

**РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ  
ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ДЛЯ АЭРОЗОЛЬНЫХ КЛАСЕРОВ НА ОСНОВЕ  
ТЕХНОЛОГИИ NVIDIA CUDA ДЛЯ GPU**

**Черников С. В. Соснин А.С.**

**научный руководитель канд. техн. наук Кузьмин Д. А.  
Сибирский федеральный университет**

Изучение аэрозольных систем является очень важным направлением, поскольку хорошо известно, что аэрозоли играют существенную роль в общем балансе явлений, влияющих на такие важные процессы, происходящие в атмосфере, как перенос солнечного и теплового излучения, облакообразования, фотохимию озона.

Одним из важнейших явлений, которые происходят с участием аэрозоля, является процесс его коагуляции, когда в результате броуновского движения, действия внешних сил, изначально отдельные мелкие частицы сталкиваются и в результате процессов адгезии образуют более крупные образования – агломераты или аэрозольные кластеры. Зачастую они обладают свойствами фракталов.

Описание простого процесса тепловой коагуляции основано на представлениях о броуновском движении и диффузии аэрозольных частиц. При этом учитываются и возможные межчастичные потенциалы взаимодействия. Как правило, это электростатическое взаимодействие, в случае если частицы заряжены, и силы Ван-дер-Ваальса, когда расстояние между частицами очень мало.

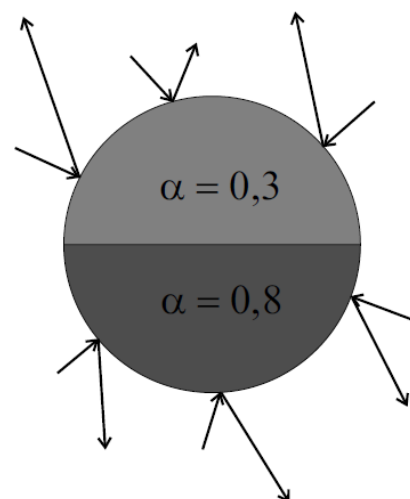
Однако, в последнее время, стали появляться работы, посвящённые изучению влияния на коагуляцию аэрозоля других видов взаимодействий, возникающих в результате газокинетических явлений – термофореза[1] и фотофореза[2].

Термофорез – явление направленного движения частицы при наличии температурных полей в газе[3].

Фотофорез[7, 8, 9, 10] возникает в результате поглощения частицами электромагнитного излучения (солнечного света, лазерного излучения, ИК источников и др.), которое приводит к неравномерному разогреву поверхности частицы и, как следствие, к нескомпенсированности импульса, передаваемого молекулами окружающего газа, поскольку после соударения с поверхностью частицы, молекулы покидают её с большей скоростью там, где поверхность разогрета сильнее ( $\Delta T$  фотофорез).

Также сила может возникнуть из-за неравномерности распределения по поверхности частицы параметра, определяющего результат аккомодации энергии молекулы – коэффициента аккомодации  $\alpha$ , трактуемого в рамках зеркально-диффузионной модели, предложенной ещё Максвеллом. По смыслу коэффициент аккомодации – есть вероятность того, что молекула, упавшая на поверхность частицы, примет температуру этой поверхности и отразится от нее диффузионно. Соответственно  $1-\alpha$  - есть вероятность зеркального отражения молекулы, при котором она не меняет своей температуры.

Рассмотрим  $\Delta\alpha$  фотофорез, при котором движение возникает благодаря разности коэффициента аккомодации на поверхности частицы. Входящий поток молекул на поверхность такой частицы одинаков во всех её точках. На рисунке нижняя часть частицы обладает большим коэффициентом аккомодации. Это приводит к тому, что в общем исходящем потоке молекул с нижней части, **большая** доля молекул отраженных



диффузно, нежели для верхней части, а значит большая доля молекул принявших температуру частицы и покинувших её с большей скоростью. Следствием этого является нескомпенсированность передаваемого молекулами импульса по поверхности частицы и ее движение вверх.

С целью изучения явления фотофореза[5,6], движения аэрозольных частиц и кластеров под действием фотофоретической силы, а также влияния фотофореза на процессы, протекающие в аэрозольных системах, была разработана модель[4].

Задача моделирования очень сильно усложняется для реальных аэрозольных кластеров. До сих пор не существует какой-либо приемлемой оценки потоков молекулярного тепла и переноса импульса в случае, когда система состоит из множества частиц с различными параметрами. Здесь становится выгодным применение метода Монте-Карло, на основе которого и был построен алгоритм. Техника расчёта основана на газокинетических уравнениях Больцмана, которые решаются в приближении свободномолекулярного режима (когда свободный пробег молекулы много больше расстояния между частицами). Порядок задачи понижается за счёт специального разложения рядов Неймана по разделяющимся переменным скоростям и пространственным координатам молекул. Тогда можно использовать специальные матрицы переноса, сократить объёмы вычислений, повысить точность, простым образом получить зависимости физических величин от неизвестных температур частиц. Это позволяет решить нелинейную задачу теплового баланса существенно проще.

Этот алгоритм хорошо поддаётся распараллеливанию на архитектуре CUDA[11, 12]. Для каждой молекулы отводится один поток, все потоки взаимодействуют с массивом структур частиц, представляющих аэрозольный кластер, помещенный внутри опорной сферы, которая так же представлена как структура в массиве. Для простоты все элементы приняты сферами с радиусом определенным относительно опорной сферы, что позволяет легко произвести масштабирование.

В работе представлена схема распараллеливания алгоритма, как на уровне потоков, так и на уровне устройств. В работе были использованы многие специфические средства CUDA, что позволило максимально увеличить производительность алгоритма относительно его реализации на классических параллельных архитектурах. Программа является оптимизированной под оборудование кластера СФУ.

Технология NVIDIA CUDA на данный момент является передовой в сфере высокопроизводительных вычислений на графических устройствах. Одним из ее плюсов на данный момент является высокая доступность - в общем случае требуется обыкновенный персональный компьютер, поддерживающий данную технологию.

Полученный опыт может быть использован в будущем при построении моделей коагуляции со сложными типами межчастичных взаимодействий, плохо поддающихся аналитическому описанию.

[1] H. J. Keh, S. H. Chen, Particle interactions in thermophoresis, Chemical Engineering Science 50 (21) (1995) 3395 – 3407.

[2] Черемисин А.А., Кушнарченко А.В. Оценка фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в стратосфере Оптика атмосферы и океана. 2010. Т. 23. № 6. С. 475-479

[3] S. Bakanov, Thermophoresis of aerosols: a review, Journal of Aerosol Science 22, Supplement 1 (0) (1991) S215 – S218.

- [4] A. Cheremisin, Transfer matrices and solution of the heat-mass transfer problem for aerosol clusters in a rarefied gas medium by the monte carlo method, Russian Journal Numeric Analysis Mathematics 25 (2010) 209–233.
- [5] A. Cheremisin, Y. Vassilyev, H. Horvath, Gravito-photophoresis and aerosol stratification in the atmosphere, Journal of Aerosol Science 36 (11) (2005) 1277 – 1299.
- [6] A. A. Cheremisin, Yu. V. Vassilyev, and A. V. Kushnarenko. Photophoretic forces for bispherical aerosol particles. volume 5027, pages 21–32. SPIE, 2003.
- [7] H. Rohatschek, Direction, magnitude and causes of photophoretic forces, Journal of Aerosol Science 16 (1) (1985) 29 – 42.
- [8] G.F.S., Photophoresis, Journal of the Franklin Institute 202 (3) (1926) 407 – 408.
- [9] S. Lin, On photophoresis, Journal of Colloid and Interface Science 51 (1) (1975) 66 – 71.
- [10] V. Chernyak, S. Beresnev, Photophoresis of aerosol particles, Journal of Aerosol Science 24 (7) (1993) 857 – 866.
- [11] Бореков А. В., Харламов А. А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2010. – 232 с.: ил.
- [12] Сандерс Дж., Кэндрот Э. Технология CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров: пер. с англ. Слинкина А. А., научный редактор Бореков А. В. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232 с.: ил.