

## МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ ГАЗА

© 2019 г. *С.В. Поляков<sup>1,2</sup>, Ю.Н. Карамзин<sup>1</sup>, Т.А. Кудряшова<sup>1</sup>,  
В.О. Подрыга<sup>1,3</sup>, Д.В. Пузырьков<sup>1</sup>, Н.И. Тарасов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

<sup>2</sup> Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup> Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет

polyakov@imamod.ru

DOI: 10.1134/S0234087919090041

Рассматривается проблема моделирования процессов очистки воздушной среды от мелкодисперсных твердых загрязняющих примесей, кластеризованных в виде наночастиц. Выбранная для исследования технология очистки предполагает применение системы, состоящей из наночистков и сорбентов. Оба используемых в ней способа очистки являются в настоящее время весьма востребованными и часто комбинируются в соответствующих устройствах. Первый способ очистки с помощью наночистков позволяет получить высокое качество последней. Однако этот способ является дорогостоящим вследствие необходимости частой замены фильтрующих элементов (мембран) и к тому же требует утилизации этих элементов. 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 наночистки 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, а также с предложенной многомасштабной постановкой задачи. Предварительные расчеты на основе макромоделли показали работоспособность предложенного подхода.

Ключевые слова: процессы очистки газа, многомасштабное моделирование, численные схемы на неструктурированных сетках, параллельные алгоритмы, высокопроизводительные вычисления.

**MULTISCALE SIMULATION OF GAS CLEANING PROCESSES**

*S.O. Polyakov<sup>1,2</sup>, Yu.N. Karamzin<sup>1</sup>, T.A. Kudryashova<sup>1</sup>,  
V.O. Podryga<sup>1,3</sup>, D.V. Puzyrkov<sup>1</sup>, N.I. Tarasov<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS

polyakov@imamod.ru

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI

<sup>3</sup>Moscow Automobile and Road Construction State Technical University

In this paper, the problem of modeling air cleaning processes from finely dispersed solid contaminants clustered in the form of nanoparticles is considered. The purification technology chosen for the study involves the use of a system consisting of nanofilters and sorbents. Both cleaning methods used in it are currently in high demand and are often combined in appropriate devices. The first cleaning method using nanofilters allows you to get high quality last. However, this method is expensive due to the need for frequent replacement of filter elements (membranes) and also requires the disposal of these elements. The second method of cleaning with sorbents gives a relatively low quality of cleaning, but allows the latter to be carried out many times after washing the sorbent with special liquids. To optimize air cleaning devices using nanofilters and sorbents, a detailed study of the processes occurring in the cleaning system is necessary. The proposed study addresses part of the problem associated with the passage of an air stream containing solid pollutant nanoparticles through a layer of granular sorbent. For this purpose, a multi-scale mathematical model, a numerical algorithm and a parallel implementation of the model on a macroscopic scale have been developed. The novelty of the approach is associated with the use of a quasi-gas-dynamic model for describing the flow in the sorbing layer, as well as with the proposed multi-scale formulation of the problem. Preliminary calculations based on the macromodel showed the efficiency of the proposed approach.

Key words: gas cleaning processes, multi-scale simulation, numerical schemes on unstructured grids, parallel algorithms, high performance computing.

## **1. Введение**

С проникновением нанотехнологий в сферу жизни человека (например, в сферу питания, фармацевтики и медицины в целом, косметики, одежды и т.д.), появляются все более убедительные свидетельства, что эта новая технологическая революция в области материалов наряду с большими преимуществами представляет определенную угрозу для здоровья и безопасности человека и окружающей среды и может вызывать в будущем серьезные социальные, экономические и этические проблемы (см., например, [1-4]).

В настоящее время продукты нанотехнологии (наноматериалы, изделия на их основе, отходы от утилизации изделий) попадают в окружающую среду без системного изучения их влияния на последнюю. В отсутствие глобальных и повсеместных систем контроля, приборов слежения и обна-

ружения вредных веществ в атмосфере, воде, почве и т.д., средств и методов безопасной утилизации нанопродукции угроза загрязнения окружающей среды многократно возрастает. Разработчики нанотехнологий нечасто предоставляют возможность общественности и независимым и компетентным экспертам участвовать в обсуждении и принятии решений о том, как проводить «нанотехнологизацию» и какие меры принимать, чтобы сделать ее результаты контролируемыми и максимально безопасными во всех отношениях.

Научное и экспертное сообщество в последнее время стало осознавать опасности и риски для живых систем, связанные с нерегулируемым развитием наноиндустрии и распространением токсичной нанопродукции [2]. Практически всем стало ясно, что потенциально опасные свойства наноматериалов, равно как и их воздействие на окружающую среду в долгосрочной перспективе, до сих пор недостаточно изучены. Положительные свойства конкретной нанопродукции могут быть перекрыты гигантским ущербом для здоровья людей.

Одним из наиболее ярких примеров такого ущерба является попадание разного рода наночастиц в легкие человека при дыхании [2, 3]. Подобный процесс наблюдается не только при производстве наноматериалов, но более всего в рамках других производственных и непроизводственных процессов, где наночастицы являются часто неизвестным и неконтролируемым побочным продуктом. В частности, большой вред здоровью наносит вдыхание наночастиц углерода, образуемых при неполном сгорании топлива в моторных двигателях и на тепловых электростанциях. Также подобная проблема возникает на металлургических предприятиях, предприятиях химической промышленности, а также в процессе курения. И если на производстве применяются все более эффективные системы очистки с высоким КПД, то при бытовых выбросах наночастиц контроль практически отсутствует. При этом следует отметить, что даже самые совершенные методы очистки газовой среды от наночастиц не могут гарантировать абсолютную безопасность.

В настоящей работе обсуждается проблема очистки воздушной среды от загрязняющих ее твердых нанопримесей. Поэтому обсудим кратко современные методики очистки воздушной среды от такого рода загрязнений. Традиционным способом газоочистки является применение технологий принудительной вентиляции помещений с пропусканием загрязненного воздуха через механические, электрические и другие виды фильтров [5-11]. В открытых воздушных пространствах применяются средства индивидуальной защиты (маски, противогазы и т.д.). В обоих случаях 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.

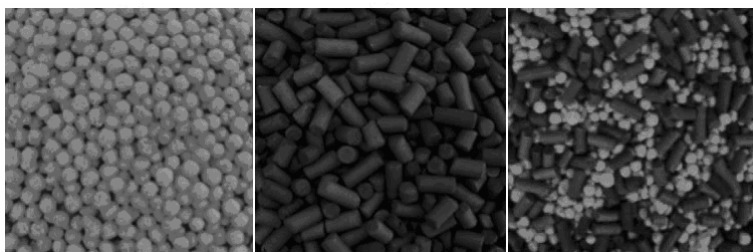
Одним из путей решения вышеуказанной проблемы в последнее время является применение специальных волокнистых или гранулированных сорбентов [10, 12-14]. Общее преимущество сорбентов перед мембранами заключается в существенно большей площади контакта с частицами загрязняющих веществ. Волокнистые сорбенты 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). Гранулы изготавливаются на основе различных полимеров и могут иметь круглую, эллипсоидную, цилиндрическую или более сложную форму. И те, и другие сорбенты обычно помещаются в фильтрационную камеру (контейнер) цилиндрической формы с полупроницаемыми торцевыми стенками.

Преимуществом волокнистых сорбентов является их высокая степень очистки пропускаемого через них газа (например, воздуха) или жидкости (например, воды). Недостатками этих видов сорбентов является невозможность их повторного использования (в случае сильного загрязнения их заменяют на новые), небольшой срок эксплуатации, а также необходимость их утилизации после использования. Например, при кондиционировании помещений используются волокнистые сорбенты, которые следует менять через каждые 3-4 месяца.

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. Также в последнее время в полимерные гранулированные сорбенты внедряются наночастицы различных металлов и их оксидов [15-18]. Это внедрение улучшает адсорбирующие свойства гранулированных сорбентов, а также стимулирует химический распад вредных веществ на их поверхности. Также гранулы модифицированных сорбентов могут иметь

свободный электрический заряд на своей поверхности (то есть электризоваться) или обладать магнитным моментом, что способствует притяжению к ним атомов, молекул и наночастиц вредных веществ.

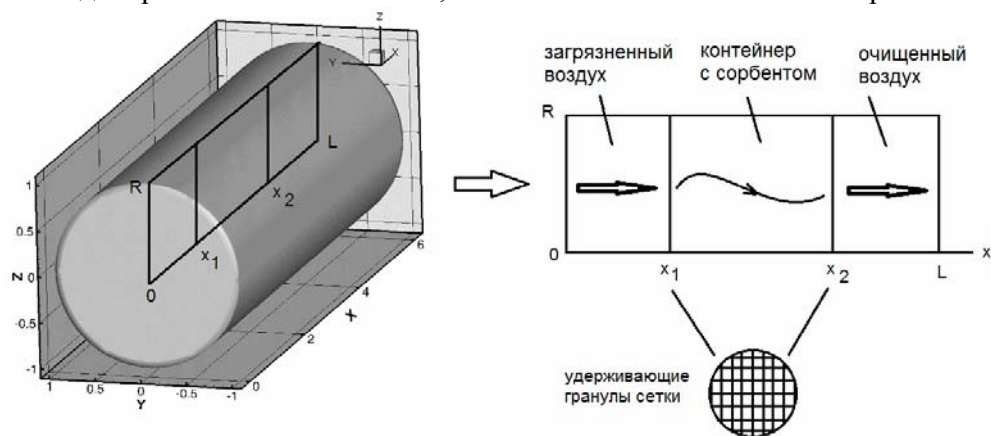
Одним из путей оптимизации фильтрующих систем на основе гранулированных сорбентов является как подбор основного материала и модификаторов сорбента, так и подбор формы поверхности его гранул (рис.1). Конкретное сочетание этих свойств может увеличить эффективность гранулированных сорбентных фильтров в десятки раз по абсолютной величине удаленного загрязнения воздушной среды.



**Рис.1.** Варианты гранулированных сорбентов, отличающиеся формой гранул.

В настоящей работе предлагается технология моделирования процесса газоочистки в гранулированном сорбентном фильтре (рис.2). 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 моделирования течений газов, потоков газовых смесей в микроканалах



**Рис.2.** Модельная геометрия очистной системы.

технических систем и др. на основе нового многомасштабного подхода [19-25], 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 процессов прохождения наночастиц загрязнителя через слой сорбента можно проводить с различной степенью детализации. В случае использования в системе очистки гранулированных сорбентов в литературе присутствуют данные о двух основных математических подходах. Первый из них относится к расчетам макроскопических процессов движения воздуха в пористой среде на основе моделей Пуазейля и д'Арси [26-29]. Однако для этого необходимо знать кинетические коэффициенты данного процесса (коэффициенты пористости, проницаемости и диффузии), которые можно определить лишь во множественных натуральных экспериментах [30-32]. Второй подход относится к расчетам микроскопических процессов взаимодействия отдельных частиц загрязнителя (атомов, молекул или наночастиц) с поверхностью гранулы [33-35] на основе методов частиц [36-42] и Монте-Карло [43-46].

В настоящей работе в соответствии с разработанным многомасштабным подходом [19-25] 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 (с формулировкой соответствующих математических задач), так и в комплексе на основе метода расщепления по физическим процессам.

### 2.1. Модель макроскопического уровня

Для описания процесса прохождения воздушной среды через систему очистки (см. рис.2) на макроскопическом уровне используется квазигазодинамическая (КГД) система уравнений, предложенная и исследованная в [47-52]. В случае смеси газов система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [48].

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:

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

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

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

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

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  $\varepsilon_l$  – 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),  $\operatorname{Pr}_l$ ,  $\operatorname{Sc}_l$ ,  $\operatorname{Ma}_l$  и  $\operatorname{Re}_l$  – числа Прандтля, Шмидта, Маха и Рейнольдса для компонент смеси;  $\lambda_l$  – 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 [21].

Система уравнений (1)-(4) замыкается начальными и граничными ус-

ловиями. 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 [48]. 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  $k$ -й компоненты загрязнителя,  $\mathbf{W}_k^{(C)}$  – поток концентрации,  $\mathbf{u}$  – средняя скорость движения воздушной среды,  $\Phi_k$  – плотность объемных источников  $k$ -й компоненты загрязнителя отличная от нуля в зоне перед сорбционной камерой,  $D_k^{(C)}$  – суммарный коэффициент диффузии  $k$ -й компоненты загрязнителя в воздушной среде,  $q_k$  – суммарный поверхностный заряд наночастиц  $k$ -й компоненты загрязнителя (может быть равным 0),  $\mu_k^{(C)}$  – коэффициент подвижности наночастиц  $k$ -й 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  $\varphi$  – напряженность и потенциал электрического поля,  $\mathbf{B}$  – вектор магнитной индукции,  $\varepsilon$  – суммарная диэлектрическая проницаемость воздушной среды, зависящая от ее состава,  $C_k^*$  – равновесное (предельно допустимое) значение концентрации наночастиц  $k$ -й компоненты загрязнителя.

При записи уравнений (5), (6) предполагалось, что очищенный воздушный поток при отсутствии внешних воздействий не создает возмущений



электромагнитного поля (ЭМП). Однако в присутствии специальных источников ЭМП (например, приложенного внешнего поля, целенаправленной электризации гранул сорбента, наличия внутри гранул наночастиц ферромагнетиков и т.д.), а также электризации наночастиц загрязнителей такие возмущения возникают и могут либо усилить, либо ослабить эффект адсорбции наночастиц загрязнителей на поверхности гранул.

Уравнения (5), (6) также замыкаются начальными и граничными условиями. В начальный момент времени система очистки предполагается условно 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. При этом на стенках канала реализуется условие непроницаемости, а на поверхности гранул реализуется нелинейное условие лимитированного поглощения:

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

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).

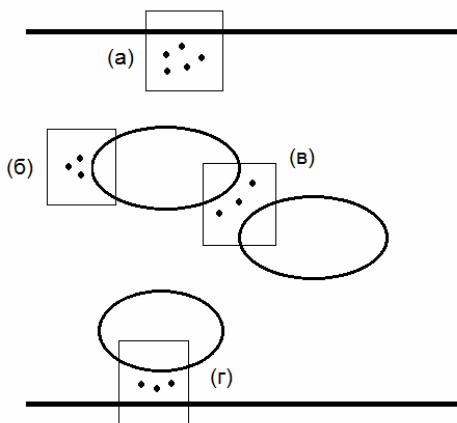
Все кинетические коэффициенты и параметры уравнений состояния, входящие в уравнения и условия (1)-(7), задаются на основе усреднений результатов расчетов, выполненных на микроуровне (см., например, [53-55]).

## 2.2. Модель мезоскопического уровня

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. 3 показана возможная расчетная геометрия мезоскопического уровня.

Необходимая система уравнений формируется на основе уравнений механики Ньютона [37-40]. Потенциалы взаимодействия наночастиц между собой и поверхностями стенок канала и гранул формируются на основе расчетов, выполненных по моделям микроскопического уровня. Взаимодейст-

вием наночастиц загрязнителей с газовой смесью в выделенных пограничных зонах можно в первом приближении пренебречь.



**Рис.3.** Модельная двумерная 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 и граничные условия формируются на основе конкретных физических условий либо определяются граничными потоками массы, импульса и энергии, рассчитанными в рамках макромоделли.

### 2.3. Модель микроскопического уровня

На микроскопическом уровне используется модель молекулярной динамики (см., например, [40]). В ее рамках отдельно рассматриваются равновесные свойства компонент газовой смеси [55], свойства металлических стенок [53], а также свойства гранул. Также на атомно-молекулярном уровне рассматриваются конкретные процессы взаимодействия 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.

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. В этом случае в качестве граничных условий могут использоваться либо зеркальные граничные условия, в этом случае частицы взаимодействуют со своим зеркальным отражением и не выходят вследствие этого за границу, либо условия исчезновения частицы на границе и появления ее в другом месте микросистемы (так чтобы не нарушалось общее равновесие в системе). Также может осуществляться как свободный выход частиц на одной стороне выделенного объема и вход потока частиц – на другой. Контроль над температурой системы и над ее полным импульсом осуществляется с помощью алгоритмов термостатирования.

#### **2.4. Объединение моделей**

В случае динамического комплексного расчета объединение моделей трех вышеуказанных уровней производится на основе схемы расщепления по физическим процессам [56]. 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 при необходимости 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 коррекция границ), а также коррекция макроскопических параметров двухфазной воздушной среды в пограничных слоях.

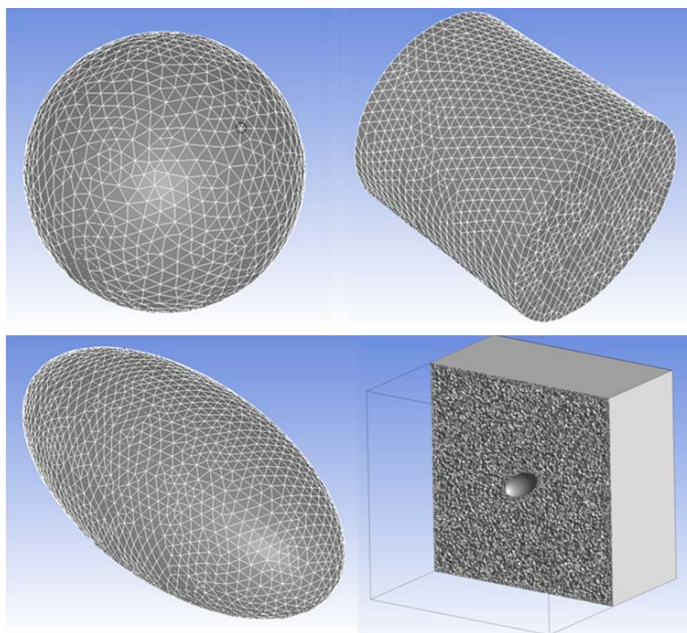
### **3. Численный алгоритм и параллельная реализация для решения задачи на макроуровне**

#### **3.1. Численный алгоритм макроуровня**

Систему уравнений (1)-(6) предлагается решать на основе явного по времени сеточного численного алгоритма, имеющего в своей основе метод контрольных объемов на сетках произвольного вида [57, 58]. Для дискретизации расчетной области нами 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. В качестве пространственных контрольных объемов использовались сами ячейки. Такой выбор связан с необходимостью будущей интеграции разработанных численных схем на макроуровне с методами частиц в ячейках [59].

Первичные грубые сетки в двумерном случае и треугольные сетки на поверхности гранул (см. рис. 4) строились по оригинальному алгоритму на основе критерия Делоне [60]. Первичные декартовы и призматические сетки также строились с помощью собственных алгоритмов. Первичные тетраэдральные сетки строились в пакете ANSYS CFX [61].



**Рис.4.** Треугольные сетки на поверхностях гранул (вверху и внизу слева) и тетраэдральная сетка (внизу справа) вблизи поверхности гранулы.

При решении КГД системы все параметры компонент газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относились к центрам масс ячеек. Поточковые переменные относились к центрам граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов КГД уравнений выполнялись по стандартным методикам (см., например, [62, 63]). Вычислительная схема по времени была явной и двухэтапной (предиктор-корректор). Для повышения устойчивости схемы применялся метод адаптивной искусственной вязкости [63].

При решении уравнений (5) использовались оригинальные экспонен-

циальные схемы на неструктурированных сетках [64]. При решении уравнения (6) использовались стандартные аппроксимации [65] и итерационные методы на основе схемы сопряженных градиентов с оператором перехода Якоби [66].

### 3.2. Параллельная реализация

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 в [23, 67, 68].

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". В некоторых случаях в зоне расположения гранул эти блины дополнительно разбивались в 2, 4 и т.д. раз. Дополнительно цилиндр разбивался по азимутальному углу равномерным способом. В итоге, нами использовалось двумерное разбиение по вычислителям (рис.5).

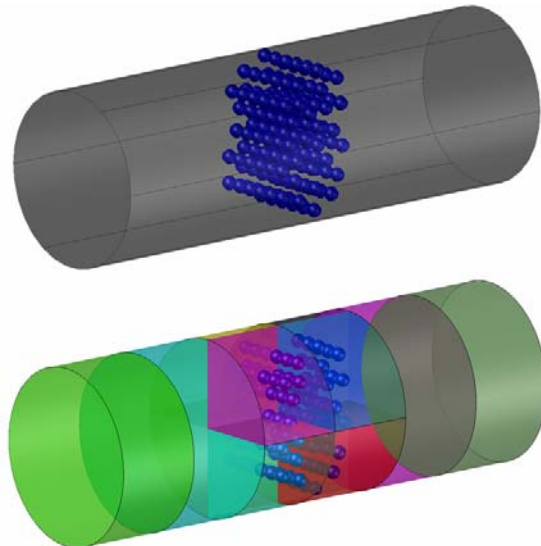


Рис.5. Трехмерная расчетная область (вверху) и ее разбиение (внизу) по вычислителям.

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.

Название СК, тип ВУ	Кол-во узлов	Тип сети, скорость (Гбит/с)	Тип процессоров, частота (ГГц)	Производительность (ТФлопс)	Кол-во ВУ на узле	Кол-во потоков на ВУ	Величина ОЗУ на узле (Гб)
K60, CPU	78	InfiniBand FDR, 56	Intel Xeon E5-2690 v4, 2.6	74.2	2	28	256
K60, GPU	8	InfiniBand FDR, 56	NVidia Tesla V100-PCIe, 1.75	240	4	5120	128
K48, VPU	16	OmniPath, 100	Intel Xeon Phi KNL 7250F, 1.4	48	1	272	112

Таблица 2.

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

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

\*\*) Хотя количество VPU на K48 равно 16, однако при использовании 64 потоков на каждом из них имеется возможность увеличить максимальную конфигурацию до 64 виртуальных ВУ.

Анализ приведенных в табл. 2 данных показывает, что при выбранных стратегии распараллеливания и алгоритме статической балансировки загрузки вычислителей на стартовой конфигурации (1 ВУ, т.е. 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 це-

почке через память CPU. Данная ситуация существенно улучшается, если вместо GPU NVidia Tesla V100-PCIe использовать модель NVidia Tesla V100-NVlink и сеть InfiniBand EDR.

Анализ данных 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 преимуществ 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 расчетов

В данном разделе рассмотрим результаты предварительных расчетов. Они были выполнены 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:

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

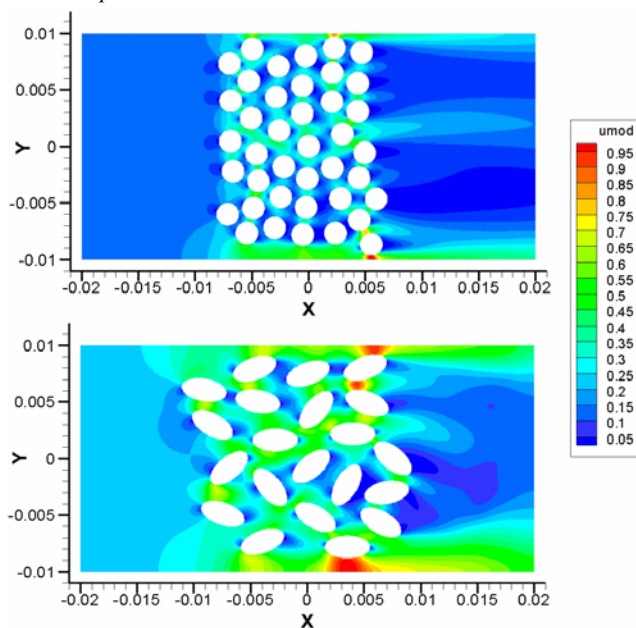
Здесь  $C_0$  – характерная концентрация загрязнителя в потоке,  $dV_C/dt$  – скорость изменения объема загрязненного воздуха (пропорциональна средней продольной скорости воздушного потока на входе в систему очистки

$\langle u_{x,in} \rangle = \int_S u_x(0, x, z) dy dz$ ,  $V_G = S_G h_G$  – максимальный объем загрязнения,

который могут удерживать 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).

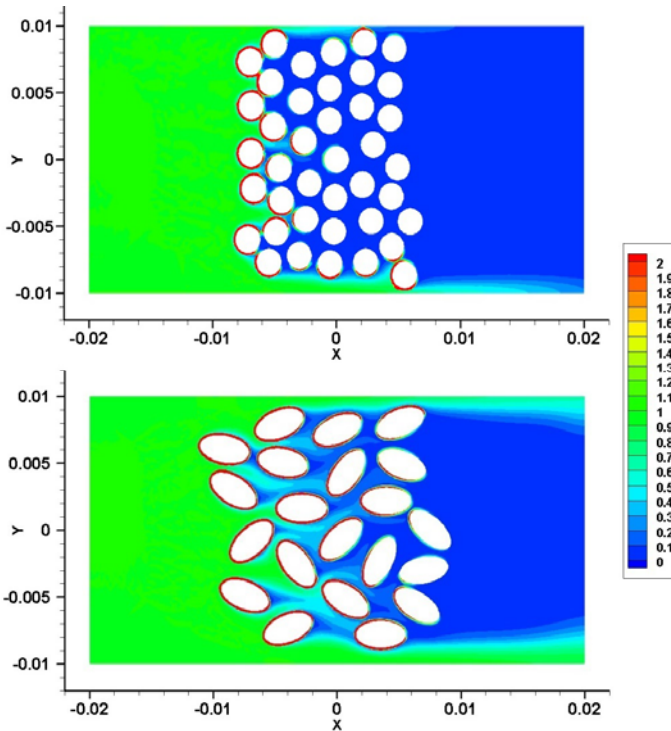
В качестве модельного примера в двумерном случае была рассмотрена расчетная область размером  $0.04 \text{ м} \times 0.02 \text{ м}$  (рис.6, 7), для которой было рассчитано сначала стационарное течение воздуха при нормальных условиях:  $T = 273.15 \text{ К}$ ,  $p = 101325 \text{ Па}$ ,  $\rho = 1.25 \text{ кг/м}^3$ ,  $\mu = 1.7894 \cdot 10^{-5} \text{ кг/(м} \cdot \text{с)}$ , 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  $0.001 \text{ м}$  в количестве 40) и овалы эллиптической формы (с главными осями  $0.002 \text{ м}$  и  $0.001 \text{ м}$  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 ( $S_{C\phi} = 1.2566 \text{ см}^2$ ,  $S_{Эл} = 1.3195 \text{ см}^2$ ).



**Рис.6.** Стационарные распределения модуля скорости в случае использования гранул сорбента круглой (вверху) и овальной (внизу) формы.



На рассчитанном стационарном поле скоростей (рис.6) 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 постоянно-му 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  $\bar{D} = 0.00001$ .



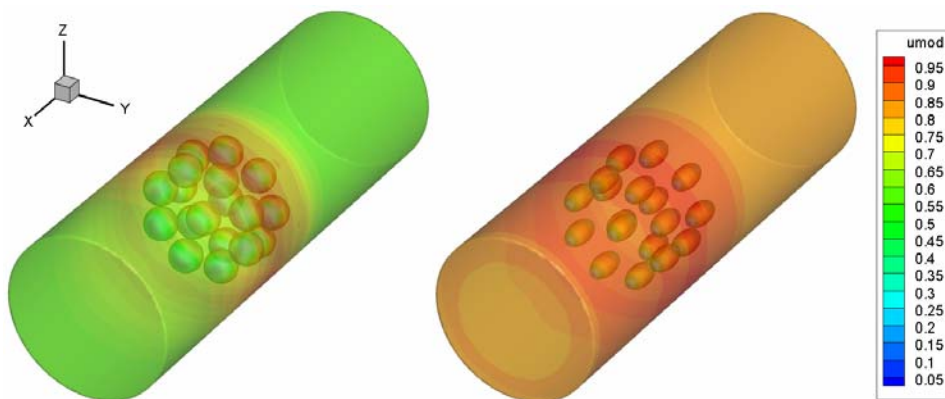
**Рис.7.** Квазистационарные распределения концентрации загрязнителя в случае использования гранул сорбента круглой (вверху) и овальной (внизу) формы.

Расчеты проводились на суперкомпьютере K60-CPU на криволинейных прямоугольных сетках соответственно с количеством ячеек 68996 и 68085. Результаты расчета квазистационарных распределений концентрации приведены на рис.7. 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.7 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.

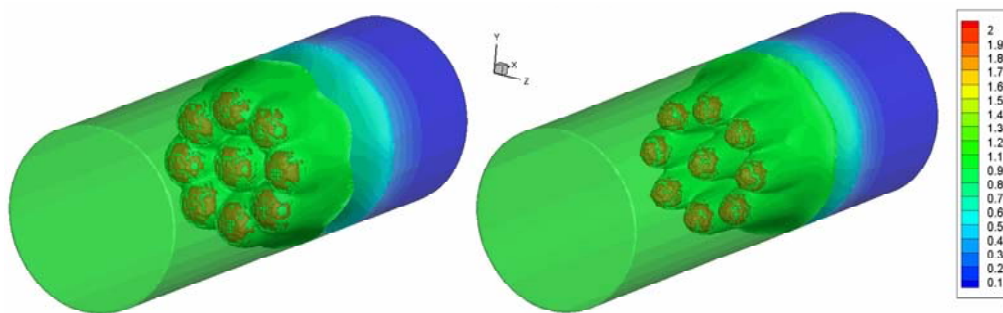
Если сравнивать поля концентраций, полученные для различной формы гранул, можно отметить, что круглые гранулы в целом дают лучший результат очистки по сравнению с овальными, однако из-за более плотной упаковки и меньшей длины поверхности фильтр с круглыми гранулами будет очищать воздушную среду менее продолжительное время.

Аналогичные трехмерные расчеты проводились для гранул шарообразной и овальной формы (рис.8). Расчеты проводились на полностью тетраэдральных сетках с количеством элементов соответственно 4 030 611, 4 147 648. Результаты расчета параметров течения хорошо согласуются с данными, рассчитанными дополнительно в пакете ANSYS CFX [61].



**Рис.8.** Стационарные распределения модуля скорости вблизи множества гранул сферической (слева) и овальной (справа) формы.

Квазистационарные распределения концентрации загрязнителя показаны на рис.9. Из рисунка видно, что на гранулах налип достаточно толстый слой наночастиц. При этом эффект очистки течения в целом не очень нагляден ввиду того, что в предварительном расчете рассмотрено малое число гранул. Тем не менее понятно, что расчет более реалистичной геометрии с точки зрения иллюстрации очистки воздушной среды будет аналогичен двумерному случаю.



**Рис.9.** Распределения концентрации загрязнителя вблизи множества гранул сферической (слева) и овальной (справа) формы в момент времени, когда часть загрязнителя адсорбировалась на гранулах.

### Заключение

В работе представлены результаты разработки аппарата моделирования процессов очистки воздушной среды от мелкодисперсных твердых загрязняющих нанопримесей. Выбранный способ очистки базируется на применении гранулированных сорбентов. В предлагаемом исследовании рассмотрена часть проблемы, связанная с расчетами прохождения воздушного потока, содержащего твердые наночастицы загрязнителя, через сорбирующий слой. Для этого предложены основные компоненты многомасштабной математической модели, а также численный алгоритм и параллельная реализация макроскопического уровня детализации. Новизна подхода связана с использованием квазигазодинамической модели. Предварительные тестовые расчеты подтвердили работоспособность разработанной вычислительной технологии.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.Н. Лысцов, Н.В. Мурзин. Проблемы безопасности нанотехнологий. - М.: МИФИ, 2007, 70 с.;  
V.N. Lystsov, N.V. Murzin. Problemy bezopasnosti nanotekhnologii. - М.: MIFI, 2007, 70 s.
2. Г.Е. Кричевский. Опасности и риски нанотехнологий и принципы контроля за нанотехнологиями и наноматериалами // Нанотехнологии и охрана здоровья, 2010, №3, с.10-24;  
G.E. Krichevskii. Opasnosti i riski nanotekhnologii i printsipy kontrolya za nanotekhnologiiami i nanomaterialami // Nanotekhnologii i okhrana zdorovia, 2010, №3, s.10-24.
3. Ю.Н. Моргалёв, Т.Г. Моргалёва, Н.С. Хоч, С.Ю. Моргалёв. Основы безопасности при обращении с наноматериалами. – Томск: Томский гос. университет, 2010, 138 с.;  
Iu.N. Morgalev, T.G. Morgaleva, N.S. Khoch, S.Iu. Morgalev. Osnovy bezopasnosti pri obrashchenii s nanomaterialami. – Tomsk: Tomskii gos. universitet, 2010, 138 s.

4. *В.В. Рыжкин.* Перспективы развития института общественного контроля в сфере наноиндустрии России // Креативная экономика, 2013, т.7, №10, с.52-58;  
*V.V. Ryzhkin.* Perspektivy razvitiia instituta obshchestvennogo kontroliia v sfere nano-industrii Rossii // Kreativnaia ekonomika, 2013, t.7, №10, s.52-58.
5. *В.Н. Ужов, Б.И. Мягков.* Очистка промышленных газов фильтрами. - М.: Химия, 1970, 319 с.;  
*V.N. Uzhov, B.I. Miagkov.* Ochistka promyshlennykh gazov filtrami. - M.: Khimiia, 1970, 319 s.
6. *И.Г. Пивоваров, Н.Г. Бугай, В.А. Рычко.* Дренаж с волокнистыми фильтрами. - Киев: Наукова думка, 1980, 211 с.;  
*I.G. Pivovarov, N.G. Bugai, V.A. Rychko.* Drenazh s voloknistymi filtrami. - Kiev: Naukova dumka, 1980, 211 s.
7. *М.Г. Мазус, М.Л. Мальгин, М.Л. Моргулис.* Фильтры для улавливания промышленных выбросов. - М.: Машиностроение, 1985, 240 с.;  
*M.G. Mazus, M.L. Malgin, M.L. Morgulis.* Filtry dlia ulavlivaniia promyshlennykh vybrosov. - M.: Mashinostroenie, 1985, 240 s.
8. *Е.А. Штокман.* Очистка воздуха от пыли на предприятиях пищевой промышленности. - М.: Агропромиздат, 1989, 312 с.;  
*E.A. Shtokman.* Ochistka vozdukha ot pyli na predpriiatiikh pishchevoi promyshlennosti. - M.: Agropromizdat, 1989, 312 s.
9. *С.Б. Старк.* Газоочистные аппараты и установки в металлургическом производстве. - М.: Металлургия, 1990, 321 с.;  
*S.B. Stark.* Gazoochistnyye apparaty i ustanovki v metallurgicheskom proizvodstve. - M.: Metallurgiiia, 1990, 321 s.
10. *Е.А. Штокман.* Очистка воздуха. - М.: АСВ, 2007, 313 с.;  
*E.A. Shtokman.* Ochistka vozdukha. - M.: ASV, 2007, 313 s.
11. *Н.Ф. Гладышев, Т.В. Гладышева, С.И. Дворецкий.* Системы и средства регенерации и очистки воздуха обитаемых герметичных объектов. - М.: ИД Спектр, 2016, 204 с.;  
*N.F. Gladyshev, T.V. Gladysheva, S.I. Dvoretiskii.* Sistemy i sredstva regeneratsii i ochistki vozdukha obitaemykh hermetichnykh obieektov. - M.: Izdatelskii dom Spektr, 2016, 204 s.
12. *В.С. Солдатов, А.А. Шункевич, В.В. Марцинкевич.* Сравнительные исследования процесса умягчения воды гранульными и волокнистыми ионитами // Журнал прикладной химии, 2001, т.74, №9, с.1477-1480;  
*V.S. Soldatov, A.A. Shunkevich, V.V. Martsinkevich.* Comparative study of water softening with granular and fibrous ion exchangers // Russian Journal of Applied Chemistry, 2001, v.74, №9, p.1521-1524.
13. *Е.А. Захарченко, О.Б. Моходоева, Г.В. Мясоедова.* Использование волокнистых "наполненных" сорбентов для динамического концентрирования благородных металлов // Сорбционные и хроматографические процессы, 2005, т.5, №5, с.679-689;  
*E.A. Zakharchenko, O.B. Mokhodoeva, G.V. Miasoedova.* Ispolzovanie voloknistykh "napolnennykh" sorbentov dlia dinamicheskogo kontsentrivaniia blagorodnykh metallov // Sorbtsionnye i khromatograficheskie protsessy, 2005, t.5, №5, s.679-689.
14. *И.В. Комарова, Н.К. Галкина, К.И. Шентовецкая.* Исследования волокнистого сорбента, наполненного катионитом КУ-2, с использованием математических моделей

- процесса умягчения воды // Сорбционные и хроматографические процессы, 2010, т.10, №3, с.371-377;
- I.V. Komarova, N.K. Galkina, K.I. Sheptovetskaia.* Issledovaniia voloknistogo sorbenta, napolnennogo kationitom KU-2, s ispolzovaniem matematicheskikh modelei protsessu umiagcheniia vody // Sorbtionnye i khromatograficheskie protsessy, 2010, t.10, №3, s.371-377.
15. *С.В. Колотилов, А.В. Швец, И.В. Василенко, Н.В. Касьян, В.В. Павлищук.* Пористые магнитные сорбенты на основе наночастиц  $Fe_3O_4$  для селективного извлечения оптически активных молекул // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии, 2008, т.6, №4, с.1261-1271;
- S.V. Kolotilov, A.V. Shvets, I.V. Vasilenko, N.V. Kasian, V.V. Pavlishchuk.* Poristye magnitnye sorbenty na osnove nanochastits  $Fe_3O_4$  dlia selektivnogo izvlecheniia opticheski aktivnykh molekul // Nanosistemy, nanomater., nanotekhnol., 2008, t.6, №4, s.1261-1271.
16. *Д.А. Сухарева, А.Г. Ганиева, В.Ю. Гуськов, Ф.Х. Кудашева.* Сорбционные свойства модифицированного наночастицами платины пористого полимера // Сорбционные и хроматографические процессы, 2014, т.14, №1, с.175-180;
- D.A. Sukhareva, A.G. Ganieva, V.Iu. Guskov, F.Kh. Kudasheva.* Sorbtionnye svoystva modifitsirovannogo nanochastitsami platiny poristogo polimera // Sorbtionnye i khromatograficheskie protsessy, 2014, t.14, №1, s.175-180.
17. *О.Р. Егунова, Т.А. Константинова, С.Н. Штыков.* Магнитные наночастицы магнетита в разделении и концентрировании // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология, 2014, т.14, №4, с.27-35;
- O.R. Egunova, T.A. Konstantinova, S.N. Shtykov.* Magnitnye nanochastitsy magnetita v razdelenii i kontsentrirovanii // Izv. Sarat. un-ta. Nov. ser. Ser. Khimiia. Biologiia. Ekologiia, 2014, t.14, №4, s.27-35.
18. *В.В. Толмачева, В.В. Апяри, Е.В. Кочук, С.Г. Дмитриенко.* Магнитные сорбенты на основе наночастиц оксидов железа для выделения и концентрирования органических соединений // Журнал аналитической химии, 2016, т.71, №4, с.339-356;
- V.V. Tolmacheva, V.V. Apyari, E.V. Kochuk, S.G. Dmitrienko.* Magnetic adsorbents based on iron oxide nanoparticles for the extraction and preconcentration of organic compounds // Journal of Analytical Chemistry, 2016, v.71, №4, p.321-338.
19. *Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, С.В. Поляков.* Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Матем. моделирование, 2015, т.27, №7, с.65-74;
- Yu.N. Karamzin, T.A. Kudryashova, V.O. Podryga, S.V. Polyakov.* Mnogomasshtabnoe modelirovanie nelineinykh protsessov v tekhnicheskikh mikrosistemakh // Matem. modelirovanie, 2015, t.27, №7, s.65-74.
20. *Т. Кудряшова, Ю. Карамзин, В. Подрыга, С. Поляков.* Two-scale computation of N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> jet flow based on QGD and MMD on heterogeneous multi-core hardware // Advances in Engineering Software, 2018, v.120, p.79-87.
21. *В.О. Подрыга, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков.* 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, v. 2, p.2331-2345.

22. *В.О. Подрыга*. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // ДАН, 2016, т.469, №6, с.656-658;  
*V.O. Podryga*. Multiscale approach to computation of three-dimensional gas mixture flows in engineering microchannels // Doklady Mathematics, 2016, v.94, №1, p.458-460.
23. *В.О. Подрыга, С.В. Поляков*. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование, 2016, т.17, №2, с.147-165;  
*V.O. Podryga, S.V. Polyakov*. Parallelnaia realizatsiia mnogomasshtabnogo podkhoda dlia rascheta mikrotechenii gaza // Vychislitelnye metody i programmirovaniye, 2016, t.17, №2, s.147-165.
24. *В.О. Подрыга, С.В. Поляков*. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум. - М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016, №81, 52 с.;  
*V.O. Podryga, S.V. Polyakov*. Mnogomasshtabnoye modelirovaniye istecheniia gazovoi strui v vakuum. - M: Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2016, №81, 52 s.
25. *Т. Кудряшова, В. Подрыга, С. Поляков*. НРС-simulation of gasdynamic flows on macroscopic and molecular levels // Nonlinearity. Problems, Solutions and Applications. - NY: Nova Science Publishers, 2017, v.1, ch.26, p.543-556.
26. *Л.И. Хейфец, А.В. Неймарк*. Многофазные процессы в пористых средах. - М.: Химия, 1982, 320 с.;  
*L.I. Kheifets, A.V. Neimark*. Mnogofaznyye protsessy v poristykh sredakh. - M.: Khimiia, 1982, 320 s.
27. *Н.В. Чураев*. Физико-химия процессов массопереноса в пористых телах. - М.: Химия, 1990, 272 с.;  
*N.V. Churaev*. Fiziko-khimiia protsessov massopere-nosa v poristykh telakh. - M.: Khimiia, 1990, 272 s.
28. *П.В. Москалев, В.В. Шитов*. Математическое моделирование пористых систем. - М.: Физматлит, 2007, 120 с.;  
*P.V. Moskalev, V.V. Shitov*. Matematicheskoye modelirovaniye poristykh sistem. - M.: Fizmatlit, 2007, 120 s.
29. *А.Э. Шейдеггер*. Физика течения жидкостей через пористые среды. - М.-Ижевск: ИКИ, 2008, 254 с.;  
*A.E. Scheidegger*. The physics of flow through porous media. - NY: Macmillan Co., 1960, 313 p.
30. *С.А. Рейтлингер*. Проницаемость полимерных материалов. - М.: Химия, 1974, 269 с.;  
*S.A. Reitlinger*. Pronitsaemost polimernykh materialov. - M.: Khimiia, 1974, 269 s.
31. *А.А. Малкин, А.Е. Чалых*. Диффузия и вязкость полимеров: Методы измерения. - М.: Химия, 1979, 304 с.;  
*A.Ia. Malkin, A.E. Chalykh*. Diffuziia i viazkost polimerov: Metody izmereniia. - M.: Khimiia, 1979, 304 s.
32. *А.Е. Чалых*. Диффузия в полимерных системах. - М.: Химия, 1987, 312 с.;  
*A.E. Chalykh*. Diffuziia v polimernykh sistemakh. - M.: Khimiia, 1987, 312 s.
33. *И.И. Ворович, В.М. Александров*. Механика контактных взаимодействий. - М.: Физматлит, 2001, 672 с.;  
*I.I. Vorovich, V.M. Aleksandrov*. Mekhanika kontaktnykh vzaimodeistvii. - M.: Fizmatlit, 2001, 672 s.

34. *Н.К. Мышкин, М.И. Петроковец.* Трение, смазка, износ. Физические основы и технические приложения трибологии. - М.: Физматлит, 2007, 368 с.;  
*N.K. Myshkin, M.I. Petrokovets.* Trenie, smazka, iznos. Fizicheskie osnovy i tekhnicheskie prilozheniia tribologii. - М.: Fizmatlit, 2007, 368 s.
35. *В.Г. Заводинский.* Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. - М.: Физматлит, 2013, 174 с.;  
*V.G. Zavodinskii.* Kompiuternoe modelirovanie nanochastits i nanosistem. - М.: Fizmatlit, 2013, 174 s.
36. *Р. Хокни, Дж. Иствуд.* Численное моделирование методом частиц. - М.: Мир, 1987, 640 с.;  
*R.W. Hockney, J.W. Eastwood.* Computer simulation using particles. - Adam Hilger, Bristol, NY: IOP Publishing Ltd, 1988, 540 p.
37. *М.Р. Аллен, Д.Дж. Тилдесли.* Computer simulation of liquids. - Oxford: Oxford Univ. Press, 1989, 385 p.
38. *Дж.М. Хаиле.* Molecular dynamics simulations. elementary methods. - NY: John Wiley & Sons, Inc., 1992, 489 p.
39. *Д. Френкел, В. Смит.* Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. - San Diego: Academic Press, 2002, 638 p.
40. *Д.С. Рапорт.* The art of molecular dynamics simulation. - Cambridge: Cambridge University Press, 2004, 564 p.
41. *Дж.Е. Леннард-Джонс.* Cohesion // Proc. Phys. Soc., 1931, v.43, №5, p.461-482.
42. *Л. Верлет.* Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev., 1967, v.159, p.98-103.
43. *Н. Метрополис, С. Улам.* The Monte Carlo method // Journal of the American Statistical Association, 1949, v.44, №247, p.335-341.
44. *И.М. Соболев.* Метод Монте-Карло. - М.: Наука, 1968, 64 с.;  
*I.M. Sobol.* The Monte Carlo method. - Chicago: Chicago University Press, 1974, 72 p.
45. *Г.С. Фишман.* Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications. - Springer, 1996, 722 p.
46. *О.М. Белоцерковский, Ю.И. Хлопков.* Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа. - М.: Азбука, 2008, 330 с.;  
*O.M. Belotserkovskii, Yu.I. Khlopkov.* Monte-Carlo methods in mechanics of fluids and gas. - NY, London, Singapore, Hong Kong, Beijing: World Scientific Publishing Ltd., 2010, 268 p.
47. *В.Н. Четверушкин.* Kinetic schemes and quasi-gasdynamics system of equations. - Barcelona: CIMNE, 2008, 298 p.
48. *Т.Г. Елизарова.* Quasi-gas dynamic equations. - Berlin, Heidelberg, NY: Springer-Verlag, 2009, 286 p.
49. *Ю.В. Шеретов.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. - М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2009, 400 с.;  
*Iu.V. Sheretov.* Dinamika sploshnykh sred pri prostranstvenno-vremennom osrednenii. - М.-Izhevsk: NITs "Reguliarnaia i khaoticheskaia dinamika", 2009, 400 s.
50. *Т.Г. Елизарова, А.А. Злотник, Б.Н. Четверушкин.* О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // ДАН, 2014, т.459, №4, с.395-399;

- T.G. Elizarova, A.A. Zlotnik, B.N. Chetverushkin.* On quasi-gasdynamic and quasi-hydrodynamic equations for binary gas mixtures // *Doklady Mathematics*, 2014, v.90, №3, p. 719-723.
51. *А.А. Злотник, В.А. Гаврилин.* О дискретизации одномерной квазигидродинамической системы уравнений для реального газа // *Вестник Московского энергетического института*, 2016, №1, с.5-14;  
*A.A. Zlotnik, V.A. Gavrilin.* O diskretizatsii odnomernoї kvazigidrodinamicheskoi sistemy uravnenii dlia realnogo gaza // *Vestnik Moskovskogo energeticheskogo instituta*, 2016, №1, s.5-14.
52. *А.А. Злотник.* Энтропийно консервативная пространственная дискретизация многомерной квазигазодинамической системы уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2017, т.57, №4, с.710-729;  
*A.A. Zlotnik.* Entropy-conservative spatial discretization of the multidimensional quasi-gasdynamic system of equations // *Comp. Math.&Math. Phys.*, 2017, v.57, №4, p.706-725.
53. *В.О. Подрыга, С.В. Поляков.* Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. - М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2014. № 41. 20 с.;  
*V.O. Podryga, S.V. Polyakov.* Molekuliarno-dinamicheskoe modelirovanie protsessa ustanovleniia termodinamicheskogo ravnovesiia nagretogo nikelia. - M: Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2014, № 41, 20 s.
54. *В.О. Подрыга, С.В. Поляков, Д.В. Пузырьков.* Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // *Вычислительные методы и программирование*, 2015, т.16, №1, с.123-138;  
*V.O. Podryga, S.V. Polyakov, D.V. Puzyrkov.* Superkompiuternoe molekuliarno modelirovanie termodinamicheskogo ravnovesiia v mikrosistemakh gaz-metall // *Vychislitelnye metody i programmirovaniie*, 2015, t.16, №1, s.123-138.
55. *В.О. Подрыга, С.В. Поляков.* Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе. - М: Препр. ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016, № 80, 26с.;  
*V.O. Podryga, S.V. Polyakov.* Molekuliarno-dinamicheskii raschet makroparametrov gaza v potoke i na granitse. - M: Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2016, № 80, 26 s.
56. *Г.И. Марчук.* Методы расщепления. - М.: Наука, 1988, 263 с.;  
*G.I. Marchuk.* Metody rasshchepleniia. - M.: Nauka, 1988, 263 s.
57. *R. Eymard, T.R. Gallouet, R. Herbin.* The finite volume method // *Handbook of Numerical Analysis*. - Amsterdam: North Holland Publishing Company, 2000, v.7, p.713-1020.
58. *R. Li, Zh. Chen, W. Wu.* Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. - NY: Marcel Dekker Inc., 2000, 472 p.
59. *Ю.Н. Григорьев, В.А. Вишневков, М.П. Федорук.* Численное моделирование методами частиц в ячейках. - Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004, 360 с.;  
*Yu.N. Grigoriev, V.A. Vshivkov, M.P. Fedoruk.* Numerical 'Particle-In-Cell' Methods: Theory and Applications. - Utrecht, Boston: VSP, 2002, 249 p.
60. *И.В. Попов, С.В. Поляков.* Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей // *Матем. моделирование*, 2002, т.14, №6, с.25-35;



- I.V. Popov, S.V. Polyakov.* Postroenie adaptivnykh neregularnykh treugolnykh setok dlia dvumernykh mnogosviaznykh nevypuklykh oblastei // *Matem. modelirovanie*, 2002, t.14, №6, s.25-35.
61. Вычислительная гидродинамика в ANSYS CFX. URL: <https://www.cadfem-cis.ru/products/ansys/fluids/cfx/>;  
Computational fluid dynamics in ANSYS CFX. URL: <https://www.cadfem-cis.ru/products/ansys/fluids/cfx/>
62. *W. Gautschi.* Numerical analysis. - NY: Springer / Birkhuser, 2012, 588 p.
63. *И.В. Понов, И.В. Фрязинов.* Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. - М.: КРАСАНД, 2015, 288 с.;  
*I.V. Popov, I.V. Fryazinov.* Metod adaptivnoi iskusstvennoi viazkosti chislennoho resheniia uravnenii gazovoi dinamiki. - М.: KRASAND, 2015, 288 s.
64. *Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков.* Экспоненциальные конечно-объемные схемы для решения эллиптических и параболических уравнений общего вида на нерегулярных сетках // *Сеточные методы для краевых задач и приложения*, Матер.Восьмой Всероссийской конф. - Казань: Изд-во Казанского гос. университета, 2010, с.234-248;  
*Yu.N. Karamzin, S.V. Polyakov.* Eksponentsialnye konechno-obiemnyye skhemy dlia resheniia ellipticheskikh i parabolicheskikh uravnenii obshchego vida na neregularnykh setkakh // *Setochnye metody dlia kraevykh zadach i prilozheniia*, Materialy Vosmoi Vserossiiskoi konf. - Kazan: Izd-vo Kazanskogo gos. universiteta, 2010, s.234-248.
65. *А.А. Самарский.* Введение в теорию разностных схем. - М.: Наука, 1971, 553 с.;  
*A.A. Samarskii.* Vvedenie v teoriu raznostnykh skhem. - М.: Nauka, 1971, 553 s.
66. *А.А. Самарский, Е.С. Николаев.* Методы решения сеточных уравнений. - М.: Наука, 1976, 532 с.;  
*A.A. Samarskii, E.S. Nikolaev.* Metody resheniia setochnykh uravnenii. - М.: Nauka, 1976, 532 s.
67. *С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, А.А. Свердлин, Э.М. Кононов, О.А. Косолапов.* Параллельный программный комплекс для решения задач механики сплошной среды на современных многопроцессорных системах // *Матем. моделирование*, 2010, т.22, №6, с.132-146;  
*S.V. Polyakov, T.A. Kudryashova, A.A. Sverdlin, E.M. Kononov, O.A. Kosolapov.* Parallel software package for simulation of continuum mechanics problems on modern multiprocessor systems // *Math. Models & Comput. Simul.*, 2011, v.3, №1, p.46-57.
68. *Yu. Karamzin, T. Kudryashova, V. Podryga, S. Polyakov.* Numerical simulation of the gas mixture flows using hybrid computer systems // *Proc. of the Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (ECT 2014)*. - Stirlingshire, UK: Civil-Comp Press, 2014, Paper 28 (14 p.).

Поступила в редакцию 15.04.2019

После доработки 15.04.2019

Принята к публикации 20.05.2019