

УДК 519.6

БЫСТРЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ АГРЕГАЦИОННО-ФРАГМЕНТАЦИОННОЙ КИНЕТИКИ ТИПА УРАВНЕНИЙ СМОЛУХОВСКОГО

С. А. Матвеев¹, Е. Е. Тыртышников², А. П. Смирнов³, Н. В. Бриллиантов⁴

Рассмотрены модели агрегационно-фрагментационных процессов, написанные в классе уравнений типа уравнений Смолуховского. Предложен численный метод для быстрого решения указанного класса проблем, позволяющий снизить алгоритмическую сложность задачи без потери точности. Применение нового численного метода продемонстрировано на конкретных задачах агрегационно-фрагментационной кинетики.

Ключевые слова: уравнение Смолуховского, кинетика процессов агрегации и фрагментации, схема предиктор-корректор, крестовый алгоритм интерполирования, малоранговые матричные аппроксимации, дискретная свертка.

1. Введение. Процессы агрегации и фрагментации широко представлены в природе и нередко являются частью технологических процессов. В качестве важных примеров таких процессов можно указать следующие: процессы обратимой полимеризации в растворах, рост биологически важных биополимеров (например, прионов), образование протопланет в пылевых облаках в межзвездном пространстве и др. Распределение по размерам частиц в планетных кольцах, таких как кольца Сатурна, также определяется балансом процессов агрегации и фрагментации соударяющихся частиц. В случае однородных систем, рассматриваемых в настоящей статье, указанные выше процессы описываются системой уравнений Смолуховского. Эти уравнения определяют изменение размера частиц вследствие их объединения или распада. Образование крупных агрегатов из более мелких происходит при столкновении частиц, в то время как распад агрегатов на составляющие может происходить по различным сценариям.

В настоящей статье рассматриваются только бинарные взаимодействия частиц, а тройные, четверные и т.д. не учитываются. Такое приближение представляется вполне обоснованным, так как взаимодействия, включающие в себя три и более объектов, сравнительно редки, если система не слишком плотная. Ниже мы будем рассматривать следующие типы фрагментации: спонтанный распад на более мелкие составляющие (вследствие термических флуктуаций) и ударный распад частиц, когда кинетическая энергия соударяющихся объектов (например, ледяных частиц в планетных кольцах) переходит в свободную энергию поверхности и кинетическую энергию образовавшихся осколков. В первом случае отсутствует порог энергии распада, во втором — соударяющиеся частицы должны иметь кинетическую энергию относительного движения выше пороговой [1]. Мы будем изучать дискретный вариант уравнений Смолуховского, когда все объекты (агрегаты) состоят из определенного числа мономеров, т.е. частиц минимального размера, возможного в данной системе [2, 3].

Пусть n_k — концентрация (т.е. количество частиц в единице объема) агрегатов, которые содержат k “элементарных” частиц (мономеров). Уравнения Смолуховского описывают эволюцию концентраций n_k во времени. В процессе эволюции образуются все бóльшие и бóльшие частицы, так что система уравнений Смолуховского, строго говоря, бесконечна. В связи с этим прямое применение классических вычислительных методов для решения такого рода задач представляется затруднительным. Действительно, использование обычных разностных схем для семейства конечных систем дифференциальных уравнений, аппроксимирующих бесконечные системы, оказывается слишком затратным относительно требуемой алгоритмической сложности и объемов памяти.

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119992, Москва; студент, e-mail: matveevserega@rambler.ru

² Институт вычислительной математики РАН, ул. Губкина, д. 8, 119333, Москва; директор, e-mail: eugene.tyrtysnikov@gmail.com

³ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119992, Москва; доцент, e-mail: sap@cs.msu.su

⁴ Department of Mathematics, University of Leicester, University Road, Leicester, LE1 7RH United Kingdom; Professor, e-mail: nb144@leicester.ac.uk

В этой связи в настоящей работе построен метод, позволяющий снизить асимптотику алгоритмической сложности разностной схемы предиктор–корректор, а также понизить асимптотику количества используемых ячеек оперативной памяти. В основе разработанного подхода лежит применение мало-ранговых аппроксимаций и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Преимущества разработанного численного метода продемонстрированы ниже применительно к конкретному классу задач агрегационно-фрагментационной кинетики.

2. Динамика роста и распределение по размерам прионов. В настоящее время считается, что целый ряд заболеваний, таких как губчатый энцефалит у домашних животных, болезнь куру, разновидности заболеваний Крейтцфельда–Якоба и ряда других, связаны с ростом фибриллярных структур, образованных из белковых молекул — прионов. В то время как обычная (непатогенная) конформация этих белков имеет некоторую биологическую функцию, патогенная конформация этого протеина приводит к развитию заболевания по сценарию кооперативного автокатализа и нуклеационной полимеризации [4, 5]. Смысл этого процесса в том, что при присоединении нормального приона к фибриллярной структуре, образованной из прионов патогенной конформации, происходит изменение нормальной конформации белка на патогенную и объединение его с фибриллом, что приводит к росту фибриллярных структур. Последние, таким образом, увеличиваются в размере за счет присоединения мономеров. Возможен также спонтанный распад фибриллов с константой реакции, пропорциональной размеру структуры. Распад происходит на две составляющие; если, однако, один из осколков оказывается меньше определенного размера, то он распадается далее вплоть до мономеров. Математическая модель агрегационно-фрагментационной кинетики прионов была сформулирована Мазелем с соавторами [6], аналитическое решение было предложено в работе [7]. Система уравнений для этой модели имеет вид [6, 7]

$$\begin{aligned} \frac{dn_1}{dt} &= \lambda - dn_1 - \beta n_1 \sum_{i=n}^{\infty} n_i + 2b \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=n+j}^{\infty} j n_i + 2b \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=n}^{n+j-1} i n_i, \\ \frac{dn_i}{dt} &= \beta n_1 n_{i-1} - \beta n_1 n_i - a n_i - b(i-1)n_i + 2b \sum_{j=i+1}^{\infty} n_j, \end{aligned} \quad (1)$$

где n_1 и n_i — концентрации мономеров (прионов нормальной конформации) и фибриллярных агрегатов, состоящих из i мономерных единиц; λ — константа, характеризующая источник мономеров (за счет клеточных процессов); d — константа, характеризующая удаление мономеров из системы за счет процессов, не связанных с агрегацией; β — константа скорости процессов присоединения мономера к фибриллярной структуре; b — константа скорости спонтанного распада этих процессов; a — константа скорости удаления из системы фибриллярных структур.

Система уравнений (1) описывает оба процесса агрегации и фрагментации и является бесконечной.

3. Динамика роста и распада линейных полимеров. Другим важным процессом, в котором одновременно происходят агрегация и фрагментация, является равновесная полимеризация. В случае линейной полимеризации различные молекулярные элементы (например, метилакрилат, винилпиридин и др.) объединяются с образованием линейных цепей. Предоставленные самим себе в равновесном растворе, полимерные цепи распадаются под действием термических флуктуаций на фрагменты, состоящие из одного или нескольких элементов.

Считается, что агрегация происходит тогда, когда две частицы сталкиваются и образуют химическую связь. Если одна из частиц состоит при этом из i элементарных единиц (мономеров), а другая из j , то при агрегации образуется частица, состоящая из $i + j$ мономеров. Одновременные столкновения трех и более частиц в этой модели не рассматриваются. В результате процесс агрегации можно символически записать в виде $[i] + [j] \rightarrow [i + j]$.

Введем кинетические коэффициенты C_{ij} , определяющие число возникающих агрегатов размера $i + j$ в единице объема в единицу времени при столкновении частиц с размерами i и j . В этих обозначениях кинетические уравнения можно записать в виде

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - \sum_{i=1}^{\infty} C_{ki} n_i n_k. \quad (2)$$

Здесь первый член описывает скорость образования частиц размера k из частиц с размерами i и j . Суммирование проводится по всем парам i и j , таким, что $i + j = k$ с множителем $1/2$, что позволяет избежать двойного суммирования. Второй член определяет скорость, с которой частицы размера k исчезают из-за агрегации со всеми прочими частицами размера i .

Фрагментация — это противоположный процесс, при котором крупные частицы разбиваются на более мелкие. Этот процесс может происходить спонтанно, например из-за тепловых флуктуаций (как в рассматриваемом примере полимеризации). Пусть частица размера k распадается на l фрагментов с размерами i_1, i_2, \dots, i_l : $[k] \longrightarrow [i_1] + [i_2] + \dots + [i_l]$.

Вследствие сохранения общей массы выполнено условие $i_1 + i_2 + \dots + i_l = k$. Следовательно, уравнения, учитывающие процессы агрегации и спонтанной фрагментации можно записать в форме

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - \sum_{i=1}^{\infty} C_{ki} n_i n_k + \sum_{i=k+1}^{\infty} A_i y_k(i) n_i - A_k n_k. \quad (3)$$

Здесь коэффициенты A_i характеризуют динамику спонтанной фрагментации агрегатов размера i , а $y_k(i)$ — число осколков размера k при распаде частицы размера i .

Фрагментация также возможна при столкновениях агрегатов, когда их кинетическая энергия переходит в кинетическую энергию и энергию поверхности осколков. Данный процесс может быть представлен в виде $[k] + [j] \longrightarrow [i_1] + [i_2] + \dots + [i_l]$, где $i_1 + i_2 + \dots + i_l = k + j$ вследствие сохранения общей массы. В результате полная система кинетических уравнений, описывающая процессы агрегации, а также спонтанной и столкновительной фрагментаций, может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{dn_k}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - \sum_{i=1}^{\infty} C_{ki} n_i n_k + \sum_{i=k+1}^{\infty} A_i y_k(i) n_i - A_k n_k - \\ & - \sum_{i=1}^{\infty} A_{ki} n_i n_k (1 - \delta_{k1}) + \sum_{i=1}^k n_i \sum_{j=k+1}^{\infty} A_{ij} n_j x_k(j) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \geq k+1}^{\infty} A_{ij} n_i n_j [x_k(i) + x_k(j)]. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь, как и прежде, первый член описывает скорость, с которой агрегаты размера k формируются из частиц с размерами i и j . Второй, четвертый и пятый члены описывают скорость исчезновения частиц размера k из-за слияний с частицами любого размера i , а также из-за рассмотренных выше процессов фрагментации. Третий, шестой и седьмой члены описывают образование частиц размера k из-за разрушения более крупных. Через $x_k(i)$ обозначено полное число обломков размера k , возникающих при разрушении частиц размера i при бинарных столкновениях. Через δ_{k1} обозначен символ Кронекера.

Далее для простоты рассмотрим модель, в которой предполагается, что при спонтанной фрагментации, а также при фрагментационном столкновении частицы целиком разбиваются на мономеры. В этом случае $y_k(i) = i\delta_{k1}$ и $x_k(i) = i\delta_{k1}$.

4. Динамика агрегации и фрагментации частиц в планетарных кольцах. В планетарных кольцах образование новых агрегатов происходит при парных столкновениях частиц с их с последующим слиянием или дроблением на более мелкие частицы [8, 9]. Результат столкновения определяется величиной кинетической энергии относительного движения сталкивающихся частиц: при малых значениях энергии частицы сливаются, а при больших — разрушаются на осколки. Можно показать, что в широком диапазоне параметров частота столкновений с агрегацией частиц пропорциональна частоте столкновений, приводящих к разрушению частиц. В результате получается, что кинетические коэффициенты A_{ij} и C_{ij} отличаются мультипликативным множителем $\lambda > 0$, т.е. $A_{ij} = \lambda C_{ij}$. Таким образом, приходим к следующей системе уравнений, описывающей динамику агрегации и фрагментации частиц в планетных кольцах [10]:

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{jk} n_j, \quad k = \overline{2, \infty}. \quad (5)$$

Положив значение λ равным нулю, приходим к системе уравнений агрегации Смолуховского. Уравнение для мономеров с учетом указанных выше процессов принимает вид

$$\frac{dn_1}{dt} = -n_1 \sum_{j \geq 1} C_{1j} n_j + \frac{\lambda}{2} \sum_{i,j \geq 2} C_{ij} (i + j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum_{j \geq 2} j C_{1j} n_j. \quad (6)$$

Вводя начальные условия $n_1(t = 0) = n_{1_0}, \dots, n_k(t = 0) = n_{k_0}, \dots$, получаем задачу Коши для бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Отметим, что из физических соображений следует симметричность и неотрицательность коэффициентов C_{ij} , т.е. $C_{ij} = C_{ji} \geq 0$ [3, 11].

В качестве характеристики состояния системы в момент времени t введем полную концентрацию агрегатов $N(t) = \sum_{j=1}^{\infty} n_j(t)$ и общую массу вещества $M(t) = \sum_{j=1}^{\infty} j n_j(t)$. В случае $C_{ij} \equiv 1$ и $n_k(0) = \delta_{1k}$ известно следующее аналитическое решение указанной системы уравнений [3, 10]:

$$N(t) = \begin{cases} 2\lambda(1 + 2\lambda - \exp(-\lambda t))^{-1}, & \text{если } \lambda > 0, \\ 2(2 + t)^{-1}, & \text{если } \lambda = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Далее мы приводим детальное обсуждение эффективного численного метода для решения рассмотренных выше задач.

5. Численный метод. Сформулируем численный метод решения систем уравнений рассматриваемого класса задач на примере модели агрегации-фрагментации частиц в планетарных кольцах. Отметим, что описываемая ниже схема легко адаптируется к уравнениям двух других моделей, сформулированных выше.

Аппроксимируем исходную бесконечную систему дифференциальных уравнений конечной системой из тех же уравнений при $k = \overline{1, M}$. Введем следующие обозначения: $\mathbf{n}^T(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots, n_M(t)]$, $\mathbf{n}_0^T = [n_{1_0}, n_{2_0}, \dots, n_{M_0}]$ и

$$\mathbf{S}(n) = \begin{bmatrix} -n_1 \sum_{j \geq 1}^M C_{1j} n_j + \frac{\lambda}{2} \sum_{\substack{i, j \leq M \\ i, j \geq 2}} C_{ij} (i + j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum_{j \geq 2}^M j C_{1j} n_j \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=2} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_2 \sum_{j \geq 1} C_{j2} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{jk} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=M} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_M \sum_{j \geq 1} C_{jM} n_j \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Тогда выбранное приближение исходной системы уравнений можно записать в компактном виде

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{n}^T}{dt} = \mathbf{S}(n(t)), \\ \mathbf{n}^T(0) = \mathbf{n}_0^T. \end{cases} \quad (9)$$

Применим к (9) явную разностную схему предиктор–корректор по времени:

$$\begin{cases} \frac{n^{k+1/2} - n^k}{0.5\Delta t} = \mathbf{S}(n^k), \\ \frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} = \mathbf{S}(n^{k+1/2}), \\ \mathbf{n}^T(0) = \mathbf{n}_0^T. \end{cases} \quad (10)$$

Эта схема имеет второй порядок точности по временной сетке. Арифметическая сложность шага разностной схемы при таком подходе составит $O(M^2)$ операций. Далее составим алгоритм вычисления оператора (8) с более низкой алгоритмической сложностью.

Предположим, что функцию C_{ij} от переменных $i = \overline{1, M}$ и $j = \overline{1, M}$ можно приблизить суммой вида

$$C_{ij} \approx \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(i) V_{\alpha}(j). \quad (11)$$

Поиск такого приближения равносильно построению скелетного разложения для матрицы

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1M} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M1} & C_{M2} & \dots & C_{MM} \end{bmatrix} \approx UV^T \tag{12}$$

с матрицами U и V размеров $M \times R$. Разложение (12) будем строить с помощью крестового интерполяционного алгоритма [12]. Это разложение позволяет хранить $2MR$ значений элементов матриц U и V вместо исходных M^2 элементов C_{ij} , а его построение с помощью крестового алгоритма потребует $O(MR^3)$ арифметических операций.

Рассмотрим дискретную функцию

$$f_1(k) = \sum_{i+j=k} C_{ij}n_in_j \equiv \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i}n_in_{k-i}, \quad k = \overline{1, M}. \tag{13}$$

С помощью приближений для C_{ij} функцию $f_1(k)$ можно представить в виде

$$f_1(k) = \sum_{i=1}^{k-1} C_{ij}n_in_{k-i} \approx \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R U_\alpha(i)V_\alpha(k-i)n_in_{k-i} = \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R \widehat{U}_\alpha(i)\widehat{V}_\alpha(k-i), \tag{14}$$

$$\widehat{U}_\alpha(i) \equiv U_\alpha(i)n_i, \quad \widehat{V}_\alpha(i) \equiv V_\alpha(i)n_i.$$

В (14) имеем сумму из R нижнетреугольных дискретных сверток массивов $\widehat{U}_\alpha(i)$ и $\widehat{V}_\alpha(j)$, каждую из которых можно вычислить за $O(M \log M)$ арифметических операций одновременно при всех значениях $k = \overline{1, M}$ [13]. В результате сложность вычисления первой суммы из системы (5) при $k = \overline{1, M}$ снизится с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций.

Далее рассмотрим дискретную функцию

$$f_2(k) = \sum_{i=1}^M C_{ik}n_i, \quad k = \overline{1, M}. \tag{15}$$

Вычисление значений $f_2(k)$ при $k = \overline{1, M}$ напрямую по формуле (15) потребует $O(M^2)$ арифметических операций. Заметим, что операция (15) эквивалентна операции умножения матрицы C на вектор значений n_i . Через разложение (12) вычисление (15) можно свести к поочередному умножению множителей разложения U и V^T на соответствующие векторы. Таким образом, сложность вычисления функции (15) снижается до $O(MR)$ операций.

Заметим, что вычисление кратной суммы из уравнения для мономеров можно свести к умножению множителей разложения симметричной матрицы значений C_{ij} на векторы:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M \sum_{j=2}^M C_{ij}(i+j)n_in_j &= \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M in_i \sum_{j=2}^M C_{ij}n_j + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M n_i \sum_{j=2}^M C_{ij}jn_j = \\ &= [n_2 \ n_3 \ \dots \ n_M] \times \begin{bmatrix} C_{22} & C_{23} & \dots & C_{2M} \\ C_{32} & \dots & \dots & C_{3M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M2} & C_{M3} & \dots & C_{MM} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 2n_2 \\ 3n_3 \\ \dots \\ Mn_M \end{bmatrix} \approx \\ &\approx [n_2 \ n_3 \ \dots \ n_M] \times UV^T \times \begin{bmatrix} 2n_2 \\ 3n_3 \\ \dots \\ Mn_M \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{16}$$

Таким образом, сложность вычисления кратной суммы снижается с $O(M^2)$ до $O(MR)$ арифметических операций.

Используя построенные методы для вычисления (13), (15) и (16) в схеме (10), получаем снижение сложности исходной разностной схемы с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций, где R — число столбцов в множителях U и V разложения $C \approx UV^T$. При $R \ll M$ построенный метод потребует существенно меньше арифметических операций для осуществления шага разностной схемы, а также меньше ячеек памяти, необходимых для хранения значений C_{ij} , чем исходный.

Отметим, что при моделировании процессов агрегации и фрагментации часто используются ядра следующего вида [2, 3, 11, 14]:

$$C_{ij} = (i^{1/3} + j^{1/3})^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}, \quad (17)$$

$$C_{ij} = i^\mu j^\nu + i^\nu j^\mu; \quad \mu + \nu < 1; \quad \mu \geq 0; \quad \nu \geq 0. \quad (18)$$

Ядро (18) (обобщенное ядро умножения) уже представлено в виде разложения (11) с $R = 2$. Численные результаты по построению приближений вида (11) для ядра (17) (баллистическое ядро) указаны в табл. 1–3.

Таблица 1

Оценки рангов крестового разложения баллистического ядра коагуляции

Число узлов по направлениям	Относительная погрешность аппроксимации	Ранги
200	10^{-6}	9
400	10^{-6}	10
800	10^{-6}	11
1600	10^{-6}	12
3200	10^{-6}	13
6400	10^{-6}	14
12 800	10^{-6}	14
25 600	10^{-6}	14
51 200	10^{-6}	16
102 400	10^{-6}	17

Таблица 2

Время расчета при $C_{ij} \equiv 1$, $N(0) = 1$ для $t \in [0; 10]$, $\lambda = 10^{-4}$

Число уравнений M	Исходный разностный метод, сек.	Ускоренный разностный метод, сек.	Относительная погрешность полной концентрации агрегатов
1000	0.366	0.5829	0.004067
10 000	35.57	1.7543	0.004059
50 000	925.31	2.3103	0.004057

Тестовые расчеты с ядром $C_{ij} \equiv 1$ и $N(0) = 1$ для модели агрегации и фрагментации вещества в планетарных кольцах показали согласованность кластерной плотности численного решения с аналитической (табл. 2). Тестовые расчеты с баллистическим ядром (17) подтвердили эффективность предложенной модификации численной схемы (табл. 3): при больших значениях M получено ускорение исходной схемы более чем в 1000 раз при согласованных кластерных плотностях численных решений, полученных исходной и ускоренной схемами.

Таблица 3

Время расчета при $C_{ij} = (i^{1/3} + j^{1/3})^2 \sqrt{1/i + 1/j}$, $N(0) = 1$ для $t \in [0; 10]$, $\lambda = 10^{-4}$

Число уравнений M	Исходный разностный метод, сек.	Ускоренный разностный метод, сек.	Относительная разность полной концентрации агрегатов
1000	101.15	0.4142	0.016
5000	2534.96	2.26535	0.022
10 000	10 162.4	9.18745	0.021

6. Заключение. В настоящей статье рассмотрена группа задач агрегационно-фрагментационной кинетики, сформулированных в классе уравнений Смолуховского. При использовании крестового интерполяционного алгоритма [12], методов умножения малоранговых матриц на вектор и быстрых алгоритмов вычисления дискретной свертки массивов [13] построен новый численный метод, снижающий асимптотику сложности с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций, где M — число уравнений в конечных системах, аппроксимирующих исход-

ные бесконечные, а R — максимальный из рангов приближения используемых при расчетах массивов. Построенный численный метод требует $O(MR)$ ячеек памяти вместо $O(M^2)$. Для обобщенного ядра умножения (18) получена теоретическая оценка $R = 2$, а для баллистического ядра получены численные оценки для R , подтверждающие заявленную эффективность построенного метода.

Разработанный численный алгоритм позволяет значительно расширить класс решаемых задач и может быть адаптирован к другим, сходным проблемам, в которых необходимо решать большое число связанных нелинейных уравнений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 13–01–12061 и 14–01–00804).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brilliantov N.V., Bodrova A.S., Krapivsky P.L. A model of ballistic aggregation and fragmentation // J. Stat. Mech. 2009. P06011 (DOI: 10.1088/1742-5468/2009/06/P06011).
2. Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation // Physics Reports. 2003. **383**, N 2/3. 95–212.
3. Krapivsky P.L., Redner A., Ben-Naim E.A. Kinetic view of statistical physics. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010.
4. Cohen F.E., Pan K.M., Huang Z., Baldwin M., Fletterick R.J., Prusiner S.B. Structural clues to prion replication // Science. 1994. **264**. 530–531.
5. Eigen M. Prionics or the kinetic basis of prion diseases // Biophys. Chem. 1996. **63**. A1–A18.
6. Masel J., Jansen V.A.A., Nowak M.A. Quantifying the kinetic parameters of prion replication // Biophys. Chem. 1999. **77**. 139–152.
7. Poeschel T., Brilliantov N.V., Frommel C. Kinetics of prion growth // Biophys. J. 2003. **85**. 3460–3474.
8. Cuzzi J.N. et al. An evolving view of Saturn’s dynamic rings // Science. 2010. **327**. 1470–1475.
9. Esposito L. Planetary rings. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006.
10. Brilliantov N., Krapivsky P., Bodrova A., Spahn F., Hayakawa H., Stadnichuk V., Schmidt J. Particle size distribution in Saturn’s rings: aggregation–fragmentation model // Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2014 (submitted).
11. Галкин В.А. Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001.
12. Oseledets I., Tyrtyshnikov E. TT-cross approximation for multidimensional arrays // Linear Algebra and its Applications. 2008. **432**, N 1. 70–88.
13. Kazeev V., Khoromskij B., Tyrtyshnikov E. Multilevel Toeplitz matrices generated by tensor-structured vectors and convolution with logarithmic complexity // SIAM J. Sci. Comp. 2013. **35**, N 3. A1511–A1536.
14. Palaniswamy G., Loyalka S.K. Direct simulation, Monte Carlo, aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling // Nuclear Technology. 2006. **156**, N 1. 29–38.

Поступила в редакцию
25.12.2013

A Fast Numerical Method for Solving the Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation and Fragmentation Processes

S. A. Matveev¹, E. E. Tyrtyshnikov², A. P. Smirnov³, and N. V. Brilliantov⁴

¹ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Student, e-mail: matveevserga@rambler.ru

² Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Gubkina 8, Moscow, 119333, Russia; Professor, Director, e-mail: eugene.tyrtyshnikov@gmail.com

³ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Associate Professor, e-mail: sap@cs.msu.su

⁴ Department of Mathematics, University of Leicester; University Road, Leicester, LE1 7RH United Kingdom; Professor, e-mail: nb144@leicester.ac.uk

Received December 25, 2013

Abstract: A number of models of aggregation–fragmentation processes on the basis of Smoluchowski-type kinetic equations are considered. A new numerical method for the fast solution of this class of problems

is proposed. This method allows one to decrease the computational complexity of a problem without loss of accuracy. The application of the method is illustrated by several examples of problems of aggregation–fragmentation kinetics in the cases of interest in practice.

Keywords: Smoluchowski equation, kinetics equations of aggregation and fragmentation processes, predictor–corrector scheme, cross interpolation method, low-rank matrix approximations, discrete convolution.

References

1. N. V. Brilliantov, A. S. Bodrova, and P. L. Krapivsky, “A Model of Ballistic Aggregation and Fragmentation,” *J. Stat. Mech.* (2009), P06011, DOI: 10.1088/1742-5468/2009/06/P06011.
2. F. Leyvraz, “Scaling Theory and Exactly Solved Models in the Kinetics of Irreversible Aggregation,” *Physics Reports* **383** (2/3), 95–212 (2003).
3. P. L. Krapivsky, A. Redner, and E. A. Ben-Naim, *Kinetic View of Statistical Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010).
4. F. E. Cohen, K. M. Pan, Z. Huang, et al., “Structural Clues to Prion Replication,” *Science* **264**, 530–531 (1994).
5. M. Eigen, “Prionics or the Kinetic Basis of Prion Diseases,” *Biophys. Chem.* **63**, A1–A18 (1996).
6. J. Masel, V. A. A. Jansen, and M. A. Nowak, “Quantifying the Kinetic Parameters of Prion Replication,” *Biophys. Chem.* **77**, 139–152 (1999).
7. T. Poeschel, N. V. Brilliantov, and C. Frommel, “Kinetics of Prion Growth,” *Biophys. J.* **85**, 3460–3474 (2003).
8. J. N. Cuzzi, J. A. Burns, S. Charnoz, et al., “An Evolving View of Saturn’s Dynamic Rings,” *Science* **327**, 1470–1475 (2010).
9. L. Esposito, *Planetary Rings* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2006).
10. N. Brilliantov, P. Krapivsky, A. Bodrova, et al., “Particle Size Distribution in Saturn’s Rings: Aggregation–Fragmentation Model,” in *Proc. National Academy of Sciences of the United States of America*, 2014, submitted.
11. V. A. Galkin, *The Smoluchowski Equation* (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
12. I. Oseledets and E. Tyrtyshnikov, “TT-Cross Approximation for Multidimensional Arrays,” *Linear Algebra and Its Applications* **432** (1), 70–88 (2008).
13. V. Kazeev, B. Khoromskij, and E. Tyrtyshnikov, “Multilevel Toeplitz Matrices Generated by Tensor-Structured Vectors and Convolution with Logarithmic Complexity,” *SIAM J. Sci. Comp.* **35** (3), A1511–A1536 (2013).
14. G. Palaniswamy and S. K. Loyalka, “Direct Simulation, Monte Carlo, Aerosol Dynamics: Coagulation and Collisional Sampling,” *Nucl. Technol.* **156** (1), 29–38 (2006).