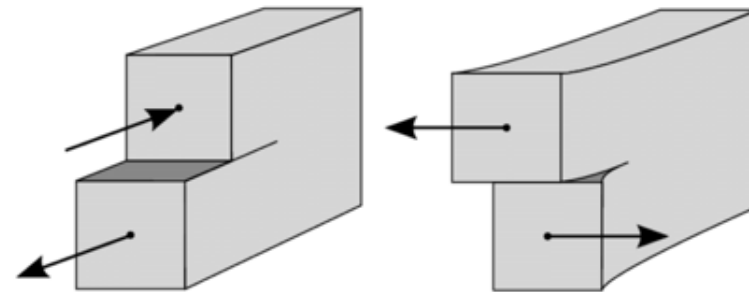
$$\left[\mathbf{n}^T \left(-\mathcal{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} \right) \mathbf{n} \right] = 0, \quad (\mathbb{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}^T) \left(-\mathcal{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} \right) \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad [\mathbf{n}^T \mathbf{u}] = 0$$

- Двухточечная аппроксимация:

$$\mathbf{q} = \frac{1}{\mathbf{n}^T (d_1 T_2^{-1} + d_2 T_1^{-1}) \mathbf{n}} \mathbf{n} \mathbf{n}^T (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2),$$

- Поперечная поправка:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{\mathbf{n}^T (d_1 T_2^{-1} + d_2 T_1^{-1}) \mathbf{n}} \mathbf{n} \mathbf{n}^T (\mathbb{I} \otimes (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1)^T + d_1 T_2 \Gamma_1 + d_2 T_1 \Gamma_2) (\mathbf{u} \otimes \nabla)_{1,2}.$$





Закон Кулона

- Закон Кулона с анизотропным трением, $\boldsymbol{\mu}$ – вырожденный тензор второго порядка, $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu} \mathbf{n} = 0$:

- Трение покоя: $[\mathbf{u}] = \mathbf{0}$, $|(\boldsymbol{\mu} + \mathbf{nn}^T)^{-1}(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}| \leq |\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}|$,

- Скольжение с трением: $[\mathbf{u}] \cdot \mathbf{n} = 0$, $(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = -\boldsymbol{\mu} |\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}| \frac{[\mathbf{u} - \mathbf{u}^0]}{|[\mathbf{u} - \mathbf{u}^0]|}$.

- Преобразование условий:

- Дополнительная неизвестная: $\xi = \ln|(\mathbf{u}_{f_1} - \mathbf{u}_{f_2}) - (\mathbf{u}_{f_1}^0 - \mathbf{u}_{f_2}^0)| - \ln|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}|$,

- Выражение на трение: $\mathbf{u}_{f_1} - \mathbf{u}_{f_2} + \mathbb{T} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{u}_{f_1}^0 - \mathbf{u}_{f_2}^0$, $\mathbb{T} = \exp(\xi) (\boldsymbol{\mu} + \mathbf{nn}^T)^{-1} (\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)$.

- Система на поток:

$$\begin{bmatrix} \mathbb{T}_1 & & \mathbb{I} \\ & \mathbb{T}_2 & -\mathbb{I} \\ \mathbb{I} & -\mathbb{I} & \mathbb{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{f_1} \\ \mathbf{u}_{f_2} \\ -\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{T}_1 \mathbf{u}_1 - \Gamma_1(\mathbf{u}_1 \otimes \nabla) \\ \mathbb{T}_2 \mathbf{u}_2 + \Gamma_2(\mathbf{u}_2 \otimes \nabla) \\ \mathbf{u}_{f_1}^0 - \mathbf{u}_{f_2}^0 \end{bmatrix}$$



МКО для системы Био

- Система:

$$-\operatorname{div}(\mathbb{C}:\boldsymbol{\epsilon} - \mathbb{B}p) = \rho g \nabla z,$$

$$\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div}(\mu^{-1} \mathbb{K}(\nabla p - \rho_f g \nabla z)) - \mathbb{B}:\frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}}{\partial t} = q.$$

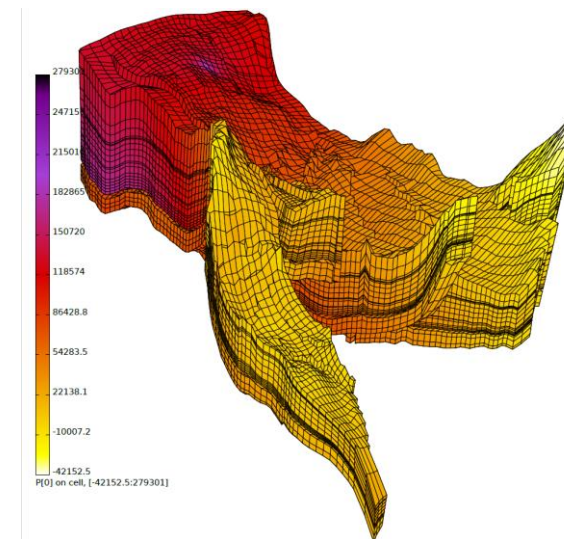
- Поток:

Неопределенная матрица

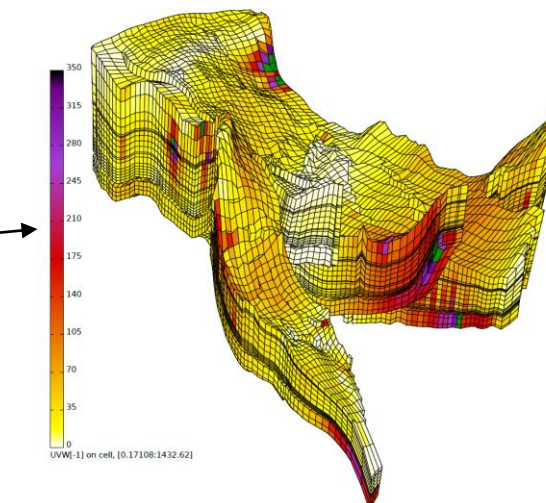
$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} \mathbb{B}\mathbf{n} \\ (\mathbb{B}\mathbf{n})^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} - (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \begin{bmatrix} \mathbb{C} \\ \Delta t \mu^{-1} \mathbb{K} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} \otimes \nabla \right) + \begin{bmatrix} \Delta t \mu^{-1} \rho_f g \mathbf{n}^T \mathbb{K} \nabla z - (\mathbb{B}\mathbf{n})^T \mathbf{u}^n \end{bmatrix}.$$

- Непрерывность потоков дает:

- Единственное выражение на поток
- Интерполяцию
- ЛББ-неустойчивость
- **Неопределенный матричный коэффициент в q**



Давление



Перемещения



МКО для системы Био

- Система:

$$-\operatorname{div} \left(\mathbb{C} : \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} - \mathbb{B} p \right) = \rho g \nabla z,$$

$$\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\mu^{-1} \mathbb{K} (\nabla p - \rho_f g \nabla z) - \mathbb{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) = q.$$

- Поток:

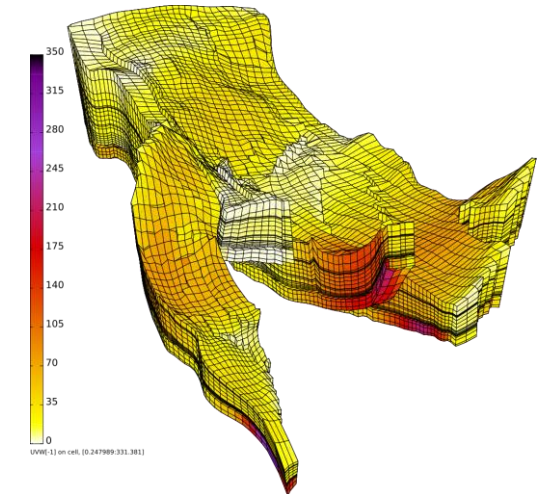
$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} (\mathbb{B}\mathbf{n})^T & \mathbb{B}\mathbf{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} - (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T) \left[\begin{matrix} \mathbb{C} & \Delta t \mu^{-1} \mathbb{K} \end{matrix} \right] \left(\begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{bmatrix} \otimes \nabla \right) + \begin{bmatrix} \Delta t \mu^{-1} \rho_f g \mathbf{n}^T \mathbb{K} \nabla z - (\mathbb{B}\mathbf{n})^T \mathbf{u}^n \end{bmatrix}.$$

Неопределенная матрица

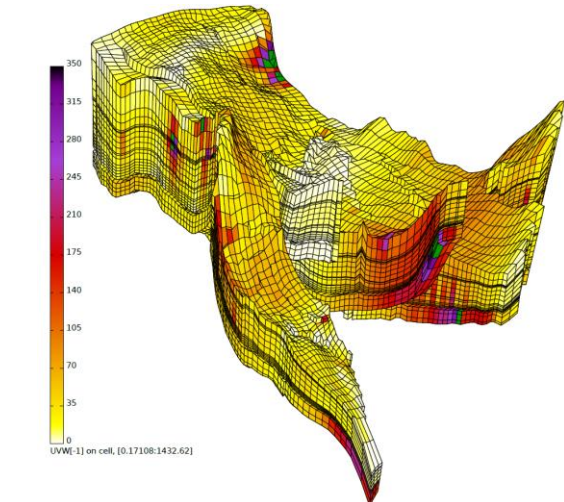
- Расщепление **неопределенной матрицы**:

$$\begin{bmatrix} (\mathbb{B}\mathbf{n})^T & \mathbb{B}\mathbf{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \mathbb{B}\mathbf{n}\mathbf{n}^T \mathbb{B} & \mathbb{B}\mathbf{n} \\ (\mathbb{B}\mathbf{n})^T & b \mathbf{n}^T \mathbb{B}^2 \mathbf{n} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a \mathbb{B}\mathbf{n}\mathbf{n}^T \mathbb{B} & \\ & b \mathbf{n}^T \mathbb{B}^2 \mathbf{n} \end{bmatrix},$$

- Параметры определяются через анализ собственных значений для выражения на поток.



Перемещения (с расщеплением)



Перемещения (без расщепления)



Условия Биверса-Джозефа-Саффмана

- Условия Биверса-Джозефа-Саффмана для несжимаемой жидкости и пороупругого тела:

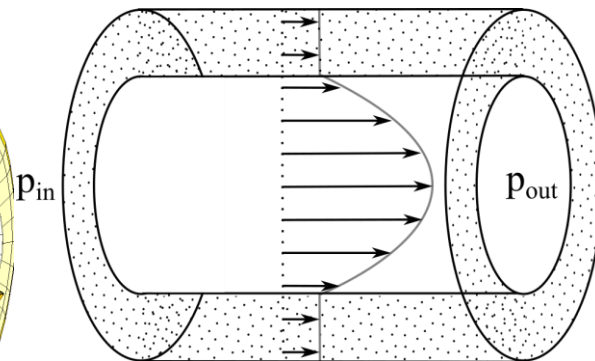
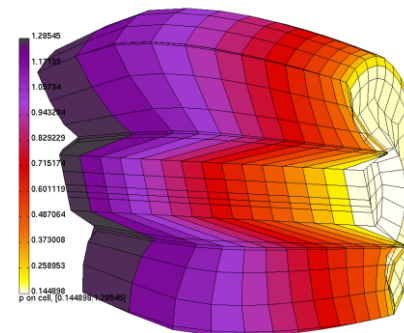
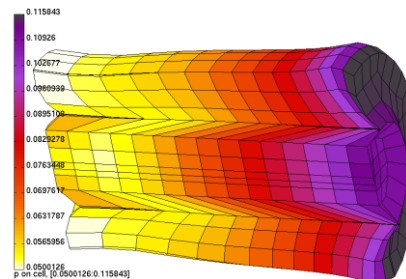
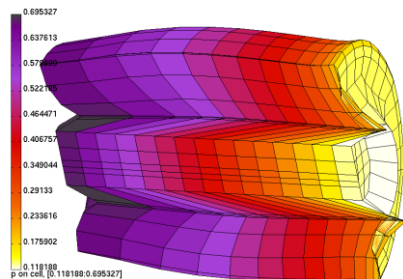
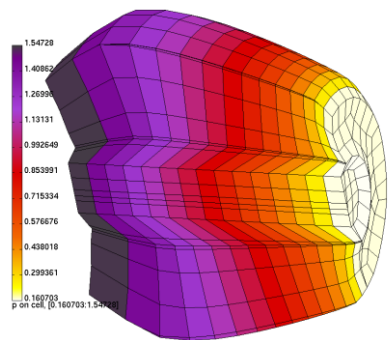
$$\left(\begin{array}{c} \gamma\nu(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\sqrt{\kappa^{-1}}(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\mathbf{v} + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n} \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n} \\ -\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \end{array} \right) \Big|_{\partial\Omega_f} = \left(\begin{array}{c} \gamma\nu(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\sqrt{\kappa^{-1}}(\mathbb{I} - \mathbf{nn}^T)\partial_t\mathbf{u} - p\mathbf{n} \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})\mathbf{n} - \alpha p\mathbf{n} \\ -\mathbf{n} \cdot \partial_t\mathbf{u} + \nu^{-1}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}\nabla p \end{array} \right) \Big|_{\partial\Omega_p}$$

- где \mathbf{v} – скорость жидкости, \mathbf{u} – смещение, p – давление, ν – вязкость жидкости, $\boldsymbol{\kappa}$ – тензор проницаемости, α - параметр Био, $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v})$ - тензор стресса жидкости, $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})$ - тензор стресса твердого тела.
- Аппроксимация условий позволяет выразить \mathbf{v}_f , \mathbf{u}_f и p_f - скорость, смещение и давление на грани и использовать их в выражении на поток.
- Потоки:
 - Свободно текущая жидкость: $\mathbf{t}_f = \begin{pmatrix} \mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{n} - \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v})\mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T\mathbf{v} \end{pmatrix}$,
 - Течение в пороупругой среде: $\mathbf{t}_p = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})\mathbf{n} - \alpha p\mathbf{n} \\ \alpha\mathbf{n} \cdot \partial_t\mathbf{u} - \nu^{-1}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}\nabla p \end{pmatrix}$.

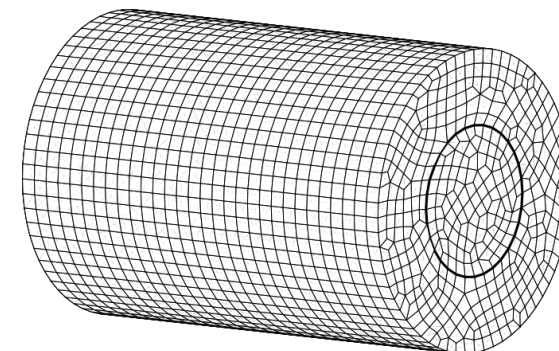
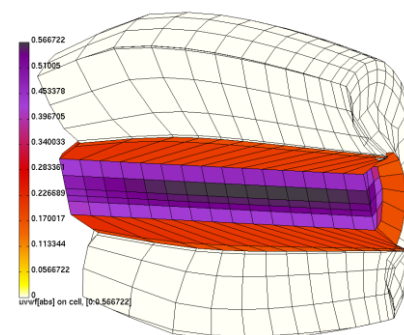
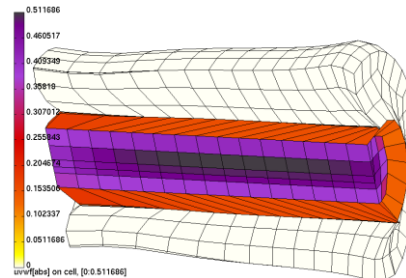
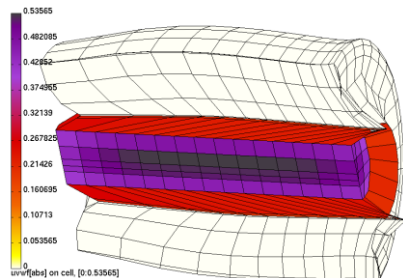
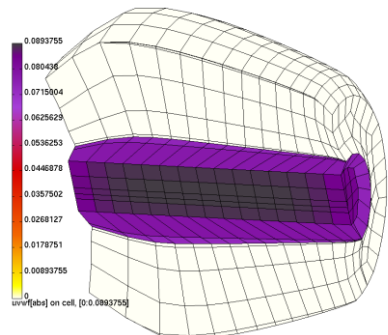


Условия Биверса-Джозефа-Саффмана

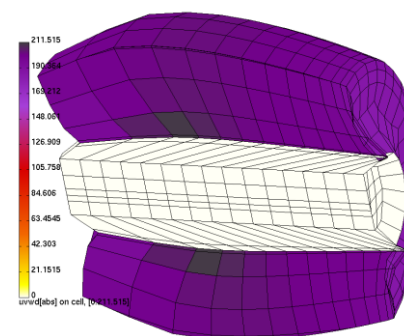
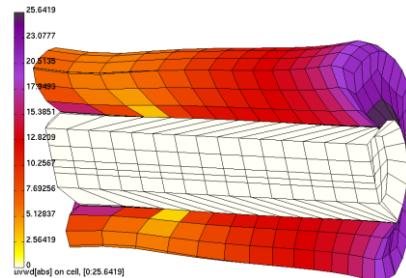
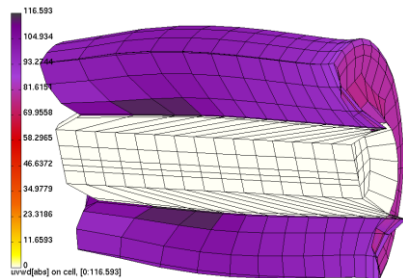
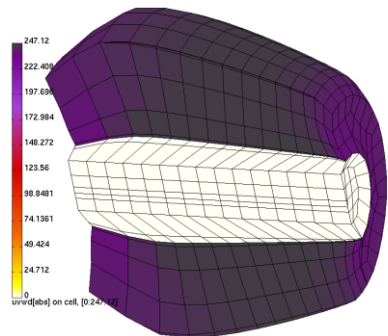
Давление



Скорости



Смещение



Пульсирующие
давление на входе

Параметры:
 $\lambda = 25, \mu = 5, \alpha = 1$
 $\nu = 10^{-2}, \gamma = 1, \kappa = 5$



Дополнительные слайды

По блочному алгебраическому многосеточному методу



References

- 1) Bakhvalov, Nikolai Sergeevich. ***On the convergence of a relaxation method with natural constraints on the elliptic operator.*** USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics 6.5, 101--135 (1966)
- 2) Fedorenko, Radii Petrovich. ***Iterative Methods for Elliptic Difference Equations.*** Russian Mathematical Surveys 28, 129--195 (1973)
- 3) Brandt, A and McCormick, S and Ruge, J.: ***Algebraic multigrid (AMG) for automatic algorithm design and problem solution.*** Report,. Comp. Studies, Colorado State University, Ft. Collins (1982)
- 4) Ruge, John W and Stuben, Klaus.: ***Algebraic multigrid. Multigrid methods,*** SIAM, 73--130 (1987)
- 5) Brezina, Marian and Falgout, R and MacLachlan, Scott and Manteuffel, T and McCormick, S and Ruge, John. ***Adaptive algebraic multigrid.*** SIAM Journal on Scientific Computing 27.4, 1261--1286 (2006)
- 6) Brezina, Marian and Ketelsen, Christian and Manteuffel, T and McCormick, S and Park, Minho and Ruge, J. ***Relaxation-corrected bootstrap algebraic multigrid (rBAMG).*** Numerical Linear Algebra with Applications 19.2, 178--193 (2012)
- 7) Wallis, John Richard, Richard P. Kendall, and T. E. Little. ***Constrained residual acceleration of conjugate residual methods.*** SPE (1985)
- 8) Bramble, James H., and Joseph E. Pasciak. ***A preconditioning technique for indefinite systems resulting from mixed approximations of elliptic problems.*** Mathematics of Computation 50.181 (1988): 1-17.



Near Null-Space Vector

- Linear system: $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, where A is $N \times N$ matrix.
- Let $A\mathbf{e} \approx \mathbf{0}$, where vector \mathbf{e} is **near null space** of the system:

$$a_{ii}\mathbf{e}_i \approx - \sum_{i \neq j} a_{ij}\mathbf{e}_j$$

- For elliptic system the best guess is: $\mathbf{e} = \mathbf{1}$ – **classical** AMG.
- **Adaptive multigrid**: exploit information on \mathbf{e} for general systems.
- **Bootstrap process**: try to estimate \mathbf{e} with several iterations of the available smoother

(Ideal \mathbf{e} is an **eigenvector** corresponding to smallest eigenvalue – extremely expensive to find! Instead we search for error outside of smoother range)



Space and Connections Splitting

- **Coarse-fine** splitting of the grid elements: $\Omega = \{1, \dots, N\} = C \cup F$.
- **Connections** of the element: $N_i = \{j \mid i \neq j, a_{ij} \neq 0\}$.
- **Strong-weak** splitting of connections: $N_i = S_i \cup W_i = I_i \cup T_i \cup E_i \cup W_i$.
 - $I_i = S_i \cap C$ – **interpolatory connections**.
 - W_i - **weak connections**, absorbed by the diagonal coefficient.
 - $T_i \cup E_i = S_i \cap F$ – **strong non-interpolatory** connections.
 - T_i – **twice-removed interpolation**, requires $\forall j \in T_i : S_i \cap S_j \cap C \neq \emptyset$.
 - E_i – **absorbed by the coefficient**, do not satisfy the condition.
- **Ruge-Stuben** rules for the **coarse-fine** splitting:
 - $\forall i \in F: \forall j \in S_i \cap F: S_i \cap S_j \cup C \neq \emptyset$ (E_i is always **empty**)
 - C is a maximal independent set in the graph of strong connections.



Interpolation Method

- Using introduced spaces:

$$a_{ii} \mathbf{e}_i \approx - \sum_{i \neq j} a_{ij} \mathbf{e}_j = - \sum_{j \in I_i} a_{ij} \mathbf{e}_j - \sum_{j \in W_i} a_{ij} \mathbf{e}_j - \sum_{j \in T_i} a_{ik} \mathbf{e}_k - \sum_{j \in E_i} a_{ij} \mathbf{e}_j$$

- Twice-removed interpolation for T_i :

$$a_{ik} \mathbf{e}_k \approx - \sum_{j \in S_i \cap S_k \cap C} \frac{a_{ik} a_{kj} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j}{\sum_{l \in S_i \cap S_k \cap C} a_{kl} \mathbf{e}_l}$$

- Now $A\mathbf{e} \approx \mathbf{0}$ turns into expression:

$$\left(a_{ii} + \sum_{j \in W_i} a_{ij} \frac{\mathbf{e}_j}{\mathbf{e}_i} \right) \mathbf{e}_i \approx - \eta_i \sum_{j \in I_i} \left(a_{ij} + \sum_{k \in T_i} \frac{a_{ik} a_{kj} \mathbf{e}_k}{\sum_{l \in S_i \cap S_k \cap C} a_{kl} \mathbf{e}_l} \right) \mathbf{e}_j$$

- Multiplying coefficient for E_i :

$$\eta_i = \frac{\sum_{k \in S_i} a_{ik} \mathbf{e}_k}{\sum_{k \in S_i \setminus E_i} a_{ik} \mathbf{e}_k}$$



Interpolation Method

- Interpolation:

$$\mathbf{e}_i = \sum_{j \in I_i} \omega_{ij} \mathbf{e}_j$$

- Weights:

$$\omega_{ij} = \frac{-\eta_i \mathbf{e}_i}{a_{ii} + \sum_{j \in W_i} a_{ij} \mathbf{e}_j} \left(a_{ij} + \sum_{k \in T_i} \frac{a_{ik} a_{kj} \mathbf{e}_k}{\sum_{l \in S_i \cap S_k \cap C} a_{kl} \mathbf{e}_l} \right)$$

- Prolongator:

$$P_i = \begin{cases} \sum_{j \in I_i} \omega_{ij} \delta_j & i \in F \\ \delta_i & i \in C \end{cases}$$

- Coarse-space system:

$$B = P^T A P$$



Choosing Spaces

- **Modification** to the Ruge-Stuben **coarse-fine splitting** rules:

- $\forall i \in F: |\eta_i - 1| \leq \kappa$, where κ is a tunable parameter.
- C is a maximal independent set in the graph of strong connections.

- **Classical** selection of strong connections by Ruge-Stuben:

- $S_i = \left\{ j \mid -a_{ij} \geq \theta \max_{k \in N_i} (-a_{ik}) \right\}, \quad \theta = \frac{1}{4}.$

- **Modified** selection of strong connections:

- $S_i = \left\{ j \mid -\text{sgn}(a_{ii} \mathbf{e}_i) a_{ij} \mathbf{e}_j \geq \theta \max_{k \in N_i} (-\text{sgn}(a_{ii} \mathbf{e}_i) a_{ik} \mathbf{e}_k) \right\}, \quad \theta = \frac{1}{4}$

- Additional requirement: $a_{ii} \mathbf{e}_i (a_{ii} \mathbf{e}_i + \sum_{j \in W_i} a_{ij} \mathbf{e}_j) > 0.$



Interpolation Method (Block version)

- Selection of strong connections:

$$S_i = \left\{ j \mid \|a_{ij}\| \geq \theta \max_{k \in N_i} (\|a_{ik}\|) \right\}, \quad \theta = \frac{1}{4}.$$

- Interpolation ($\kappa = 0 \Rightarrow E_i = \emptyset$):

$$\mathbf{e}_i = \sum_{j \in I_i} \omega_{ij} \mathbf{e}_j, \quad \omega_{ij} = - \left(\mathbf{a}_{ii} + \sum_{j \in W_i} \mathbf{a}_{ij} \right)^{-1} \left(\mathbf{a}_{ij} + \sum_{k \in T_i} \frac{\mathbf{a}_{ik} \|\mathbf{a}_{kj}\|}{\sum_{l \in S_i \cap S_k \cap C} \|\mathbf{a}_{kl}\|} \right)$$

- Prolongator:

$$P_i = \begin{cases} \sum_{j \in I_i} \omega_{ij} \delta_j & i \in F \\ \mathbb{I} \delta_i & i \in C \end{cases}$$

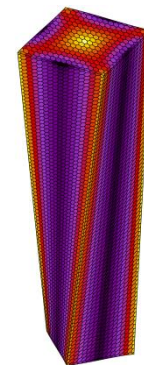
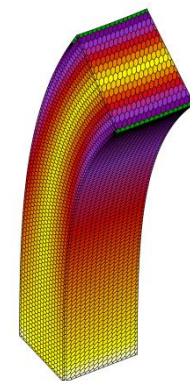
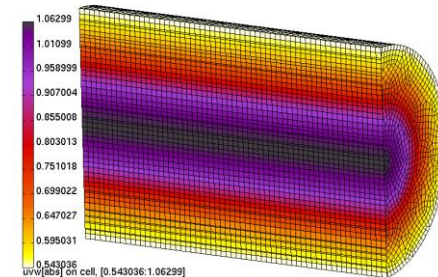
- Coarse-space system:

$$B = P^T A P$$



Block AMG on Saddle-Point Problems

NS: analytical Pousielle solution in a pipe
rigid-s: analytical solution for rigid beam under shear
rigid-t: analytical solution for rigid beam under torsion



Problem	Size	Block GS, T	Block GS, Nit	Block AMG, T	AMG, Nit	Block Size
NS-1	11040	0,581	64	1,089	5	4
NS-2	80640	3,127	133	3,262	4	4
NS-3	614400	38,044	270	20,6	6	4
rigid-s-1	5120	-	-	1,196	30	4
rigid-s-2	40960	-	-	2,552	42	4
rigid-s-3	327680	-	-	16,614	58	4
rigid-t-1	5120	-	-	0,883	29	4
rigid-t-2	40960	-	-	2,657	44	4
rigid-t-3	327680	-	-	16,314	62	4

(time in sec)

(time in sec)

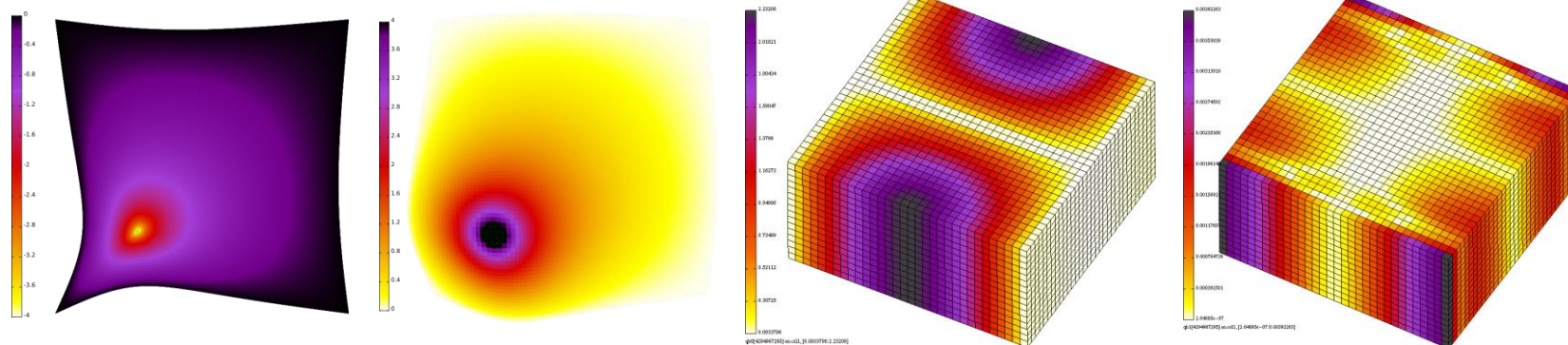
Almost linear scaling!



Block AMG on Saddle-Point Problems

biot: Barry & Mercer analytical solution for pulsating source

maxwell: analytic solution for cavity bounded by perfect electric conductor



Problem	Size	Block GS, T	Block GS, Nit	Block AMG, T	AMG, Nit	Block Size
biot-1	1936	0,353	56	0,603	8	4
biot-2	8464	0,737	92	0,787	9	4
biot-3	35344	1,261	206	1,212	10	4
maxwell-1	3072	0,221	7	0,323	3	6
maxwell-2	24576	0,49	7	1,365	3	6
maxwell-3	196608	2,545	7	5,615	3	6

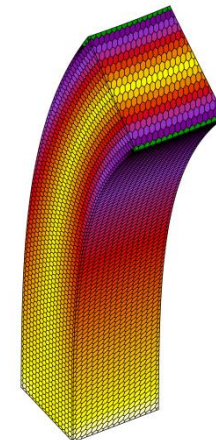
(time in sec)

(time in sec)

Almost linear scaling!



Block AMG on Block Elliptic Problems



shear: analytical solution for elastic beam under shear
tet, hex, dual: tetrahedral, hexahedral and dual meshes

Problem	Size	Block GS, T	Block GS, Nit	Block AMG, T	AMG, Nit	Block Size
shear-tet-1	5760	0,732	325	0,804	62	3
shear-tet-2	46080	-	-	2,626	69	3
shear-tet-3	363640	-	-	23,392	89	3
shear-hex-1	960	0,4	114	0,475	24	3
shear-hex-2	7680	0,873	276	1,123	31	3
shear-hex-3	61440	3,087	507	3,363	35	3
shear-dual-1	1575	0,523	131	0,51	34	3
shear-dual-2	9963	0,801	285	1,299	45	3
shear-dual-3	70227	3,892	609	3,4	56	3

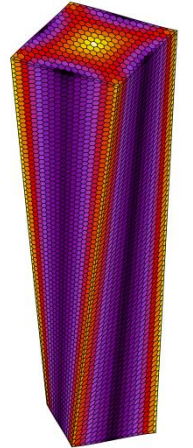
(time in sec)

(time in sec)

Almost linear scaling!



Block AMG on Block Elliptic Problems



torsion: analytical solution for elastic beam under torsion
tet, hex, dual: tetrahedral, hexahedral and dual meshes

Problem	Size	Block GS, T	Block GS, Nit	Block AMG, T	AMG, Nit	Block Size
torsion-tet-1	5760	2,113	972	0,83	62	3
torsion-tet-2	46080	11,764	4220	2,7	69	3
torsion-tet-3	368640	-	-	18,775	88	3
torsion-hex-1	960	0,353	106	0,74	23	3
torsion-hex-2	7680	0,677	210	1,017	34	3
torsion-hex-3	61440	3,326	382	3,615	61	3
torsion-dual-1	1575	0,425	126	0,695	32	3
torsion-dual-2	9963	1,318	535	1,018	49	3
torsion-dual-3	70227	10,783	2336	3,974	79	3

Almost linear scaling!

(time in sec)

(time in sec)

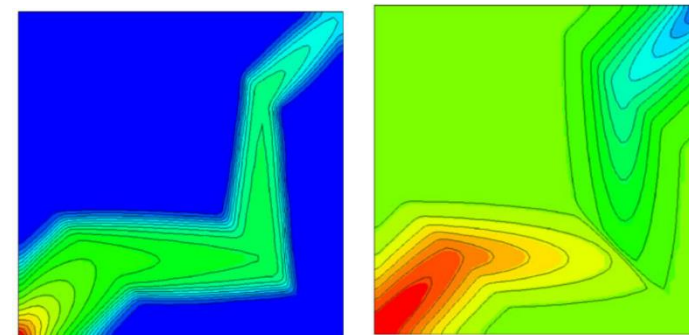


Block AMG on Oil & Gas Systems

twophase: oil recovery with water

threephase: black oil recovery

gas, water: gas or water are injected



Problem	Size	Block GS, T	Block GS, Nit	Block AMG, T	AMG, Nit	Block Size
twophase-1	512	0,229	64	0,232	11	2
twophase-2	2048	0,329	148	0,249	14	2
twophase-3	8192	0,749	295	1,445	22	2
threephase-gas-1	768	0,179	7	0,184	4	3
threephase-gas-2	3072	0,285	16	0,265	9	3
threephase-gas-3	12288	0,328	22	0,945	25	3
threephase-water-1	768	0,423	7	0,18	4	3
threephase-water-2	3072	0,223	15	0,22	6	3
threephase-water-3	12288	0,372	21	0,889	23	3

(time in sec)

(time in sec)

Almost linear scaling! Black oil systems **break down** on **phase switch**: mixing gas saturation and bubble point pressure in interpolation.