

На правах рукописи

Тарасов Никита Игоревич

**Разработка численных алгоритмов и параллельных программ для
моделирования некоторых задач промышленной экологии**

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

Научный руководитель: **Поляков Сергей Владимирович**,
д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник отдела
№16 «Проблемы математического
моделирования и высокопроизводительных
вычислений» ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: **Кобельков Георгий Михайлович**,
д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой
вычислительной математики механико-
математического факультета МГУ, ведущий
научный сотрудник в ИВМ РАН

Губайдуллин Ирек Марсович,
д.ф.-м.н., профессор, заведующий
лабораторией математической химии
Института нефтехимии и катализа УФИЦ
РАН, ведущий научный сотрудник, профессор
кафедры технологии нефти и газа УГНТУ

Ведущая организация: **ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный
университет» (Институт математики,
информационных технологий и физики)**

Защита диссертации состоится «___» _____ 20__ г. в ___ ч. на заседании
диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН, расположенного по адресу: 125047, г. Москва,
Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН

https://keldysh.ru/council/3/D00202403/tarasov_ni_diss.pdf

Автореферат разослан «___» _____ 20__ г.

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.237.01

кандидат физико-математических наук

 Корнилина М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Экология сегодня занимает одну из ведущих ролей в промышленности и включает широкий круг вопросов, требующих разрешения при организации деятельности предприятий. Предметом промышленной экологии является воздействие промышленности на окружающую среду, в том числе последствия данного воздействия на качество жизни человека и общества в целом, и наоборот – воздействие внешней среды на технологические или сельскохозяйственные предприятия. Одним из вопросов, рассматриваемых в рамках обсуждаемой области, являются задачи очистки воды и воздуха, зачастую решаемые посредством фильтрации загрязненных сред с использованием различных физико-химических эффектов.

Диссертация посвящена развитию многомасштабного численного подхода к моделированию этапа «тонкой» фильтрации, следующего за прохождением механических и/или химических фильтров. На данном этапе очистки водная среда подвергается электромагнитному или термическому воздействию, а воздушная среда проходит через гранулированные активные вещества. Этап тонкой фильтрации актуален не только для выполнения норм экологической безопасности по стокам и выбросам промышленных установок и объектов. Он является зачастую необходимой частью самого производства. Например, в атомной энергетике необходимо получение теплового агента с предсказуемыми физико-химическими параметрами. В авиационной и автомобильной промышленности требуется специальная очистка воды, а также жидких и газообразных топлив, для увеличения срока службы и соблюдения стандартов качества при производстве. В фармакологии требуется особо чистая вода для производства лекарств. Отдельная потребность в тонкой очистке связана с разработкой средств индивидуальной защиты.

Актуальность темы исследования обусловлена необходимостью наличия инструмента моделирования процессов, проходящих в прецизионных (обеспечивающих высокую степень очистки от мелкодисперсных примесей, в том числе микро- и наноразмерных) фильтрационных установках, как с целью разработки новых высокоэффективных конструкций, так и для обслуживания уже существующих очистных систем. Во втором случае создание цифровых двойников действующих очистных установок позволит прогнозировать их состояние и выработать оптимальный график технического обслуживания, в том числе периодичность очистки или замены фильтров.

С математической точки зрения комплексное компьютерное моделирование процессов очистки находится в процессе становления. В частности, остается актуальной проблема расчета гидро- и газодинамических процессов в пористых и сыпучих средах реальной трехмерной геометрии. Также является актуальным учет в макроскопических моделях физико-химических процессов, происходящих на микроуровне. Проблема в целом решается применением различных многомасштабных подходов, однако их

единичные реализации и разнородность математических описаний не позволяют пока говорить о надежности получаемых численных результатов. Отчасти это объясняется обилием постановок фундаментальных и прикладных задач, инициируемых научными группами и промышленностью, а также большим объемом предварительных исследований необходимых для принятия тех или иных вычислительных моделей и компьютерных технологий.

Степень научной разработанности, поставленной в рамках настоящей диссертации задачи, с одной стороны заключается в хорошей обоснованности применяемых математических моделей и численных алгоритмов, обсуждаемых далее. С другой стороны, в рассматриваемой предметной области отсутствуют аналогичные программные пакеты комплексного многомасштабного моделирования процессов фильтрации. Зачастую применяются методы схематичного описания установок, не учитывающие геометрических особенностей фильтрационных компонент, в совокупности с упрощенными математическими моделями, во многом основанными на эмпирических и эвристических данных^{1,2}.

Целью данной работы является разработка математических основ, программного вычислительного ядра и цифровой платформы для компьютерного и суперкомпьютерного моделирования процессов прецизионной фильтрации водной и воздушной сред от загрязняющих нейтральных и заряженных мелкодисперсных примесей.

Задачами исследования являются:

- анализ существующих промышленных методов и систем очистки водной и воздушной сред от загрязняющих примесей, выбор актуальных проблем в классе технологий, обеспечивающих прецизионное качество, формулировка модельных задач экологии;
- обзор методов математического моделирования фильтрационных процессов для выбранных постановок задач, разработка комплексного многомасштабного подхода, формулировка конкретных математических моделей на основе уравнений механики сплошной среды и дополнение их материальными уравнениями среды, сформированными на основе методов частиц и молекулярной динамики;
- разработка численных методов и параллельных алгоритмов решения выбранных двух- и трехмерных модельных задач в рамках макроскопических описаний с акцентом на использование неструктурированных гибридных сеток, а также численных процедур

¹ Понкратова, С. А. Математическое моделирование и управление качеством очистки сточных вод / С. А. Понкратова, В. М. Емельянов, А. С. Сироткин, М. В. Шулаев // Вестник Казанского технологического университета. – 2010. – № 6. – С. 76-85.

² Пономарев, В. Я. Математическое моделирование процесса аэробной очистки сточных вод предприятий пищевой промышленности / В. Я. Пономарев, Э. Ш. Юнусов, Г. О. Ежкова // Вестник Казанского технологического университета. – 2011. – №17. – С. 139 – 145.

- уточнения материальных уравнений среды и параметров уравнений методами частиц;
- программная реализация численных методов решения базовых уравнений механики сплошной среды в двухмерной и трехмерной постановке, разработка вычислительных кодов для решения выбранных модельных задач;
- разработка архитектуры и программная реализация цифровой платформы, обеспечивающей полный цикл компьютерного моделирования;
- проведение серии вычислительных экспериментов с целью верификации и валидации разработанных моделей, численных методов, алгоритмов и программ.

Научной новизной диссертационной работы являются разработанные комплексные математические модели, предназначенные для моделирования процессов тонкой очистки водной и воздушной сред, их численные алгоритмы и программная реализация, а также цифровая платформа для проведения вычислительных экспериментов на вычислительных кластерах и суперкомпьютерах.

Теоретическая значимость работы состоит в создании комплексных математических макроскопических моделей экологической направленности, параметры которых можно уточнить в рамках использования многомасштабного подхода, объединяющего классические модели и методы механики сплошных сред и динамики частиц.

Практическая ценность исследования заключается в разработанном прототипе цифровой платформы и комплексе параллельных программ для суперкомпьютерного моделирования процессов очистки водной и воздушной сред от загрязняющих их примесей методами макроскопического уровня или в рамках многомасштабных вычислений.

Методология и методы исследования. В части математического моделирования разработанная методология заключается в использовании квазигидро- и квазигазодинамического систем уравнений для описания многокомпонентных двухфазных течений жидкости и газа (в качестве второй фазы включающих твердые мелкодисперсные микро- и наночастицы) в областях сложной геометрии близкой к реальной. При этом твердая фаза описывается на макроскопическом уровне в терминах концентраций примесей и использует системы уравнений конвекции-диффузии-реакции, дополненные электростатическими, тепловыми и реакционными членами.

В качестве основы комплексного численного алгоритма применяется метод конечного объема по пространственным переменным. При этом контрольные объемы совпадают с используемыми сеточными элементами. Для дискретизации по времени используются явные схемы. Многомасштабность заключается в моделировании процессов на макроскопическом уровне на основе соответствующих систем уравнений,

параметры которых (кинетические коэффициенты уравнений, потоки на границах, коэффициенты сорбции и теплопередачи) и константы материальных уравнений (в том числе уравнений состояния), либо определены на основе методов частиц и молекулярной динамики заранее, либо рассчитываются непосредственно в рамках многомасштабного подхода на этапе так называемых подсеточных вычислений. Наиболее важным элементом предлагаемого многомасштабного подхода является расчет процессов сорбции и теплообмена на твердых поверхностях элементов систем очистки (стенок резервуаров и каналов, внешней и внутренней поверхностей гранул сорбентов).

При программной реализации разработанных комплексных моделей сформировано необходимое вычислительное ядро, которое представляет собой набор классов и методов, основанных на объектно-ориентированном и шаблонном подходах. Цифровая платформа для проведения вычислительных экспериментов реализуется посредством применения веб-технологий в виде клиент-серверного решения, использующего в качестве клиентской части браузер на компьютере пользователя, а в качестве сервера – среду из одного или нескольких веб-серверов, размещенных в сети Интернет.

Достоверность и обоснованность диссертации обусловлена использованием классических подходов, таких как метод расщепления по физическим процессам, для формирования комплексных моделей процессов фильтрации. При этом элементы, их составляющие, представляют собой корректные постановки начально-краевых задач, основанные на хорошо известных, обоснованных и неоднократно проверенных математических подходах, в том числе классических моделях сплошной среды и моделях динамики частиц. Немаловажным также является применение консервативного сеточного метода конечного объема при конструировании итогового вычислительного алгоритма.

Апробация результатов работы была проведена посредством личного представления автором результатов на ряде научных конференций:

- Международная конференция "Mathematical Modeling and Computational Physics, 2019" (MMCP2019) (Татры, Словакия, 1-5 июля 2019),
- IV Всероссийская научная конференция "Теплофизика и физическая гидродинамика" (Ялта, Россия, 15-22 сентября 2019 г.),
- 7th European Seminar on Computing (ESCO 2020) (Пльзень, Чехия, 8-12 июня 2020 г., удаленно),
- XIII международная конференция «Сеточные методы для краевых задач и приложения» (Казань, Россия, 20-28 октября 2020 г., удаленно),
- Fourth Virtual Workshop on Numerical Modeling in MHD and Plasma Physics: Methods, Tools, and Outcomes (Новосибирск, 12- 14 октября 2021 г., удаленно).

В рамках данной работы было **опубликовано** 13 статей в том числе 10 из списка ВАК, 9 индексируются в базах Web of Science и Scopus.

Личный вклад автора состоит в формировании набора комплексных математических моделей для исследования процессов тонкой фильтрации, разработке общего численного алгоритма, основанного на классическом методе конечного объема, программной реализации вычислительного ядра и цифровой платформы.

Объем и структура диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Диссертация содержит 139 страниц и 71 рисунок.

Содержание работы

Во введении рассматриваются общие направления промышленной экологии из которых выделяется вопрос тонкой очистки водной и воздушной сред. Процесс прецизионной фильтрации, осуществляемый после механической, химической или биологической очистки, производят в таких технологически емких и критических областях промышленности, как ядерная энергетика и медицина, требующих использования сред с предсказуемыми физико-химическими свойствами. В качестве моделируемых в рамках диссертационной работы способов фильтрации установлены такие актуальные методы как фильтрация воды электромагнитным способом, воздуха с помощью гранулированных сорбентов. Также рассматривается вопрос образования накипи на нагревательных элементах при прохождении через резервуар жесткой воды. В качестве целей работы указаны: формирование комплексных многомасштабных моделей для анализа предложенного класса прикладных задач промышленной экологии; разработка вычислительного алгоритма и параллельного программного ядра; разработка цифровой платформы для поддержки полного цикла вычислительного эксперимента.

В первой главе производится выбор базовых математических моделей многомасштабного подхода, описывающих в комплексе процесс тонкой фильтрации, полученный на основе метода расщепления по физическим процессам. Устанавливается список задач для верификации и валидации разработанного подхода, а также актуальных задач промышленной экологии.

При прохождении среды через фильтр происходит множество физических, электро- и термохимических эффектов, обеспечивающих ее очистку. При попадании загрязненного вещества в исследуемый элемент конструкции она проходит через активную область фильтра (подверженную электромагнитному, термическому воздействию), основной задачей которого является изменение однородного распределения загрязнителя на стратифицированное. Полученная в активной области неоднородность позволяет сформировать два подхода для очистки среды:

- применение в областях локализации примеси сорбционных элементов, допускающих накопления загрязнителя в течении некоторого времени эффективной эксплуатации, в пределах которого происходит забор очищенной среды;

- геометрическая сепарация потока и оснащение фильтрационного устройства отдельными выходными отверстиями, при котором насыщенная примесью среда покидает область исследования в одной части, а забор очищенного вещества осуществляется в другой.

Исходя из рассмотренных фактов для построения полноценной модели фильтрации, необходимо учитывать следующие процессы:

- течение среды в исследуемой области, в том числе имеющей сложную геометрию;
- конвекционно-диффузионный перенос загрязнителя;
- учет внешних эффектов, приводящий к неоднородности распределения загрязнителя (силы Лоренца, термохимические процессы);
- учет сорбции на стенках фильтра, специальных сорбционных элементах (гранулированных, пористых).

Рассматриваемые процессы возможно разбить на два масштабных уровня:

- размеры установок, размеры фильтрующих систем, размеры элементов фильтров и гранул, размеры пор и каналов между ними, размеры микро- и наночастиц загрязнителей, описываемые с помощью методов механики сплошных сред;
- размеры тонких капилляров и пор (при описании захвата частиц загрязнителя стенками резервуара или гранулами сорбента), размеры отдельных атомов и молекул, описываемый моделями частиц, в том числе моделями молекулярной динамики.

При объединении макроскопических и микроскопических описаний используются результаты микроскопического моделирования в моделях макроскопического уровня. Например, неизвестные параметры веществ и материалов, уравнений состояния среды, кинетические коэффициенты уравнений гидродинамики и тепло- и массопереноса могут быть вычислены предварительно методами микроскопического уровня.

Для **описания течения** среды будем использовать квазигидродинамическую (КГиД) систему уравнений^{3,4,5,6,7}, обеспечивающую устойчивый счет даже на очень подробных сетках:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \left[\frac{1}{\text{Re}} (\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T) + \mathbf{w} \otimes \mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - p \right], \quad (1)$$

³ Елизарова, Т.Г. Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля / Т.Г. Елизарова, И.С. Калачинская, А.В. Ключникова, Ю.В. Шеретов // ЖВМиМФ. – 1998. – Т. 34, №10. – С. 1732-1742.

⁴ Chetverushkin, B.N. Kinetic schemes and quasi-gasdynamic system of equations / B.N. Chetverushkin – Barcelona: CIMNE. – 2008. – 298 p.

⁵ Elizarova, T.G. Quasi-gas dynamic equations / T.G. Elizarova – Berlin, Heidelberg, NY: Springer-Verlag. – 2009 – 286 p.

⁶ Шеретов, Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении / Ю.В. Шеретов – М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика" – 2009 – 400 с.

⁷ Рязанов, Д.А. Квазигидродинамический алгоритм в задаче моделирования аттракторов внутренних волн / Д.А. Рязанов // Математическое моделирование. – 2021. – Т. 33, №12. – С. 3-20.

$$\nabla(\nabla p) = \nabla \left[\frac{1}{\tau} \mathbf{u} - (\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} \right], \quad (2)$$

$$\mathbf{w} = \tau [(\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} + \nabla p], \quad (3)$$

где $\frac{\partial}{\partial t}$ – временная производная, $Re = \frac{\rho u_0 L_h}{\eta}$ – число Рейнольдса,

$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}^T$ – оператор Гамильтона, $\mathbf{u} = \{u_x, u_y, u_z\}^T$ – вектор скорости,

$(\bullet \otimes \bullet)$ – прямое произведение векторов, p – давление, $\mathbf{w}$ – регуляризирующая

поправка, $\tau \sim \frac{1}{Re}$ – параметр регуляризации, ρ – плотность, η – коэффициент динамической вязкости, u_0 – характерная скорость течения, D_h – характерный линейный размер области (гидродинамический диаметр).

В случае существенных отклонений параметров среды от несжимаемой жидкости в качестве модели предлагается использовать полную систему квазигазодинамических (КГД) уравнений, записанную для смеси компонент, исключая твердую фазу. Для последней используется уравнение конвекции-диффузии, которое при необходимости дополняется уравнением теплопроводности. В случае смеси газов система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид. Модель течения газа реализована вне рамок данной работы на базе программного комплекса GIMM_NANO с использованием программных модулей GIMM_APP_QGD_CPU⁸ и GIMM_APP_QGD_MD_CPU⁹.

Для **отражения температурных эффектов** в рамках рассматриваемой КГиД модели течения система уравнений (1) – (3) дополняется выражением:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \left[\frac{1}{RePr} \nabla T + (\mathbf{w} - \mathbf{u}) T \right], \quad (4)$$

где $Pr = \frac{\eta c_p}{\kappa}$ – число Прандтля, c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, κ – коэффициент теплопроводности.

⁸ Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ течений газа в микроканалах на основе уравнений квазигазодинамики GIMM_APP_QGD_CPU программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016612717 от 09.03.2016. Правообладатель: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

⁹ Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ течений газа в микроканалах на основе уравнений квазигазодинамики и методов молекулярной динамики GIMM_APP_QGD_MD_CPU программного комплекса GIMM_NANO, версия 2. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2018666727, 20 декабря 2018. Правообладатель: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

Уравнения (1) – (3) дополняются членами:

$$\mathbf{Gr}T, \nabla \mathbf{Gr}T \text{ и } -\tau \mathbf{Gr}T \quad (5)$$

соответственно, тут $\mathbf{Gr} = \{Gr_x, Gr_y, Gr_z\}^T$. При учете силы тяжести, действующей вдоль оси OY, $\mathbf{Gr} = \{0, Gr, 0\}^T$, где $Gr = \frac{g \rho^2 L_h^3 \beta \Delta T}{\eta^2}$ – число Грасгофа, g – ускорение свободного падения, β – коэффициент объемного расширения среды, ΔT – характерный перепад температур.

При моделировании **поведения примесей**, содержащихся в потоке жидкости или газа, на макроскопическом уровне вводились концентрации ее компонент. Для получения их распределения и эволюции в исследуемой области очистной системы для учета конвекционно-диффузионного движения компонент примеси использовались классические уравнения конвекции-диффузии, дополненные КГид регуляризацией. Эти уравнения в безразмерной форме имеют следующий вид:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \nabla \left[D_k \nabla C_k + (\mathbf{w} - \mathbf{u}) C_k \right], \quad (6)$$

здесь C_k – концентрация частиц (ионов) сорта k , $D_k = \frac{D_{0,k}}{u_0 L_h}$ – безразмерный коэффициент диффузии частиц.

Моделирование электромагнитных фильтров требует учет силы Лоренца, в уравнении (6) посредством введения члена:

$$-\nabla (F_k \mathbf{F} C_k), \quad (7)$$

где $F_k = \frac{q_k \mu_{\varepsilon k} E_0}{u_0}$ – коэффициент нормировки силы Лоренца, q_k – заряд частиц в относительных единицах с учетом знака, $\mu_{\varepsilon k}$ – коэффициент подвижности частиц, $E_0 = \frac{\varphi_0}{L_h}$ – константа нормировки напряженности, $\varphi_0 = \frac{\max_k (|q_k C_{0,k}|) L_h^2}{\varepsilon}$

– константа нормировки потенциала, $\mathbf{F} = \mathbf{E} + B_0 \left[\mathbf{u} \times \frac{\mathbf{B}}{|\mathbf{B}|} \right]$ – сила Лоренца, $\mathbf{E}$ –

напряженность электрического поля, $B_0 = \frac{u_0}{E_0} |B|$ – константа нормировки

магнитной индукции, ε – диэлектрическая проницаемость среды, $\mathbf{B}$ – вектор магнитной индукции.

Исследуемым в диссертационной работе фильтрационным процессам характерно магнитное число Рейнольдса много меньше единицы. Этот факт дает возможность считать магнитное поле в системе внешним фактором, а в качестве постановки использовать потенциальное описание:

$$\nabla(\nabla\varphi) = -\sum_k^{n_c} \frac{q_k C_{0,k}}{\max_k(|q_k C_{0,k}|)} C_k, \quad (8)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad (9)$$

где φ – потенциал электрического поля.

Уравнения (1) – (9) дополняются граничными условиями, необходимыми для описания рассматриваемых фильтрационных устройств и включающих: входное и выходное отверстия, стенки области, стенки гранулированных сорбентов и нагревательных элементов. В качестве начальных условий в рамках работы используются условия покоя.

В рамках диссертации **микромасштабная модель** реализуется с помощью разработанных ранее программных модулей комплекса GIMM_NANO, в том числе GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal¹⁰ и KIAM_MolSDAG_CPU¹¹. Основой представленной разработки являются уравнения классической динамики Ньютона для случая многих типов частиц. Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит согласно формуле выбранного потенциала взаимодействия.

Для компонент воздушной смеси на молекулярном уровне в данной работе использовались потенциалы Леннарда-Джонса, для молекул загрязнителей и материала гранул использовались потенциалы Ми. Потенциалы взаимодействия частиц разных сортов определялись в рамках модели Леннарда-Джонса на основе правил Лоренца-Бершелота. В качестве начальных условий принимались равновесные состояния системы, сконструированные при помощи характеристик потока, полученных в макрорасчете.

Для компонент водной среды молекулярный уровень не использовался. Однако на поверхности электродов и на поверхности гранул сорбента необходимо было вычислить коэффициенты сорбции частиц загрязнителя. Для этого применялась модель молекулярной динамики. В предварительном расчете рассматривался небольшой фрагмент поверхности электрода или гранулы, в рамках которого вычислялось взаимодействие частиц загрязнителя и

¹⁰ Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015618870 от 19.08.2015. Правообладатель: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

¹¹ Пузырьков Д.В., Поляков С.В., Подрыга В.О. Программный комплекс для решения задач распределенной генерации больших молекулярных систем KIAM_MolSDAG_CPU, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2020618460, 29 июля 2020. Правообладатель: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

атомов поверхности. Для замыкания задачи использовались периодические граничные условия.

На основании микрорасчетов производилось формирование таблиц коэффициентов сорбции, скорости захвата примеси элементами конструкций, диффузии, получаемые путем осреднения данных, рассчитанных посредством моделирования взаимодействия конкретных молекулярных систем.

Во второй главе рассматриваются численные методы и вычислительные алгоритмы предложенных математических моделей механики сплошной среды, полученные на основе метода конечных объемов. Обсуждаются вопросы программной реализации расширяемого вычислительного ядра, предназначенного для проведения расчетов процессов фильтрации. Параллельная реализация осуществлялась посредством геометрического параллелизма при разбиении расчетной сетки на расчетные домены.

Используемые сеточные параметры и обозначения на примере прямоугольных элементов изображены на рис. 1. Здесь V_i – площадь в двухмерном и объем в трехмерном случае текущего i -ого сеточного элемента, P_i – точка центра текущего i -ого элемента, P_{ij} – точка центра j -соседнего к i -ому элемента, l_{ij} – расстояние между центрами соседних ячеек, $\mathbf{n}_{ij}$ – единичный направляющий вектор от центра текущего элемента к центру соседнего, S_{ij} – направленная длина в двухмерном случае и площадь в трехмерном j -ой грани i -ого элемента, помноженная на внешнюю нормаль.

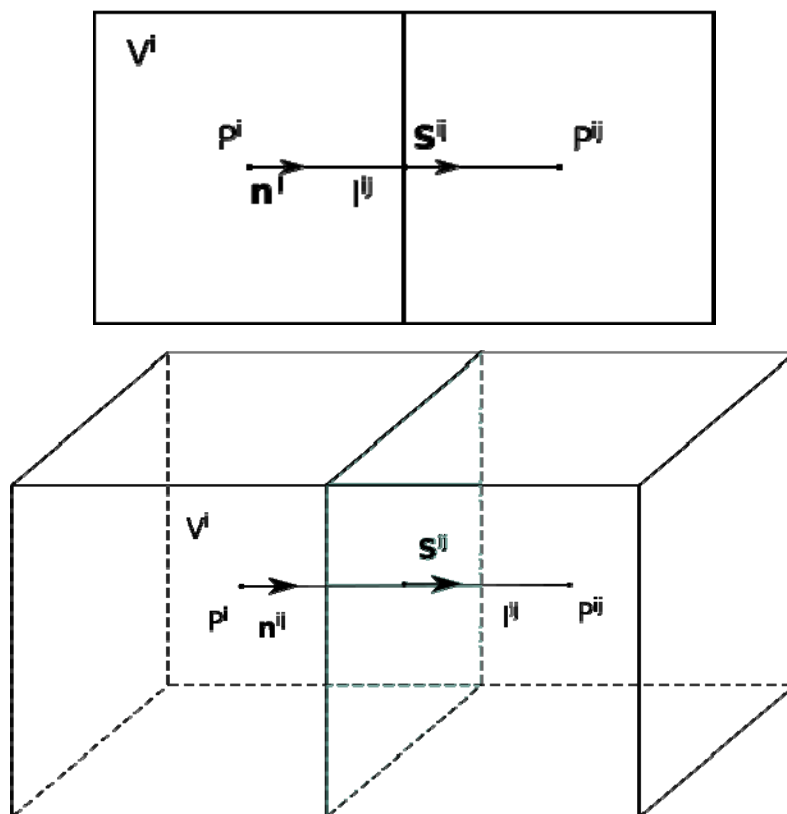


Рисунок 1 – Характерные сеточные величины для четырехугольных двухмерных (сверху) и кубических трехмерных (снизу) конечных объемов

С учетом введенных обозначений сеточный аналог уравнений (1) – (3) примет вид:

$$\hat{\mathbf{u}}^i = \mathbf{u}^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left[\frac{1}{\text{Re}} \left\{ \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} \otimes (\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i) + (\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i) \otimes \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} \right\} \cdot \mathbf{S}^{ij} + \right. \\ \left. + \{ \mathbf{w}^{ij} \otimes \bar{\mathbf{u}}^{ij} + \bar{\mathbf{u}}^{ij} \otimes \mathbf{w}^{ij} \} \cdot \mathbf{S}^{ij} - \{ \bar{\mathbf{u}}^{ij} \otimes \bar{\mathbf{u}}^{ij} \} \cdot \mathbf{S}^{ij} - \bar{p}^{ij} \mathbf{S}^{ij} \right], \quad (10)$$

$$\hat{p}^i = \left[\sum_{j=1}^m \left(p^{ij} \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} - \frac{1}{\tau} \bar{\mathbf{u}}^{ij} + (\bar{\mathbf{u}}^{ij}, \mathbf{n}^{ij}) \frac{\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i}{l^{ij}}, \mathbf{S}^{ij} \right) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij})}{l^{ij}} \right]^{-1}, \quad (11)$$

$$\mathbf{w}^{ij} = \tau \left[(\bar{\mathbf{u}}^{ij}, \mathbf{n}^{ij}) \frac{\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i}{l^{ij}} + \frac{p^{ij} - p^i}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} \right], \quad (12)$$

где $\hat{\mathbf{u}}^i$ – сеточный аналог скорости в i элементе на следующем временном шаге, $\mathbf{u}^i$ – аналог скорости в выделенном элементе на текущем временном шаге, τ_{time} – шаг по времени, $\bar{\mathbf{u}}^{ij} = 0.5(\mathbf{u}^{ij} + \mathbf{u}^i)$ – интерполяция скорости на центр грани сеточного элемента, $\mathbf{u}^{ij}$ – сеточный аналог скорости в соседнем элементе, m – количество соседних к выделенному элементов (в случае треугольной сетки равное 3, квадратной сетки – 4, в случае гексаэдральной – 6), $\bar{p}^{ij} = 0.5(p^{ij} + p^i)$ – интерполяция давления на центр грани сеточного элемента, $\hat{p}^i$ – сеточный аналог давления в центре выделенной ячейки, p^{ij} – аналог давления в соседней ячейке, $\mathbf{w}^{ij}$ – сеточный аналог регуляризирующей поправки.

Уравнение модели теплопроводности (4) примут следующую разностную форму:

$$\hat{T}^i = T^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left(\frac{1}{\text{RePr}} \frac{(T^{ij} - T^i)}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} + \bar{T}^{ij} (\mathbf{w}^{ij} - \bar{\mathbf{u}}^{ij}), \mathbf{S}^{ij} \right), \quad (13)$$

где $\hat{T}^i$, T^i – температура в текущей i ячейке на следующем и текущем шагах по времени, T^{ij} – температура в соседней ячейке, $\bar{T}^{ij} = 0.5(T^{ij} + T^i)$ – интерполяция температуры на грань сеточного элемента.

Разностные аналоги добавок (5) для выражений (10) – (12) примут вид:

$$\mathbf{Gr} T^i, \left[\sum_{j=1}^m \bar{T}^{ij} (\mathbf{Gr}, \mathbf{S}^{ij}) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij})}{l^{ij}} \right]^{-1} \text{ и } -\tau \mathbf{Gr} T^i. \quad (14)$$

Распространение компонент загрязнителя будем рассчитывать с помощью разностных аналогов уравнений конвекции-диффузии (6):

$$\hat{C}_k^i = C_k^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left(D_k \frac{C_k^{ij} - C_k^i}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} + \bar{C}_k^{ij} (\mathbf{w}^{ij} - \bar{\mathbf{u}}^{ij}), \mathbf{S}^{ij} \right), \quad (15)$$

где $\hat{C}_k^i$, C_k^i - концентрация k компонента примеси в i текущей ячейке на следующем и текущем временных шагах, C_k^{ij} - концентрация k компонента в соседней ячейке, $\bar{C}^{ij} = 0.5(C^{ij} + C^i)$ - интерполяция концентрации k компоненты на грань сеточного элемента.

Электростатическая модель (8), (9) в разностной форме будет иметь следующий вид:

$$\hat{\phi}^i = \left[V^i \sum_{k=1}^p \frac{q_k C_{k0}}{\max_k (|q_k C_{k0}|)} C_k^i + \sum_{j=1}^m \frac{\phi^{ij}}{I^{ij}} (\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{s}^{ij}) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{s}^{ij})}{I^{ij}} \right]^{-1}, \quad (16)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^i = -\frac{1}{V^i} \sum_{j=1}^m \bar{\phi}^{ij} \mathbf{s}^{ij}, \quad (17)$$

где $\hat{\phi}^i$, $\hat{\mathbf{E}}^i$ - значения потенциала и напряженности электрического поля на следующей итерации в i ячейке, ϕ^i , ϕ^{ij} - значение потенциала в текущей i ячейке и j соседней, $\bar{\phi}^{ij} = 0.5(\phi^{ij} + \phi^i)$ - интерполяция потенциала на грань элемента.

Дискретный аналог добавки (7) к выражению (15) примет вид:

$$-\frac{\tau_{time}}{V^i} F_k \sum_{j=1}^m (\bar{C}_k^{ij} \mathbf{F}^{ij}, \mathbf{s}^{ij}), \quad (18)$$

где $\mathbf{F}^{ij} = \bar{\mathbf{E}}^{ij} + B_0 [\bar{\mathbf{u}}^{ij} \times \mathbf{B}^{ij}]$ - разностный аналог силы Лоренца, определяемый на гранях сеточного элемента, $\bar{E}^{ij} = 0.5(E^{ij} + E^i)$ - интерполяция напряженности на грань сеточного элемента, $\mathbf{B}^{ij}$ - вектор магнитной индукции на грани ячейки.

Комплексный вычислительный алгоритм формируется из выражений (10) – (18), использование которых определяется условиями моделируемой задачи. Зачастую предполагается слабое обратное влияние концентраций примеси на характер течения, что позволяет вычислить стационарные распределения скорости и давления и использовать их при расчетах концентрации, дополненных соответствующими электромагнитными или термическими воздействиями.

Программное ядро, реализующее описанный вычислительный алгоритм, выполнено на языке программирования C++ с использованием библиотек OpenMP и OpenMPI для организации параллельного счета. Программное обеспечение использует объектно-ориентированный и шаблонный подходы, формируя расширяемую библиотеку, модульная структура которой изображена на рис. 2.

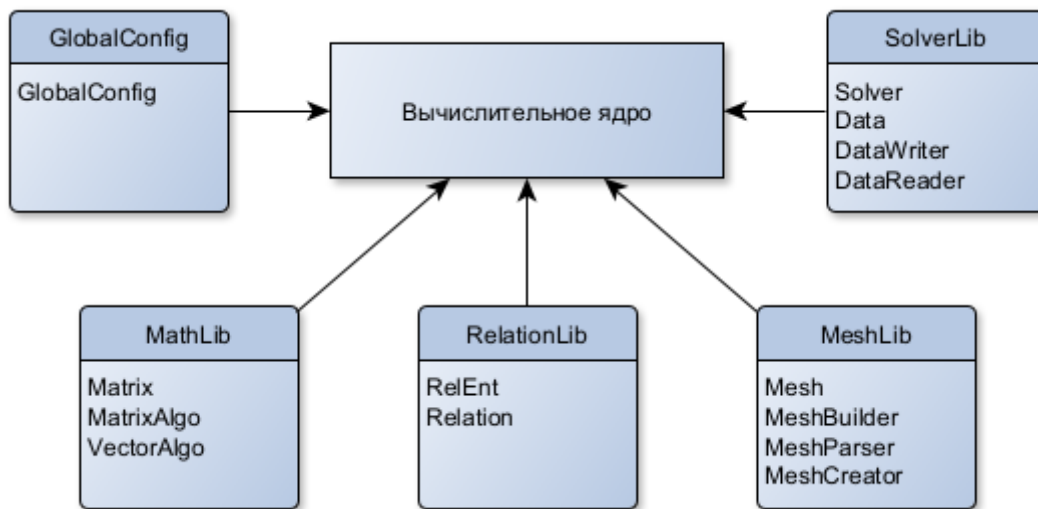


Рисунок 2 – Схема вычислительного ядра

Вычислительное ядро содержит следующие основные корневые модули:

- библиотека представления конфигурации вычислительного ядра (класс GlobalConfig);
- библиотеки представления матриц и векторов, а также операций над ними (пространство имен MathLib);
- библиотеки представления отношений данных различной природы (пространство имен RelationLib);
- библиотеки сеточного представления (пространство имен MeshLib);
- библиотеки решателей, включающей в том числе представление данных (пространство имен SolverLib),

и пакетную головную программу макромодели, динамически конфигурируемую при запуске с возможностью определения типа задания и используемых математических моделей.

В третьей главе обсуждается архитектура цифровой платформы предназначенной для проведения полного цикла вычислительного эксперимента на кластерах и суперкомпьютерах, в том числе удаленных. Под полным циклом вычислительного эксперимента подразумевается отправка и сборка прикладных приложений на удаленный вычислительный ресурс, подготовка параметров запуска, конфигурационных файлов и файлов данных, запуск и слежение за прохождением пользовательского задания, а также анализ результатов математического моделирования. В рамках диссертации с применением веб-технологий был реализован веб-сервер, обеспечивающий функционал цифровой платформы, в том числе:

- многопользовательский доступ по протоколу HTTP/HTTPS;
- взаимодействие с удаленными вычислителями по SSH с возможностью расширения поддерживаемых протоколов (например, специализированного API конкретных решений для облачных

- вычислений);
- авторизованный доступ пользователей к системе, разделение пользователей по ролям (уровням доступа);
 - обеспечение клиентов графическим интерфейсом для взаимодействия с удаленными вычислителями;
 - обеспечение информационной поддержки о состоянии вычислителя, прикладных программных кодах, проведенных расчетах;
 - наличие расширяемой базы данных, содержащей описания вычислительных ресурсов, прикладных приложений и сценариев их запуска, на основе которых формируется графический интерфейс подготовки расчета к запуску.

Основой серверной реализации стал Node.js, расширяющий язык программирования JavaScript до языка общего назначения. Обеспечение безопасности, авторизации и маршрутизации достигнуто посредством применения библиотеки Express.js. Графический интерфейс основан на реактивной парадигме одностраничного приложения с помощью Vue.js. В качестве библиотеки компонентов применена Quasar.js. Пример некоторых страниц разработанной веб-системы представлен на рис. 3 – 5.

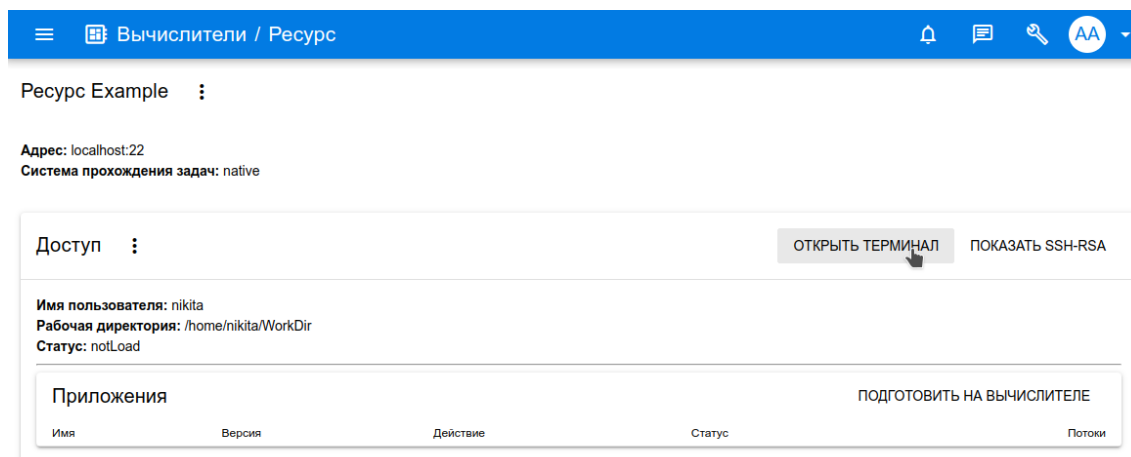


Рисунок 3 – Страница вычислительного ресурса с активным доступом

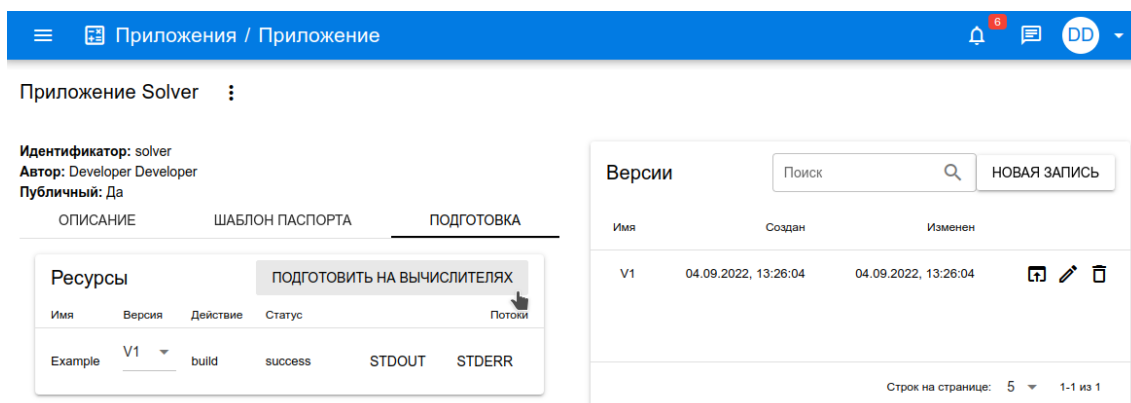


Рисунок 4 – Страница приложения

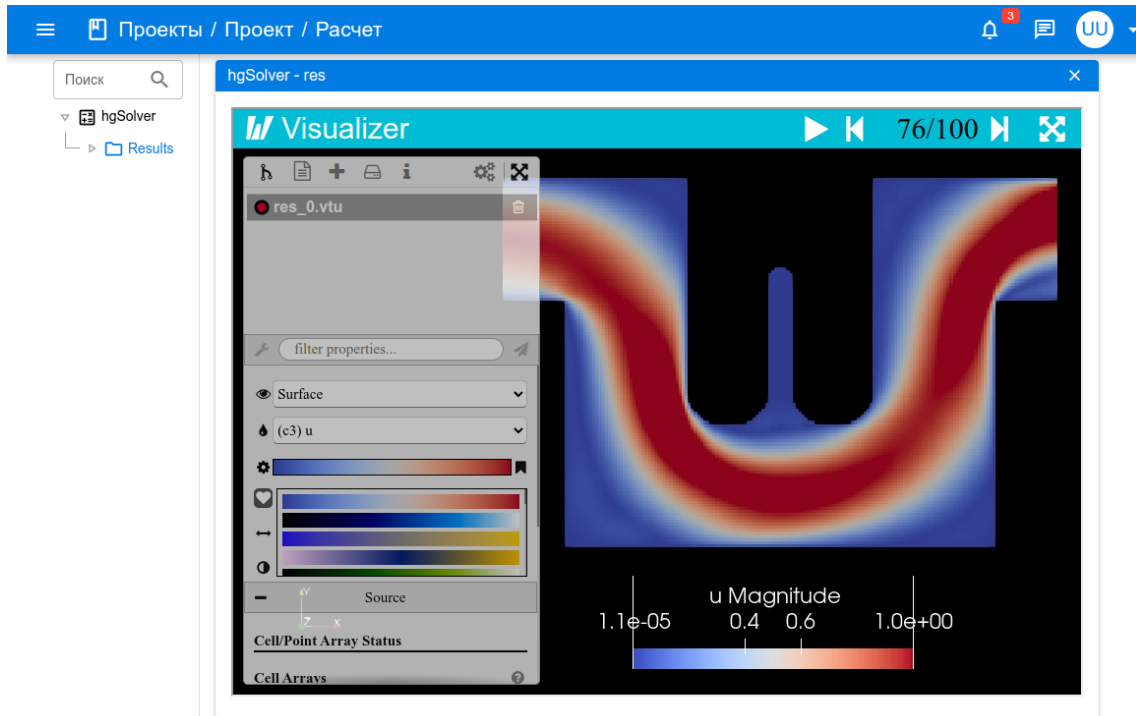


Рисунок 5 – Анализ выходных данных

В четвертой главе приведены результаты математического моделирования задач верификации и валидации, а также некоторых задач промышленной экологии.

В качестве **первой задачи верификации** рассматривалось установление течения Пуазейля в прямоугольной области размером 4×1 . Расчеты проводились при числе Рейнольдса равного 100 на сгущающихся сетках с линейными размерами элемента 0.05, 0.025 и 0.01. Результаты моделирования приведены на рис. 6 и 7, на которых наблюдается сходимость к точному решению с уменьшением шага сетки.

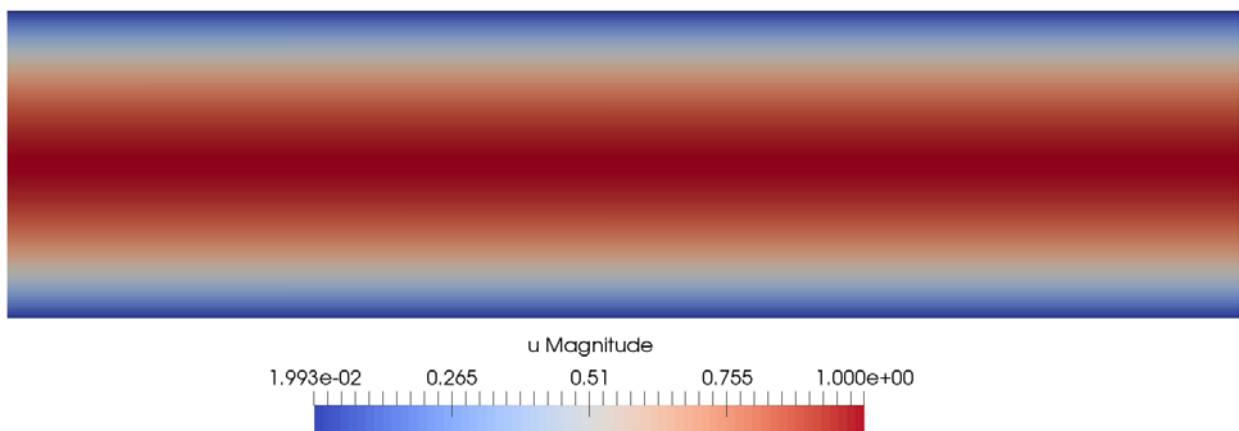


Рисунок 6 – Распределение модуля скорости

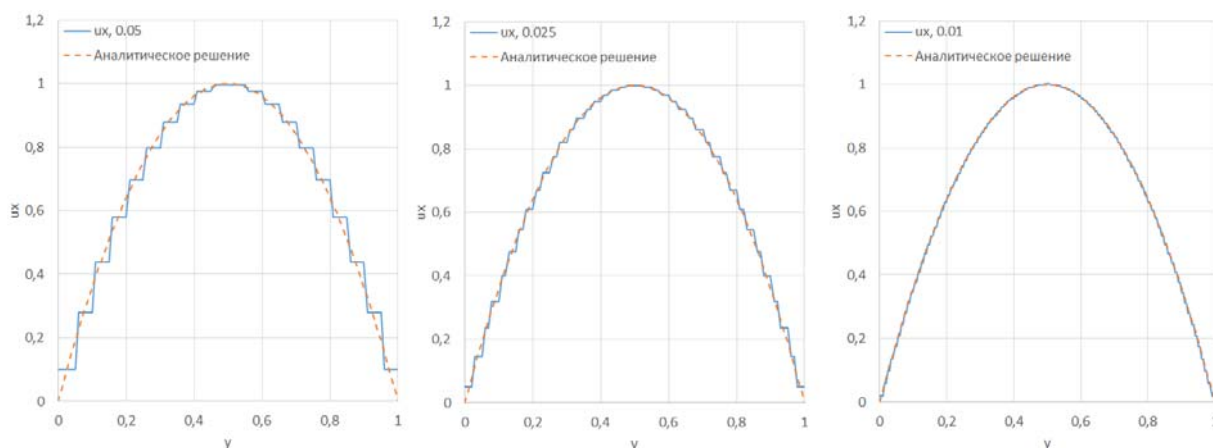


Рисунок 7 – Распределения продольной скорости при $X=2$ для сеток: 0.05 – слева сверху; 0.025 – справа сверху, 0.01 – снизу

Вторая задача верификации рассматривала перенос концентрации от начальных данных:

$$u_x = 0.5, \quad u_y = 0.5, \quad p = 0.5, \quad C(x, y) = \exp \left[-\frac{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2}{D_0} \right],$$

при $D_0 = 0.005$. Квадратная расчетная область размерами 2×2 покрывалась декартовой сеткой с размером элемента равным 0.01.

Распределение концентрации в исследуемой области приведены на рис. 8. Сравнение с аналитическим решением¹² изображено на рис. 9. Графики показывают хорошее соответствие результатов численного расчета аналитическому решению как по амплитуде, так и по скорости перемещения пика.

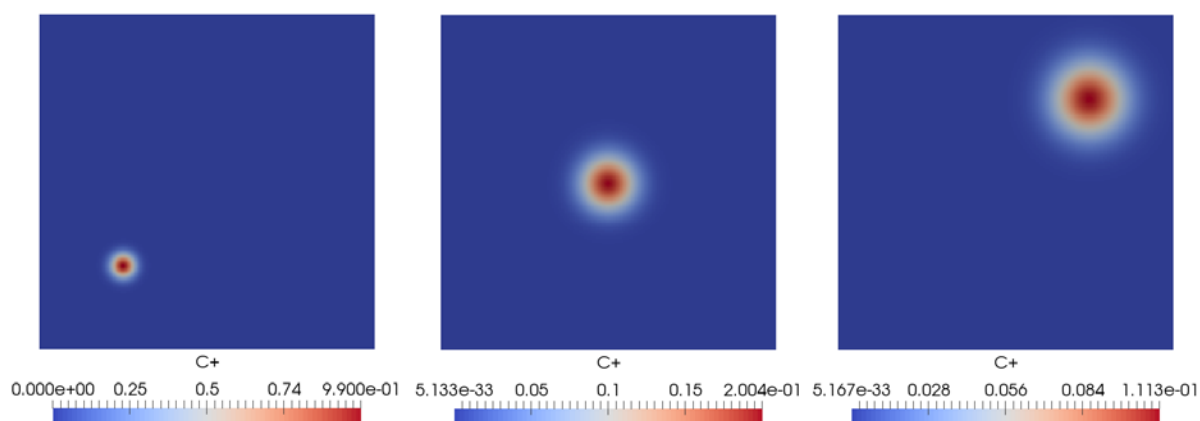


Рисунок 8 – Распределение концентрации при $t = 0.0$ (слева), $t = 1.0$ (по центру) и $t = 2.0$ (справа)

¹² Sankaranarayanan, S. Three-dimensional finite difference model for transport of conservative pollutants / S. Sankaranarayanan, N.J. Shankar, H.F. Cheong // Ocean Engineering. – 1998. – Vol. 25, Issue 6. – P. 425-442.

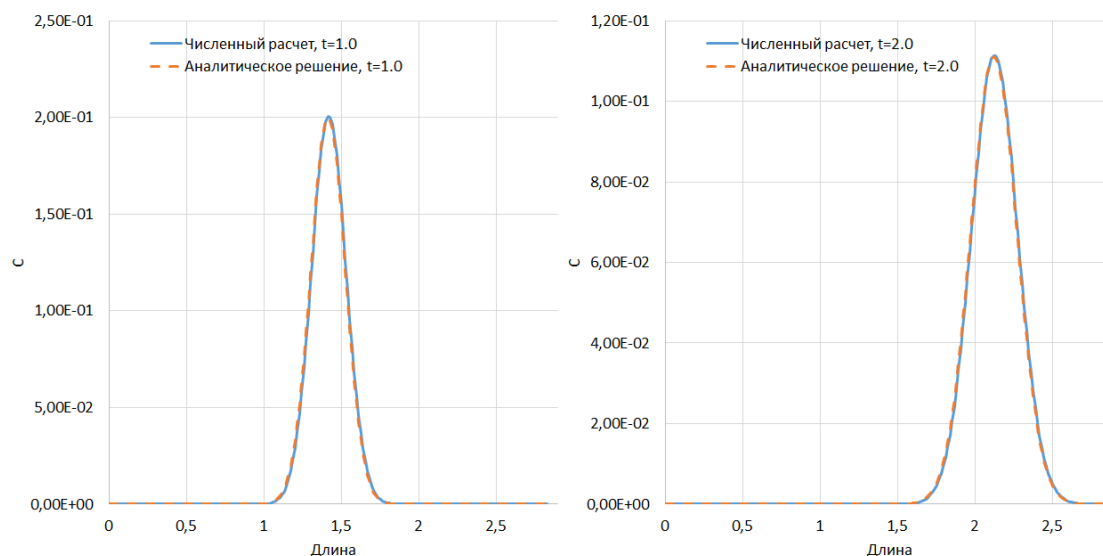


Рисунок 9 – Численный расчет и аналитическое решение при $t = 1$ (слева) и $t = 2$ (справа)

В рамках **задачи валидации** рассматривался процесс обессоливания воды безмембранным способом¹³, заключающемся в геометрическом расщеплении потока и локализацией растворенных ионов посредством анода. При расчете число Рейнольдса принималось равным 100, в качестве дискретизации расчетной области использовалась гексаэдральная сетка, содержащая 78 200 элементов (характерный линейный размер – элемента 0.05). Стационарное течение, полученное в результате моделирования, изображено на рис. 10, а распределение примеси на рис. 11.

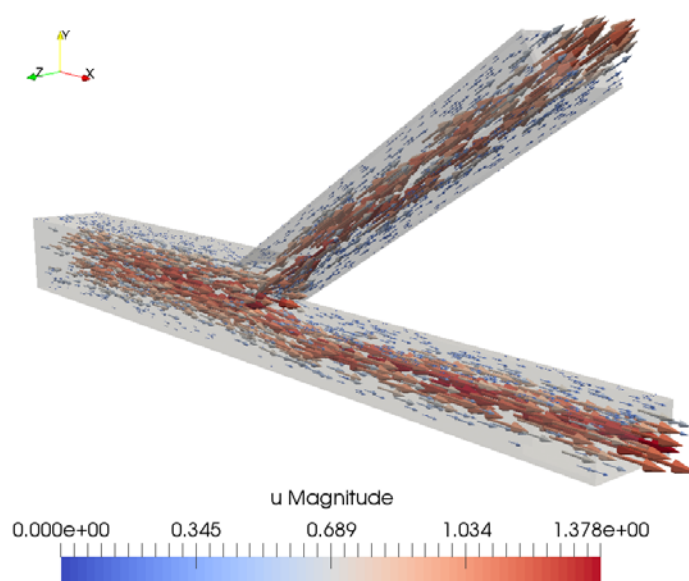


Рисунок 11 – Распределение модуля скорости в объеме

¹³ Crooks, R.M. Electrochemically mediated desalination / R. M. Crooks, K. N. Knust, M. R. Stanley, F. J. Carrillo, D. Hlushkou, U. Tallarek / Proc. of 18th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences. – 2014. – P. 156-159.

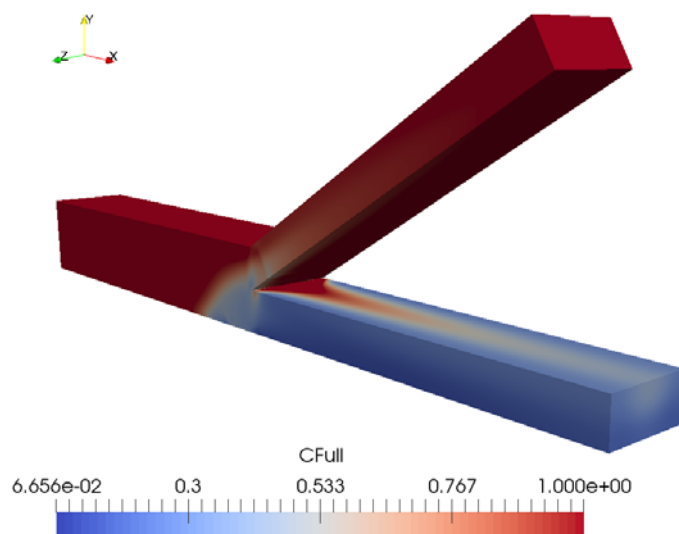


Рисунок 12 – Распределение концентрации на поверхности области

Общий характер стационарного течения и распределения загрязнителя согласуется с приведенным в работе¹⁴, насыщенная солью жидкость протекает через верхний патрубок. Обессоленная вода протекает по нижнему.

В рамках серии расчетов **задач промышленной экологии** были получены распределения при очистке жидкости посредством электромагнитного воздействия (рис. 13), фильтрации воздушной среды сорбционными фильтрами (рис. 14) и образование накипи (рис. 15) на тепловыделяющем элементе с последующей очисткой (рис. 16). Полученные результаты моделирования хорошо соотносятся с теоретическими представлениями, в том числе соответствуют положениям тематических работ, посвященных промышленной экологии.

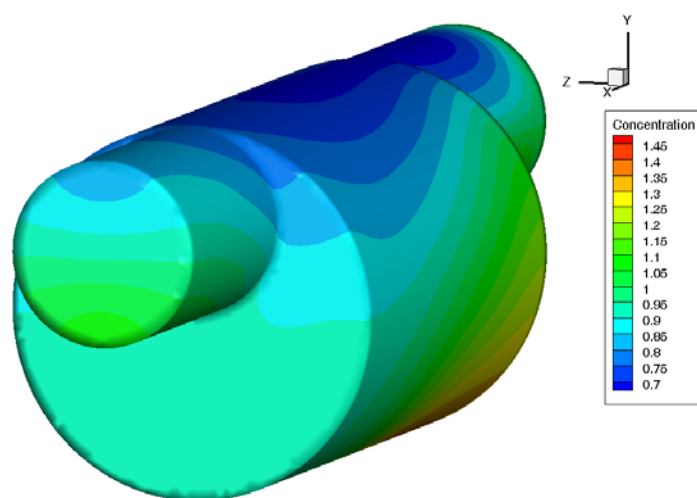


Рисунок 13 – Распределение концентрации примеси, электромагнитная очистка

¹⁴ Knust, K.N. Electrochemically Mediated Seawater Desalination / K.N. Knust, D. Hlushkou, R.K. Anand, U. Tallarek, R.M. Crooks // Angew. Chem. Int. Ed. – 2013 – Vol. 52, Issue 31 – P. 8107-8110.

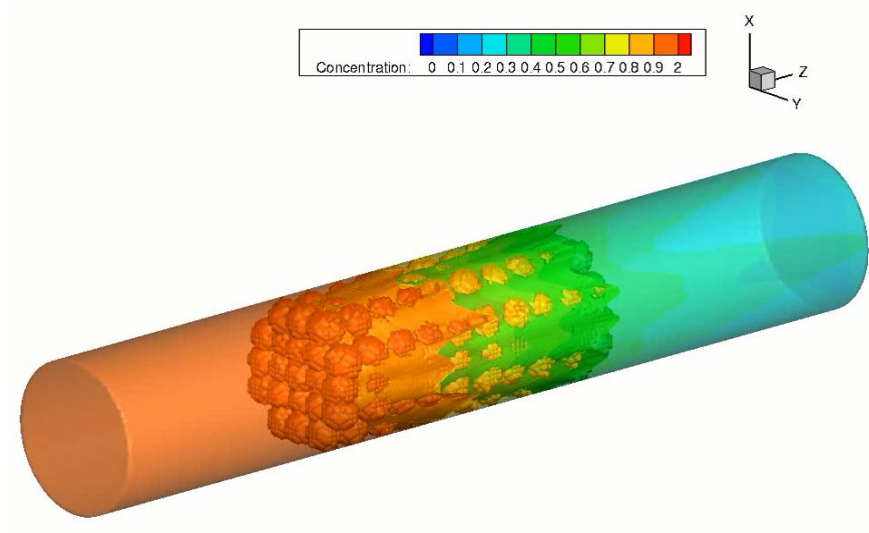


Рисунок 14 – Распределение концентрации примеси, сорбционная фильтрация

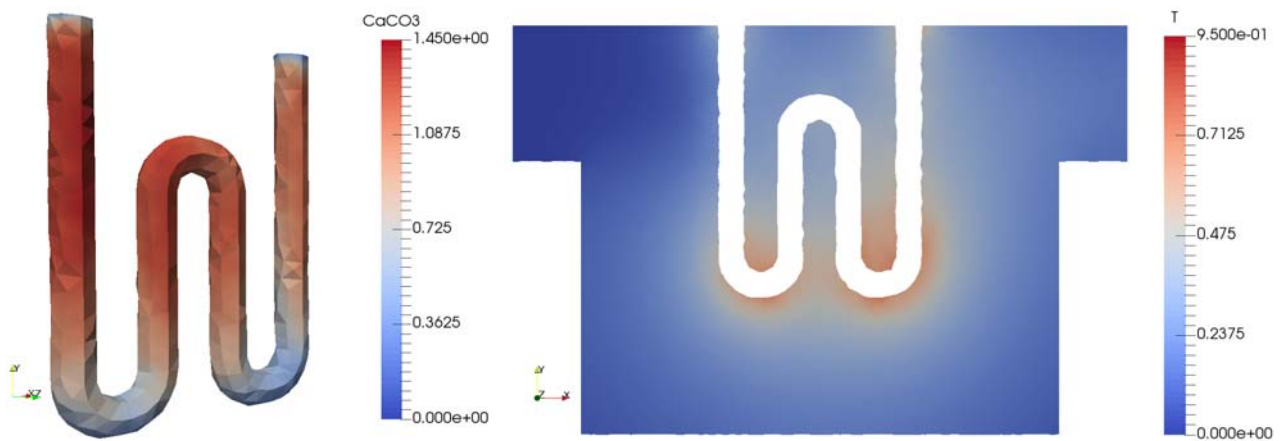


Рисунок 15 – Распределение накипи на нагревательном элементе (слева) и распределение температуры в сечении $Z=0$ (справа) при $t = 50$

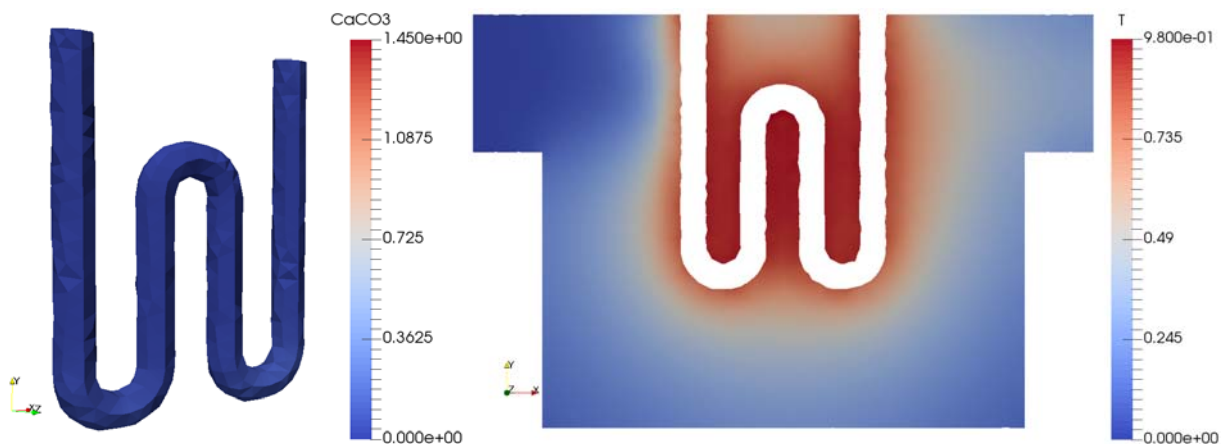


Рисунок 16 – Распределение накипи на нагревательном элементе (слева) и распределение температуры в сечении $Z=0$ (справа) при очистке на $t = 50$

В заключении приведены основные результаты работы.

Основные результаты

Основными результатами диссертационной работы, выносимыми на защиту, являются:

1) разработаны комплексные математические модели, применяемые в задачах экологической направленности (процессы фильтрации, загрязнение функциональных элементов конструкции), а именно:

- а) квазигидродинамическая модель течения водной среды с учетом динамики электромагнитного поля и процессов конвекции и диффузии заряженных примесей;
- б) квазигазодинамическая многокомпонентная модель течения воздушной среды с учетом наличия в ней твердых наноразмерных частиц;
- в) квазигидродинамическая многокомпонентная модель течения жидкой среды с учетом процессов конвекции, диффузии и химических превращений,

и способы их уточнения и агрегирования в рамках многомасштабного подхода;

2) предложены численные методы анализа разработанных комплексных моделей, основанные на методе конечных объемов на неструктурированных сетках, и их программные реализации, ориентированные на использование современных компьютерных и суперкомпьютерных вычислительных систем;

3) создана цифровая платформа, включающая вычислительное ядро, базирующееся на разработанных комплексных моделях, и дополнительный программный инструментарий, реализующий всю цепочку вычислительного эксперимента при решении актуальных прикладных задач экологической направленности;

4) в целях верификации и валидации комплексных математических моделей и их программной реализации проведено численное моделирование для ряда практических задач промышленной экологии, подтвердившее эффективность разработанной компьютерной технологии.

Публикации автора по теме диссертации

1. Kudryashova, T. A novel parallel algorithm for 3D modelling electromagnetic purification of water / T. Kudryashova, S. Polyakov, N. Tarasov // MATEC Web of Conferences 210. – 04027. - 2018. – 1-5 pp. – URL: <https://doi.org/10.1051/mateconf/201821004027> (дата обращения: 23.09.2022). [Scopus]
2. Тарасов, Н.И. Моделирование потока несжимаемой вязкой жидкости с помощью метода двойного потенциала / Н.И. Тарасов, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2018. – № 247. – 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-247> (дата обращения: 23.09.2022). [BAK]

3. Polyakov, S. Optimization of Parallel Computations for Modeling Water Purification Processes by Electromagnetic Method / S. Polyakov, T. Kudryashova, N. Tarasov // EngOpt 2018 Proceedings of the 6th International Conference on Engineering Optimization. – Springer, Cham. – 2019. – Pp. 754-765. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-319-97773-7_66 (дата обращения: 23.09.2022). [Springer]
4. Kudryashova, T. Application of the Double Potential Method to Simulate Incompressible Viscous Flows / T. Kudryashova, S. Polyakov, N. Tarasov // J.M.F. Rodrigues et al. (Eds.): ICCS 2019, LNCS 11539. – 2019. - Pp. 568-579. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-030-22747-0_42 (дата обращения: 23.09.2022). [WoS, BAK]
5. Тарасов, Н.И. Моделирование потока вязкой несжимаемой жидкости с помощью квазигазодинамической системы уравнений / Н.И. Тарасов, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков // Математическое моделирование. – 2019. – т. 31, № 12. – с. 33-43. Перевод: Tarasov N.I. Incompressible Viscous Flow Simulation Using the Quasi-Hydrodynamic Equations' System / N.I. Tarasov, S.V. Polyakov, Yu.N. Karamzin, T.A. Kudryashova, V.O. Podryga, D.V. Puzyrkov // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2020. – Vol. 12, No. 4. – Pp. 553-560. URL: <https://doi.org/10.1134/S2070048220040183> (дата обращения: 23.09.2022). [Scopus, BAK]
6. Поляков С.В. Многомасштабное суперкомпьютерное моделирование процессов очистки газа методом адсорбции / С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов // Вычислительные методы и программирование. – 2020. – Т. 21. – С. 64-77. URL: <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r106> (дата обращения: 23.09.2022). [BAK]
7. Поляков С.В. Метод двойного потенциала для моделирования внутреннего течения вязкой несжимаемой жидкости / С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, Н.И. Тарасов // Доклады РАН. Математика, информатика, процессы управления. – 2020. – Т. 494, № 1. – С. 73-76. Перевод: Polyakov S.V. Double potential method for modeling the internal flow of a viscous incompressible liquid / S.V. Polyakov, T.A. Kudryashova, N.I. Tarasov // Doklady Mathematics. – 2020. – Vol. 102, No. 2. – Pp. 418-421. URL: <https://doi.org/10.1134/S1064562420050397> (дата обращения: 23.09.2022). [WoS, BAK]
8. Podryga, V.O. Developing of Multiscale Approach to HPC-Simulation of Multiphase Fluid Flows / V.O. Podryga, S.V. Polyakov, N.I. Tarasov // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2021. – Vol. 42, No. 11. – Pp. 2623-2633. URL: <https://doi.org/10.1134/S1995080221110160> (дата обращения: 23.09.2022). [Scopus, BAK]
9. Поляков, С.В. Применение многомасштабного подхода для моделирования сорбционной фильтрации воздуха / С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, Н.И.

- Тарасов // Доклады РАН. Математика, информатика, процессы управления. – 2021. – том 500. - С. 1-5. Перевод: Polyakov S.V. Application of the Multiscale Approach to Simulation of Air Sorbent Filtration / S.V. Polyakov, T.A. Kudryashova, N.I. Tarasov // Doklady Mathematics. – 2021. – Vol. 104, No. 5. – Pp. 297-300. URL: <https://doi.org/10.1134/S1064562421050094> (дата обращения: 23.09.2022). **[WoS, BAK]**
10. Tarasov, N. Computer modeling of air flows purification using sorption filters / N. Tarasov, Yu. Karamzin, T. Kudryashova, V. Podryga, S. Polyakov // Journal of Physics: Conf. Series (JPCS). – 2021. – V. 2028. – Paper 012025. – 7 p. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2028/1/012025> (дата обращения: 23.09.2022). **[Scopus, BAK]**
 11. Kudryashova, T.A. Mathematical Modelling of Electrophysical Water Treatment / T.A. Kudryashova, S.V. Polyakov, N.I. Tarasov // Defect and Diffusion Forum. – 2021. – vol. 412. – Pp. 149-162. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.412.149> (дата обращения: 23.09.2022). **[WoS]**
 12. Тарасов, Н.И. Архитектура и реализация цифровой платформы для проведения вычислительных экспериментов на суперкомпьютерах / Н.И. Тарасов // Препринты ИПИМ им. М.В. Келдыша. 2022. № 50. 30 с. URL: https://keldysh.ru/papers/2022/prep2022_50.pdf (дата обращения: 23.09.2022). **[BAK]**
 13. Тарасов, Н.И. Моделирование образования и удаления известкового налета в системах водоочистки / Н.И. Тарасов, Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков // Доклады Российской Академии Наук. Математика, информатика, процессы управления. – 2022. – Том 505. – с. 79-85. Перевод: Tarasov, N.I. Modeling Formation and Removal of Limescale in Water Treatment Systems / N.I. Tarasov, T.A. Kudryashova, S.V. Polyakov // Doklady Mathematics. – 2022. – Vol. 106, No. 1. – P. 279-285. URL: <https://doi.org/10.1134/S1064562422040184> (дата обращения: 28.09.2022) **[WoS, BAK]**