



ДАДАХОДЖАЕВ Рустам Бахтиёрович

Отчет по производственной практике

**Разработка и интеграция алгоритма взаимодействия водяных
капель в нефти**

Уровень образования: *Магистратура*

Направление 09.04.04 «Программная инженерия»

Научный руководитель:

доцент, Кафедра радиофизики, старший научный сотрудник,

Васильков Сергей Андреевич

Оглавление

Введение	3
Цель	5
Задачи исследования	5
Глава 1 Физическая модель	6
1.1. Метод дискретных элементов	6
Глава 2 Алгоритм Burners-Hurt	8
Глава 3 Экспериментальное исследование производительности.....	10
3.1. Калибровка параметра theta (θ)	11
3.2. Оптимизация размера листа (leaf_size).....	15
3.3. Масштабируемость N	18
Выводы	20
Список литературы	21

ВВЕДЕНИЕ

Эффективное разделение водонефтяных эмульсий является критически важной задачей нефтедобывающей и нефтеперерабатывающей промышленности [1]. Электрокоалесценция – процесс слияния водяных капель под действием внешнего электрического поля – представляет собой один из наиболее перспективных сепараций эмульсий.

Современные исследования показывают, что коллективные эффекты играют решающую роль в кинетике коалесценции [2]. Численное моделирование с учётом многочастичных взаимодействий позволяет предсказывать пространственное распределение капель [3], вероятности столкновений и эффективность сепарации в зависимости от параметров процесса [4].

Однако прямое численное моделирование коллективной динамики миллионов капель с учётом диполь-дипольных взаимодействий сталкивается с фундаментальной вычислительной проблемой: классический метод расчёта всех парных взаимодействий имеет квадратичную сложность $O(N^2)$ [5], что делает его практически неприменимым для реалистичных систем и исключает возможность долговременного моделирования эволюции эмульсии.

Разработка эффективных алгоритмов со сложностью $O(N * \log(N))$ и их адаптация к специфике диполь-дипольных сил открывает возможность для масштабируемого моделирования промышленно значимых систем, содержащих $10^5 - 10^6$ капель, и получения статистически достоверных данных о механизмах коалесценции. При сближении капель в вязкой среде возникают сложные гидродинамические эффекты: деформация поверхности, дренирование масляной плёнки, возможность отскока [6]. Большинство моделей используют упрощённые критерии слияния, пренебрегая этими явлениями. Приближённые методы (Barnes-Hut [7], Fast Multipole Method [8]) требуют тщательной калибровки параметров аппроксимации для сохранения физической адекватности результатов при максимальном ускорении вычислений. Большинство существующих моделей фокусируются на траекториях отдельных капель, игнорируя коллективные эффекты

и статистику столкновений, критически важные для понимания макроскопического поведения эмульсий.

Алгоритм Barnes-Hut, для ускорения расчёта дальнодействующих сил, был впервые предложен для задач астрофизики и успешно применяется в молекулярной динамике. Метод быстрых мультиполей (FMM) с теоретической сложностью $O(N)$ был разработан Greengard & Rokhlin (1987). Однако адаптация этих методов к специфике диполь-дипольных взаимодействий в электрокоалесценции остаётся недостаточно исследованной.

Физика электрокоалесценции активно изучалась в работах [2] [3] [9], где были установлены основные закономерности образования цепочечных структур и слияния капель. Теоретические основы гидродинамики капель в вязкой среде были заложены в работах [10], [11]. Электростатика диэлектрических частиц в поле подробно рассмотрена в классических работах [12].

На текущий момент отсутствуют реализации алгоритмов для моделирования электрокоалесценции, сочетающие высокую производительность, контролируемую точность для моделирования промышленно значимых систем.

Объектом исследования является система водяных капель в масляной среде, находящаяся под воздействием внешнего постоянного электрического поля.

Предметом исследования являются вычислительные методы для масштабируемого моделирования систем из $10^5\text{--}10^6$ капель с целью изучения коллективной динамики.

Цель

Целью данной работы является разработка и верификация высокопроизводительной вычислительной модели для исследования коллективной динамики и статистики коалесценции водяных капель в нефтяной эмульсии, находящейся под воздействием внешнего электрического поля.

Задачи исследования

1)Разработка и оптимизация вычислительного ядра.

Провести оптимизацию алгоритма расчета парных взаимодействий для преодоления вычислительной сложности $O(N^2)$. Внедрить быстрые алгоритмы, с использованием иерархического дерева со сложностью $O(N \log N)$ для моделирования систем, содержащих более миллионов капель. Выполнить верификацию приближенного алгоритма, сравнив его результаты с данными точного расчета.

2)Внедрение и анализ статистического аппарата.

Распределение расстояний и углов до ближайших соседей. Распределение амплитуд и направлений сил, действующих на капли. Частоты и вероятности бинарных столкновений и коалесценции.

Обеспечить высокую производительность сбора статистики для обработки больших объемов данных.

3)Расширение модели и исследование влияния физических факторов.

Расширить модель, введя механизмы отскока и распыления капель при столкновениях. Интегрировать в модель динамику электрического заряда капель (включая его релаксацию) и проанализировать его влияние на процессы коалесценции.

Ожидаемым научным результатом является создание масштабируемой и физически адекватной модели, позволяющей получить статистически значимые данные о поведении эмульсии в электрическом поле.

Глава 1 ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

1.1. Метод дискретных элементов

В работе используется метод дискретных элементов (Discrete Element Method, DEM), который подразумевает численное решение системы уравнений движения отдельных капель с учётом их парных взаимодействий.

Эволюция системы описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i(r_1, r_2, \dots, r_n, R_1, R_2, \dots, R_n), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

где: $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – положение капли, R_i – радиус капли, v_i – скорость.

В модели пренебрегается инерцией капель. Считается, что они движутся сквозь внешнюю среду с установившейся скоростью, которая определяется из закона Стокса, учитывающего вязкость как воды, так и масла.

$$v_{i,\text{дрейф.}}(r_i, R_i) = \frac{\sum_{i,j} F_{i,j} (r_i - r_j)}{A_i}, \quad A_i(R, \eta) = 2\pi R_i \eta \frac{2\eta + 3\eta_w}{\eta + \eta_w}.$$

Здесь η – вязкость масла, η_w – вязкость воды, $A_i(R, \eta)$ — коэффициент сопротивления, учитывающий внутреннюю циркуляцию жидкости внутри капли (формула Адамара-Рыбчинского).

Под действием внешнего электрического поля $\bar{E} = E \bar{e}_z$ каждая водяная капля приобретает силу:

$$F_{ij,x}(x, y, z) = 12\pi\epsilon\epsilon_0 E^2 \frac{R_i^3 R_j^3}{r^4} x \frac{4z^2 - x^2 - y^2}{r^3},$$

$$F_{ij,y}(x, y, z) = 12\pi\epsilon\epsilon_0 E^2 \frac{R_i^3 R_j^3}{r^4} y \frac{4z^2 - x^2 - y^2}{r^3},$$

$$F_{ij,z}(x, y, z) = 12\pi\epsilon\epsilon_0 E^2 \frac{R_i^3 R_j^3}{r^4} z \frac{2z^2 - 3x^2 - 3y^2}{r^3}.$$

Капля, двигаясь через вязкую среду со скоростью $v_{i,\text{дрейф.}}$, создаёт в ней течение. Для расчёта скорости течения, создаваемого точечной силой F_{ij} , используется решение линеаризованного стационарного уравнения Навье-Стокса, известное как стокслет:

$$u_{i,j,k}(\mathbf{r}) = J_{kl}(\mathbf{r}) \cdot F_{j,l}(r_j - r_l),$$

где $J_{kl}(\mathbf{r})$:

$$J_{kl}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left(\frac{\delta_{kl}}{r} + \frac{r_k r_l}{r^3} \right).$$

Полная конвективная скорость в точке расположения капли от всех остальных капель:

$$v_{i,\text{конв.}}(r_i) = \sum_{i,j} u_{i,j}(r_i - r_j)$$

Гидродинамические взаимодействия учитывают, что движение одной капли создаёт течение среды, которое воздействует на соседние капли. Это приводит к дополнительным корреляциям в движении и влияет на кинетику столкновений.

Для каждой капли уравнение движения записывается как:

$$\frac{dr_i}{dt} = v_{i,\text{дрейф.}}(r_i) + v_{i,\text{конв.}}(r_i)$$

Ключевой задачей является вычисление правой части этих уравнений — скорости каждой капли, которая зависит от положения и размера всех остальных капель в системе. Именно эта взаимозависимость, требующая учёта парных взаимодействий, создаёт основную вычислительную сложность:

$$\sum_{i,j} F_{i,j}(r_i - r_j), \sum_{i,j} u_{i,j}(r_i - r_j) \approx O(N^2)$$

Глава 2 АЛГОРИТМ BURNERS-HURT

В основе алгоритма Burners-Hurt для ускорения расчёта дальнодействующих сил лежит иерархическая аппроксимация. Главная идея заключается в том, чтобы заменить трудоёмкий точный расчёт сил от множества далёких отдельных капель на расчёт с одной условной «супер-каплей». Эта супер-капля представляет собой компактную группу капель, и характеризуется её суммарной массой и положением центра масс. Для целевой капли, находящейся на достаточно большом расстоянии от такой группы, совокупное воздействие всех капель внутри группы приближается воздействием от одного этого эквивалентного источника.

$$R_{eff} = \sqrt[3]{\sum_{i=1}^N R_i^3}$$

$$F_{approx} = 12\pi\epsilon\epsilon_0 E^2 \frac{R_i^3 R_{eff}^3}{r_{iG}^4} \Delta x \frac{4\Delta z^2 - \Delta x^2 - \Delta y^2}{r_{iG}^3}, \text{аналогично для } y, z.$$

Где R_{eff} – эффективный радиус “супер-капли”, r_{iG} – расстояние от капли i до центра масс группы G .

Центр масс, взвешенный по \mathbf{R}^3 :

$$M = \frac{\sum_{j=1}^n R_j^3 r_j}{\sum_{j=1}^n R_j^3}, \text{где } r_j = (x_j, y_j, z_j)$$

Применимость этого приближения зависит от θ -критерия:

$$\frac{l_q}{r_{iq}} < \theta$$

Где l_q – линейный размер прямоугольной ячейки q , внутри которой частицы группируются в единую материальную точку, r_{iq} – расстояние от точки, для которой вычисляется диполь-дипольный момент электрического поля, до центра масс группируемой ячейки q , θ – параметр, задающий точность приближения.

Если условие $\frac{l_q}{r_{iq}} < \theta$ выполнено, это означает, что в рамках организации приближенного счета можно группировать частицы внутри прямоугольника q и вычислять взаимодействие только с центром масс системы сгруппированных частиц. Для реализации полностью адаптивного алгоритма необходимо предварительно провести иерархическое разбиение области, заполненной частицами, как показано на рис. 1, что осуществляется построением октодерева, где вся расчётная область последовательно делится на меньшие ячейки до тех пор, пока в каждой конечной ячейке не окажется не более одной частицы или не будет достигнут максимальный уровень глубины, после чего алгоритм, начиная с корневого узла, рекурсивно проверяет для каждой ячейки выполнение критерия $\frac{l_q}{r_{iq}} < \theta$ и, либо рассчитывает силу от всей группы через её суммарные характеристики (центр масс и эффективный радиус), либо спускается на более глубокий уровень разбиения для точного учёта взаимодействий, что позволяет сбалансировать точность и вычислительные затраты.

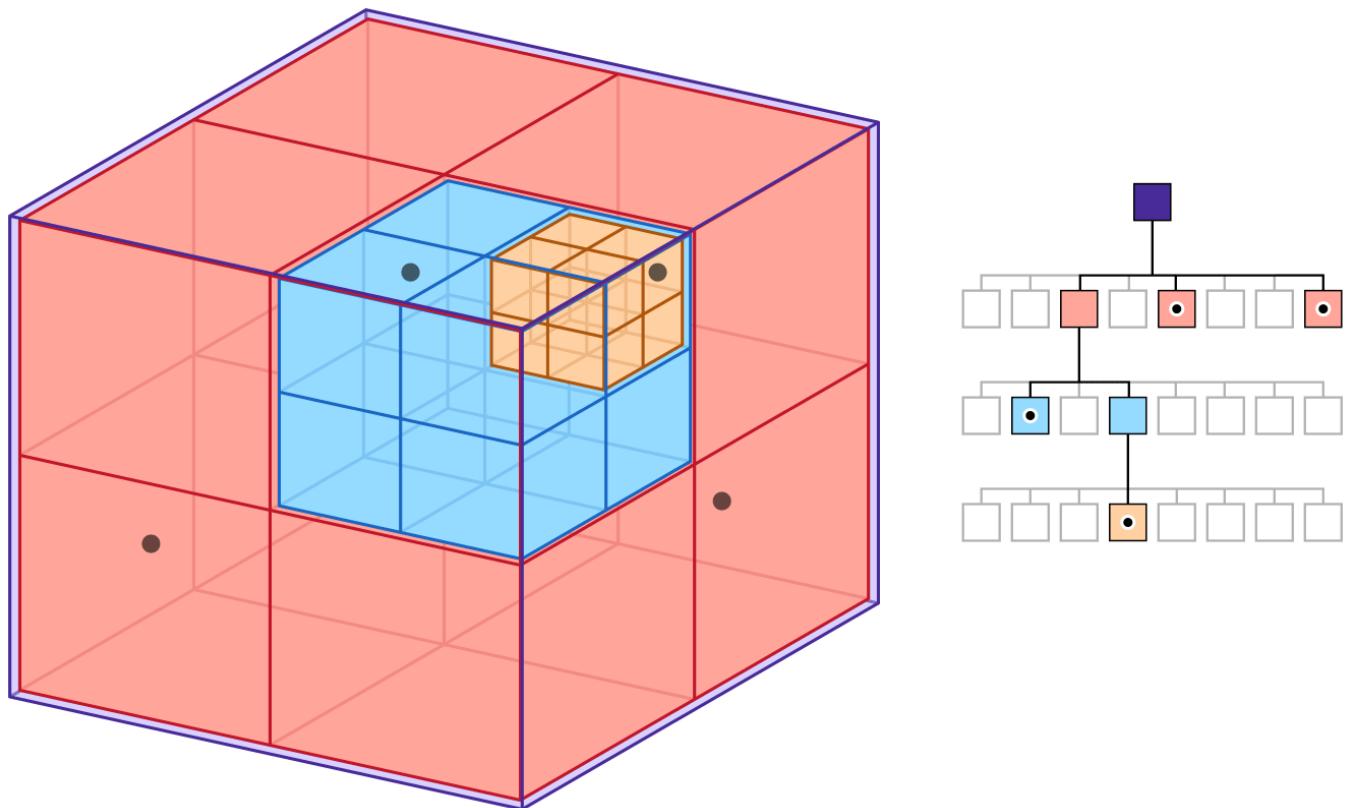


Рисунок №1 Изображение иерархической декомпозиции пространства

Глава 3 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

Тестирование проводилось на процессоре Intel Core i7-11800H 2.3 ГГц, причём для обеспечения полной воспроизводимости результатов использовалась детерминированная генерация систем капель по следующему алгоритму: фиксировалось начальное значение генератора случайных чисел, капли размещались в кубическом объёме с заданной объёмной долей $\varphi = 2\%$, их радиусы задавались равномерным распределением в диапазоне [2.5 мкм, 7.5 мкм], а для гарантии отсутствия пересечений между каплями выполнялись проверки корректного размещения.

Время выполнения измерялось исключительно для этапа расчёта диполь-дипольных сил, без учёта затрат на первичное построение октодерева, при этом для минимизации влияния статистических флуктуаций на результат, каждый замер производился $RUNS = 5$ раз с последующим усреднением полученных значений.

Метрики производительности:

Ускорение:

$$speedup = \frac{T_{naive}}{T_{octree}},$$

Где T_{naive} – время расчета честного суммирования сил $\sum_{i,j} F_{i,j} (r_i - r_j)$, T_{octree} – время алгоритма Barnes-Hut.

Точность:

Относительная ошибка по силе для одной капли i .

$$e_i = \frac{|F_i^{octree} - F_i^{naive}|}{|F_i^{naive}|} * 100\%,$$

Где F_i^{octree} — значение силы, полученное иерархическим методом, F_i^{naive} — точное решение, полученное методом прямого суммирования по всем каплям.

Максимальная относительная ошибка:

$$\max_{err} = \max_{i=1,\dots,N} e_i$$

Средняя относительная ошибка:

$$avg_{err} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i$$

3.1. Калибровка параметра theta (θ)

Зафиксируем количество капель и размер листа – максимальное количество капель в одной ячейке октодерева.

Условие теста	
Количество капель (N)	100000
Размер листа ($leaf_size$)	16

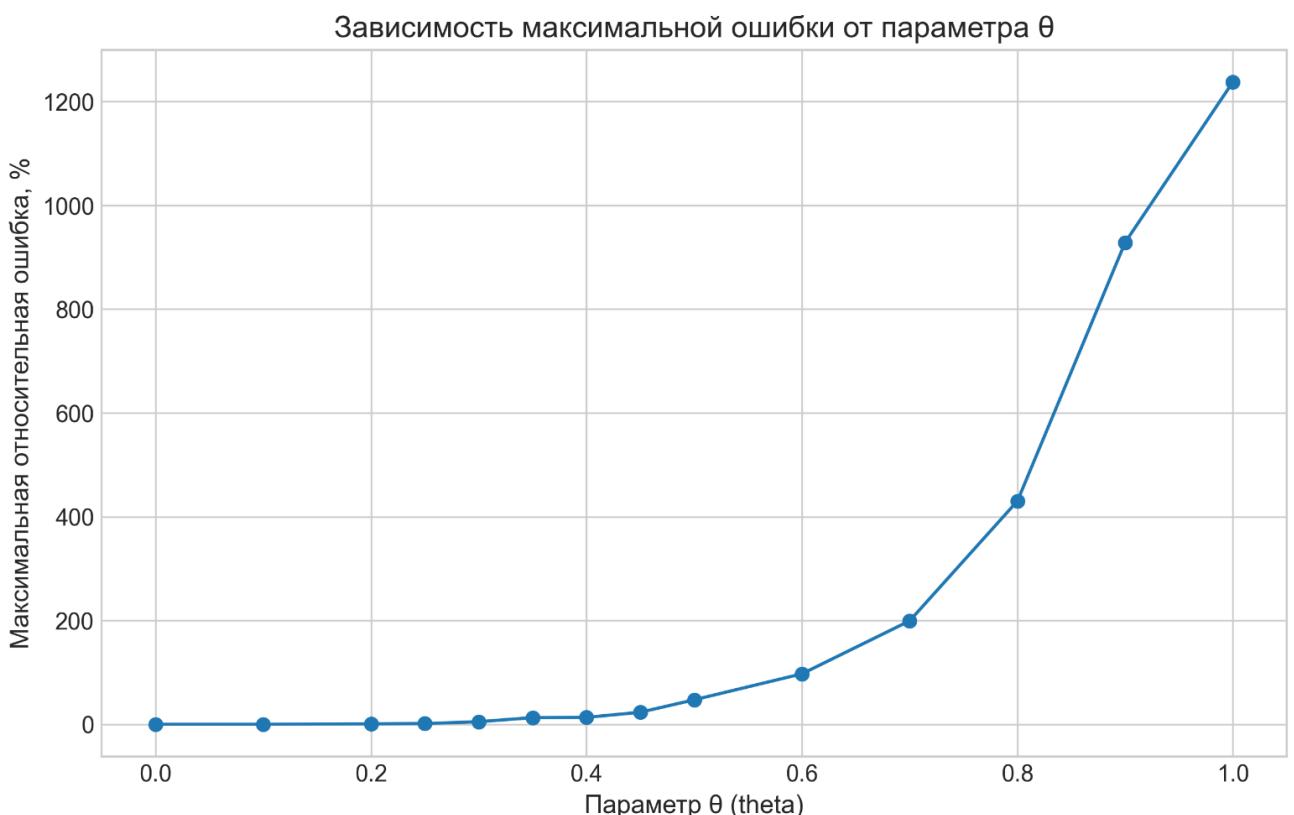


Рисунок №2 Зависимость максимальной ошибки от параметра θ [0, 1]



Рисунок №3 Зависимость максимальной ошибки от параметра θ [0, 0.35]

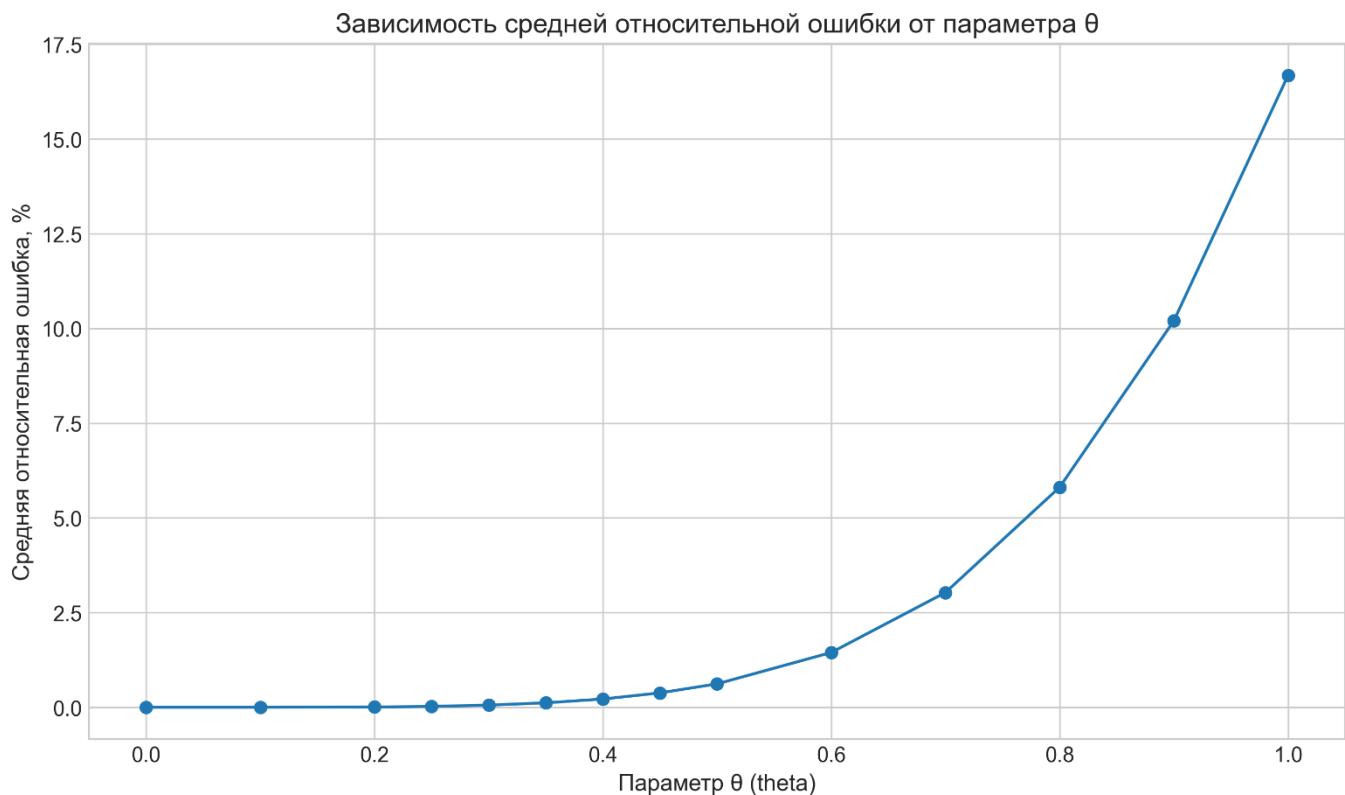


Рисунок №4 Зависимость средней ошибки от параметра θ [0, 1]

На представленных графиках (рис.2-4) показаны зависимости максимальной и средней относительных ошибок от параметра аппроксимации θ , из которых видно, что при малых значениях θ метод практически не вносит погрешности, тогда как с ростом θ наблюдается нелинейное увеличение ошибок: средняя ошибка растёт умеренно и отражает общее качество аппроксимации, в то время как максимальная ошибка увеличивается значительно быстрее, характеризуя наихудшие случаи и демонстрируя компромисс между точностью и выигрышем в производительности.

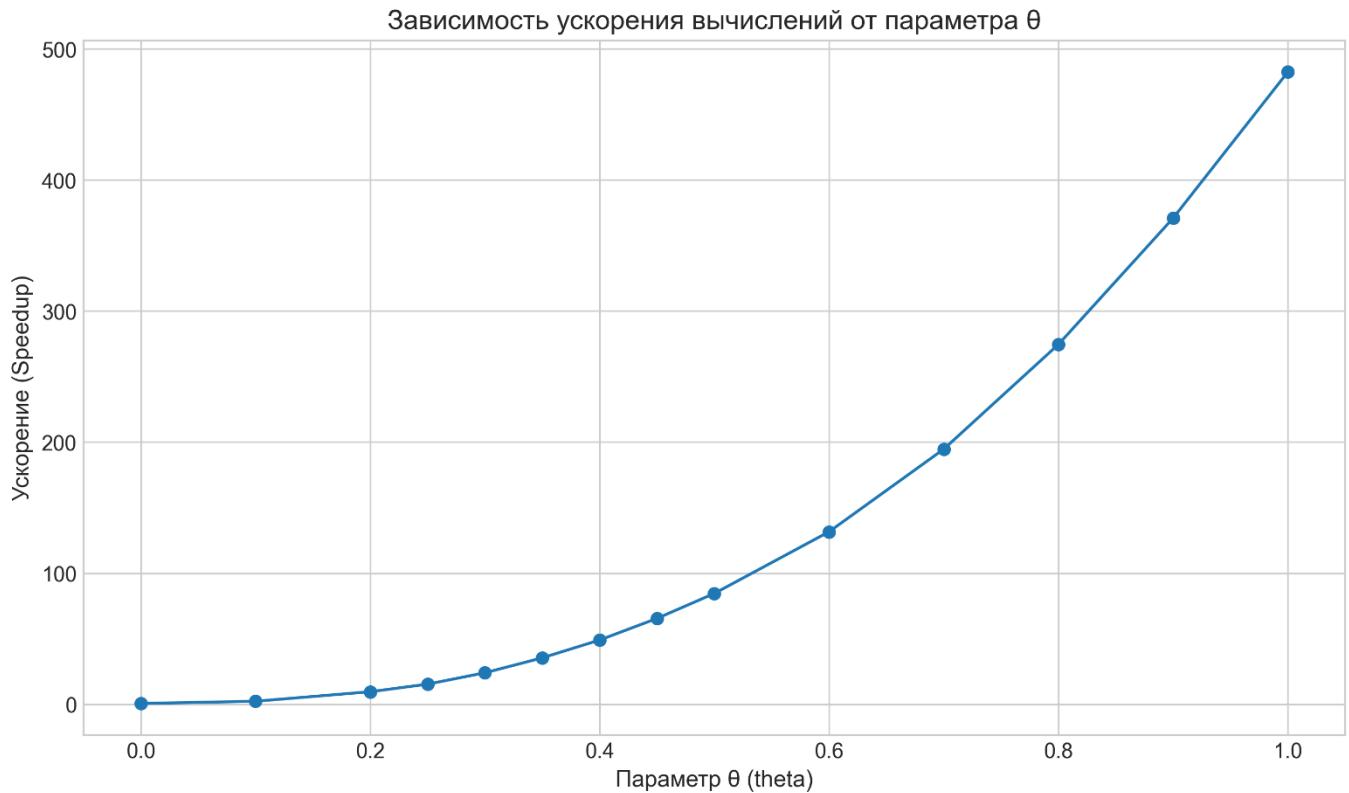


Рисунок №5 Зависимость ускорения вычислений от параметра θ [0, 1]

На графике (рис. 5) показана зависимость ускорения вычислений от параметра аппроксимации θ , из которой видно, что с увеличением θ ускорение возрастает нелинейно. Это обусловлено ростом доли аппроксимированных взаимодействий и отражает повышение производительности алгоритма ценой снижения точности.

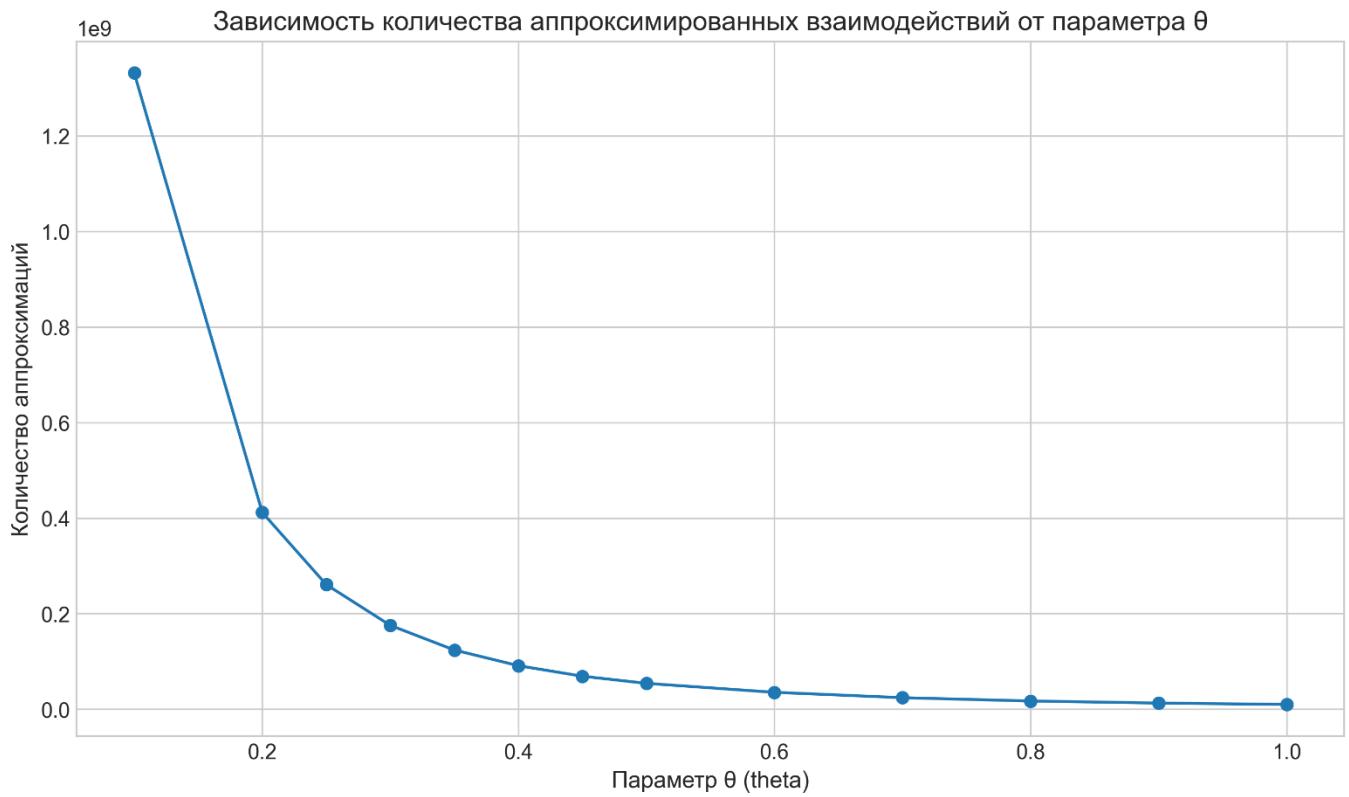


Рисунок №6 Зависимость количества аппроксимаций от параметра θ [0, 1]

На представленном графике (рис. 6) показана зависимость количества аппроксимированных взаимодействий от параметра аппроксимации θ , из которой видно, как при увеличении θ число аппроксимаций монотонно уменьшается, что указывает на более агрессивное укрупнение дальних взаимодействий в октодереве и напрямую объясняет наблюдаемый рост ускорения вычислений при одновременном снижении точности.

На основе совместного анализа графиков ускорения, средней и максимальной ошибок, а также количества аппроксимированных взаимодействий, можно сделать вывод, что в качестве оптимального значения параметра аппроксимации целесообразно выбрать $\theta = 0.25$, поскольку при данном значении достигается существенное ускорение вычислений (более чем в 15 раз) при сохранении высокой точности: максимальная относительная ошибка не превышает 2%, а средняя ошибка остаётся пренебрежимо малой, что делает такой выбор наиболее сбалансированным с точки зрения надёжности результатов и эффективности алгоритма.

3.2. Оптимизация размера листа (*leaf_size*)

Условие теста

Количество капель (<i>N</i>)	100000
--------------------------------	--------

Параметр θ	0.25
-------------------	------

Зависимость ускорения от размера листа

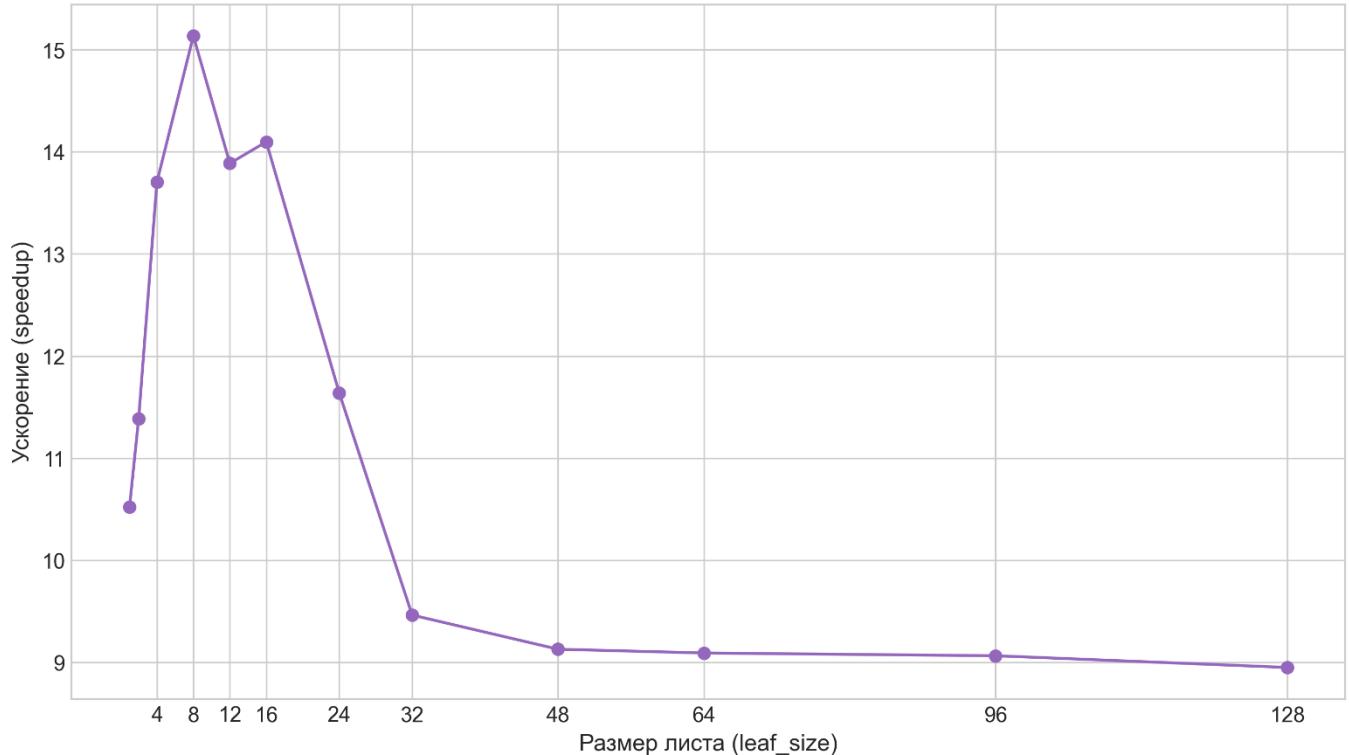
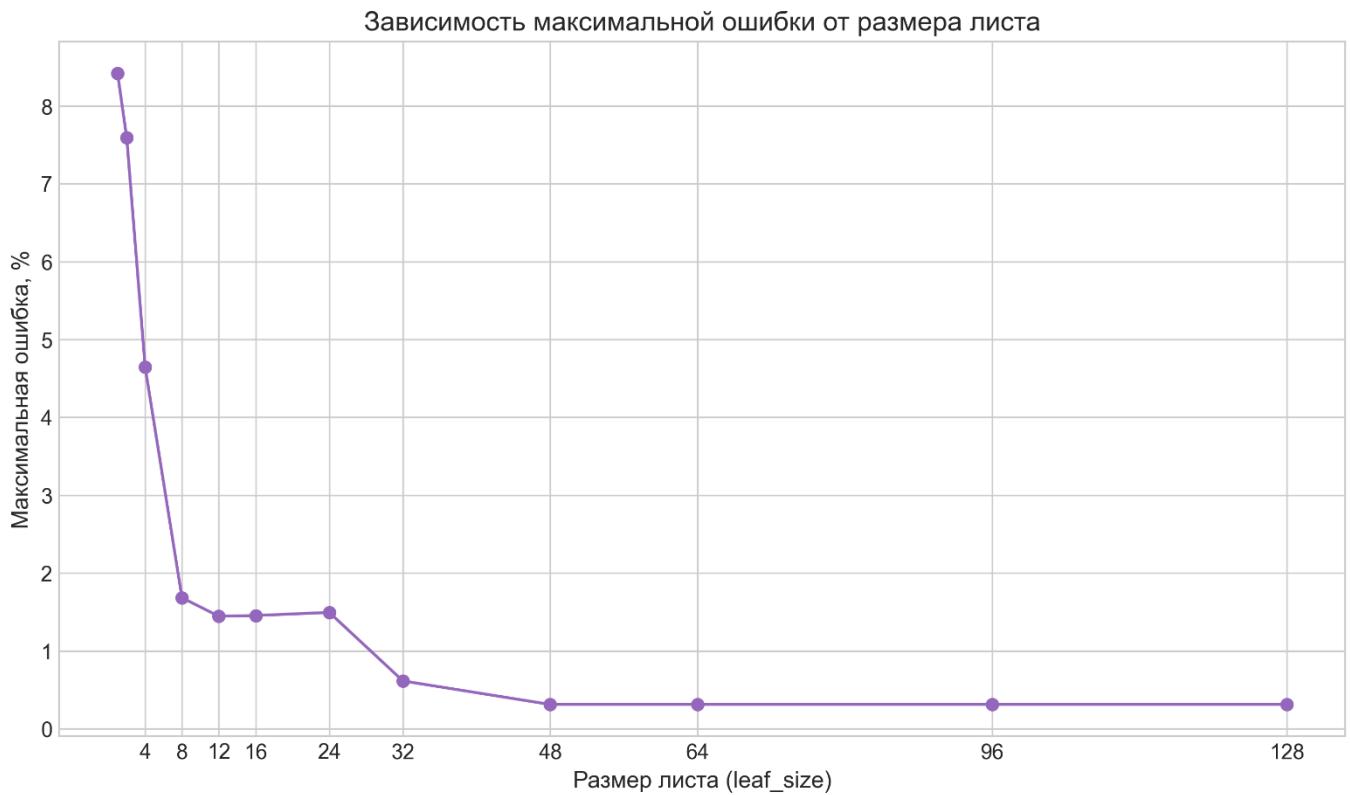
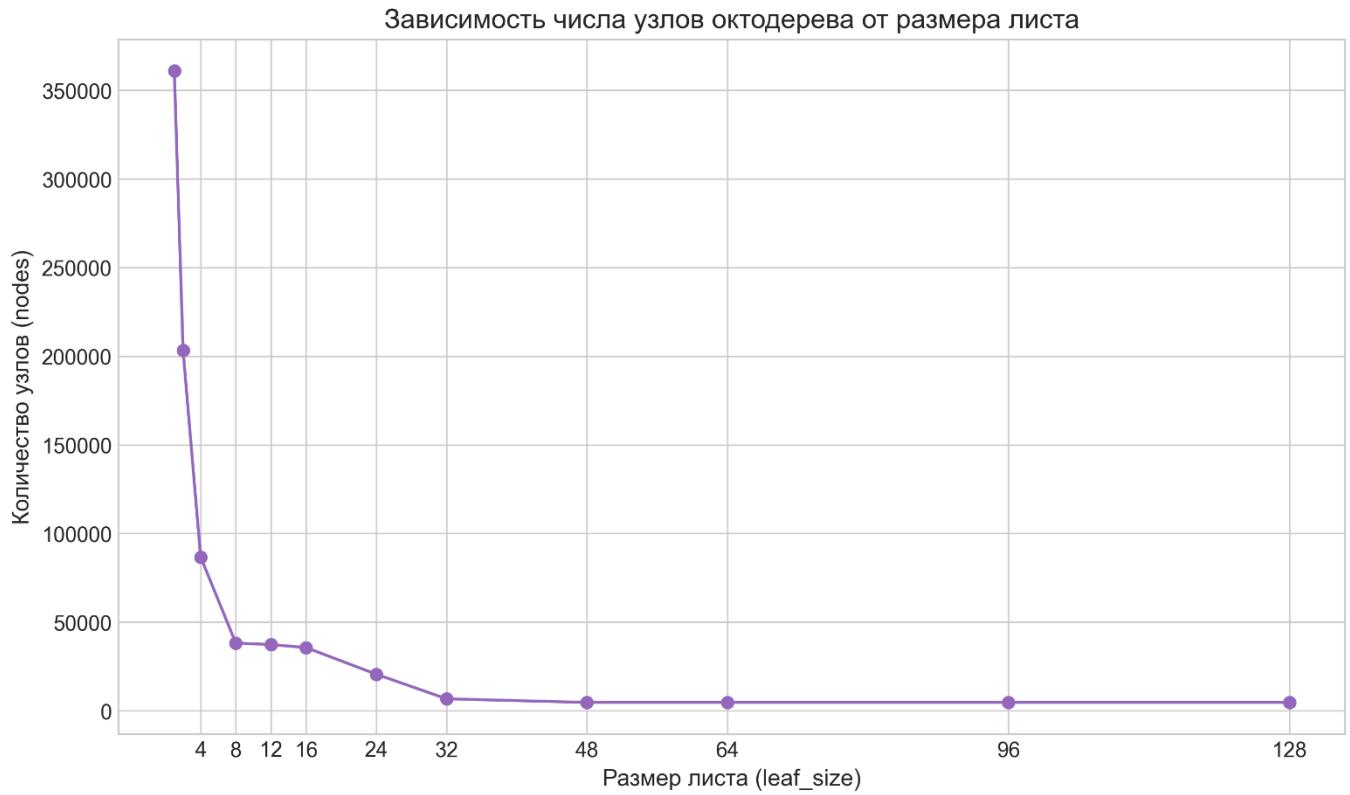


Рисунок №7 Зависимость ускорения от размера листа

На серии графиков (рис. 7-9) показана зависимость характеристик алгоритма от размера листа октодерева (*leaf_size*). Из анализа видно, что с ростом размера листа ускорение вычислений сначала увеличивается, достигая максимальных значений при $leaf_size \approx 8-16$, а затем постепенно снижается для больших листов. Максимальная и средняя ошибки при этом уменьшаются с ростом *leaf_size* до диапазона 8–16 и остаются на низком уровне, обеспечивая высокую точность (максимальная ошибка $\leq 1.5\%$, средняя $< 0.03\%$), в то время как количество узлов октодерева снижается почти экспоненциально, что отражает сокращение структуры дерева при укрупнении листьев. Таким образом, $leaf_size = 8 - 16$ обеспечивает оптимальный компромисс между производительностью и точностью, позволяя достичь значительного ускорения при минимальном снижении качества вычислений и контроле ошибок.



Рисунок№8 Зависимость максимальной ошибки от размера листа



Рисунок№9 Зависимость максимальной ошибки от размера листа

Ускорение определяется тем, насколько эффективно октодерево сокращает количество вычислений по сравнению с честным методом. При малых листах дерево содержит много узлов (рис. 10), большинство взаимодействий вычисляется точно,

аппроксимация применяется редко, поэтому ускорение невысокое. При средних листьях количество узлов уменьшается, аппроксимации применяются чаще для больших групп частиц, внутри листа капли считаются точно, а между листьями — через аппроксимацию, что даёт оптимальное ускорение без существенного роста ошибок; при больших листьях узлы очень крупные, число узлов резко сокращается, аппроксимации начинают терять точность, что уменьшает эффективность вычислений и снижает ускорение, потому что приходится обрабатывать больше частиц на каждом уровне дерева и точные вычисления внутри крупных листов становятся громоздкими.

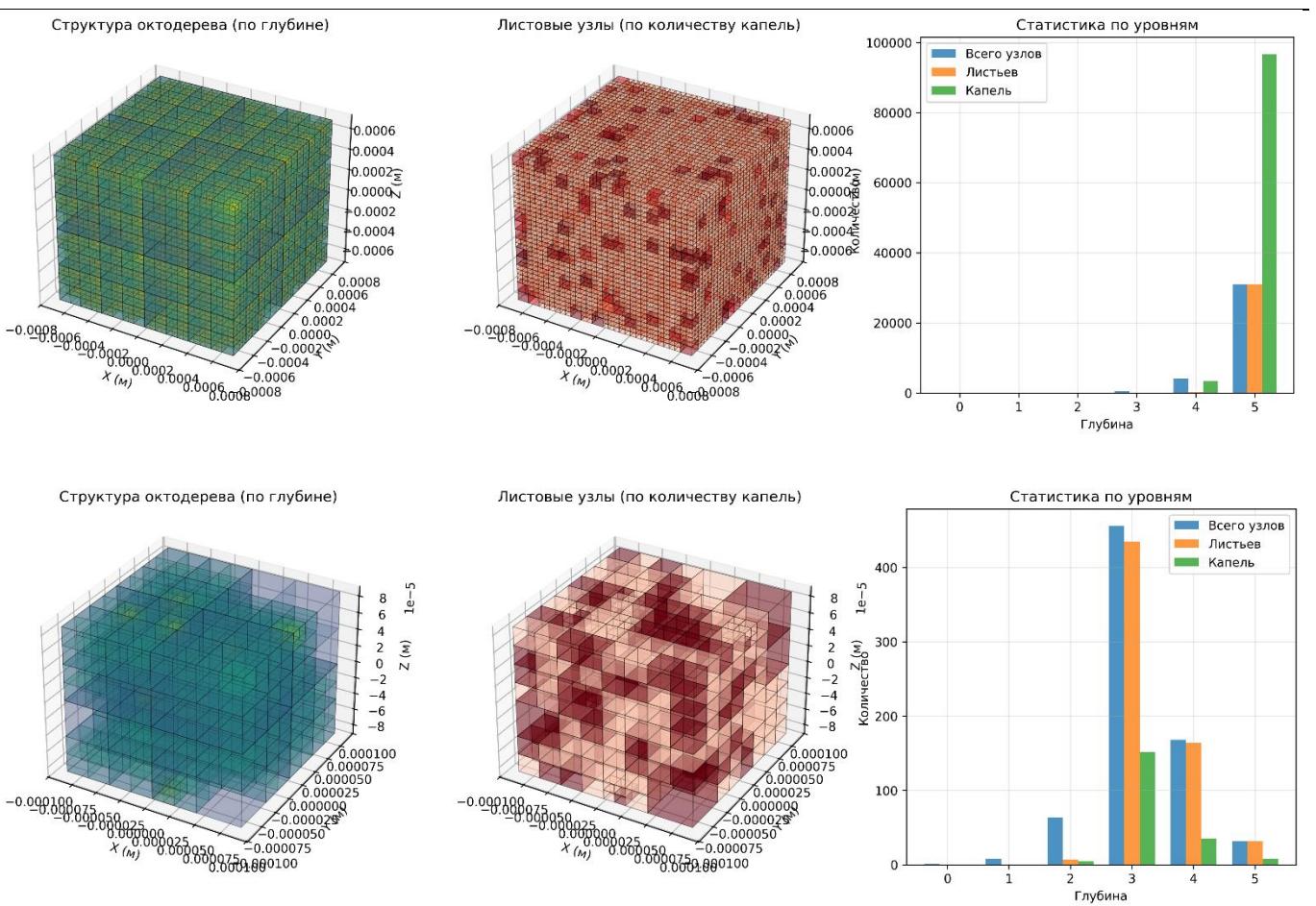


Рисунок №10 Сравнение структуры октодерева и статистики листовых узлов для

$$\text{leaf}_{\text{size}} = 1 \text{ и } \text{leaf}_{\text{size}} = 16$$

Справа (рис. 10) на каждом блоке изображены гистограммы статистики по уровням октодерева. В верхнем ряду глубина достигает 5 уровней, на самых глубоких уровнях сосредоточено большинство узлов, листьев и почти все капли, поскольку каждый лист содержит максимум одну каплю, что приводит к очень

глубокому дереву с огромным количеством узлов, необходимых для распределения всех капель по маленьким листам.

3.3. Масштабируемость N

Условие теста

Параметр θ	0.25
Размер листа (<i>leaf_size</i>)	16

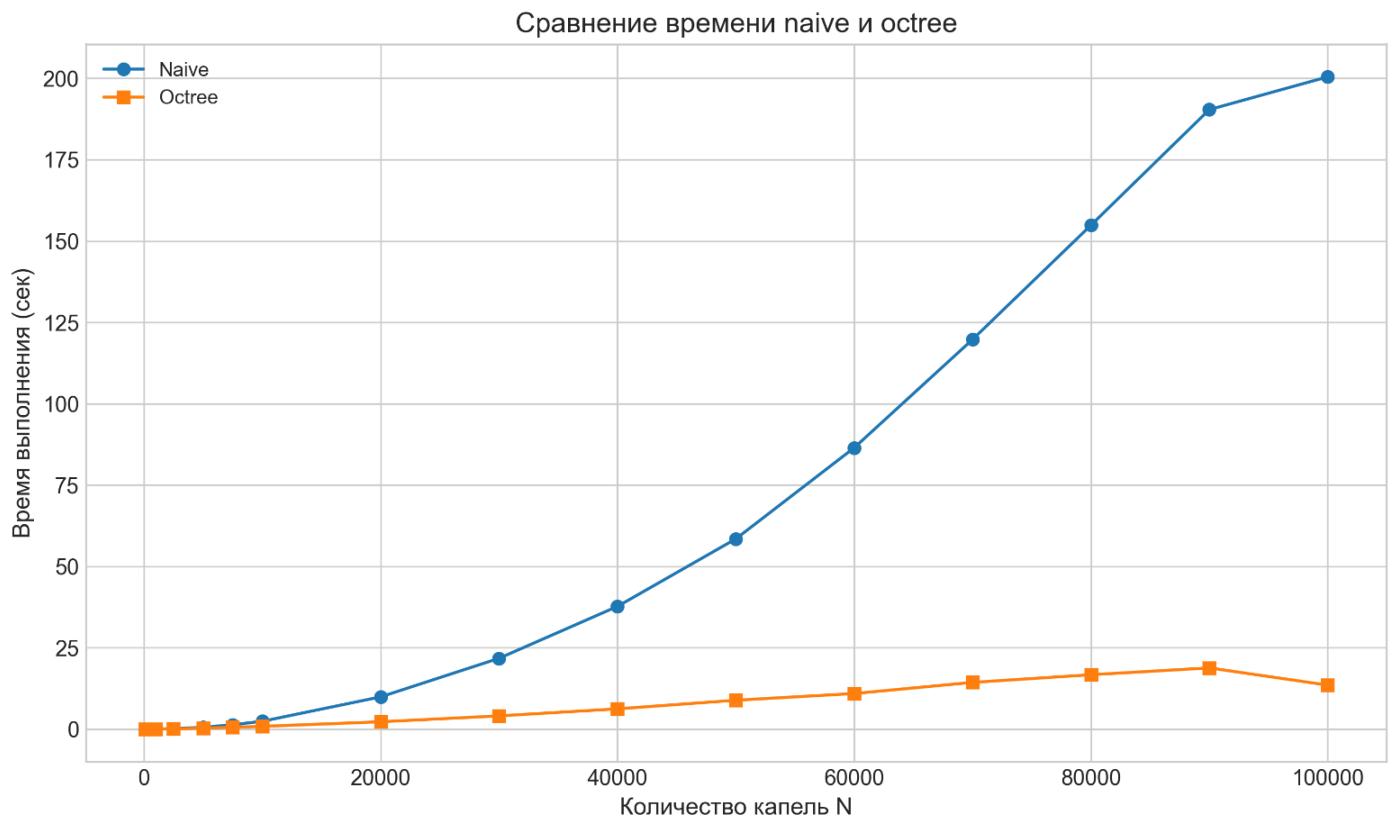


Рисунок №11 Сравнение времени расчета честного суммирования сил и метода построение иерархического дерева

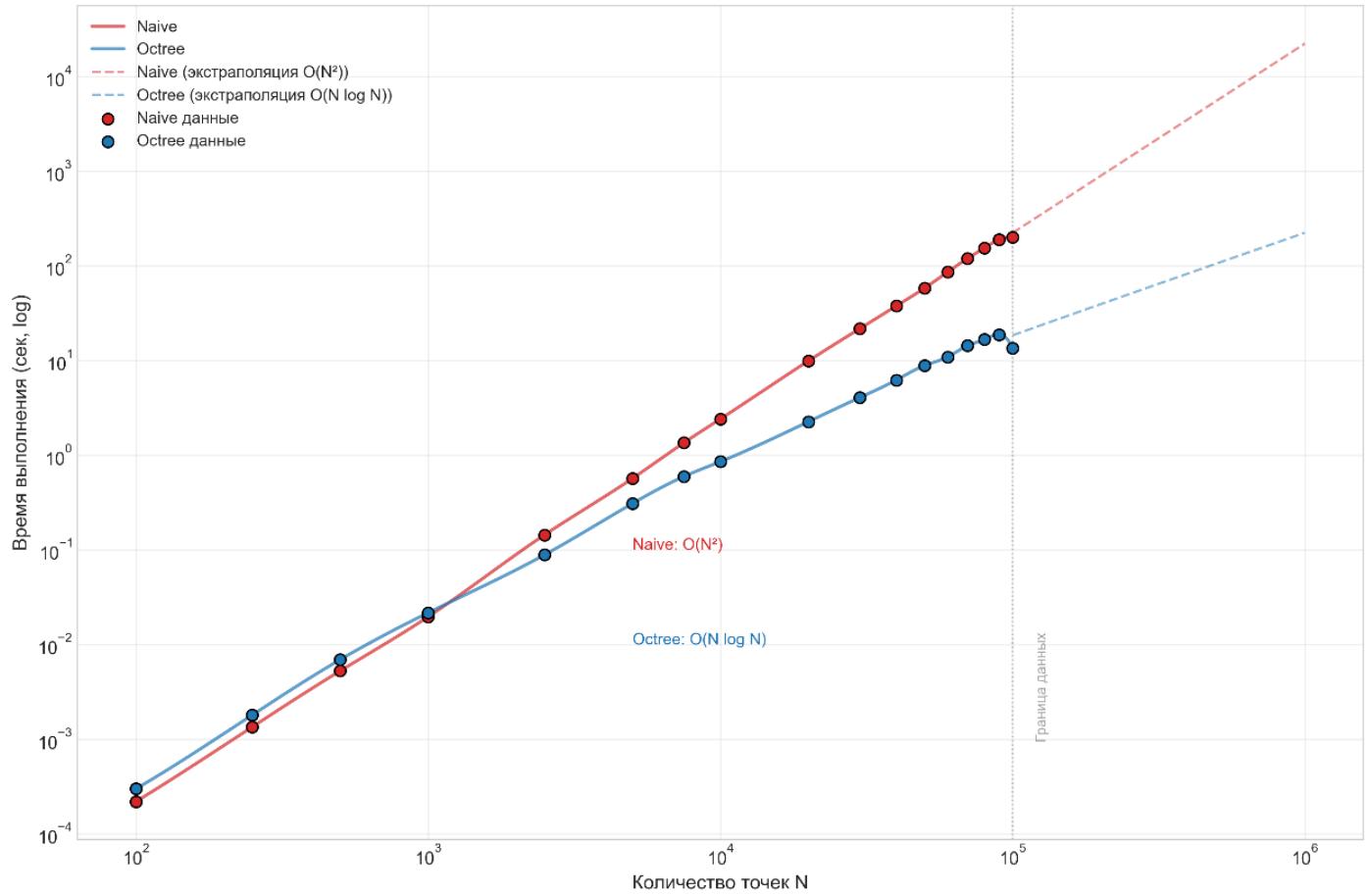


Рисунок №12 Сравнение времени в логарифмической шкале

На графиках (рис. 11-12) показано сравнение времени выполнения честного суммирования сил и метода октодерева в зависимости от числа частиц N . Для малых N оба метода дают схожие времена, но с ростом числа частиц Octree демонстрирует значительное ускорение, достигая $\sim 15x$ при $N = 100\,000$, при этом сохраняется контроль точности через параметр θ .

Таблица №1 “Экспериментальные данные”

Число капель N	Naive(сек)	Octree(сек)	Ускорение	MAX ошибки
100	0,0002	0,0003	0,73	0,11
250	0,0013	0,0018	0,75	0,08
500	0,005	0,006	0,76	0,07
1000	0,02	0,02	0,91	1,03
2500	0,14	0,09	1,63	0,26
5000	0,56	0,30	1,84	0,59
7500	1,35	0,6	2,27	0,98
10000	2,41	0,85	2,82	0,60
20000	9,92	2,26	4,39	0,92
30000	21,76	4,07	5,35	0,57

40000	37,72	6,23	6,05	1,00
50000	58,46	8,88	6,58	1,86
60000	86,46	10,94	7,90	1,05
70000	119,74	14,36	8,33	1,31
80000	154,85	16,71	9,26	1,70
90000	190,37	18,82	10,11	1,73
100000	200.24	13.11	15.27	1,45

Выводы

В ходе выполнения практики была разработана и реализована высокопроизводительная вычислительная модель для исследования коллективной динамики водяных капель в нефтяной эмульсии под воздействием внешнего электрического поля.

Реализован алгоритм Barnes-Hut с октодеревом для ускоренного расчёта диполь-дипольных взаимодействий. Достигнуто снижение вычислительной сложности с $O(N^2)$ до $O(N \log N)$.

Проведено экспериментальное исследование на системах от 100 до 100,000 капель:

- Оптимальный параметр аппроксимации: $\theta = 0.25$
- Оптимальный размер листа: $leaf_{size} = 8 - 16$
- Достигнутое ускорение: $15x$ при $N = 100,000$
- Максимальная ошибка: $\leq 2\%$

Экспериментально подтверждена теоретическая сложность $O(N \log N)$. Открыта возможность моделирования систем до 10^6 капель.

В дальнейшем планируется распараллелить алгоритм, внедрить модель конвективного движения, реализовать CI/CD-тестирование и дополнить физическую модель процесса.

Список литературы

1. Raya S. A. и др. A critical review of development and demulsification mechanisms of crude oil emulsion in the petroleum industry // J Petrol Explor Prod Technol. 2020. Т. 10, № 4. С. 1711–1728.
2. Chirkov V. A. и др. Numerical models of two-phase electrohydrodynamics for simulating key processes in electrostatic coalescers: a review (invited paper) // Journal of Electrostatics. 2025. Т. 137. С. 104085.
3. Chirkov V. и др. Physical correctness of numerical modeling electrohydrodynamic processes in two-phase immiscible liquids basing on the phase-field and arbitrary Lagrangian–Eulerian methods // International Journal of Multiphase Flow. 2024. Т. 177. С. 104881.
4. Huang X. и др. Deformation and coalescence of water droplets in viscous fluid under a direct current electric field // International Journal of Multiphase Flow. 2019. Т. 118. С. 1–9.
5. Vasilkov S. A., Kozlov A. S. Model Developing for Simulation of Multidroplet Dynamics in Water-in-Oil Emulsions under the Action of Electric Field // J. Phys.: Conf. Ser. 2025. Т. 3027, № 1. С. 012063.
6. Taylor G. I. Studies in electrohydrodynamics. I. The circulation produced in a drop by an electric field // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. 1966. Т. 291, № 1425. С. 159–166.
7. Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm // Nature. 1986. Т. 324, № 6096. С. 446–449.
8. Greengard L., Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations // Journal of Computational Physics. 1987. Т. 73, № 2. С. 325–348.
9. Eow J.S., Ghadiri M., Sharif A. Electrostatic and hydrodynamic separation of aqueous drops in a flowing viscous oil // Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. Vol. 41. 2002. С. 649–657.
10. Hadamard J. S. Mouvement permanent lent d'une sphère liquide et visqueuse dans un liquide visqueux // Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences. Vol. 152. 1911. С. 1735–1738.
11. Rybczynski W. Über die fortschreitende Bewegung einer flüssigen Kugel in einem zähen Medium. Bulletin de l'Académie des Sciences de Cracovie, Classe des Sciences Mathématiques et Naturelles. 1911. С. 40–46.
12. Jackson J. D. Classical electrodynamics. 3. ed., [Nachdr.]. Hoboken, NY: Wiley, 2009. 808 с.

Параметры системы

Дисперсная фаза (вода)

Диэлектрическая проницаемость	ϵ	80 Ф/м
Динамическая вязкость	η_w	0.001 Па*с
Плотность	ρ_w	1000 кг/м ³
Диапазон радиусов	R_i	2.5-7.5 мкм

Непрерывная фаза (масло/нефть)

Диэлектрическая проницаемость	ϵ	2.85 Ф/м
Динамическая вязкость	η	0.065 Па*с
Плотность	ρ	910 кг/м ³

Напряженность	E	3*10 ⁵ В/м
---------------	---	-----------------------