

Многомасштабное суперкомпьютерное моделирование процессов очистки газа*

С.В. Поляков^{1,2}, Ю.Н. Карамзин¹, Т.А. Кудряшова¹,
В.О. Подрыга^{1,3}, Д.В. Пузырьков¹, Н.И. Тарасов¹

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН¹, НИЯУ МИФИ², МАДИ³

В настоящей работе рассматривается проблема суперкомпьютерного моделирования процессов очистки воздушной среды от мелкодисперсных твердых загрязняющих примесей, кластеризованных в виде наночастиц. Моделируемый способ очистки предполагает применение системы, состоящей из нанофильтров и сорбентов. Оба указанных способа очистки являются в настоящее время весьма востребованными и часто комбинируются в соответствующих устройствах. Первый способ очистки с помощью нанофильтров позволяет получить высокое качество последней, но является дорогостоящим вследствие необходимости частой замены фильтрующих элементов (мембран). Второй способ очистки с помощью сорбентов дает относительно низкое качество очистки, однако позволяет проводить последнюю многократно после промывки сорбента специальными жидкостями. Для оптимизации устройств воздушной очистки, использующих нанофильтры и сорбенты, необходимо детальное исследование протекающих в системе очистки процессов. В предлагаемом исследовании рассматривается часть проблемы, связанная с прохождением воздушного потока, содержащего твердые наночастицы загрязнителя, через слой гранулированного сорбента. Для этого разработаны многомасштабная математическая модель, численный алгоритм и параллельная реализация модели на макроскопическом масштабе. Новизна подхода связана с использованием квазигазодинамической модели для описания течения в сорбирующем слое. Предварительные расчеты показали возможность расчета течений подобного класса.

Ключевые слова: многомасштабное суперкомпьютерное моделирование, процессы очистки газа, высокопроизводительные вычисления.

1. Введение

В настоящей работе обсуждается проблема очистки воздушной среды от загрязняющих ее твердых нанопримесей. Традиционным способом газоочистки является применение технологий принудительной вентиляции помещений с пропусканьем загрязненного воздуха через механические, электрические и другие виды фильтров [1-5]. Качество очистки определяется свойствами системы фильтров. Наиболее эффективная система газоочистки использует на финальной стадии фильтры мембранного типа, улавливающие наночастицы размером 20 нм и более (так называемые нанофильтры). Однако наночастицы меньших размеров могут либо свободно проходить через фильтр (при низкой концентрации наноразмерных наночастиц), либо очень быстро выводят из строя фильтрующую систему (при высокой концентрации наноразмерных наночастиц). В связи с этим стоит задача замены или дополнения мембранных фильтров альтернативными системами газоочистки.

Одним из путей решения проблемы в последнее время является применение специальных волокнистых или гранулированных сорбентов [1, 3-5]. Общее преимущество сорбентов перед мембранами заключается в существенно большей площади контакта с частицами загрязняющих веществ. Волокнистые сорбенты представляют собой объемные образования специального нетканого синтетического волокна. Гранулированные сорбенты представляют собой множество гранул размером от нескольких миллиметров до нескольких десятков микрон (в зависимости от назначения сорбента). Преимуществом волокнистых сорбентов является их высокая степень

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 18-51-18004-болг-а, 18-07-01292-а, 18-07-00841-а.

очистки пропускаемого через них газа (например, воздуха) или жидкости (например, воды). Недостатками этих видов сорбентов является невозможность их повторного использования. Гранулированные сорбенты обеспечивают не столь высокую степень очистки по сравнению с волокнистыми, однако их можно использовать многократно после промывки специальными жидкостями (в том числе и водой) и сушки.

В настоящей работе предлагается технология суперкомпьютерного моделирования процесса газоочистки в гранулированном сорбентном фильтре. Целью работы на первом этапе является решение прямых задач газоочистки с заданными параметрами фильтра. На последующих этапах будут рассмотрены обратные задачи, позволяющие производить оптимизацию газоочистной системы. В данной работе предлагается предварительная численная методика решения ряда прямых задач. В наших предыдущих работах уже анализировались различные аспекты компьютерного и суперкомпьютерного моделирования течений газов, потоков газовых смесей в микроканалах технических систем и др. на основе нового многомасштабного подхода [6-12], сочетающего решение макроскопических уравнений газовой динамики с уравнениями динамики Ньютона для отдельных частиц. В настоящей работе предлагается использовать разработанный инструментарий к вышеуказанному новому классу прикладных задач.

2. Математические постановки

Моделирование прохождения наночастиц загрязнителя через слой сорбента проводится на основе двух математических подходов. Первый относится к расчетам макроскопических процессов движения воздуха в пористой среде на основе моделей Пуазейля и д'Арси [13, 14]. Он требует знания кинетических коэффициентов данного процесса (коэффициенты пористости, проницаемости и диффузии), которые можно определить лишь в натуральных экспериментах. Второй подход относится к расчетам микроскопических процессов взаимодействия отдельных частиц загрязнителя (атомов, молекул или наночастиц) с поверхностью гранулы на основе методов частиц [15, 16] и Монте-Карло [17, 18]. В настоящей работе в соответствии с разработанным ранее многомасштабным подходом [6-12] выделяются три уровня детализации: макроскопический, мезоскопический и микроскопический. На макроскопическом уровне рассматривается общее течение воздушной среды и распространение в ней частиц загрязнителя в канале системы очистки, в том числе в слое сорбента. На мезоскопическом уровне рассматриваются пограничные слои на поверхности гранул и вблизи стенок канала. На микроуровне рассматриваются атомно-молекулярные взаимодействия между отдельными наночастицами и поверхностью гранул. Рассмотрение вышеуказанных процессов может проводиться на соответствующих масштабных уровнях как по отдельности, так и в комплексе.

Модель макроскопического уровня. Для описания процесса прохождения воздушной среды через систему очистки (см. Рис. 1) на макроскопическом уровне используется квазигазодинамическая (КГД) система уравнений, предложенная в [19-22]. В случае смеси газов система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [20].

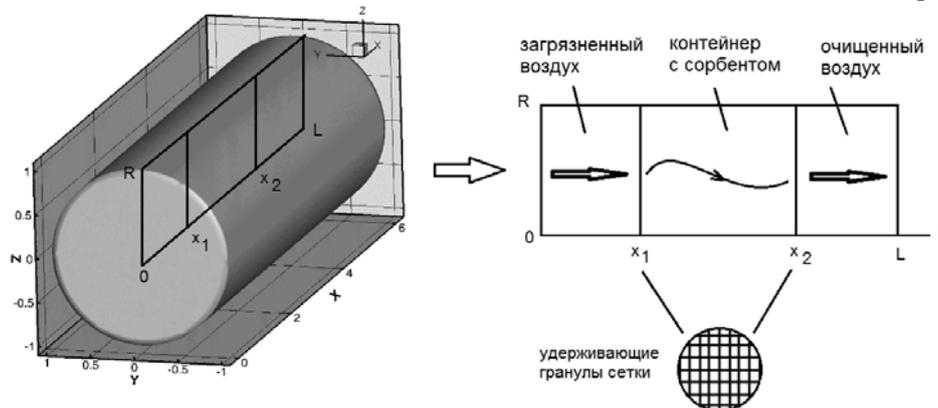


Рис. 1. Модельная геометрия очистной системы.

Запишем КГД уравнения в трехмерном случае для смеси газов в инвариантном относительно системы координат виде в размерных переменных (ниже используется система единиц СИ) вместе с уравнениями связей и состояния:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho_l u_{l,k})}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = S_{l,k}^{(\rho u)}, \quad k = x, y, z, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} E_l &= \frac{1}{2} \rho_l |\mathbf{u}_l|^2 + \rho_l \varepsilon_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \\ \gamma_l &= \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad \operatorname{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\chi_l}, \quad \operatorname{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \quad \operatorname{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \operatorname{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}, \end{aligned} \quad (4)$$

где все переменные с индексом l относятся к газу типа l , каждая компонента имеет свои числовую плотность (концентрацию) n_l , массовую плотность $\rho_l = m_l n_l$ (m_l – масса молекул газа l). Каждый газ также характеризуется своей температурой T_l и макроскопической скоростью \mathbf{u}_l . Другие параметры компонент смеси: p_l – парциальные давления газов в смеси; E_l , H_l и ε_l – плотности полной энергии, энтальпии и внутренние энергии компонент смеси; $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $D_l = D_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ – кинетические коэффициенты компонент смеси, а именно: коэффициенты динамической вязкости, теплопроводности и диффузии. Переменные $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$, $\gamma_l = \gamma_l(T_l, \rho_l)$, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$, $c_{p,l} = c_{p,l}(T_l)$ и $\mathfrak{R}_l = k_B / m_l$ – коэффициенты сжимаемости, показатели адиабат, удельные теплоемкости и индивидуальные газовые постоянные компонент смеси (k_B – постоянная Больцмана), Pr_l , Sc_l , Ma_l и Re_l – числа Прандтля, Шмидта, Маха и Рейнольдса для компонент смеси; λ_l – средние длины свободного пробега; векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками массовой плотности, соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии. Обменные члены $S_{l,k}^{(\rho u)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси. Подробно векторы потоков и обменные члены описаны, например, в [8].

Система уравнений (1)-(4) замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия берутся в соответствии с равновесным состоянием газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. Граничные условия для КГД уравнений на входе, выходе и стенках очистной системы задаются традиционным способом. На входе в систему задается течение Паузейля, на выходе из системы задаются так называемые "мягкие" граничные условия [20]. На твердых стенках канала задаются условия непротекания или скольжения. На поверхности гранул для плотности газа задаются условия непротекания, а для импульса и энергии задаются условия 3-го рода, описывающие процесс поглощения поверхностью гранулы части энергии и импульса газа.

Для описания эволюции загрязняющих газ твердых частиц с учетом возмущений электрического поля используются уравнения конвекции-диффузии, записываемые для каждого сорта загрязнений, а также уравнение Пуассона для потенциала электрического поля:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_k^{(C)} = -(\mathbf{u}, \nabla C_k) + \Phi_k, \quad \mathbf{W}_k^{(C)} = D_k^{(C)} \nabla C_k \pm q_k \mu_k^{(C)} \mathbf{F} C_k, \quad (5)$$

$$\operatorname{div}(\varepsilon \mathbf{E}) = \sum_k q_k (C_k - C_k^*), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (6)$$

Здесь C_k – концентрация k -ой компоненты загрязнителя, $\mathbf{W}_k^{(C)}$ – поток концентрации, \mathbf{u} – средняя скорость движения воздушной среды, Φ_k – плотность объемных источников k -ой компоненты загрязнителя отличная от нуля в зоне перед сорбционной камерой, $D_k^{(C)}$ – суммарный коэффициент диффузии k -ой компоненты загрязнителя в воздушной среде, q_k – суммарный поверхностный заряд наночастиц k -ой компоненты загрязнителя (может быть равным 0), $\mu_k^{(C)}$ – коэффициент подвижности наночастиц k -ой компоненты загрязнителя, $\mathbf{F} = \mathbf{E} + [\mathbf{u} \times \mathbf{B}]$ – суммарное векторное поле, действующее на заряженные наночастицы и учитывающее гидродинамические, электрические и магнитные эффекты, \mathbf{E} и φ – напряженность и потенциал электрического поля, \mathbf{B} – вектор магнитной индукции, ε – суммарная диэлектрическая проницаемость воздушной среды, зависящая от ее состава, C_k^* – равновесное (предельно допустимое) значение концентрации наночастиц k -ой компоненты загрязнителя.

При записи уравнений (5), (6) предполагалось, что очищенный воздушный поток не создает возмущений электромагнитного поля (ЭМП). Однако в присутствии специальных источников ЭМП, а также электризации наночастиц загрязнителей такие возмущения возникают и могут либо усилить, либо ослабить эффект адсорбции наночастиц на поверхности гранул.

Уравнения (5), (6) замыкаются начальными и граничными условиями. В начальный момент времени система очистки предполагается свободной от загрязнения, то есть поля концентраций C_k соответствуют их предельно допустимым равновесным значениям C_k^* . Граничные условия для концентраций ставятся в потоковой форме. На стенках канала реализуется условие непроницаемости, на поверхности гранул – условие лимитированного поглощения:

$$\left(\mathbf{W}_k^{(C)}, \mathbf{n} \right) = -A_k (C_k - C_k^*) (C_k^{**} - C_k). \quad (7)$$

Здесь \mathbf{n} – внешняя нормаль к поверхности гранулы (или пограничного слоя, окружающего гранулу), C_k^{**} – максимальная концентрация k -го компонента загрязнителя, удерживаемая элементом поверхности гранулы сорбента, A_k – интенсивность захвата наночастиц k -го компонента загрязнителя поверхностью гранулы сорбента (может зависеть от общего числа вакансий на поверхности гранулы, свободных от всех наночастиц всех сортов загрязнителя).

Все кинетические коэффициенты и параметры уравнений состояния, входящие в уравнения и условия (1)-(7), задаются на основе усреднений результатов расчетов, выполненных на микроуровне (см., например, [23]).

Модель мезоскопического уровня относится к моделям метода крупных частиц. В этом случае речь идет о движениях и эволюции систем наночастиц загрязнителя вблизи поверхности гранул сорбента и стенок канала. При этом учитываются взаимодействия наночастиц разных сортов между собой и с поверхностью гранул и стенок. На рис. 2 показана возможная расчетная геометрия мезоскопического уровня.

Необходимая система уравнений формируется на основе уравнений механики Ньютона [15, 16]. Потенциалы взаимодействия наночастиц между собой и поверхностями стенок канала и гранул формируются на основе расчетов, выполненных по моделям микроскопического уровня. Взаимодействием наночастиц загрязнителей с газовой смесью в выделенных пограничных зонах можно в первом приближении пренебречь. Начальные и граничные условия формируются на основе конкретных физических условий либо определяются граничными потоками массы, импульса и энергии, рассчитанными в рамках макромоделли.

Модель микроскопического уровня. На микроскопическом уровне используется модель молекулярной динамики (см. например [23, 24]). В ее рамках отдельно рассматриваются равновесные свойства компонент газовой смеси, свойства металлических стенок, а также свойства гранул. Также на атомно-молекулярном уровне рассматриваются конкретные процессы взаи-

модействия наночастиц загрязнителей между собой и поверхностями стенок и гранул сорбента с целью анализа механизмов притягивания, отталкивания, слипания и разъединения. Выбор потенциалов взаимодействия атомов и молекул учитывает влияние внутреннего и внешнего электромагнитных полей и уточняется сравнением свойств компьютерных моделей и реальных материалов на основе данных натуральных экспериментов.

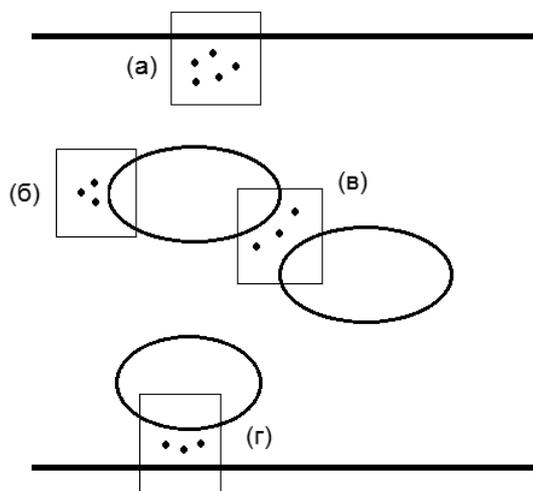


Рис. 2. Модельная геометрия мезоскопического уровня. Взаимодействия рассматриваются отдельно для зон контакта наночастиц со стенкой канала (а), с поверхностью гранулы (б), в межгранульном пространстве (в) и в пространстве между гранулой и стенкой (г).

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы частиц при заданных температуре, давлении и среднем импульсе. Граничные условия на молекулярном уровне зависят от моделируемой ситуации. Для определения общих свойств среды достаточно рассмотреть выделенный трехмерный ее объем с периодическими граничными условиями по всем координатам. При исследовании микросистем реальной геометрии, таких как микроканал, одно или несколько направлений имеют конечный размер, и сохранение формы объекта достигается подбором потенциала либо фиксацией системы.

Объединение моделей. В случае комплексного расчета объединение моделей трех вышеуказанных уровней производится на основе схемы расщепления по физическим процессам [25]. На каждом шаге по времени сеточными методами решаются сначала уравнения (1)-(6). Затем в граничных зонах вблизи гранул сорбента и стенок канала решаются методом крупных частиц соответствующие уравнения динамики Ньютона, учитывающие перемещения наночастиц загрязнителя и их взаимодействия между собой и поверхностями канала и гранул. Далее на поверхностях канала и гранул рассматриваются атомно-молекулярные процессы, рассчитываемые методом молекулярной динамики. Завершает расчетную процедуру коррекция границ канала и гранул (при налипании наночастиц происходит деформация твердых поверхностей), коррекция граничных элементов сетки (соответствующая коррекции границ), а также коррекция макроскопических параметров двухфазной воздушной среды в пограничных слоях.

3. Численный алгоритм и параллельная реализация для решения задачи на макроуровне

Численный алгоритм. Система уравнений (1)-(6) решалась на основе явного по времени сеточного численного алгоритма, имеющего в своей основе метод контрольных объемов на сетках произвольного вида [26]. Для дискретизации расчетной области использовались гибридные блочные сетки, состоявшие из ячеек различной формы и размера. В частности, в двумерном случае использовались как четырехугольные, так и треугольные ячейки. В

трехмерном случае в качестве ячеек использовались параллелепипеды, тетраэдры, а также призмы с треугольным основанием (см. Рис. 3). В качестве пространственных контрольных объемов использовались сами ячейки. Такой выбор был связан с необходимостью будущей интеграции разработанных численных схем на макроуровне с методами частиц в ячейках [27]. Первичные грубые сетки в двумерном случае и треугольные сетки на поверхности гранул строились по оригинальному алгоритму на основе критерия Делоне [28]. Первичные декартовы и призматические сетки также строились с помощью собственных алгоритмов. Первичные тетраэдральные сетки строились в пакете ANSYS CFX [29].

При решении КГД системы все параметры компонента газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относились к центрам масс ячеек. Поточные переменные относились к центрам граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов КГД уравнений выполнялись по стандартным методикам [28, 30]. Вычислительная схема по времени была явной и двухэтапной (предиктор-корректор). Для повышения устойчивости схемы применялся метод адаптивной искусственной вязкости [30].

При решении уравнений (5) использовались оригинальные экспоненциальные схемы на неструктурированных сетках [31]. При решении уравнения (6) использовались стандартные аппроксимации и итерационные методы на основе схемы сопряженных градиентов.

Параллельная программная реализация базового численного алгоритма была выполнена в двух вариантах. Первый вариант использует только центральные (CPU) и/или векторные (VPU) процессоры. В этом варианте используются стандарты параллельного программирования MPI и OpenMP. Второй вариант позволяет использовать графические ускорители (GPU). В этом варианте используются стандарты параллельного программирования MPI, OpenMP и CUDA. Конкретные детали реализации приведены например, в [10].

Центральной проблемой при распараллеливании была реализация иерархического разбиения расчетной сетки по вычислителям (узлам вычислительной системы, отдельным вычислительным устройствам узлов и ядрам этих устройств). Ввиду отсутствия в используемых сетках сильной анизотропии ячеек был использован относительно несложный геометрический принцип, когда вся сетка вписывалась в окаймляющий цилиндр, который разбивался сначала по продольной оси на примерно одинаковые по толщине "блины" (см. рис. 3). В зоне расположения гранул эти блины дополнительно разбивались по толщине в 2, 4 и т.д. раз. Дополнительно цилиндр разбивался по азимутальному углу равномерным способом. В итоге, нами использовалось двумерное разбиение по вычислителям.

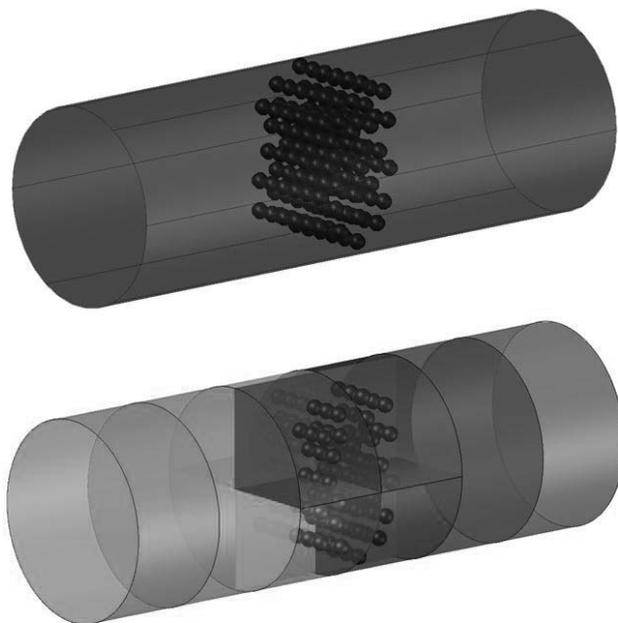


Рис. 3. Трехмерная расчетная области (вверху) и ее разбиение (внизу) по вычислителям.

Исследование эффективности разработанной параллельной реализации проводилось на трех суперкомпьютерах (далее – СК) с центральными (CPU), векторными (VPU) и

графическими (GPU) процессорами (далее – ВУ – вычислительными устройствами), характеристики которых приведены в Табл. 1. Результаты тестирования были получены на примере расчета эволюции загрязнения вокруг гранулы цилиндрической формы на тетраэдральной сетке с количеством элементов 12757337 (см. п. 4). Для этого решалось только уравнение (5) при заданном заранее рассчитанном стационарном потоке воздуха. Значения времени расчета 100 шагов по явной схеме приведены в Табл. 2.

Таблица 1
 Параметры использованных в расчетах суперкомпьютерных систем

Название СК	Кол-во узлов	Тип интерконнекта	Тип процессоров	Производительность, ТФлопс	Кол-во ВУ на узле	Кол-во потоков на ВУ	Величина ОЗУ на узле, Гб
K60-CPU	78	InfiniBand FDR, 56 Gbit/s	Intel Xeon E5-2690 v4, 2.6 GHz	74,2	2	28	256
K60-GPU	8	InfiniBand FDR, 56 Gbit/s	NVidia Tesla V100-PCIe, 1.75 GHz	240	4	5120	128
K48-VPU	16	OmniPath, 100 Gbit/s	Intel Xeon Phi KNL 7250F, 1.4 GHz	48	1	272	112

Таблица 2
 Времена (сек.) расчета 100 шагов по явной схеме при решении трехмерного уравнения (5)

СК / Кол-во ВУ	1 ^{*)}	2	4	8	16	32	Ускорение при кол-ве ВУ 32	Эффективность при кол-ве ВУ 32, %
K60-CPU	26.407	14.274	7.633	4.438	2.756	1.914	13.797	43.115
K60-GPU	8.832	5.076	2.751	1.670	1.316	0.972	9.144	28.576
K48-VPU	68.964	35.733	18.612	10.134	5.442	2.964**	23.267	72.710

*) Для достижения минимального времени решения задачи на ВУ подбиралось оптимальное число параллельных потоков (блоков). Для процессоров на K60-CPU оптимальное число параллельных потоков составило 28, для процессоров на K48-VPU – 64. На K60-GPU оптимальной была линейная структура памяти с количеством блоков 160 и количеством параллельных нитей в блоке 512.

**) Хотя количество ВУ на K48-VPU равно 16, однако в связи с тем, что при использовании 64 потоков на каждом из них имеется возможность увеличить максимальную конфигурацию до 64 виртуальных ВУ.

Анализ приведенных данных показывает, что при выбранных стратегии распараллеливания и алгоритме статической балансировки загрузки вычислителей на стартовой конфигурации (1 ВУ, то есть либо 1 CPU, либо 1 VPU, либо 1 GPU) выигрывает СК с GPU. Однако на максимальной конфигурации (32 ВУ) его почти догоняет СК с CPU. Такая ситуация объясняется тем, что обмен данными между GPU происходит по длинной цепочке: память GPU 1 – шина PCI-Express 1 – память CPU 1 – шина PCI-Express 1 – адаптер InfiniBand 1 – коммутатор InfiniBand – адаптер InfiniBand 2 – шина PCI-Express 2 – память CPU 2 – шина PCI-Express 2 – память GPU 2. Данная ситуация существенно улучшается, если вместо GPU NVidia Tesla V100-PCIe использовать модель NVidia Tesla V100-NVlink и сеть InfiniBand EDR.

Анализ Табл. 2 также показывает, что на выбранном классе задач СК с VPU оказывается медленнее по сравнению со своими конкурентами, однако в целом на максимальной конфигурации он приближается по временам расчета к СК с CPU и реализует более высокую эффективность распараллеливания. Данный результат обусловлен как более низкими частотами и вычислительной мощностью ядер VPU, так и более быстрой сетью OmniPath. При сравнении

расчетов на CPU и GPU легко видеть, что достижение преимущества последних лежит на пути оптимизации процесса передачи данных между отдельными устройствами.

В целом можно сделать вывод, что разработанные программы параллельного расчета взаимодействия частиц загрязнителя со слоем сорбента оказались работоспособными, но имеют определенный запас для оптимизации. В частности, можно отметить, что довольно низкая эффективность распараллеливания связана как с небольшим размером выбранной трехмерной сетки, так и с неточным стартовым разбиением сетки по вычислительным устройствам.

4. Результаты предварительных расчетов

Рассмотрим результаты предварительных расчетов, выполненных в двумерном и трехмерном вариантах. Для упрощения анализа был исследован процесс прохождения воздушной смеси, содержащей однокомпонентный загрязнитель (например, мелкодисперсную угольную пыль) через слой гранулированного пористого сорбента (например, силикогеля). Электромагнитные эффекты не учитывались. Расчеты проводились на фиксированном интервале времени t_{\max} , величина которого определялась из соотношения количества частиц загрязнителя N_C , вошедших в систему очистки за это время, и максимального количества частиц N_G , которые могут задержаться на поверхности гранул сорбента:

$$N_C = C_0 \cdot \frac{dV_C}{dt} \cdot t_{\max} = N_G = C^* V_G \Rightarrow t_{\max} = (C^* V_G) \left(C_0 \cdot \frac{dV_C}{dt} \right)^{-1}. \quad (8)$$

Здесь C_0 – характерная концентрация загрязнителя в потоке, $\frac{dV_C}{dt}$ – скорость изменения объема загрязненного воздуха (пропорциональна средней продольной скорости воздушного потока на входе в систему очистки $\langle u_{x,in} \rangle = \int_S u_x(0, x, z) dy dz$), $V_G = S_G h_G$ – максимальный объем загрязнения, который могут удержать гранулы сорбента (S_G – суммарная площадь гранул, h_G – максимальная толщина слоя загрязнения на гранулах).

В расчетах предполагалось, что наночастицы угольного нанопорошка задерживались на гранулах лишь за счет захвата в микропорах вследствие эффекта адсорбции. В первом приближении этот процесс может быть воспроизведен с помощью граничного условия (7).

В качестве модельного примера в двумерном случае была рассмотрена расчетная область размером 0.04 м х 0.02 м (см. Рис. 4), для которой было рассчитано сначала стационарное течение воздуха при нормальных условиях: $T = 273.15 \text{ K}$, $p = 101325 \text{ Pa}$, $\rho = 1.25 \text{ кг/м}^3$, $\mu = 1.7894 \cdot 10^{-5} \text{ кг/(м} \cdot \text{с)}$, и скорости входного потока $u_x = 0.143152 \text{ м/с}$, что соответствует значению числа Рейнольдса $Re = 100$. В качестве гранул были рассмотрены круги (с радиусом 0.001 м в количестве 40) и овалы эллиптической формы (с главными осями 0.002 м и 0.001 м в количестве 21). Обе конфигурации были выбраны таким образом, чтобы гранулы перекрывали канал целиком, слой сорбента был примерно одинаковой толщины, площади, занимаемые гранулами примерно совпадали ($S_{C\phi} = 1.2566 \text{ см}^2$, $S_{\text{эл}} = 1.3195 \text{ см}^2$).

На рассчитанном стационарном поле скоростей были проведены расчеты эволюции безразмерного поля концентрации загрязнения ($\bar{C} = C / C_0$). Для этого в начальный момент времени поле концентрации было задано тождественно равным нулю (т. е. $\bar{C}^* = C^* / C_0 = 0$). На правой границе области было задано граничное условие, соответствующее постоянному притоку загрязнения: $\bar{C} = 1$. Значения безразмерных параметров в граничном условии (7) были: $\bar{A} = 0.1$, $\bar{C}^* = 190$. Приведенный коэффициент диффузии был равен $\bar{D} = 0.00001$.

Расчеты проводились на суперкомпьютере K60-CPU на криволинейных прямоугольных сетках соответственно с количеством ячеек 68996 и 68085. Результаты расчета квазистационар-

ных распределений концентрации приведены на Рис. 5. Они показывают, что за достаточно длительное время формируется некоторое характерное поле концентрации загрязнителя, в котором последний почти целиком адсорбируется на поверхности гранул. В итоге наблюдается эффект очистки воздушной среды (область справа).

Показанная на Рис. 4 картина будет сохраняться некоторое фиксированное время, пока не произойдет насыщение поверхности гранул частицами загрязнителя. Далее возможны два сценария развития событий. В первом сценарии межгранульные пространства также начнут заполняться загрязнителем, вследствие чего сильно уменьшится скорость прохождения воздушного потока через сорбент. Во втором сценарии при больших числах Рейнольдса фильтр перестанет задерживать наночастицы загрязнителя. В обоих случаях это означает, что сорбент пора регенерировать. Если сравнивать поля концентраций, полученные для различной формы гранул, можно отметить, что круглые гранулы в целом дают лучший результат очистки по сравнению с овальными, однако из-за более плотной упаковки и меньшей длины поверхности фильтр с круглыми гранулами будет очищать воздушную среду менее продолжительное время.

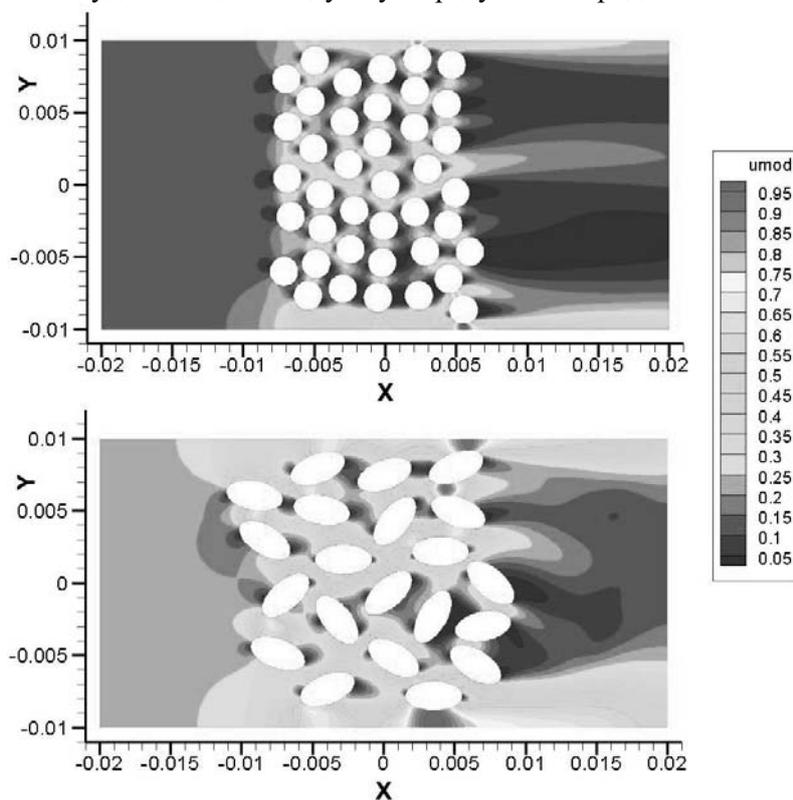


Рис. 4. Распределения модуля скорости в случае использования гранул сорбента круглой (вверху) и овальной (внизу) формы.

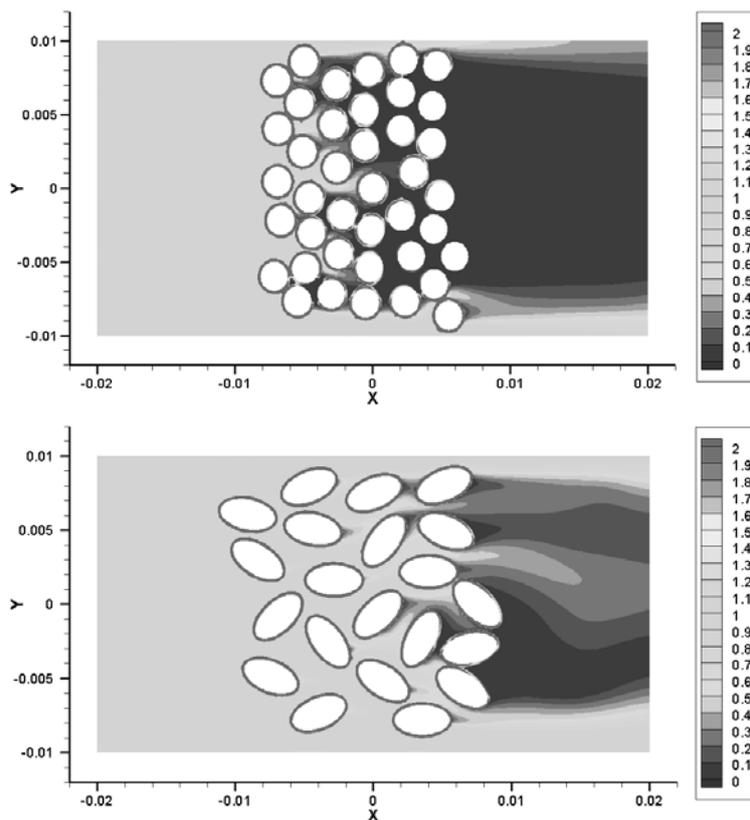


Рис. 5. Квазистационарные распределения концентрации примеси в случае использования гранул сорбента круглой (вверху) и овальной (внизу) формы.

Аналогичные трехмерные расчеты проводились на K60-CPU, K60-GPU и K48-VPU для трех форм гранул: шарообразной, овальной и цилиндрической. В предварительных расчетах были получены течения вблизи уединенной гранулы (Рис. 6) и вблизи небольшого множества (Рис. 7). Расчеты проводились на полностью тетраэдральных сетках с количеством элементов соответственно 12745929, 12781612, 12757337, 830852, 624014. Полученные результаты хорошо согласуются с данными, рассчитанными в пакете ANSYS CFX [48]. Распределения концентрации загрязнителя планируется рассчитать на реальных геометриях аналогичных использованным в двумерном случае.

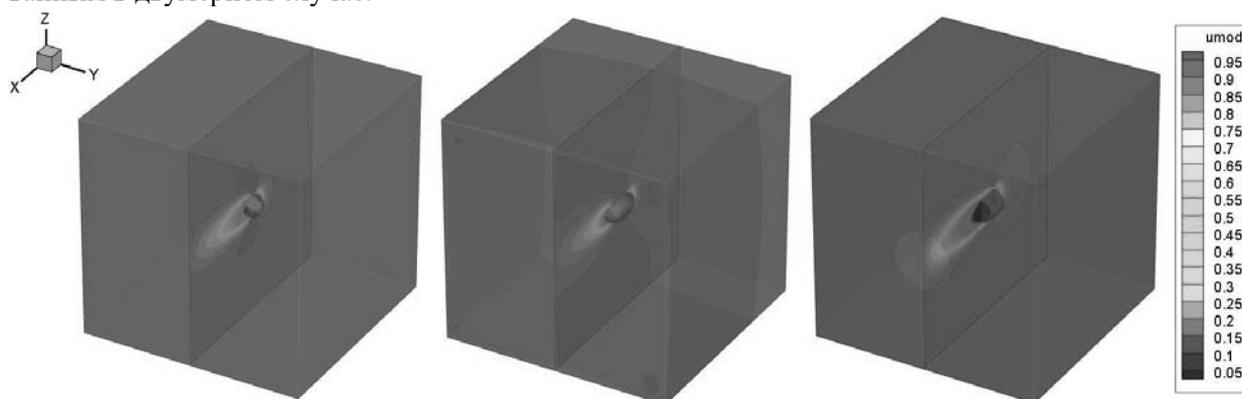


Рис. 6. Стационарные распределения модуля скорости вблизи гранул различной формы.

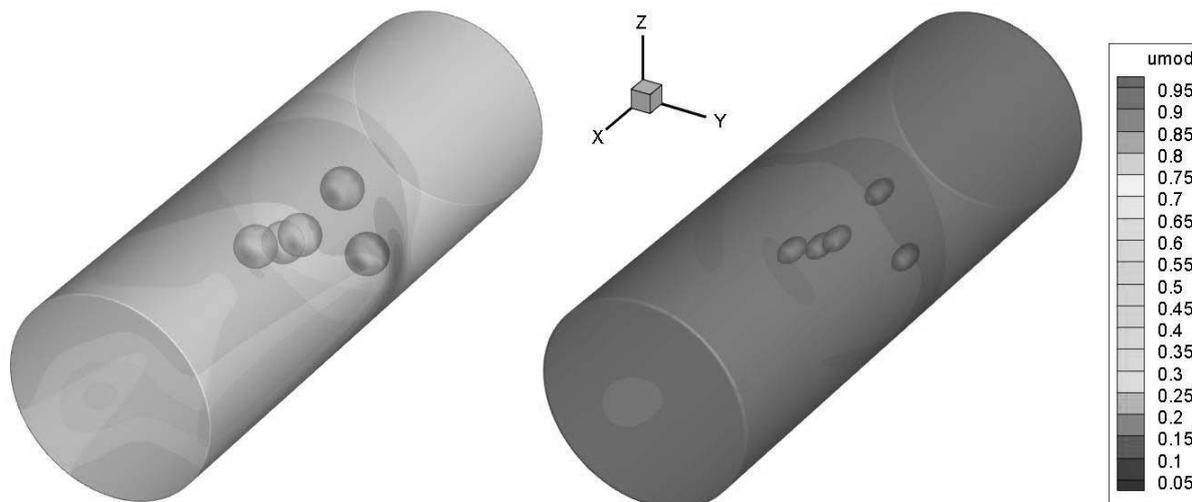


Рис. 7. Стационарные распределения модуля скорости вблизи множества гранул сферической (слева) и овальной (справа) формы.

5. Заключение

Представлена технология суперкомпьютерного моделирования процессов очистки воздушной среды от мелкодисперсных твердых загрязняющих нанопримесей. Моделируемый способ очистки базируется на применении гранулированных сорбентов. Рассмотрена проблема расчета процессов очистки воздушного потока от твердых наночастиц в сорбирующем слое гранул. Предложены основные компоненты многомасштабной математической модели, численный алгоритм и параллельная реализация макроскопического уровня детализации. Новизна подхода связана с использованием квазигазодинамической модели в рамках многомасштабного подхода. Предварительные расчеты подтвердили работоспособность предложенной технологии.

Литература

1. Штокман Е.А. Очистка воздуха. - М.: Асв, 2007. 313 с.
2. Гладышев Н.Ф., Т.В. Гладышева, С.И. Дворецкий. Системы и средства регенерации и очистки воздуха обитаемых герметичных объектов. - М.: Издательский дом <Спектр>, 2016. 204 с.
3. Солдатов В.С., Шункевич А.А., Марцинкевич В.В. Сравнительные исследования процесса умягчения воды гранульными и волокнистыми ионитами // Журнал прикладной химии. 2001. Т. 74, Вып. 9. С. 1477-1480.
4. Захарченко Е.А., Моходоева О.Б., Мясоедова Г.В. Использование волокнистых "наполненных" сорбентов для динамического концентрирования благородных металлов// Сорбционные и хроматографические процессы. 2005. Т.5. Вып.5. С. 679-689.
5. Комарова И.В., Галкина Н.К., Шептовецкая К.И. Исследования волокнистого сорбента, наполненного катионитом КУ-2, с использованием математических моделей процесса умягчения воды // Сорбционные и хроматографические процессы. 2010. Т. 10. Вып. 3. С. 371-377.
6. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 65–74.
7. Kudryashova T., Karamzin Yu., Podryga V., Polyakov S. Two-Scale Computation of N₂-H₂ Jet Flow Based on QGD and MMD on Heterogeneous Multi-Core Hardware. // Advances in Engineering Software, 2018, V. 120, pp. 79-87.
8. Podryga V.O., Karamzin Yu.N., Kudryashova T.A., Polyakov S.V. Multiscale Simulation of Three-Dimensional Unsteady Gas Flows in Microchannels of Technical Systems // Proc. of the

- Seventh European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2016), June 2016. Vol. 2. P. 2331–2345.
9. Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // Доклады Академии Наук. 2016. Т. 469, № 6. С. 656–658.
 10. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. Т. 17, Вып. 2. С. 147–165.
 11. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум. М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. № 81. 52 с.
 12. Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. HPC-simulation of gasdynamic flows on macroscopic and molecular levels // In: Nonlinearity. Problems, Solutions and Applications, L.A. Uvarova, A.V. Nadykto, A.V. Latyshev (Eds). New York: Nova Science Publishers, 2017. Vol. I, Chap. 26, P. 543–556.
 13. Хейфец Л.И., Неймарк А.В. Многофазные процессы в пористых средах. М.: Химия.1982. 320 с.
 14. Москалев П.В., Шитов В.В. Математическое моделирование пористых систем. Физматлит. 2007. 120 с.
 15. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
 16. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 564 p.
 17. Fishman, George S. Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications. Springer, 1996. 722 p.
 18. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа. М.: Азбука, 2008. 330 с.
 19. Chetverushkin V.N. Kinetic Schemes and Quasi-Gasdynamic System of Equations. Barcelona: CIMNE, 2008. 298 p.
 20. Elizarova T.G. Quasi-Gas Dynamic Equations. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2009. 286 p.
 21. Шеретов Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2009. 400 с.
 22. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады Академии Наук. 2014. Т. 459, № 4. С. 395-399.
 23. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование. 2015. Т. 16, № 1. С. 123–138.
 24. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе. М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. № 80. 26 с.
 25. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988. 263 с.
 26. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method // In: Handbook of Numerical Analysis (eds. P.G. Ciarlet, J.L. Lions). Amsterdam: North Holland Publishing Company, 2000. Vol. VII. P. 713–1020.
 27. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц в ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. 360 с.
 28. Попов И.В., Поляков С.В. Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей. // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 6. С. 25-35.
 29. Вычислительная гидродинамика в ANSYS CFX. URL: <https://www.cadfecis.ru/products/ansys/fluids/cfx/>
 30. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. М.: КРАСАНД, 2015. 288 с.
 31. Карамзин Ю.Н., Поляков С.В. Экспоненциальные конечно-объемные схемы для решения эллиптических и параболических уравнений общего вида на нерегулярных сетках / Сеточные методы для краевых задач и приложения, Материалы Восьмой Всероссийской конференции. Казань: Изд-во Казанского гос. университета, 2010. С. 234-248.