

Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова  
Факультет вычислительной математики и кибернетики

На правах рукописи

Загидуллин Ришат Раилевич

**Математическое моделирование пространственно-неоднородных  
процессов агрегации**

Специальность 1.2.2

«Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ»

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва 2024

Работа выполнена на кафедре автоматизации научных исследований факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент

**Смирнов Александр Павлович**

Официальные оппоненты: **Богомолов Сергей Владимирович**, доктор физико-математических наук, доцент, МГУ имени М.В. Ломоносова, профессор кафедры вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики

**Сетуха Алексей Викторович**, доктор физико-математических наук, профессор, Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ, ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительных методов

**Сорокин Андрей Александрович**, кандидат физико-математических наук, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, старший научный сотрудник лаборатории 71

Защита состоится 21 февраля 2024 г. в 16 ч. 30 мин. На заседании диссертационного совета МГУ.012.1 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, строение 52, факультет ВМК, ауд. 685.

E-mail: ilgova@cs.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале:

<https://dissovet.msu.ru/dissertation/012.1/2848>.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ года.

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ.012.1,

доктор физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН

Ильин А.В.

# Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Коагуляция в неоднородной среде является малоизученной областью кинетики агрегации. Это может быть связано с несколькими причинами. Во-первых, даже пространственно-однородные случаи могут быть сложными для моделирования, к примеру, в задачах многокомпонентной коагуляции или трехчастичных столкновений. Во-вторых, учет неоднородности среды может усложнить модель настолько, что аналитическое решение зачастую получить невозможно. Поэтому анализ таких систем сводится к численному моделированию, что в некоторой степени затрудняет обобщение полученных результатов. Наконец, необходимо изучить взаимодействие неоднородной среды и процессов агрегации, так как исследование их влияния друг на друга позволит строить более полные модели и получать более точные результаты.

Изучение процессов агрегации актуально также с прикладной точки зрения. Многие мониторинговые исследования свидетельствуют о вреде частиц малого диаметра ( $PM_{2,5}$  и  $PM_{10}$ ). Такие частицы могут образовываться в результате слипания более мелких коагулянтов. Из этих работ можно сделать вывод, что загрязнение воздуха твердыми частицами напрямую влияет на здоровье населения, поэтому важно прогнозировать (а затем регулировать) динамику твердых частиц в атмосфере.

**Цель и задачи.** В этом диссертационном исследовании мы ставим целью внесение вклада в формирование теории коагуляции в условиях пространственной неоднородности. Мы хотим получить новые аналитические результаты, представить разработанные численные схемы и валидировать рассмотренные модели на экспериментальных данных. Важной составляющей разработки численных схем является написание программ для решения постановок задач, и их оформление в удобном для других пользователей виде. Таким образом, для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. применить известные методы математического моделирования для исследования процессов агрегации в неоднородной среде в простейшем одномерном случае; использовать полученную модель как базовую для дальнейших разработок;

2. изучить возможность получения аналитических выводов при исследовании базовой модели;
3. реализовать численные схемы для более общих моделей в двумерной и трехмерной средах;
4. разработать программный комплекс для моделирования процессов агрегации в неоднородной среде, позволяющий рассматривать модели в  $1/2/3D$  пространствах и использовать высокопроизводительные вычисления.

**Объектом исследования** является уравнение Смолуховского, описывающее процесс агрегации системы частиц, а также уравнения переноса и диффузии, добавляющие в рассматриваемую систему пространственную неоднородность. **Предметом исследования** являются численные и аналитические решения рассматриваемых постановок задач, а также свойства используемых численных схем.

**Научная новизна.** В рамках данной работы были получены аналитические формулировки для неоднородной коагуляции в одномерном пространстве в стационарном случае. Также было сформулировано ядро агрегации для вещества, находящегося в потоке. Помимо этого была реализована численная схема для решения задач коагуляции в неоднородной среде в одномерном/двумерном/трехмерном случаях. Численные решения можно получить как на декартовой сетке, так и на неструктурированной. При этом написанный программный пакет, в котором представлена реализация численного решения, может запускаться на параллельных архитектурах, что позволяет получить ускорение работы программы в сотни раз.

**Теоретическая и практическая значимость.** Теоретическая значимость работы заключается в получении аналитических результатов важных для обобщения теории коагуляции до случаев неоднородной среды. Предложенные методы моделирования представляют ценность как инструмент анализа и изучения неоднородных агрегирующих систем. Говорить о практической значимости нам позволяет разработанный комплекс программ, включающий в себя инструменты для исследования моделей в  $1/2/3D$  пространствах, визуализацию, построение графиков, высокопроизводительные вычисления.

**Методы исследования.** В работе используются аналитические и численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, методы вычислительной математики и компьютерного моделирования.

**Положения, выносимые на защиту.**

- Разработаны методы моделирования процессов агрегации в неоднородной среде путем решения задач переноса-диффузии-коагуляции. Пространственная компонента варьируется от одномерных до трехмерных случаев. Для одномерного случая помимо численных результатов получены также аналитические выводы. На основе моделирования движения агрегирующих частиц в потоке с радиальной симметрией получены корректировки для диффузионного ядра агрегации в пространственно-неоднородных случаях.
- Реализованы оптимальные численные схемы: для коагуляционной составляющей уравнений применены методы быстрого решения операторов Смолуховского. Для переноса и диффузии написан широкий набор схем, позволяющий помимо важных свойств аппроксимации, сходимости и устойчивости, также добиться сохранения монотонности и консервативности. Получены как явные, так и неявные схемы. Также они работают как на регулярной сетке, так и на неструктурированной. Наконец, представлены параллельные варианты численных алгоритмов, позволяющие проводить расчеты на больших вычислительных кластерах с использованием ЦПУ и ГПУ.
- Собраны программные пакеты и выложены в открытый доступ. Предоставлены инструменты для моделирования процессов агрегации (на языке C++ с использованием параллельных технологий MPI, CUDA), а также для визуализации полученных результатов (Python, OpenGL). Код оформлен с использованием принципов объектно-ориентированного программирования, что позволяет другим заинтересованным лицам пользоваться кодами в виде библиотеки, а также без большого труда модифицировать их для своих нужд. Коды находятся по адресу [github.com/RishatZagidullin](https://github.com/RishatZagidullin).

**Апробация результатов.** Основные результаты данной диссертационной работы докладывались автором и обсуждались

- на семинаре “Мир в капле” ИКИ РАН,

а также на конференциях:

- “6th China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications” (МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, 2017)
- “Тихоновские чтения 2018” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2018),
- “5th International Conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications” (Сколково, Москва, 2019)
- “Russian Supercomputing Days” (Москва, 2019)
- “Тихоновские чтения 2020” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2020),
- “Ломоносовские чтения 2021” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2021),
- “Тихоновские чтения 2021” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2021).

**Достоверность результатов.** Численные решения рассматриваемых постановок задач исследовались на сходимость путем сравнения расчетов на сектах с разной дискретизацией и вычисления относительной погрешности. Также некоторые численные решения сравнивались с аналитическими расчетами и проходили тесты на корректность результатов для упрощенных постановок задач.

**Публикации.** По теме работы было опубликовано 7 статей (все входят в перечень ВАК).

**Личный вклад автора.** В работе [1] автор занимался программной реализацией численного решения поставленного уравнения, проведением численных экспериментов, а также построением графиков. Матвеев Сергей Александрович и Тыртышников Евгений Евгеньевич представили постановку задачи а также способ оптимального решения оператора Смолуховского, Смирнов Александр Павлович разработал численную схему. В работах [2,3] автору принадлежит идея способов параллельной реализации и сами эти реализации алгоритмов и проведение численных экспериментов на суперкомпьютере Ломоносов и построение графиков. Авторству Матвеева С.А. принадлежат

проведение численных экспериментов на кластерах Сколтеха и ИВМ РАН, а также построение графиков. В исследовании [4] автору принадлежит оформление постановки задачи, разработка численной схемы, проведение экспериментов, построение графиков, анализ сходимости. В статье [5] постановка задачи и аналитические выводы принадлежат Крапивскому Павлу Львовичу. Идея использования свернутого оператора переноса-диффузии принадлежит Смирнову А.П. Численная реализация, валидация аналитических выводов численными расчетами и построение графиков выполнялись автором. Наконец, в работе [6] постановка задачи принадлежит Бриллиантову Николаю Васильевичу. Аналитические выводы выполнялись совместно Смирновым А.П. и автором диссертации. Идея использования рациональной аппроксимации принадлежит Бриллиантову Н.В. Численные расчеты и построение графиков проводились автором. Работа [7] полностью выполнена автором.

**Структура и объем работы.** Работа состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Общий объем – 109 страниц, включая 28 рисунков, 15 таблиц и список литературы из 116 наименований.

**Благодарности.** Автор выражает огромную признательность своему научному руководителю Смирнову Александру Павловичу за чуткое руководство, помощь и экспертизу при проведении исследований и подготовке публикаций. Только благодаря ему у автора сформировался интерес к научной деятельности, и данная работа была доведена до написания диссертации. Также автор хочет выразить благодарность доценту кафедры ВТМ факультета ВМК МГУ Матвееву Сергею Александровичу и профессору Сколтеха Бриллиантову Николаю Васильевичу за неоценимый вклад в данное исследование. Без их экспертизы проведение исследований в рамках данной работы было бы невозможным. Наконец, автор очень признателен своей семье и близким: за моральную поддержку, помощь в работе над диссертацией и ценные замечания и исправления автор благодарен Липковой Елизавете; за возможность оказаться на исследовательском пути автор благодарит Загидуллина Раиля, Загидуллину Альфию.

# Краткое содержание диссертации

**Во введении** определены цель и задачи работы, указаны научная новизна и значимость, кратко представлены результаты диссертационного исследования. Кроме того сформулированы основные уравнения агрегации в дискретной и непрерывной формах.

**В первой главе** рассмотрены процессы агрегации в одномерном пространстве. **В первом параграфе** рассмотрена модель, которая служит основанием для дальнейших наработок в диссертации. В нее вносится максимальный допустимый размер частиц  $V_{\max}$  – при достижении этого размера частицы перестают участвовать в процессе коагуляции:

$$\frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} + \mathcal{V}(v) \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x} = \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v-u) f(t, x, u) f(t, x, v-u) du - f(t, x, v) \int_0^{V_{\max}} K(u, v) f(t, x, u) du, \quad (1)$$

где  $x$  – пространственная координата,  $v, u$  – координаты размера частицы, искомая функция  $f$  – концентрация частиц,  $\mathcal{V}(v)$  – поле скоростей. Оператор коагуляции приведен в интегральной форме.  $K(u, v)$  – ядро коагуляции, характеризующее скорости реакции слияния частиц размера  $[u] + [v] \rightarrow [u + v]$ . Первый член в правой части описывает увеличение концентрации частиц размера  $v$  за счет слияния  $u$  с  $v - u$ . Второй член описывает уменьшение концентрации частиц размера  $v$  в результате их слияния с всеми другими агрегатами. Также в модели участвует оператор переноса (второй член левой части уравнения).

Можно получить постановку задачи в области  $(t, x, v) \in [0; \infty] \times [0; \infty] \times [0; V_{\max}]$ . Вдоль оси  $x \geq 0$  осуществляется перенос коагулирующих частиц со скоростью  $\mathcal{V}(v)$ . При известном граничном условии  $f(t, x = 0, v)$  и заданных начальных условиях  $f(t = 0, x, v)$  имеем задачу Коши для модели переноса коагулирующих частиц. Данная постановка задачи решается численно методом разделения операторов. Прежде чем вычислить интегралы Смолуховского можно преобразовать ядро коагуляции при помощи скелетного разложения. В случае малого ранга ядра вычисление интегралов в разложенном виде позволяет заметно снизить время расчетов. Результаты численных экс-

периментов показывают, что существует такой выбор параметров модели, при котором образуются пространственно неоднородные стационарные распределения частиц (см. Рис. 1).

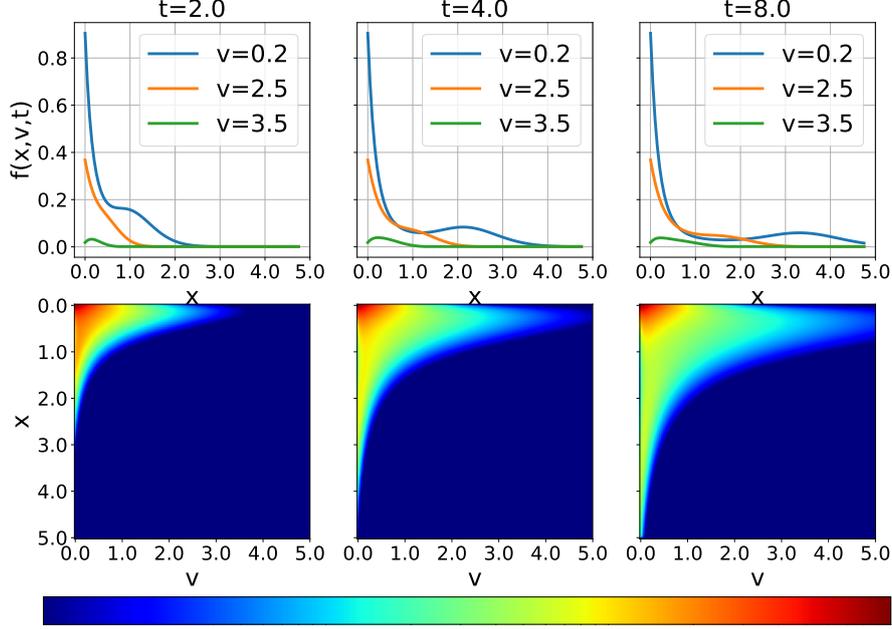


Рис. 1: Перенос по  $x$  частиц фиксированных размеров (сверху). Распределение частиц по размерам (снизу) при скорости переноса  $\mathcal{V}(v) = (v + 1)^{-1}$  для баллистического ядра коагуляции  $K(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 |(u + 1)^{-1} - (v + 1)^{-1}|$ .

**Во втором параграфе первой главы** мы рассмотрели процессы агрегации с локализованным источником мономеров:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_k}{\partial t} + V_k \frac{\partial c_k}{\partial x} &= \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j} c_j \\ &+ D_k \frac{\partial^2 c_k}{\partial x^2} + J \delta_{k,1} \delta(x). \end{aligned} \quad (2)$$

По сравнению с предыдущей формулировкой уравнения Смолуховского добавлены некоторые новые члены. Третий член правой части уравнения – оператор диффузии с коэффициентами  $D_k$  для кластеров размера  $k$ . Следующий член представляет собой источник мономеров при  $x = 0$ . Уравнение представлено в дискретной форме.

Мы провели аналитический и численный анализ данного уравнения. На-

личие источника мономеров влечет за собой появление квазистационарных решений. Такие решения не зависят от времени в пределах некоторого интервала длины, неограниченно расширяющегося с течением времени. Сначала мы рассмотрели простейшую модель постоянных кинетических коэффициентов. Для этой модели можно получить точное аналитическое решение для плотности агломератов разного размера в зависимости от пространственной координаты. Далее мы рассмотрели более реалистичную модель с массозависимыми коэффициентами. Для стационарного случая уравнения диффузии-адвекции-коагуляции могут быть сведены к зависящим от времени уравнениям типа Смолуховского для пространственно-однородной системы. Мы также показали, что в отличие от обычных уравнений Смолуховского, где полная масса кластеров сохраняется, в наших системах сохраняется момент порядка  $5/3$  на достаточно далеком от источника пространственном интервале. На основе этого квазизакон сохранения развита скейлинговая теория плотностей агломератов и их массы. Корректность аналитических результатов проверяется при помощи численного моделирования (см. Рис. 2, 3).

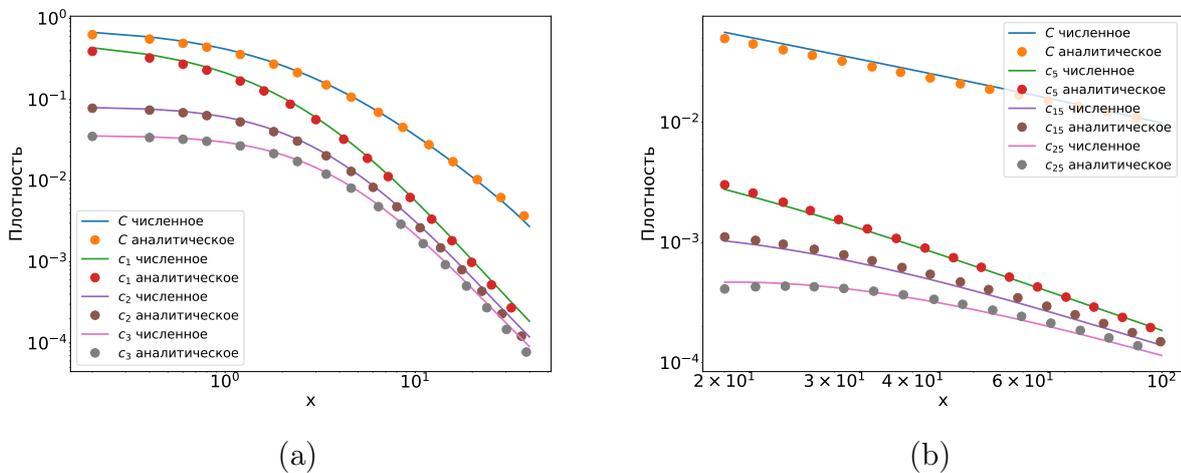


Рис. 2: Стационарные решения ( $t = 200$ ). Сравнение аналитических выводов (точки) с численным решением (линии) уравнения (2). **(а)** Система без переноса.  $D = 1, K = 1, J = 1$  и  $V = 0$ . **(б)** Система с переносом.  $D = 1, K = 1, J = 1$  и  $V = 1$ .

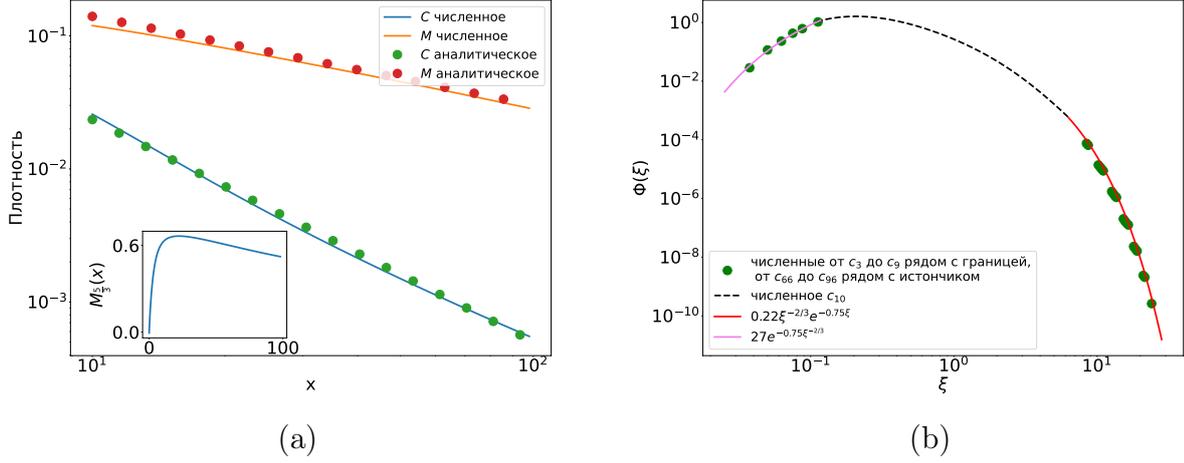


Рис. 3: Стационарные решения ( $t = 200$ ) для системы диффузии-адвекции-коагуляции (2) с массозависимыми коэффициентами с баллистическим ядром. **(а)** Полная масса  $m(x)$  и полная концентрация  $c(x)$  как функции расстояния  $x$  от начала координат. Линии — численные результаты, точки — теория масштабирования. На вставке показана зависимость  $M_{5/3}$  от  $x$ . **(б)** График зависимости  $x^{8/3}c_k(x)$  от  $\xi = k/x$  для различных значений  $k$ . Точки (численные расчеты) находятся на одной кривой, соответствующей аналитической скейлинговой функции.

**В последнем параграфе** мы привели пример использования рассмотренных моделей в контексте изучения динамики аэрозолей. Для этого мы используем данные о суточных изменениях концентрации частиц и распределения по размерам, вызванных естественными изменениями концентрации озона. Полевые опыты проводились в акватории озера Байкал. Твердые частицы здесь в основном природного происхождения — они образуются при лесных пожарах и переносятся ветром. Мы наблюдаем периодическое изменение среднего размера частиц, которое антикоррелирует с периодическим изменением концентрации озона; аналогичным образом изменяется распределение частиц по размерам. Чтобы объяснить полученные наблюдения к модельным уравнениям добавляются вспомогательные:

$$\frac{dq}{dt} = \chi C_{oz} \cdot (q_{\max} - q)\Theta(q_{\max} - q) - \xi q, \quad (3)$$

где  $q$  — реакционный параметр, через который образуется связь между динамикой озона и агрегирующих частиц,  $C_{oz}$  — концентрация озона (связанная с солнечной активностью, а  $q_{\max}$  — максимальная плотность реакционного параметра. Параметры  $\chi$  и  $\xi$  определяют соответственно скорость реакции

озона с поверхностью, приводящую к образованию и исчезновению  $q$  из-за различных химических или физических процессов. Влияние концентрации озона на процесс агрегации происходит через ядро коагуляции:

$$K_{ij} \rightarrow K_{ij} \cdot (1 + q). \quad (4)$$

Численно решив указанные уравнения и подобрав параметры можно получить соответствие результатов с полевыми измерениями (см. Рис. 4).

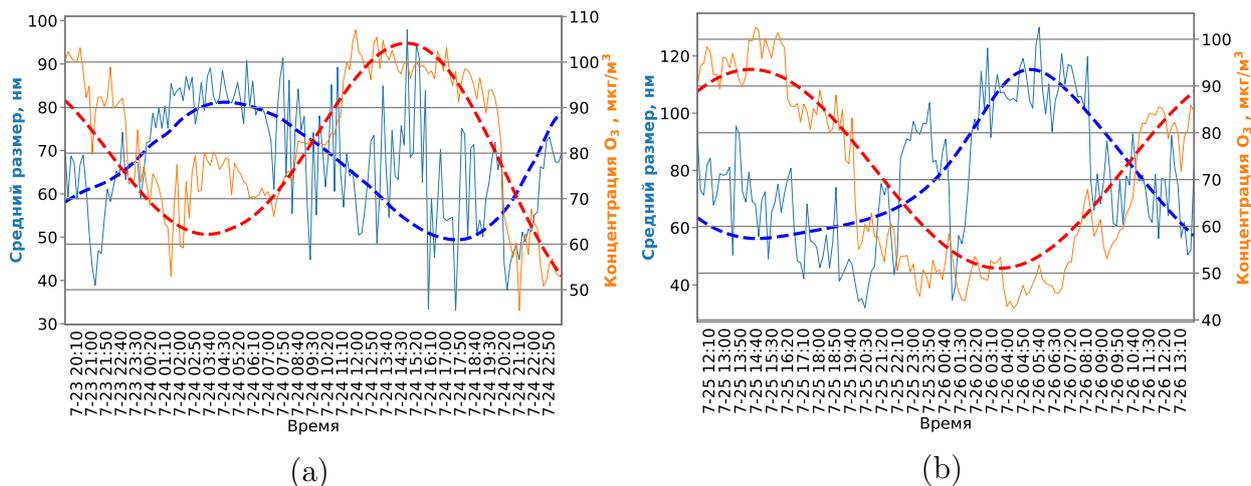


Рис. 4: Динамика среднего размера частиц ( $D_m$ , синий график) в аэрозолях и динамика концентрации озона ( $O_3$ , красный график), полученные из численных расчетов (сглаженные пунктирные линии), в сравнении с экспериментальными наблюдениями.

**Во второй главе** мы рассмотрели неоднородную среду в двумерном и трехмерном пространствах. **В первом параграфе** исследована модель динамики загрязнения реки агрегирующим веществом. Неоднородность распространяется в направлении течения реки а также в ее глубину под действием выталкивающей силы / силы тяжести (Рис. 5).

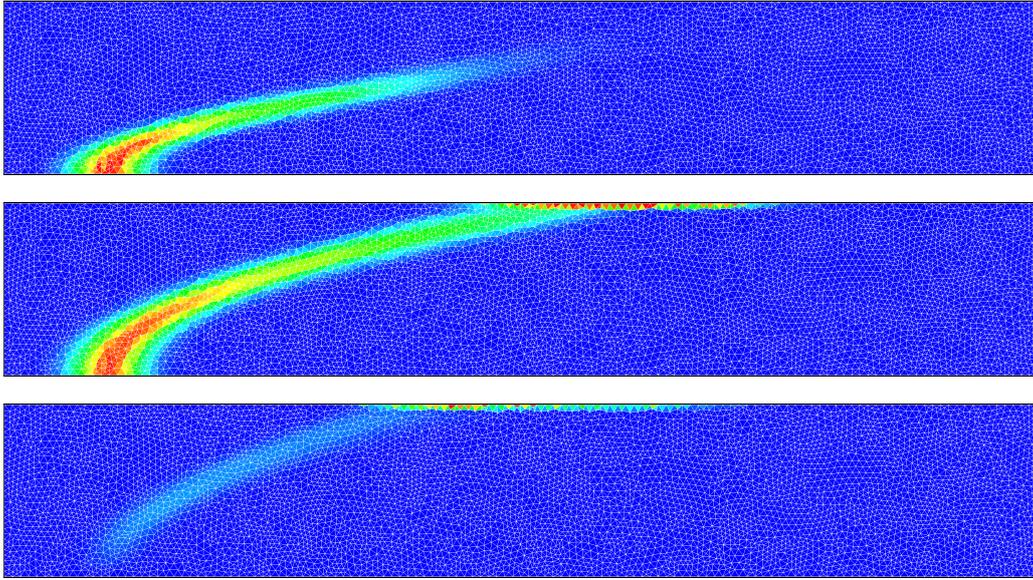


Рис. 5: Распределение частиц в результате их переноса (**верх** – мелкие частицы, **середина** – частицы среднего размера, **низ** – крупные частицы).

**В следующем параграфе** мы применили выработанные принципы моделирования агрегации в неоднородной среде к трехмерному случаю. До сих пор движение частиц происходило в устоявшемся поле скоростей. В этот раз в модель добавлена возможность работы с турбулентными течениями. Для этого необходимо решить уравнение Навье-Стокса при больших числах Рейнольдса. В рамках данной работы подобный решатель написан не был. Поэтому были использованы разработки других исследователей. Наиболее популярной открытой библиотекой для моделирования гидродинамических систем является программный пакет OpenFOAM.

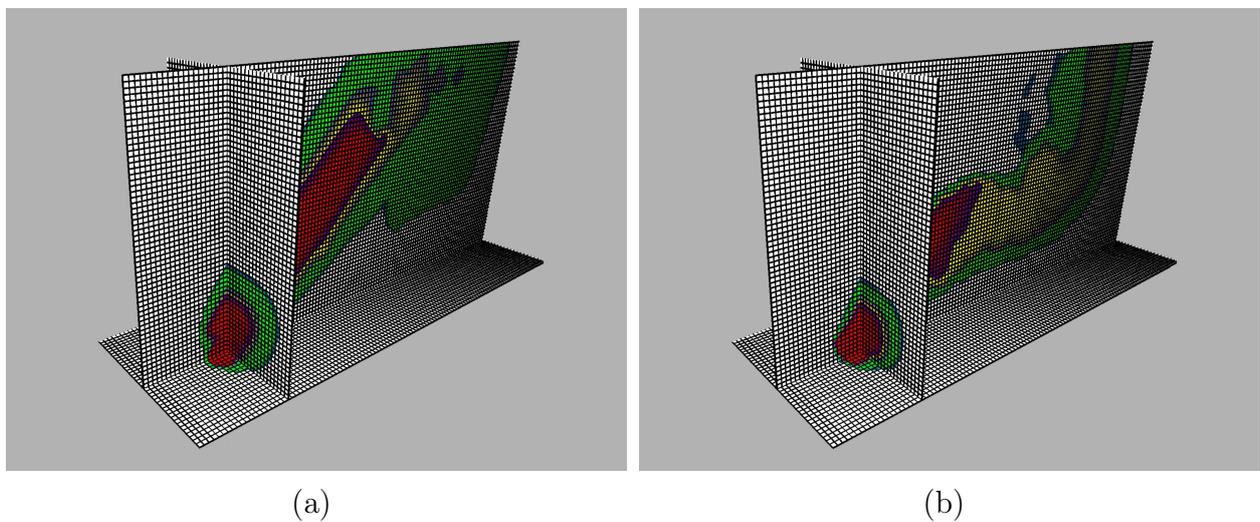


Рис. 6: Симуляция трехмерной модели: **(a)** мелкие частицы **(b)** крупные частицы.

Результаты численного моделирования приведены на Рис. 6. На нем показаны проекции на оси распределения малых и крупных частиц, которые образовались из источника мономеров в результате агрегации, переноса и диффузии. Численный эксперимент происходил при следующих значениях характерных чисел (в различные моменты времени скорость может принимать различные величины, поэтому числа представлены в виде диапазонов): число Рейнольдса – от 5000 до 8000, число Кнудсена  $\sim 10^{-5}$ , число Пекле – от 5 до 8.

**В третьем параграфе второй главы** мы провели двумерный расчет в сферической системе координат (с симметрией по азимутальному углу  $\phi$ ) с целью внесения корректировок в ядра агрегации для случаев, когда вещества движутся в потоке. Задача сводится к рассмотрению процесса седиментации частиц при малых числах Рейнольдса.

Сначала необходимо выбрать направление силы тяжести (по оси  $OZ$ ) и рассмотреть поток частиц радиуса  $R_2$  (частиц сорта “2”) на поверхность частиц радиуса  $R_1$  (частиц сорта “1”). Пусть частица сорта 1 находится в начале координат. Положим  $n(\mathbf{r}, t)$  – концентрация частиц сорта 2 на расстоянии  $r_{12}$  от центра частиц сорта 1 в момент времени  $t$ . Чтобы найти скорость агрегации под действием силы тяжести, необходимо вычислить стационарное течение частиц сорта 2 на поверхности частицы сорта 1 в начале координат. Мы предполагаем, что как только частицы касаются друг друга в точке  $|\mathbf{r}_{12}| = R_1 + R_2$ , мгновенно образуется совместный агрегат, и частицы сорта 2 исчезают. Это означает, что концентрация частиц 2 на поверхности  $r_{12} = (R_1 + R_2)$  равна нулю. С другой стороны на очень большом расстоянии от частицы сорта 1 концентрация частиц сорта 2 равна  $n_\infty$ :

$$\begin{aligned} D\Delta n - v \frac{\partial n}{\partial z} &= 0, \\ n(r = R) &= 0, \\ n(r \rightarrow \infty) &= n_\infty. \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь убраны нижние индексы ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{12}$ ) и используется сокращенная запись  $R = R_1 + R_2$ . Численное решение представлено на Рис. 7. Профиль решения меняется в зависимости от соотношения адвективных и диффузи-

онных составляющих (число Пекле  $\mu = \frac{vR}{2D}$ ).

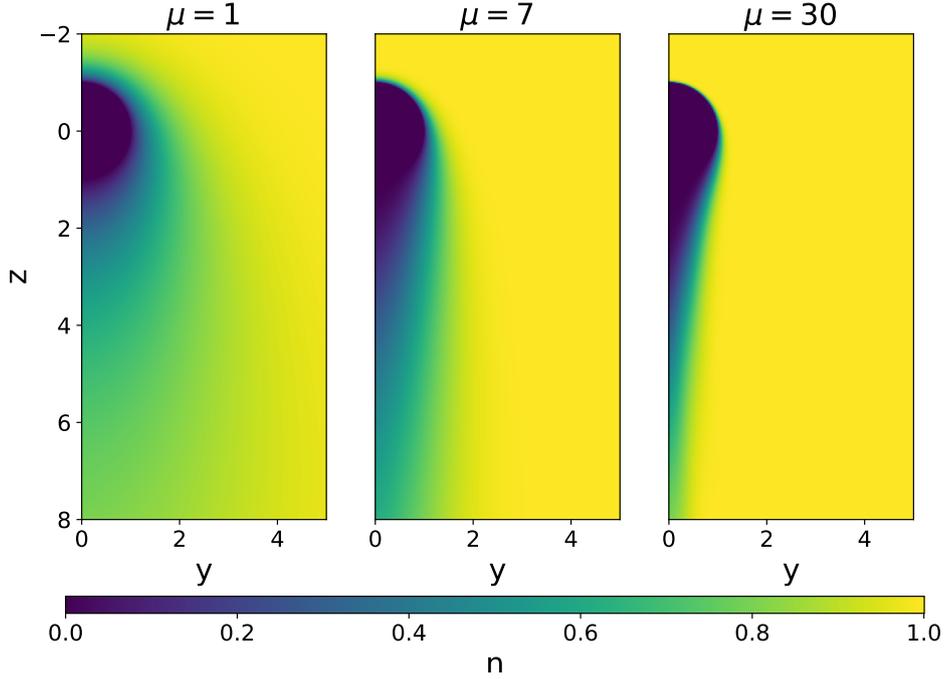


Рис. 7: Численное решение стационарного уравнения переноса-диффузии (5) для различных чисел Пекле  $\mu = vR/(2D)$ .

Для получения корректировок ядра агрегации надо проинтегрировать поток частиц сорта 2, которые поглощаются центральной частицей на своей границе. Эти корректировки представимы как функция от числа Пекле:

$$K_{ij} = 4\pi D_{ij}(R_i + R_j)\mathcal{F}(\mu_{ij}), \quad (6)$$

$$\mu_{ij} = \frac{|v_i - v_j|(R_i + R_j)}{2D_{ij}}, \quad D_{ij} = (D_i + D_j),$$

$$\mathcal{F}(\mu) = \left( \frac{1 + \frac{5}{3}\mu + \frac{1}{3}\mu^2}{1 + \frac{2}{3}\mu} \right).$$

На Рис. 8 результаты для скорости агрегации  $K$ , полученные численно, сравниваются с аналитическим результатом (6). Рисунок демонстрирует близость аналитического приближения для всего диапазона чисел Пекле, охватывающего четыре порядка величины  $\mu$ .

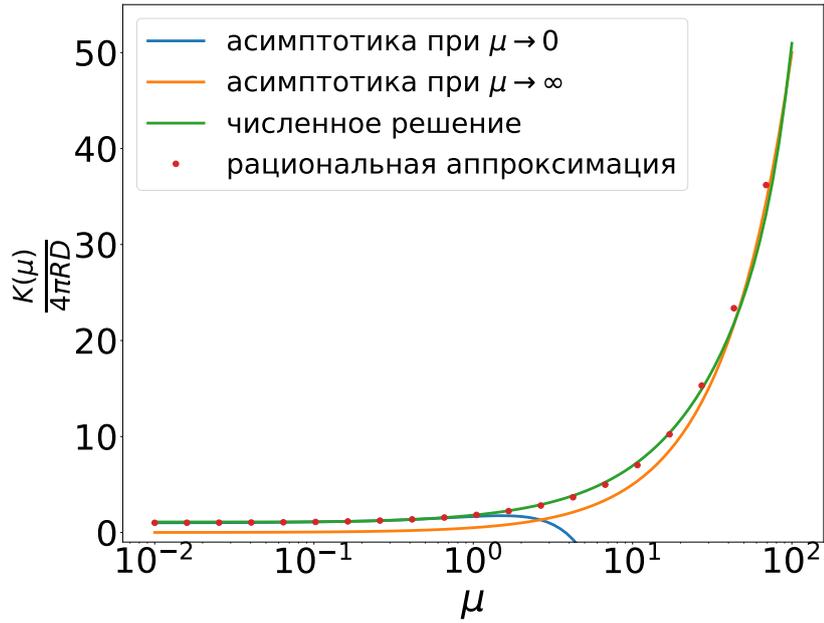


Рис. 8: Приведенная скорость агрегации  $K/(4\pi RD)$  как функция от числа Пекле  $\mu = vR/(2D)$ . Результат, полученный прямым численным решением уравнения переноса-диффузии (5) (зеленая линия), аналитическая аппроксимации (6) для всего диапазона  $\mu$  (красные точки). Также показаны асимптотики для  $\mu \rightarrow 0$  (синяя линия) и для  $\mu \rightarrow \infty$  (оранжевая линия).

**В третьей главе** затронуты способы параллельного расчета приведенных выше постановок задач. **В первом параграфе** рассмотрена одномерная задача. Качество параллельной реализации тестируется на нескольких вычислительных кластерах (см. Таблицу (1)).

Таблица 1: Cluster2 INM:  $R = 12$ , расчетная область: 2048x2048x32.

№	Кол-во узлов	Время, с	Ускорение
1	1	133.43	1
2	2	66.112	2.018
3	4	34.49	3.869
4	8	17.775	7.507
5	16	8.997	14.83
6	32	4.618	28.893
7	64	2.353	56.706
8	128	1.227	108.745
9	256	0.943	141.495

**Во втором параграфе** изучена двумерная модель. Расчеты выполня-

лись в том числе на ГПУ. И гибридная, и чистая параллельные реализации хорошо масштабируемы. Использование ГПУ-ускорителей приводит к дополнительному ускорению вычислений примерно в 2-4 раза (см. Таблицу 2). Время расчетов в чистом режиме с использованием MPI представлены в Таблице 3). Расчеты проводились на суперкомпьютерах “Ломоносов” и “Жорес”.

Таблица 2: Время вычислений (в сек) для сетки  $3830 \times 32768$  и 2 шага интегрирования по времени на суперкомпьютере Жорес GPU big очередь (интерконнект EDR 100 Гб/сек). В гибридной версии каждый процесс MPI соответствует одному устройству GPU NVidia V100.

№ ядер	без ГПУ, с	ускорение без ГПУ	с ГПУ, с	ускорение с ГПУ
1	396.512	1.0	186.47	2.13
2	219.966	1.8	101.12	3.92
4	123.606	3.2	65.33	6.07
8	73.52	5.39	35.32	11.22
16	42.51	9.33	18.53	21.4
32	36.06	11.0	12.18	32.6
64	17.86	22.2	5.93	66.87

Таблица 3: Время вычислений (в сек) для сетки  $7700 \times 8192$  и 2 шага интегрирования по времени на суперкомпьютерной очереди Ломоносова *regular4* (интерконнект QDR 40 Гб/сек) с использованием только ядер ЦПУ.

№ ядер	время, с	ускорение
1	159.312	1.0
2	74.6913	2.13
4	38.9939	4.08
8	21.54	7.4
16	10.5112	15.16
32	5.53312	28.79
64	2.94353	54.12
128	1.59911	99.63
256	0.931789	170.97
512	0.504464	315.8
1024	0.328353	485.19

**В последнем параграфе** приведены результаты масштабируемости для трехмерного решателя. В Таблице 4 приведены времена исполнения различ-

ных схем распараллеливания. Первый столбец данных показывает время вычислений с использованием разного количества ядер на одном узле. Весь параллелизм обеспечивается OpenMP. Второй столбец также выполняется на одном узле, но параллелизм достигается с помощью MPI. Третий столбец показывает время гибридного расчета с помощью ЦПУ и графического устройства. Во всех случаях ускорения заметны. Использование ГПУ в вычислениях наряду с вычислениями на ЦПУ может дать дополнительный прирост к производительности вычислений. 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. Однако по мере увеличения количества рассматриваемых размеров частиц переход на оптимизированный вариант алгоритма необходим.

Таблица 4: Время вычислений (в секундах) различных версий решателя уравнения переноса-диффузии-коагуляции в трехмерном пространстве на декартовой сетке.

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

**В заключении** тезисно представлены результаты работы:

- Реализован эффективный численный метод решения уравнения, описывающего перенос коагулирующих частиц в 1/2/3D пространствах;
- Получено аналитическое решение для агрегирующей системы с диффузией частиц, адвекцией и источником мономеров в одномерном случае;
- Предложен способ моделирования динамики загрязнения рек с использованием уравнений адвекции и коагуляции, а также представлена трехмерная модель динамики агрегирующих частиц в атмосфере;
- Исследована численно и аналитически кинетика агрегации седиментирующих частиц на основе уравнения переноса-диффузии;

- Представлен и протестирован способ численного решения уравнений пространственно-неоднородной коагуляции на параллельных архитектурах, позволяющий получить ускорение вычислений более чем в 300 раз;
- Продемонстрированы способы гибридной эксплуатации ЦПУ и ГПУ в параллельной реализации численного алгоритма, приводящий к дополнительному ускорению вычислений в 2 – 4 раза.

## Публикации по теме диссертации

*Научные статьи, опубликованные в журналах Scopus, WoS, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:*

1. Р. Загидуллин, А. Смирнов, С. Матвеев, Е. Тыртышников. Эффективный численный метод численного решения математической модели переноса коагулирующих частиц. Вестник МГУ, том 41, № 4, стр. 28–34 (2017) [Scopus SJR=0.368, Q2].
2. S. Matveev, R. Zagidullin, A. Smirnov, E. Tyrtysnikov. Parallel numerical algorithm for solving advection equation for coagulating particles. Supercomputing Frontiers and Innovations, vol. 5, № 2, pp. 43–54 (2018) [Scopus SJR=0.153, Q4].
3. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, E. Tyrtysnikov. Supercomputer modelling of spatially-heterogeneous coagulation using MPI and CUDA. In Russian Supercomputing Days (RuSCDays 2019). Communications in Computer and Information Science, vol. 1129, pp. 403–414. (2019) [Scopus SJR=0.188, Q3].
4. R. Zagidullin. Solving the transport-coagulation problem in a two-dimensional spatial region. Computational Mathematics and Modeling, vol. 31, № 1, pp. 19–24 (2020) [Scopus SJR=0.226, Q4].
5. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, N. Brilliantov, P. Krapivsky. Aggregation in non-uniform systems with advection and localized source.

Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, vol. 55, № 26, pp. 265001 (2022) [Scopus SJR=0.718, WoS IF=2.132, Q2].

6. Н. Бриллиантов, Р. Загидуллин, С. Матвеев, А. Смирнов. Кинетика агрегации при седиментации: влияние диффузии частиц. Журнал вычислительной математики и математической физики, том 63, № 4, стр. 629–638 (2023) [Scopus SJR=0.496, Q2].
7. Р. Загидуллин. Построение трехмерной модели движения агрегирующих частиц. Вычислительные методы и программирование, том 24, № 4, стр. 430–439 (2023) [RSCI IF=0.576].