

Raport stiintific privind implementarea proiectului

Modele cinetice pentru fenomene de transport la scara micro si formarea structurilor in fluide complexe: implementarea pe sisteme de calcul paralel GPU

Cod proiect: PN-II-ID-PCE-2011-3-0516

Durata proiect: 05.10.2011 – 04.10.2016

2011 - 2012:

A fost elaborat si testat un program de calcul paralel pentru curgera unui fluid monofazic intre doua placi plan-paralele. Impulsurile particulelor componente ale fluidului au fost proiectate pe cele 3 axe carteziane, iar pe fiecare axa au fost folosite formulele de cuadratura Gauss-Hermite, respectiv Gauss-Laguerre. Pentru rezolvarea ecuatiilor de evolutie rezultate in urma discretizarii spatiului fazelor a fost folosita o schema numerica cu limitator de flux. Programul a fost testat si rulat pe sistemul de calcul paralel IBM Blue Gene / P de la Universitatea de Vest din Timisoara. Au fost studiate profilele vitezei si temperaturii fluidului intre cele doua placi, precum si efectul numarului lui Knudsen asupra vitezei de alunecare si a saltului de temperatura la peretii canalului de curgere. Rezultatele obtinute au fost comparate atat cu cele obtinute prin metoda DSMC (Direct simulation Monte Carlo), existente in literatura, cat si cu rezultatele obtinute cu ajutorul unui alt model Lattice Boltzmann (SLB) in care sunt utilizate coordonate sferice. Aceste rezultate au fost prezentate oral la doua conferinte internationale din domeniu: 21st International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, (DSFD-2012) July 23-27, Bangalore (India) si CECAM Work-shop on Fluid-Structure Interaction in Soft-Matter Systems: From the Mesoscale to the Macro-scale, November 27-30, Prato (Italy), constituind totodata si obiectul lucrarii "*Gauss quadratures – the keystone of Lattice Boltzmann models*" (autori: B.Piaud, S.Blanco, R.Fournier, A.E.Ambrus, V.Sofonea), publicata in volumul de Proceedings al conferintei DSFD-2012, aparut ca numar special al revistei International Journal of Modern Physics C, vol. 25 (2014), No. 1, 1340016.

Dupa experimente preliminare, realizate in 2011 cu o placa grafica (GPU) Quadro 4000 avand 256 nuclee de procesare (cores), montata pe un sistem de calcul MacPro, in anul 2012 a fost achizitionat un sistem de calcul multi-cores dotat cu 4 (patru) placi grafice GPU nVIDIA Fermi M2090. Fiecare placa a acestui sistem poseda 512 nuclee de procesare (cores) si o memorie interna de 6 GB. Pe acest sistem a fost elaborat o prima versiune a unui program lattice Boltzmann pentru modelarea sistemelor lichid-vapori, program care utilizeaza biblioteca CUDA. Strategia utilizata la elaborarea acestui program, precum si cateva tehnici de optimizare implementate in anul urmator (2013) in cadrul programului, au constituit subiectul dizertatiei de masterat "*Fluid dynamics simulation with Lattice Boltzmann models using CUDA enabled GPGPUs*", elaborata de dl. ing. Adrian Horga, membru al echipei de cercetare implicate in acest proiect. Dizertatia a fost sustinuta in iunie 2013 la Departamentul de Calculatoare si Inginerie Software al Universitatii Politehnica din Timisoara.

2013:

Programul Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Hermite, dezvoltat in anii 2011-2012 in cazul sistemelor lichid-vapori, care a fost initial optimizat pentru sistemul de calcul IBM Blue Gene /P in 2 versiuni (2D si 3D), a fost completat prin includerea functionalelor Minkowski si utilizat la studiul evolutiei morfologiei fazelor in cursul procesului de separare lichid-vapori. Rezultatele au constituit subiectul dizertatiei de masterat "*Lattice Boltzmann models for multiphase systems*", elaborata de dl. fiz. Tonino Biciusca, membru al echipei de cercetare implicate in proiect. Dizertatia a fost sustinuta in iulie 2013 la Departamentul de Fizica al Universitatii de Vest din Timisoara. Aceste rezultate au constituit si obiectul a doua postere, primul fiind prezentat la Conferinta de Fizica TIM-12 (Timisoara, 27-30 noiembrie 2012), iar cel de-al doilea, intitulat "*Lattice Boltzmann simulation of phase separation in liquid – vapour systems*" (autori: T.Biciusca si V.Sofonea) a fost prezentat la 10th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES), July 22-26, 2013, University of Oxford (United Kingdom).

Pentru a reduce erorile cauzate de implementarea conditiilor pe frontiera domeniului de curgere, care implica calculul momentelor functiei de distributie a lui Boltzmann prin integrare pe jumatate din spatiul impulsurilor, modelul Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Laguerre a fost aprofundat, iar rezultatele obtinute cu cele doua versiuni ale acestuia (versiuni bazate pe dezvoltarea in serie a functiei de echilibru, si respectiv pe proiectarea directa a acestei functii pe baza ortogonala generata de polinoamele Laguerre) au fost prezentate la 22nd International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD-2013), July 15-19, 2013, Yerevan (Armenia), si respectiv la Conferinta de Fizica TIM-13, organizata in 21-14 Noiembrie 2013 la Timisoara. Descrierea detaliata a fiecarei versiuni a modelului Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Laguerre, precum si rezultatele obtinute pe calculator constituie obiectul a doua lucrari elaborate in cursul anului 2013 si finalizate in etapa urmatoare (2014) a proiectului: "*Implementation of diffuse reflection boundary conditions using lattice Boltzmann models based on Gauss-Laguerre quadratures*" (autori: V.E.Ambrus si V.Sofonea) care a aparut in Physical Review E (2014) si respective "*Lattice Boltzmann models based on Gauss quadratures*" (autori: V.E.Ambrus si V.Sofonea), care a aparut tot in anul 2014, intr-un numar al revistei International Journal of Modern Physics C.

2014:

In aceasta perioada a fost continuata investigarea dinamicii si morfologiei tranzitiilor de faza in fluide, utilizand modele lattice Boltzmann implementate pe sisteme de calcul paralel. Au fost utilizate in principal sistemele GPU dotate cu placi grafice nVIDIA Tesla Fermi M2090, din dotarea Centrului de Cercetari Tehnice Fundamentale si Avansate al Academiei Romane – Filiala Timi-soara, dar si sistemul de calcul IBM Blue Gene / P existent la Universitatea de Vest din Timisoara.

Au fost puse la punct doua versiuni ale unui model Lattice Boltzmann (LB), in care termenul de forta dintre particulele fluidului (termen care genereaza separarea fazelor) a fost exprimat cu ajutorul derivatelor polinoamelor Hermite. Pentru minimizarea erorilor de calcul, modelul LB folosit a fost un model Gauss-Hermite de ordinul 3. O caracteristica a acestui model este ca setul de viteze, obtinut prin aplicarea cuadraturii Gauss-Hermite, contine vectori care au componente exprimate prin numere irrationale. Din acest motiv, atat in versiunea bi-dimensionala (2D) a acestui model LB, cat si in cea tri-dimensionala (3D), a fost implementata schema numerica "corner transport upwind" pentru calculul operatorilor de derivare care intervin in ecuatie de evolutie, ceea ce constituie un element de noutate al modelului.

Noile scheme numerice astfel elaborate au permis obtinerea cu o acuratete deosebita a diagramei de faza lichid-vapori, cat si a valorii functionalelor Minkowski. Rezultatele obtinute au fost prezentate la doua conferinte internationale organizate in anul 2014 si constituie obiectul unei lucrari care a aparut in revista *Comptes Rendus de Mecanique*. O alta lucrare elaborata in cursul acestui an, in care se discuta aspecte legate de morfologia dezvoltarii tesuturilor de celule considerate aici ca un fluid bifazic, precum si influenta vascozitatii asupra evolutiei acestor structuri, a fost publicata in anul 2016 in revista *Computers in Biology and Medicine*.

Dat fiind specificul acestui proiect, care urmareste modelarea sistemelor fluide la scara micro, in care implementarea conditiilor pe frontiera domeniului de curgere cu modelele LB actuale poate prezenta erori semnificative atunci cand valoarea numarului lui Knudsen nu mai este neglijabila, si in anul acesta s-a urmarit dezvoltarea de noi modele Lattice Boltzmann. Pornind de la experienta acumulata in cursul anului 2013, cand a fost elaborat un model bazat pe polinoamele Laguerre, in anul 2014 a fost aplicat un model LB, bazat pe polinoamele Hermite definite pe semiaxele sistemului cartezian de coordonate din spatiul vitezelor (impulsurilor). Spre deosebire de modelele Lattice Boltzmann bazate pe polinoamele Hermite obisnuite (care formeaza un set ortogonal in raport cu integrarea pe intreg domeniul axelor carteziene), aceste polinoame Hermite definite pe semiaxe, cunoscute sub denumirea de *half-range Hermite polynomials* au permis obtinerea valorilor corecte, atat pentru fluxul incident de particule la perete, cat si pentru cel emergent, la diferite valori ale numarului lui Knudsen (incluzand aici si regimul balistic).

Rezultatele obtinute cu modelele LB bazate pe polinoame ortogonale definite pe semiaxele carteziene au fost prezentate in cursul anului 2014 la doua conferinte internationale, precum si in doua lucrari stiintifice, dintre care una a aparut in cursul aceluasi an. Ele au constituit o baza pentru investigarea in anii urmasori a unor efecte specifice din microfluidica.

2015:

Prima activitate prevazuta in cadrul acestui an a urmarit *Studiul efectelor de rarefactie in micro-canale*. Curgerea fluidelor rarefiate prin micro-canale este caracterizata prin efecte de rarefactie care se manifesta la valori mari ale numarului lui Knudsen. Studiul efectuat a urmarit curgerea acestor fluide in prezenta a doi pereti plan-paraleli sub actiunea unei forte constante, paralela cu peretii. In acest scop, a fost elaborat si optimizat un program de calcul 3D in care au fost implementate 3 modele Lattice Boltzmann, bazate pe cuadraturi Gauss si polinoame ortogonale (Hermite, Laguerre si respectiv half-range Hermite). Avand in vedere volumul mare de calcul, programul a fost conceput pentru a rula pe sistemele de calcul cu placi grafice Nvidia M-2090 si K-40 (workstations) de inalta performanta, aflate in dotarea executantului. S-a elaborat totodata si o versiune 2D optimizata pentru reducerea efortului de calcul. Simularile efectuate au pus in evidenta variatia densitatii (fenomenul de rarefactie) in sectiunea transversala a canalului de curgere, fenomen insotit si de un minim local (dip) al profilului temperaturii, minim care apare in zona centrala a canalului. Totodata, a fost pusa in evidenta si dependenta fluxului de masa prin canal in functie de valoarea numarului lui Knudsen, dependenta care prezinta un punct de minim, obtinandu-se o buna concordanta cu rezultatele existente in literatura, obtinute de alti cercetatori, care au abordat aceeași problema fie analitic, fie prin simulare cu metoda DSMC (Direct Simulation Monte Carlo).

Rezultatele obtinute prin simularea curgerii fluidelor rarefiate au fost incluse intr-o prezentare orala la conferinta *Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD)*, organizata in perioada 13 – 17 iulie 2015 in Edinburgh (Marea Britanic), precum si intr-o lucrare care a aparut anul urmator in *Journal of Computational Science*. In aceasta lucrare s-a facut si un studiu comparativ si sistematic

al eficienței celor 3 modele Lattice Boltzmann implementate în cadrul programului de calcul. În urma acestui studiu, s-a constatat că modelul bazat pe polinoamele Hermite half-range este cel mai eficient (erorile rezultatelor au fost mai mici la cuadraturi de același ordin) la valori mari ale numărului lui Knudsen.

Cea de-a doua activitate desfășurată în cursul anului 2015 a constat în implementarea condițiilor pe frontieră într-un domeniu închis de curgere. Implementarea s-a făcut în cadrul într-un program CUDA pentru sisteme de calcul dotate cu plăci grafice, folosind o schemă numerică cu limitator de flux și a fost utilizată în anul următor pentru studiul efectelor termice în microcanale.

2016:

Au fost investigate efectele termice în micro-canale atât în cazul gazelor rarefiate (pe un model 3D), cât și în cazul sistemelor lichid-vapori (pe un model 2D).

Folosind modelele construite cu ajutorul polinoamelor Hermite pe semiaxe, a fost studiată curgera Couette între plăci plan paralele care se deplasează cu forfecare. În acest studiu, s-a urmărit recuperarea rezultatelor obținute folosind metoda Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) pentru curgeri în regim înalt de rarefacție. Pentru a putea compara rezultatele astfel obținute cu cele obținute prin metoda DSMC, raportate în literatura, s-a folosit modelul Shakhov în trei dimensiuni spațiale, care permite controlul numărului lui Prandtl, definit ca fiind raportul dintre conductivitatea termică și vâscozitate. Este remarcabil că, deși modelul Shakhov are doar doi parametri liberi (și anume timpul de relaxare, cu ajutorul căruia se definește numărul lui Knudsen, precum și numărul lui Prandtl), se pot obține rezultate comparabile cu cele din metoda DSMC, chiar și pentru regim înalt de rarefacție ($Kn = 1.0$). De asemenea, rezultatele simulărilor noastre pentru profilul vitezei au fost validate folosind rezultatele analitice obținute pentru viteza de alunecare la perete. Aceste rezultate au fost trimise spre publicare la *Computers and Fluids*.

Spre deosebire de majoritatea modelelor existente în literatura, în care se utilizează două funcții de distribuție, modelul termic pentru sisteme lichid-vapori, dezvoltat în cadrul proiectului, se bazează doar pe o singură funcție de distribuție, ceea ce permite reducerea efortului de calcul. Pentru obținerea corectă a tuturor ecuațiilor de conservare, inclusiv cea a energiei, a fost necesară dezvoltarea funcției de distribuție în raport cu polinoamele Hermite până la ordinul patru inclusiv, precum și utilizarea unei cuadraturi Gauss-Hermite de ordinul cinci. Condițiile utilizate pe frontieră au fost de tip reflexive difuza, întrucât acestea permit și realizarea transferului de energie (căldură) între fluid și peretii canalului de curgere. Pentru a obține rezultate cât mai precise, au fost adoptată o schemă numerică cu limitator de flux pentru calculul termenului convective din ecuația de evoluție, precum și o schemă de ordinul trei, cu 25 de puncte, pentru calculul operatorilor diferențiali care apar în termenul de forță. A fost calculată diagrama de fază și s-a putut pune în evidență condensarea lichidului pe peretii canalului de curgere, iar rezultatele au fost prezentate oral la conferința International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES), ediția 2016, fiind ulterior trimise spre publicare în cadrul volumului de Proceedings al acestei conferințe.

Lista lucrarilor publicate (ISI)

1. Piaud, S. Blanco, R. Fournier, V.E. Ambrus, V.Sofonea
Gauss quadratures – the keystone of Lattice Boltzmann models
International Journal of Modern Physics C **25** (2014) 1340016
DOI: 10.1142/S0129183113400160
2. V.E. Ambrus, V.Sofonea
Implementation of diffuse reflection boundary conditions using lattice Boltzmann models
Physical Review E **89** (2014) 041301(R)
DOI: 10.1103/PhysRevE.89.041301 (Rapid Communication)
3. V.E. Ambrus, V.Sofonea
Lattice Boltzmann models based on Gauss quadratures
International Journal of Modern Physics C **25** (2014) 1441011
DOI: 10.1142/S0129183114410113
4. T.Biciusca, A.Horga, V.Sofonea
Simulation of liquid-vapour phase separation on GPUs using Lattice Boltzmann models with off-lattice velocity sets
Comptes Rendus de Mecanique **343** (2015) 580
DOI: 10.1016/j.crme.2015.07.011
5. A.Cristea, A.Neagu
Shape changes of bioprinted tissue constructs simulated by the Lattice Boltzmann method
Computers in Biology and Medicine **70** (2016) 80
DOI: 10.1016/j.combiomed.2015.12.020
6. V.E.Ambrus, V.Sofonea
Application of mixed quadrature lattice Boltzmann models for the simulation of Poiseuille flow at non-negligible values of the Knudsen number
Journal of Computational Science **17** (2016) – aparuta online
DOI: 10.1016/j.jocs.2016.03.016

Lista lucrarilor publicate (BDI)

1. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Application of Lattice Boltzmann models based on Laguerre quadratures to force-driven flows of rarefied gases
Interfacial Phenomena and Heat Transfer **2** (2014) 235
DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2015011655

Lista lucrarilor trimise spre publicare

1. T. Biciusca, V. Sofonea, G. Gonnella, A. Lamura
Simulation of liquid-vapour phase separation on GPUs using Lattice Boltzmann models with off-lattice velocity sets
trimisa spre publicare la *Physical Review E* (2015)
2. S. Busuioc, V.E. Ambrus, V.Sofonea
Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in T-junction geometries
acceptata pentru publicare la American Institute of Physics Proceedings Series (2016)

3. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Half-range lattice Boltzmann models for the simulation of Couette flow using the Shakhov collision term
trimisa spre publicare la Computers and Fluids (2016)
4. S. Busuioc, V.E. Ambrus, V. Sofonea
Lattice Boltzmann model for liquid-vapour thermal flows
trimisa spre publicare la Computers and Mathematics with Applications (2016)

Lista lucrarilor prezentate la conferinte internationale

1. B. Piaud, S. Blanco, R. Fournier, V.E. Ambrus, V. Sofonea
Gauss quadratures – the keystone of lattice Boltzmann models
21st International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD)
July 23 - 27, 2012, Bangalore (India)
2. V. Sofonea, V.E. Ambrus
Diffuse reflection boundary conditions and lattice Boltzmann models for microfluidics
CECAM Workshop Fluid - Structure Interactions in Soft – Matter Systems: From the Mesoscale to the Macroscale
November 26 – 30, 2012, Prato (Italy)
3. T. Biciusca, V. Sofonea
Lattice Boltzmann simulation of phase separation in liquid – vapour systems
Physics Conference TIM-12
November 27 – 30, 2012, Timisoara (Romania)
4. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Lattice Boltzmann models derived by Gauss quadratures and microfluidics applications
Seminar held June 17, 2013, LAPLACE Laboratory, Paul Sabatier University, Toulouse (France)
5. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Lattice Boltzmann models based on Gauss quadratures
22nd International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics
July 15 – 19, 2013, Yerevan (Armenia)
6. T. Biciusca, V. Sofonea
Lattice Boltzmann simulation of phase separation in liquid – vapour systems
10th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES)
July 22 – 26, 2013, University of Oxford (United Kingdom)
7. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Applications of the Laguerre Lattice Boltzmann models to Couette flow
Physics Conference TIM-13
November 21 – 24, 2013, Timisoara (Romania)
8. V.E. Ambrus, V. Sofonea
Application of Lattice Boltzmann models based on Laguerre quadratures in complex flows
5th International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale (HTFFM-V)
April 22 – 25, 2014, Marseille (France)
9. T. Biciusca, A. Horga, V. Sofonea

Simulation of liquid-vapour phase separation on GPUs using Lattice Boltzmann models with off-lattice velocity sets

23rd International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD)

July 28 – August 1, 2014, Paris (France)

10. V.E. Ambrus, V. Sofonea

Lattice Boltzmann models based on half-space quadratures and the corner transport upwind method

23rd International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD)

July 28 – August 1, 2014, Paris (France)

11. T. Biciusca, A. Horga, V. Sofonea

Lattice Boltzmann approach to multiphase fluids using massively parallel computing systems

Physics Conference TIM-14

November 20 – 22, 2014, Timisoara (Romania)

12. A. Cristea, A. Neagu

Bioprinted tissue constructs simulated by the lattice Boltzmann method

Physics Conference TIM-14

November 20- 22, 2014, Timisoara (Romania)

13. A.Cristea, A. Neagu

Lattice Boltzmann method for modeling bioprinted tissues

MECO40 Conference on the Middle European Cooperation in Statistical Physics

March 23 - 25, 2015, Esztergom (Hungary)

14. V.E. Ambrus, V. Sofonea

Application of the lattice Boltzmann method for flows through microchannels

24rd International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD)

July 13 - 17, 2015, Edinburgh (United Kingdom)

15. T. Biciusca, A. Cristea, A. Lamura, G. Gonnella, V. Sofonea

Lattice Boltzmann approach to liquid – vapour separation

COST Flowing Matter 2016 Conference

January 11 - 15, 2016, Porto (Portugal)

16. A. Cristea, A. Neagu

Lattice Boltzmann simulations of artificial morphogenesis in tissue engineering systems

MECO41 Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics

February 14 - 17, 2016, Vienna (Austria)

17. S. Busuioc, V.E. Ambrus, V. Sofonea

Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in T-junction geometries

Physics Conference TIM-15-16

May 26 - 28, 2016, Timisoara (Romania)

18. V.E. Ambrus

Lattice Boltzmann models based on Gauss quadratures

Lattice Boltzmann Workshop, Department of Physics, University of Rome “Tor Vergata”

June 9 - 10, 2016, Rome (Italy)

19. V.E. Ambrus, V. Sofonea

Lattice Boltzmann models for rarefied gases

13th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES)

July 18 - 22, 2016, Hamburg (Germany)

20. S. Busuioc, V.E. Ambrus, V. Sofonea

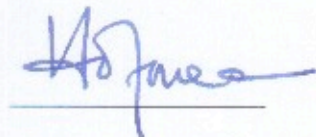
Lattice Boltzmann model for liquid-vapour thermal flows

13th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science
(ICMMES)

July 18 - 22, 2016, Hamburg (Germany)

Director proiect,

Dr. fiz. Victor Sofonea



A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'V. Sofonea', is written over a horizontal line.