

## Построение трехмерной модели движения агрегирующих частиц

**Р. Р. Загидуллин**

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,  
факультет вычислительной математики и кибернетики, Москва, Российская Федерация  
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Российская Федерация  
ORCID: 0000-0002-4124-3485, e-mail: [zagidullinrishat@gmail.com](mailto:zagidullinrishat@gmail.com)

**Аннотация:** Рассматриваются технические аспекты, связанные с моделированием процессов агрегации в неоднородной среде в условиях неустоявшихся скоростей. Для учета агрегации в модель добавлены операторы Смолуховского. Пространственная неоднородность моделируется операторами переноса и диффузии. Поле скоростей получено с помощью фреймворка для моделирования гидродинамических систем OpenFOAM.

**Ключевые слова:** агрегация, пространственная неоднородность, OpenFOAM.

**Благодарности:** Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (грант № 21–11–00363).

**Для цитирования:** Загидуллин Р.Р. Построение трехмерной модели движения агрегирующих частиц // Вычислительные методы и программирование. 2023. 24, № 4. 430–439. doi 10.26089/NumMet.v24r429.

## Construction of a three-dimensional model of the convection of aggregating particles

**Rishat R. Zagidullin**

Lomonosov Moscow State University,  
Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, Moscow, Russia  
Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia  
ORCID: 0000-0002-4124-3485, e-mail: [zagidullinrishat@gmail.com](mailto:zagidullinrishat@gmail.com)

**Abstract:** This paper discusses technical aspects related to modeling aggregation processes in a heterogeneous medium with unsteady velocities. Smoluchowski operators are added to the model to account for aggregation. Spatial heterogeneity is modeled by advection and diffusion operators. The velocity field was obtained using OpenFOAM — the framework for modeling hydrodynamic systems.

**Keywords:** aggregation, spatial heterogeneity, OpenFOAM.

**Acknowledgements:** The work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 21–11–00363).

**For citation:** R. R. Zagidullin, “Construction of a three-dimensional model of the convection of aggregating particles,” Numerical Methods and Programming. 24 (4), 430–439 (2023). doi 10.26089/NumMet.v24r429.



**1. Введение.** Математическое моделирование коагуляции в дисперсной среде является актуальным направлением исследования кинетики агрегации — совокупности сложных для экспериментального изучения физико-химических процессов, имеющих важное значение в практических задачах биологии, медицины, экологии и других областях науки и техники. Актуальность математического моделирования коагуляции в неоднородной среде обусловлена, в частности, следующими причинами: во-первых, детальное рассмотрение неоднородностей среды в реальных задачах настолько усложняет модель, что получение аналитического решения становится невозможным [1]; во-вторых, даже при отсутствии пространственных неоднородностей в среде математическое моделирование процессов многокомпонентной коагуляции [2] или трехчастичных столкновений [3] оказывается исключительно сложной задачей; в-третьих, математическое моделирование дает возможность детально изучить физические процессы агрегации в неоднородной среде, что позволит в дальнейшем строить более полные модели [4–6].

Применение математического моделирования позволяет комплексно исследовать ряд прикладных задач в области кинетики агрегации. Например, в работе [7] выполнено исследование динамики аэрозольей в атмосфере и определение конфигурации аэрозоля на больших пространствах с помощью уравнения диффузии–коагуляции; авторы сравнивают результаты математического моделирования с экспериментальными данными о распределении аэрозольей над г. Братск (Россия). Примеры изучения природных систем с точки зрения процессов агрегации и дробления хаотически движущихся частиц содержатся в [8, 9]. Такие важные в повседневной жизни агрегационные процессы, как коагуляция в коллоидных растворах (самый известный из примеров — коагуляция в молоке), слипание эритроцитов или свертывание крови, рассмотрены в работах [10–12]. Многие исследования по мониторингу окружающей среды свидетельствуют о вредном влиянии на здоровье человека частиц малого диаметра PM 2.5 и PM 10<sup>1</sup> [13, 14]. Такие частицы могут образовываться в результате слипания более мелких коагулянтов [8, 9]. Факт влияния загрязнения воздуха твердыми частицами на здоровье населения придает большое значение способности прогнозировать динамику концентрации твердых частиц в атмосфере. Отметим также обзор [15] по данной теме с обширной библиографией.

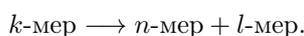
Для описания процессов агрегации пользуются уравнениями, основанными на уравнении Смолуховского, к которому добавлены операторы переноса и диффузии. Поле скоростей рассматривается в общем случае как нестационарное. Для подбора параметров необходимо определиться с моделируемой системой и постановкой задачи. Мы рассмотрим турбулентные течения влаги, тепла, загрязнений в приземных атмосферных слоях, которые в целом принято называть “планетарный пограничный слой” [16]. Во многом турбулентность течений определяется характеристикой шероховатости поверхности Земли и распространяется до высоты 1–3 км. Эта предметная область является хорошо изученной: представлены постановки задач [17], подобраны оптимальные методы [18], а также результаты расчетов соотнесены с полевыми измерениями [19].

В статье обсуждаются технические аспекты, связанные с моделированием пространственно-неоднородной агрегирующей системы в условиях турбулентных течений, а также представлен программный пакет, в котором реализованы различные разностные схемы и способы визуализации полученных расчетов. Данную работу следует рассматривать как методическую, цель которой — подготовить программный инструментарий для вычислительных экспериментов в будущих исследованиях кинетики агрегации в неоднородной среде.

**2. Описание модели.** Представим, что в атмосферу Земли выбрасываются раскаленные газы из жерла вулкана. Вулкан, в терминах модели, является *локализованным источником* взвеси сажи, а частицы сажи — *агрегирующими частицами*. Минимальные по размеру агрегирующие частицы называются *мономерами* или *1-мерами*, агрегаты, составленные из  $k$  мономеров, — *кластерами* или  *$k$ -мерами*. В планетарном пограничном слое происходят реакции слияния  $k$ -меров в кластеры, состоящие из большого числа мономеров



и распада кластеров



<sup>1</sup>PM (аббревиатура от англ. Particular Matter) — смесь мелких твердых частиц пыли, золы, сажи, дыма, а также соединений минерального или органического происхождения. Частицы PM 2.5 имеют характерный размер от 0.001 до 2.5 мкм, PM 10 — от 2.5 до 10 мкм.

Уравнение движения агрегирующих частиц в атмосфере от локализованного источника имеет вид:

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} + \mathbf{V}_k \cdot \nabla c_k = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j} c_j + D_k \Delta c_k + J \exp \left[ -(x - x_s)^2 / \sigma_x^2 - (y - y_s)^2 / \sigma_y^2 \right] \delta(k - 1) \delta(z - z_s). \quad (1)$$

Здесь  $c_k(t)$  — плотности кластеров, состоящих из  $k$  мономеров,  $\mathbf{V}_k \cdot \nabla c_k$  — выражение, описывающее перенос в поле скоростей  $\mathbf{V}_k$  агрегатов размера  $k$ ,  $K_{i,j}$  — матрица с коэффициентами, характеризующими скорости реакции слияния  $i$ -мер +  $j$ -мер  $\rightarrow (i+j)$ -мер,  $K_{k,j}$  — матрица с коэффициентами, характеризующими скорости реакции распада  $k$ -мер  $\rightarrow (k-j)$ -мер +  $j$ -мер. Первая сумма в правой части уравнения (1) описывает увеличение концентрации кластеров размера  $k$  за счет слияния, вторая сумма — распад кластеров. Выражение  $D_k \Delta c_k$ , входящее в (1), является оператором диффузии с коэффициентами  $D_k$  для кластеров размера  $k$ . Выражение  $J \exp \left[ -(x - x_s)^2 / \sigma_x^2 - (y - y_s)^2 / \sigma_y^2 \right] \delta(k - 1) \delta(z - z_s)$  в (1) моделирует источник мономеров с гауссовским распределением интенсивности  $J$  в горизонтальной плоскости с координатами центра  $x_s, y_s$  и дисперсиями  $\sigma_x^2, \sigma_y^2$ . Пространственное положение источника  $(x_s, y_s, z_s)$  задается в системе координат, в которой оси  $x$  и  $y$  имеют горизонтальную ориентацию, а ось  $z$  — вертикальную. Дельта-функции Дирака  $\delta(k - 1)$  и  $\delta(z - z_s)$  выполняют роль фильтров по переменным  $k$  и  $z$ , тем самым моделируя источник мономеров ( $k = 1$ ), лежащий в плоскости  $z = z_s$ . В дальнейшем будем полагать  $z_s = 0$ .

Сформулируем задачу о движении агрегирующих частиц в атмосфере от источника мономеров. Для этого ограничим расчетную область, заменим дельта-функции на граничные условия [20] и введем начальные условия:

$$\begin{aligned} x \in [X_{\min}, X_{\max}], \quad y \in [Y_{\min}, Y_{\max}], \quad z \in [0, Z_{\max}], \quad k \in \{1, 2, \dots, 32\}, \\ \frac{\partial c_k(t, x, y, z = 0)}{\partial z} = \begin{cases} -\frac{J}{2} \exp \left[ -(x - x_s)^2 / \sigma_x^2 - (y - y_s)^2 / \sigma_y^2 \right], & k = 1, \\ 0, & k > 1, \end{cases} \\ \frac{\partial c_k(t, x, y, z = Z_{\max})}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial c_k(t, x, y = Y_{\min/\max}, z)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial c_k(t, x = X_{\min/\max}, y, z)}{\partial x} = 0, \\ c_k(t = 0, x, y, z) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Далее будут приведены результаты для расчетов со следующими наборами параметров:

$$\begin{aligned} x_s = 0; \quad y_s = 0; \quad \sigma_x = 0.2; \quad \sigma_y = 0.2; \quad Z_{\max} = 3; \\ X_{\min} = -1; \quad X_{\max} = 5; \quad Y_{\min} = -1; \quad Y_{\max} = 1. \end{aligned}$$

Рассмотрим, как можно учесть влияние других факторов в математической модели (2).

Применение пространственно-неоднородного уравнения Смолуховского для моделирования движения агрегирующих частиц с источником мономеров, а также вывод аналитического решения для квазитрехмерного случая представлены в статье [20]. В данной работе мы предполагаем нестационарность поля скоростей, которая может быть вызвана, например, потоками ветра. Для моделирования турбулентных течений существует множество разработанных методов, включая метод Large Eddy Simulation (LES), который будет использоваться в данной работе. Его преимущество заключается в том, что данный метод способен моделировать турбулентные течения, при этом за счет удаления из расчетов высоких пространственных частот он не нуждается в слишком подробной дискретизации расчетной области. В статье [21] можно найти использование метода LES для моделирования образования сажи в газовых турбинах. Чтобы получить подобное поле скоростей, мы используем метод LES из пакета OpenFOAM [22]. Нам требуется определить параметры турбулентности: турбулентную кинетическую энергию, турбулентную кинетическую скорость диссипации и масштабы флуктуаций. Кроме того, необходимы специальные граничные



условия для моделирования источника ветра. В OpenFOAM это достижимо с использованием конфигурации атмосферных пограничных слоев (ABL).

Для того чтобы учесть влияние земного тяготения на агрегирующие частицы, нужно скорректировать вертикальную компоненту скорости переноса:

$$V_z = V_z^{\text{foam}} + V_z^{\text{grav}}, \quad V_z^{\text{grav}} = \frac{2g}{9\eta_e} (\rho_e - \rho_p) \varphi_p^{-\frac{2}{3}} r_0^2 k^{\frac{2}{3}}, \quad (3)$$

где  $V_z^{\text{foam}}$  — вертикальная компонента скорости из OpenFOAM,  $V_z^{\text{grav}}$  — вертикальная компонента скорости из-за силы тяжести,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\eta_e$  — коэффициент динамической вязкости среды,  $\varphi_p$  — объемная доля частиц,  $\rho_p$  — плотность частиц,  $\rho_e$  — плотность среды,  $r_0$  — радиус мономера агрегирующего вещества,  $k$  — количество мономеров в кластере.

Вертикальную компоненту вектора скорости можно получить из уравнений динамики. На частицы вещества в вертикальном направлении действуют архимедова сила, сила вязкого трения и сила тяжести. Будем считать, что любые кластеры агрегирующего вещества имеют форму шара. Тогда:

$$\begin{aligned} F_a &= \rho_e g \cdot \frac{4}{3} \pi R_k^3, \\ F_s &= 6\pi\eta_e R_k V_z^{\text{grav}}, \\ F_g &= Mg = \rho_p \cdot \frac{4}{3} \pi R_k^3 g, \\ R_k &= \varphi_p^{-\frac{1}{3}} r_0 k^{\frac{1}{3}}, \end{aligned}$$

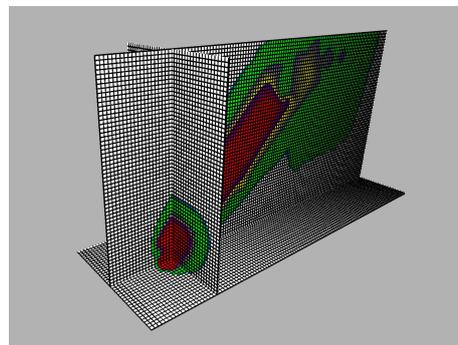
где  $F_a$  — архимедова сила (направлена вверх),  $F_s$  — сила трения (может быть направлена как вверх, так и вниз),  $F_g$  — сила тяжести (направлена вниз),  $R_k$  — радиус  $k$ -мера. Если предположить, что частицы не ускоряются (силы  $F_a$ ,  $F_s$  и  $F_g$  скомпенсированы), то можно получить выражение (3) для  $V_z^{\text{grav}}$ .

Допустим, что частицы разных размеров диффундируют и сталкиваются с одинаковой интенсивностью, тогда коэффициенты не являются массозависимыми и их можно задать константой:  $D_k = 1$ ,  $K_{i,j} = 1$ .

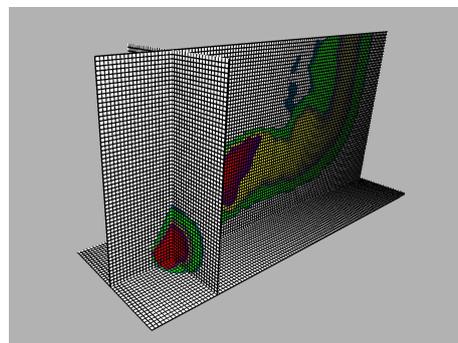
Отметим, что в программном пакете коэффициенты диффузии и ядра агрегации можно заменить на более точные без необходимости изменения разностной схемы.

После определения коэффициентов системы нам нужно численно решить уравнения из математической модели (2). Для этого можно на каждом временном шаге поочередно вычислять оператор Смолуховского и операторы переноса и диффузии [20]. Перенос реализован полулагранжевым методом — это позволяет избавиться от искусственной диффузии. Оператор диффузии решается неявным методом конечных разностей. Таким образом, мы не ограничены условием Куранта для уравнений второго порядка. Уравнение Смолуховского также решается методом конечных разностей с опцией оптимизированного расчета для ядер агрегации низкого ранга [23].

Примеры решений приведены на рис. 1 (для визуализации использовалась библиотека, реализующая стандарт OpenGL). На рис. 1 показаны проекции на оси распределения малых и крупных частиц, которые образовались из источника мономеров в результате агрегации и образовали неоднородную систему в результате переноса и диффузии. В процессе моделирования с течением времени скорость движения частиц принимает различные значения, поэтому некоторые характеристические величины определены диапазоном своих значений: число Рейнольдса — от 5000 до 8000, число Кнудсена  $\sim 10^{-5}$ , число Пекле — от 5 до 8.



a)



b)

Рис. 1. 3D-визуализация решения задачи (2): а) для мелких частиц; б) для крупных частиц

Fig. 1. 3D visualization of problem (2) solution: а) small particles; б) large particles

**3. Особенности программной реализации.** Для эффективного численного моделирования кинетики агрегирующих частиц при турбулентных течениях в среде мы предлагаем использовать пакет программ [GitHub - RishatZagidullin/coagulation-convection-3d](https://github.com/RishatZagidullin/coagulation-convection-3d). В состав пакета программ входят следующие программные компоненты:

- 1) файлы для библиотеки вычислительной гидродинамики OpenFOAM;
- 2) библиотека, написанная на языке Python, для записи в файл поля скоростей;
- 3) библиотека для построения неструктурированной сетки с помощью геометрических алгоритмов из пакета CGAL;
- 4) библиотека для визуализации решения посредством интерфейса OpenGL;
- 5) библиотека программ для решения разностных уравнений, написанная на C++.

Далее для краткости библиотеку программ для решения разностных уравнений будем называть *решателем* (от англ. solver — программа для решения уравнений, решатель).

Решатель может работать как на декартовой, так и на неструктурированной сетках.

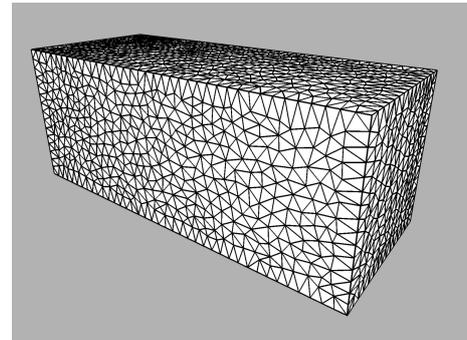
**3.1. Использование неструктурированных сеток.** Рассмотрим реализацию пространственно-неоднородных операторов на неструктурированной расчетной области. Неструктурированная сетка строится по алгоритму Делоне, реализованному в библиотеке CGAL [24]. Для решения уравнений переноса и диффузии традиционный метод конечных разностей применять довольно затруднительно, поэтому мы используем метод конечных объемов [25, 26]. В трехмерном случае изменяется лишь формула для численного расчета интеграла по замкнутому контуру, поскольку теперь вместо контура треугольника нам нужно рассматривать поверхность тетраэдра:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -\frac{1}{A_R} \sum_{i=1}^4 \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{s}_i,$$

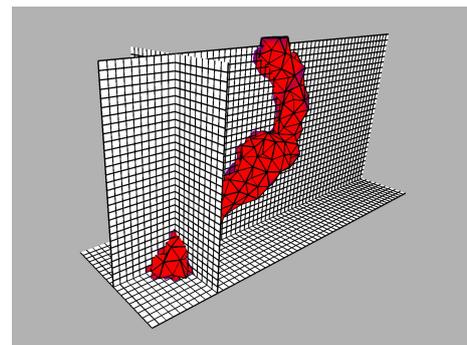
где  $\mathbf{s}_i$  — направленный наружу вектор нормали, длина которого равна площади соответствующей грани тетраэдра,  $A_R$  — объем тетраэдра,  $\mathbf{F}_i$  — поток частиц, проходящий через  $i$ -ю грань тетраэдра (значение  $\mathbf{F}_i$  хранится в барицентре  $i$ -й грани). Для вычисления  $\mathbf{F}_i$  необходимо интерполировать функцию  $f$ , узлы интерполяции находятся в барицентрах тетраэдров.

При реализации метода конечных объемов для адвективных схем важным является уменьшение вариаций (total variation diminishing) для того, чтобы избежать численных ошибок. Обычно уменьшение вариаций достигается за счет ограничения градиентов путем добавления так называемых “функций-ограничителей”, что позволяет избежать быстрых скачков функции, из-за чего численная схема становится “монотонной” [27, 28]. Однако в трехмерных расчетах ограничение потоков вызывает дополнительные сложности: решение рассеивается слишком быстро, подобно ошибкам численной диффузии. Для того чтобы решить эту проблему, были разработаны методы “многонаклонных” (multislope) градиентов [29], которые мы используем в программной реализации решателя.

На рис. 2 а показана триангуляция вычислительной области, на рис. 2 б — визуализация с помощью поверхностей уровня. В табл. 1 представлены отклонения значений функций, полученных с помощью решателя, относительно значений аналитического решения для упрощенной квазитрехмерной задачи [20]. В первой строке показаны относительные отклонения значений, вычисленных решателем, от значений аналитической функции в



a)



b)

Рис. 2. Применение неструктурированных сеток: а) триангуляция вычислительной области; б) поверхность уровня для решения задачи (2)

Fig. 2. Using unstructured grids: a) triangulation of the computational domain; b) visualization of the problem solution (2) using a level surface



Таблица 1. Относительная сходимость решателя для структурированной и неструктурированной сеток  
 Table 1. Relative solver convergence for structured and unstructured meshes

Шаг дискретизации Sampling step	$r$	$r/2$	$r/4$	$r/8$
Относительная $L_1$ -погрешность Relative $L_1$ error	0.150	0.072	0.042	0.025
Сравнение с решением на регулярной сетке Comparison with the solution on a regular grid	0.30	0.15	0.08	0.05

узлах декартовых сеток с шагами дискретизации  $r, r/2, r/4, r/8$ , во второй строке — относительные отклонения значений, вычисленных решателем на неструктурированной сетке, от значений аналитической функции, полученных интерполяцией в узлах декартовых сеток соответствующей грубости.

Следует отметить, что вычисления на произвольной сетке занимают значительно больше времени, чем на декартовой сетке. Это происходит из-за необходимости отслеживать в решателе отображение индексов тетраэдров в вычислительной области. Алгоритм решателя на неструктурированных сетках нуждается в оптимизации, а в будущем — в распараллеливании.

**3.2. Использование библиотеки OpenFOAM.** Работа с библиотекой OpenFOAM в предлагаемом нами пакете программ для моделирования кинетики агрегирующих частиц при турбулентных течениях в среде сводится к составлению нескольких конфигурационных файлов, упорядоченных по папкам в порядке, установленном для библиотеки OpenFOAM. Эти файлы конфигурации определяют область вычислений, дискретизацию, решаемое уравнение, граничные условия, расположение входов и выходов и решатель. Для нахождения турбулентного поля скоростей решаем уравнение Навье–Стокса, используя LES в качестве численного метода. Для имитации начального ветра библиотека предоставляет возможность задать ABL в отдельном файле конфигурации. Пограничный слой имеет логарифмический профиль. Его высоту, интенсивность и направление можно настроить с помощью параметров:  $Uref, Zref, zDir, flowDir, z0, zGround$  (рис. 3). Параметр  $z0$  определяет форму логарифмического профиля,  $Uref$  — значение скорости на высоте  $Zref$ .

После того как расчеты выполнены, мы можем извлечь необходимые данные из командной строки. Нам нужны местоположения центров ячеек, чтобы правильно интерполировать поле скоростей в решатель агрегации. Таким образом, расчет поля скоростей выполняется заранее. Координаты центров ячеек можно извлечь с помощью встроенной команды OpenFOAM для записи в файл центров ячеек построенной расчетной сетки:

```
postProcess -func 'writeCellCentres' -time 0
```

Поля скоростей могут быть извлечены в удобочитаемом формате из выходных файлов с помощью кода, написанного на языке Python.

**3.3. Параллельная реализация решателя.** На декартовой сетке нами был реализован решатель с параллельным алгоритмом. За счет разбиения вычислительной области на множество доменов удается распределить вычисления между несколькими вычислительными узлами суперкомпьютера с кластерной архитектурой. Обмен данными между узлами происходит посредством MPI (Message Passing Interface). Вычисление операторов Смолуховского реализовано как на CPU, так и на GPU с использованием библиотеки NVIDIA CUDA, что позволяет получить существенное ускорение вычислений на гибридном вычислительном узле.

На рис. 4а представлена схема с разбиением расчетной области на домены и обменом граничными данными. Если архитектура вычислительной системы такова, что потребности в обмене данными нет, например все процессы имеют общую память, то параллельный решатель может быть реализован с помощью библиотеки OpenMP.

На рис. 4b показана возможность асинхронного использования GPU для вычисления интегралов Смолуховского. Для этого подобласть делится на две части, на каждой из которых можно параллельно

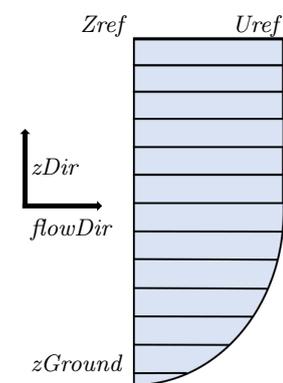


Рис. 3. Профиль слоя ABL  
 Fig. 3. ABL layer profile

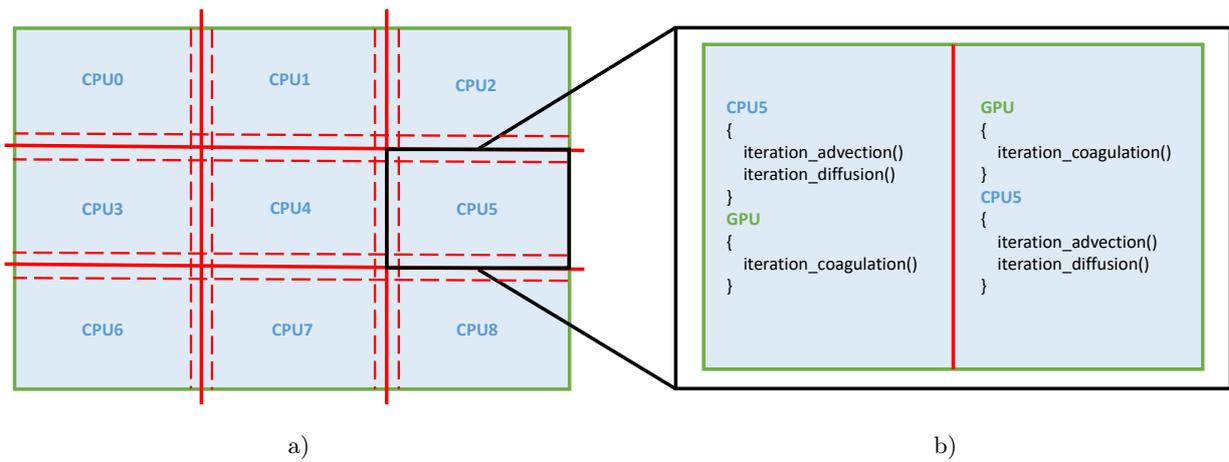


Рис. 4. Схема параллельной реализации решателя: а) разбиение домена на 9 процессоров; б) вариант гибридного решения

Fig. 4. Scheme of parallel implementation of the solver: a) domain split into 9 processors; b) hybrid solution option

Таблица 2. Время решения уравнения переноса-диффузии-коагуляции в трехмерном пространстве на декартовой сетке для различных конфигураций решателя (в секундах)  
 Table 2. Computation time (in seconds) of different configurations of the transport-diffusion-coagulation equation solver in 3D space on a Cartesian grid

Конфигурация Configuration	OpenMP	MPI	OpenMP+CUDA
1 CPU Core	59.9764	55.3257	18.8531
2 CPU Core	30.8832	27.4235	10.8875
4 CPU Core	17.1866	15.1223	6.9816

выполнить шаг численной схемы для пространственных операторов на CPU и шаг оператора коагуляции на GPU в разном порядке. Оставшиеся процессоры на узле могут работать с OpenMP. Такой вариант асинхронного использования вычислительных ресурсов актуален для случаев, когда расчеты на CPU и GPU выполняются за сопоставимое время.

В табл. 2 показаны результаты тестирования нескольких схем распараллеливания задачи (2), которые отличаются количеством ядер CPU, используемых в вычислениях, и подключением GPU с помощью библиотеки CUDA к вычислениям. Характеристики компьютера, на котором выполнялись расчеты: CPU — Intel Core i5-11300H@3.1 GHz, RAM — 16 GB, GPU — NVIDIA GeForce RTX3050, 4 GB.

Отметим, что в текущей постановке задачи ( $k \in \{1, 2, \dots, 32\}$ ) малое количество размеров частиц избавляет нас от необходимости использовать оптимальный алгоритм вычисления интегралов Смолуховского при помощи быстрого преобразования Фурье [23]. Однако по мере увеличения количества рассматриваемых размеров частиц переход на оптимизированный вариант алгоритма необходим.

Из табл. 2 видно, что наибольшее ускорение вычислений обеспечивается на гибридном вычислительном узле, в состав которого входит многоядерный CPU и GPU.

**4. Заключение.** Представлена трехмерная математическая модель движения агрегирующих частиц в среде с локализованным источником в нестационарном поле скоростей.

Для моделирования процессов коагуляции в рамках представленной математической модели создан пакет программ, включающий в себя библиотеки OpenFOAM, CGAL, CUDA, OpenGL, ряд авторских программ на языке Python. В статье показано применение библиотеки OpenFOAM для моделирования турбулентных течений в атмосфере и использование библиотеки CGAL для генерирования структурированной и неструктурированной вычислительных сеток.

Автором разработан решатель — библиотека программ на языке C++ для вычислений по разностной схеме. Решатель может выполнять вычисления на структурированной декартовой сетке или неструктурированной сетке.



рированной тетраэдральной сетке. Для повышения эффективности решателя используются библиотеки распараллеливания вычислений OpenMP, MPI, CUDA. Автором реализован алгоритм вычисления интегралов Смолуховского на GPU с помощью библиотеки CUDA.

Исследованы некоторые подходы к повышению эффективности вычислений с помощью предлагаемого пакета программ. Наибольшее ускорение вычислений получено на гибридном вычислительном узле с CPU и GPU при использовании библиотек OpenMP и CUDA. Отмечено, что решатель на неструктурированной сетке недостаточно эффективен и проигрывает в производительности решателю на структурированной сетке; намечены пути повышения производительности.

Код, использованный для написания данной статьи, находится в открытом доступе по адресу <https://github.com/RishatZagidullin/coagulation-convection-3d>.

### Список литературы

1. Галжин В.А. Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001.
2. Matveev S.A., Zheltkov D.A., Tyrtysnikov E.E., Smirnov A.P. Tensor train versus Monte Carlo for the multicomponent Smoluchowski coagulation equation // J. Comput. Phys. 2016. **316**. 164–179. doi 10.1016/j.jcp.2016.04.025.
3. Стефонишин Д.А., Матвеев С.А., Смирнов А.П., Тыртышников Е.Е. Тензорные разложения для решения уравнений математических моделей агрегации, допускающих многочастичные столкновения // Вычислительные методы и программирование. 2018. **19**, № 4. 390–404. doi 10.26089/NumMet.v19r435.
4. Матвеев С.А., Тыртышников Е.Е., Смирнов А.П., Бриллиантов Н.В. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**, № 1. 1–8.
5. Матвеев С.А. Параллельная реализация быстрого метода решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**, № 3. 360–368. doi 10.26089/NumMet.v16r335.
6. Загидуллин Р.Р., Смирнов А.П., Матвеев С.А., Тыртышников Е.Е. Эффективный метод численного решения математической модели переноса коагулирующих частиц // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2017. **41**, № 4. 28–34.
7. Aloyan A.E., Arutyunyan V.O., Lushnikov A.A., Zagaynov V.A. Transport of coagulating aerosol in the atmosphere // J. Aerosol Sci. 1997. **28**, N 1. 67–85. doi 10.1016/S0021-8502(96)00043-2.
8. Falkovich G., Fouzon A., Stepanov M.G. Acceleration of rain initiation by cloud turbulence // Nature. 2002. **419**. 151–154. doi 10.1038/nature00983.
9. Falkovich G., Stepanov M.G., Vucelja M. Rain initiation time in turbulent warm clouds // Journal of Applied Meteorology and Climatology. 2006. **45**, N 4. 591–599. doi 10.1175/JAM2364.1.
10. Anderson V.J., Lekkerkerker H.N.W. Insights into phase transition kinetics from colloid science // Nature. 2002. **416**. 811–815. doi 10.1038/416811a.
11. Samsel R.W., Perelson A.S. Kinetics of rouleau formation. I. A mass action approach with geometric features // Biophys. J. 1982. **37**, N 2. 493–514. doi 10.1016/S0006-3495(82)84696-1.
12. Anand M., Rajagopal K.B., Rajagopal K.R. A model for the formation and lysis of blood clots // Pathophysiol. Haemost. Thromb. 2005. **34**, N 2. 109–120. doi 10.1159/000089931.
13. Stein C., Dannemann Purnat T., Fietje N., et al. WHO European Health Report 2018. Vol. 164. Geneva: World Health Organization, 2018.
14. Bennett J.E., Tamura-Wicks H., Parks R.M., et al. Particulate matter air pollution and national and county life expectancy loss in the USA: a spatiotemporal analysis // PLoS Med. 2019. **16**, N 7. Article Number e1002856. doi 10.1371/journal.pmed.1002856.
15. Semeniuk K., Dastoor A. Current state of atmospheric aerosol thermodynamics and mass transfer modeling: a review // Atmosphere. 2020. **11**, N 2. Article Number 156. doi 10.3390/atmos11020156.
16. Garratt J. The atmospheric boundary layer. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1992.
17. Han Y., Stoellinger M., Naughton J. Large eddy simulation for atmospheric boundary layer flow over flat and complex terrains // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. **753**, N 3. Article Id. 032044. doi 10.1088/1742-6596/753/3/032044.
18. Stoll R., Gibbs J.A., Salesky S.T., et al. Large-eddy simulation of the atmospheric boundary layer // Boundary-Layer Meteorol. 2020. **177**, N 2–3. 541–581. doi 10.1007/s10546-020-00556-3.
19. Diebold M., Higgins C., Fang J., et al. Flow over hills: a large-eddy simulation of the Bolund case // Boundary-Layer Meteorol. 2013. **148**, N 1. 177–194. doi 10.1007/s10546-013-9807-0.

20. Zagidullin R., Smirnov A.P., Matveev S., et al. Aggregation in non-uniform systems with advection and localized source // J. Phys. A: Math. Theor. 2022. **55**, N 26. Article Id. 265001. doi [10.1088/1751-8121/ac711a](https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac711a).
21. Gallen L., Felden A., Riber E., Cuenot B. Lagrangian tracking of soot particles in LES of gas turbines // Proc. Combust. Inst. 2019. **37**, N 4. 5429–5436 (2019). doi [10.1016/j.proci.2018.06.013](https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.013).
22. OpenFOAM. <https://www.openfoam.com>. Дата обращения: 3 ноября 2023.
23. Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // J. Comput. Phys. 2015. **282**. 23–32. doi [10.1016/j.jcp.2014.11.003](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.11.003).
24. The Computational Geometry Algorithms Library (CGAL). <https://www.cgal.org>. Дата обращения: 3 ноября 2023.
25. Zagidullin R., Smirnov A., Matveev S., Tyrtysnikov E. Supercomputer modelling of spatially-heterogeneous coagulation using MPI and CUDA // Communications in Computer and Information Science. Vol. 1129. Cham: Springer, 2019. 403–414. doi [10.1007/978-3-030-36592-9\\_33](https://doi.org/10.1007/978-3-030-36592-9_33).
26. Загидуллин Р.Р. Решение задачи переноса–коагуляции на двумерной пространственной области // Прикладная математика и информатика. 2019. № 62. 27–33. <https://cs.msu.ru/node/2272#hide62>. Дата обращения: 3 ноября 2023.
27. Darwish M.S., Moukalled F. TVD schemes for unstructured grids // Int. J. Heat Mass Transf. 2003. **46**, N 4. 599–611. doi [10.1016/S0017-9310\(02\)00330-7](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(02)00330-7).
28. Denner F., van Wachem B.G.M. TVD differencing on three-dimensional unstructured meshes with monotonicity-preserving correction of mesh skewness // J. Comput. Phys. 2015. **298**. 466–479. doi [10.1016/j.jcp.2015.06.008](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.06.008).
29. Le Touze C., Murrone A., Guillard H. Multislope MUSCL method for general unstructured meshes // J. Comput. Phys. 2015. **284**. 389–418. doi [10.1016/j.jcp.2014.12.032](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.032).

Поступила в редакцию  
29 сентября 2023 г.

Принята к публикации  
1 ноября 2023 г.

### Информация об авторе

Ришат Раилевич Загидуллин — мл. научн. сотр.; 1) Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, ул. Колмогорова, д. 1, стр. 52, 119991, Москва, Российская Федерация; 2) Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар д. 30, стр. 1, 121205, Москва, Российская Федерация.

### References

1. V. A. Galkin, *Smoluchowski Equation* (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
2. S. A. Matveev, D. A. Zheltkov, E. E. Tyrtysnikov, and A. P. Smirnov, “Tensor Train Versus Monte Carlo for the Multicomponent Smoluchowski Coagulation Equation,” J. Comput. Phys. **316**, 164–179 (2016). doi [10.1016/j.jcp.2016.04.025](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.04.025).
3. D. A. Stefonishin, S. A. Matveev, A. P. Smirnov, and E. E. Tyrtysnikov, “Tensor Decompositions for Solving the Equations of Mathematical Models of Aggregation with Multiple Collisions of Particles,” Numerical Methods and Programming (Vychislitel’nye Metody i Programirovanie) **19** (4), 390–404 (2018). doi [10.26089/NumMet.v19r435](https://doi.org/10.26089/NumMet.v19r435).
4. S. A. Matveev, E. E. Tyrtysnikov, A. P. Smirnov, and N. V. Brilliantov, “A Fast Numerical Method for Solving the Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation and Fragmentation Processes,” Numerical Methods and Programming (Vychislitel’nye Metody i Programirovanie) **15** (1). 1–8 (2014).
5. S. A. Matveev, “A Parallel Implementation of a Fast Method for Solving the Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation and Fragmentation Processes,” Numerical Methods and Programming (Vychislitel’nye Metody i Programirovanie) **16** (3), 360–368 (2015). doi [10.26089/NumMet.v16r335](https://doi.org/10.26089/NumMet.v16r335).
6. R. R. Zagidullin, A. P. Smirnov, S. A. Matveev, and E. E. Tyrtysnikov, “An Efficient Numerical Method for a Mathematical Model of a Transport of Coagulating Particles,” Vestn. Mosk. Univ., Ser. 15: Vychisl. Mat. Kibern. **41**, No. 4, 28–34 (2017) [Moscow Univ. Comput. Math. Cybern. **41** (4), 179–186 (2017)]. doi [10.3103/S0278641917040082](https://doi.org/10.3103/S0278641917040082).
7. A. E. Aloyan, V. O. Arutyunyan, A. A. Lushnikov, and V. A. Zagaynov, “Transport of Coagulating Aerosol in the Atmosphere,” J. Aerosol Sci. **28** (1), 67–85 (1997). doi [10.1016/S0021-8502\(96\)00043-2](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(96)00043-2).
8. G. Falkovich, A. Fouxon, and M. G. Stepanov, “Acceleration of Rain Initiation by Cloud Turbulence,” Nature **419**, 151–154 (2002). doi [10.1038/nature00983](https://doi.org/10.1038/nature00983).



9. G. Falkovich, M. G. Stepanov, and M. Vucelja, “Rain Initiation Time in Turbulent Warm Clouds,” *J. Appl. Meteorol. Climatol.* **45** (4), 591–599 (2006). doi [10.1175/JAM2364.1](https://doi.org/10.1175/JAM2364.1).
10. V. J. Anderson and H. N. W. Lekkerkerker, “Insights into Phase Transition Kinetics from Colloid Science,” *Nature* **416**, 811–815 (2002). doi [10.1038/416811a](https://doi.org/10.1038/416811a).
11. R. W. Samsel and A. S. Perelson, “Kinetics of Rouleau Formation. I. A Mass Action Approach with Geometric Features,” *Biophys. J.* **37** (2), 493–514 (1982). doi [10.1016/S0006-3495\(82\)84696-1](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(82)84696-1).
12. M. Anand, K. B. Rajagopal, and K. R. Rajagopal, “A Model for the Formation and Lysis of Blood Clots,” *Pathophysiol. Haemost. Thromb.* **34** (2), 109–120 (2005). doi [10.1159/000089931](https://doi.org/10.1159/000089931).
13. C. Stein, T. Dannemann Purnat, N. Fietje, et al., *WHO European Health Report 2018* (World Health Organization, Geneva, 2018), Vol. 164.
14. J. E. Bennett, H. Tamura-Wicks, R. M. Parks, et al., “Particulate Matter Air Pollution and National and County Life Expectancy Loss in the USA: A Spatiotemporal Analysis,” *PLoS Med.* **16** (7), Article Number e1002856 (2019). doi [10.1371/journal.pmed.1002856](https://doi.org/10.1371/journal.pmed.1002856).
15. K. Semeniuk and A. Dastoor, “Current State of Atmospheric Aerosol Thermodynamics and Mass Transfer Modeling: A Review,” *Atmosphere* **11** (2), Article Number 156 (2020). doi [10.3390/atmos11020156](https://doi.org/10.3390/atmos11020156).
16. J. Garratt, *The Atmospheric Boundary Layer* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1992).
17. Y. Han, M. Stoellinger, and J. Naughton, “Large Eddy Simulation for Atmospheric Boundary Layer Flow over Flat and Complex Terrains,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **753** (3), Article Id. 032044 (2016). doi [10.1088/1742-6596/753/3/032044](https://doi.org/10.1088/1742-6596/753/3/032044).
18. R. Stoll, J. A. Gibbs, S. T. Salesky, et al., “Large-Eddy Simulation of the Atmospheric Boundary Layer,” *Boundary-Layer Meteorol.* **177** (2–3), 541–581 (2020). doi [10.1007/s10546-020-00556-3](https://doi.org/10.1007/s10546-020-00556-3).
19. M. Diebold, C. Higgins, J. Fang, et al., “Flow over Hills: A Large-Eddy Simulation of the Bolund Case,” *Boundary-Layer Meteorol.* **148** (1), 177–194 (2013). doi [10.1007/s10546-013-9807-0](https://doi.org/10.1007/s10546-013-9807-0).
20. R. Zagidullin, A. P. Smirnov, S. Matveev, et al., “Aggregation in Non-Uniform Systems with Advection and Localized Source,” *J. Phys. A: Math. Theor.* **55** (26), Article Id. 265001 (2022). doi [10.1088/1751-8121/ac711a](https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac711a).
21. L. Gallen, A. Felden, E. Riber, and B. Cuenot, “Lagrangian Tracking of Soot Particles in LES of Gas Turbines,” *Proc. Combust. Inst.* **37** (4), 5429–5436 (2019). doi [10.1016/j.proci.2018.06.013](https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.013).
22. OpenFOAM. <https://www.openfoam.com>. Cited November 3, 2023.
23. S. A. Matveev, A. P. Smirnov, and E. E. Tyrtysnikov, “A Fast Numerical Method for the Cauchy Problem for the Smoluchowski Equation,” *J. Comput. Phys.* **282**, 23–32 (2015). doi [10.1016/j.jcp.2014.11.003](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.11.003).
24. The Computational Geometry Algorithms Library (CGAL). <https://www.cgal.org>. Cited November 3, 2023.
25. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, and E. Tyrtysnikov, “Supercomputer Modelling of Spatially-Heterogeneous Coagulation Using MPI and CUDA,” in *Communications in Computer and Information Science* (Springer, Cham, 2019), Vol. 1129, 403–414. doi [10.1007/978-3-030-36592-9\\_33](https://doi.org/10.1007/978-3-030-36592-9_33).
26. R. R. Zagidullin, “Solving the Transport-Coagulation Problem in a Two-Dimensional Spatial Region,” *Prikl. Mat. Inform.* No. 62, 27–33 (2019) [*Comput. Math. Model.* **31** (1), 19–24 (2020)]. doi [10.1007/s10598-020-09473-z](https://doi.org/10.1007/s10598-020-09473-z).
27. M. S. Darwish and F. Moukalled, “TVD Schemes for Unstructured Grids,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **46** (4), 599–611 (2003). doi [10.1016/S0017-9310\(02\)00330-7](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(02)00330-7).
28. F. Denner and B. G. M. van Wachem, “TVD Differencing on Three-Dimensional Unstructured Meshes with Monotonicity-Preserving Correction of Mesh Skewness,” *J. Comput. Phys.* **298**, 466–479 (2015). doi [10.1016/j.jcp.2015.06.008](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.06.008).
29. C. Le Touze, A. Murrone, and H. Guillard, “Multislope MUSCL Method for General Unstructured Meshes,” *J. Comput. Phys.* **284**, 389–418 (2015). doi [10.1016/j.jcp.2014.12.032](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.032).

Received  
September 29, 2023

Accepted for publication  
November 1, 2023

### Information about the author

*Rishat R. Zagidullin* — Junior Scientist; 1) Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, ulitsa Kolmogorova 1, building 52, 119991, Moscow, Russia; 2) Skolkovo Institute of Science and Technology, Bol’shoi Bul’var 30, building 1, 121205, Moscow, Russia.