

УДК 519.62; 519.65

doi 10.26089/NumMet.v16r335

**ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ БЫСТРОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЙ АГРЕГАЦИОННО-ФРАГМЕНТАЦИОННОЙ КИНЕТИКИ
ТИПА УРАВНЕНИЙ СМОЛУХОВСКОГО**

С. А. Матвеев¹

Предложена параллельная реализация быстрого алгоритма решения систем кинетических уравнений агрегации и фрагментации типа уравнений Смолуховского. Эффективность реализации продемонстрирована на конкретных задачах агрегационно-фрагментационной кинетики. С помощью предложенной параллельной реализации быстрого алгоритма получены решения с осциллирующей полной плотностью агрегатов.

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

1. Введение. Важная задача механики — описание взаимодействующих частиц сложной системы, неупруго сталкивающихся между собой. Неупругие соударения хаотически движущихся частиц лежат в основе самых разнообразных физических явлений: от роста полимеров до образования звезд и планет [8]. Распределение частиц по размерам в таких физических системах определяется балансом процессов агрегации и фрагментации соударяющихся частиц. В случае однородных систем эволюция распределения частиц по размерам описывается системой уравнений, которая носит название “уравнения Смолуховского”. Каждое уравнение в этой системе определяет эволюцию концентрации частиц соответствующего размера вследствие процессов агрегации и фрагментации. В настоящей статье рассматривается дискретный вариант уравнения Смолуховского, когда все объекты (агрегаты) состоят из определенного числа мономеров, т.е. частиц минимального размера, возможного в данной системе [2, 3].

В настоящей статье приводится математическая модель процессов агрегации и фрагментации в приложении к планетарным кольцам [6], описывающая только бинарные взаимодействия агрегатов. Из-за не слишком высокой плотности рассматриваемой физической системы тройные взаимодействия редки, следовательно, ими можно пренебречь. Таким образом, принятое нами приближение представляется обоснованным.

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 большие и большие частицы, так что система уравнений Смолуховского, строго говоря, бесконечна (подробное описание модели приведено в разделе 2 настоящей статьи). В связи с этим прямое применение классических вычислительных методов для решения такого рода задач представляется затруднительным. Использование обычных разностных схем для семейства конечных систем дифференциальных уравнений, аппроксимирующих бесконечные системы, оказывается слишком затратным в терминах требуемой алгоритмической сложности и объемов памяти. В то же время, применение методов Монте-Карло для прямого моделирования процессов агрегации и фрагментации (например, [11]) оказывается нецелесообразным из-за их невысокой точности.

В работе [14] предложен быстрый численный метод, позволяющий снизить асимптотику алгоритмической сложности шага разностной схемы предиктор–корректор с $O(M^2)$ до $O(M \log M)$ арифметических операций, где M — число уравнений в конечной системе дифференциальных уравнений, аппроксимирующих исходную, что позволяет значительно расширить класс решаемых задач. Этот метод основывается на применении малоранговых матричных аппроксимаций и быстрых алгоритмов линейной алгебры (подробное описание данного алгоритма дано в разделе 3). Однако даже такого снижения алгоритмической сложности недостаточно в случаях, когда число уравнений M оказывается порядка ста тысяч и более. В этой связи, в настоящей работе предложена параллельная реализация этого алгоритма, позволяющая ускорить его в десятки раз для решения систем большой размерности (см. раздел 4). Преимущества параллельной реализации продемонстрированы ниже применительно к конкретным задачам

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

агрегационно-фрагментационной кинетики. При использовании предложенного параллельного алгоритма в данной работе получены стационарные решения систем уравнений рассматриваемой модели агрегации и фрагментации и решения с периодически осциллирующей полной плотностью агрегатов (результаты моделирования см. в разделе 5).

2. Модель агрегации и фрагментации частиц в планетарных кольцах. В планетарных кольцах образование новых агрегатов происходит при парных столкновениях частиц с их последующим слиянием или дроблением на более мелкие частицы [5]. Результат столкновения определяется величиной кинетической энергии относительного движения сталкивающихся частиц: при малых значениях энергии частицы сливаются, а при больших — разрушаются на осколки. В широком диапазоне параметров частота столкновений с агрегацией частиц пропорциональна частоте столкновений, приводящих к разрушению частиц [6]. В результате получается, что кинетические коэффициенты A_{ij} , характеризующие процесс распада, и коэффициенты C_{ij} , характеризующие процесс агрегации, отличаются множителем $\lambda > 0$, т.е. $A_{ij} = \lambda C_{ij}$. Таким образом, приходим к следующей системе уравнений, описывающей динамику агрегации и фрагментации частиц в планетарных кольцах [6]:

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

При $\lambda = 0$ получим классическую систему уравнений агрегации Смолуховского. Уравнение для мономеров с учетом указанных выше процессов принимает вид

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

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 дифференциальных уравнений.

Из физических соображений следует симметричность, неотрицательность и однородность коэффициентов C_{ij} [3, 8]:

$$C_{ij} = C_{ji} \geq 0, \quad C_{ki,kj} = k^\alpha C_{ij}. \tag{2}$$

В качестве характеристики состояния системы в момент времени t введем полную концентрацию агрегатов: $N(t) = \sum_{j=1}^{\infty} n_j(t)$, а также общую массу вещества: $M(t) = \sum_{j=1}^{\infty} jn_j(t)$.

Отметим, что полная масса агрегатов сохраняется $M(t) = M(0) = \text{const}$, если в (2) выполняется условие $\alpha < 1$.

В случае $C_{ij} \equiv 1$ и $n_k(0) = \delta_{1k}$ можно получить аналитическое решение указанной системы уравнений [3, 6]:

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

Далее подробно рассматривается численный алгоритм, предложенный в [14], и предлагается его параллельная реализация.

3. Быстрый алгоритм. Сформулируем численный метод решения рассматриваемых систем уравнений для моделирования процессов агрегации и фрагментации в планетарных кольцах [14]. Отметим, что эта схема легко адаптируется к уравнениям других моделей [1, 4, 13].

Приближим исходную бесконечную систему дифференциальных уравнений конечной системой из тех же уравнений при $k = \overline{1, M}$. Приводя подобные члены в уравнении для мономеров, упростим запись конечной системы:

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = -(1 + \lambda)n_1 \sum_{i=1}^M C_{1i}n_i + \lambda \sum_{i=1}^M in_i \sum_{j=1}^M C_{ij}n_j, \\ \frac{dn_k}{dt} = -(1 + \lambda)n_k \sum_{i=1}^M C_{ki}n_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i}n_in_{k-i}, \quad k = \overline{2, M}. \end{cases}$$

Вводя обозначения

$$\mathbf{n}^T(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots, n_M(t)], \quad \mathbf{n}_0^T = [n_{1_0}, n_{2_0}, \dots, n_{M_0}],$$

$$\mathbf{S}(n) = \begin{bmatrix} \lambda \sum_{i=1}^M i n_i \sum_{j=1}^M C_{ij} n_j - (1 + \lambda) n_1 \sum_{i=1}^M C_{1i} n_i \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=2} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_2 \sum_{j \geq 1} C_{j2} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{jk} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=M} C_{ij} n_i n_j - (1 + \lambda) n_M \sum_{j \geq 1} C_{jk} n_j \end{bmatrix}, \quad (3)$$

можем записать приближение исходной бесконечной системы в компактном виде:

$$\frac{d\mathbf{n}^T}{dt} = \mathbf{S}(n(t)), \quad \mathbf{n}^T(0) = \mathbf{n}_0^T. \quad (4)$$

Применим к (4) явную разностную схему предиктор–корректор по времени:

$$\frac{n^{k+1/2} - n^k}{0.5 \Delta t} = \mathbf{S}(n^k), \quad \frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} = \mathbf{S}(n^{k+1/2}), \quad \mathbf{n}^T(0) = \mathbf{n}_0^T. \quad (5)$$

Выбранная схема имеет второй порядок точности по временной сетке. Арифметическая сложность шага разностной схемы при данном подходе составит $O(M^2)$ операций. Далее повторим описание алгоритма вычисления оператора (3) из работы [14] со сложностью $O(M \log M)$ операций.

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

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

Поиск такого приближения равносильно построению приближения в виде скелетного разложения для матрицы

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1M} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M1} & C_{M2} & \dots & C_{MM} \end{bmatrix} \approx UV^T, \quad (6)$$

с матрицами U, V размеров $M \times R$. Разложение (6) будем строить с помощью крестового интерполяционного алгоритма [17], что позволяет хранить $2MR$ значений элементов матриц U, V вместо исходных M^2 элементов C_{ij} . Построение этого разложения с помощью крестового алгоритма потребует $O(MR^3)$ арифметических операций.

Рассмотрим функцию дискретного аргумента

$$f_1(k) = \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j \equiv \sum_{i=1}^{k-1} C_{i, k-i} n_i n_{k-i}, \quad k = \overline{1, M}. \quad (7)$$

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

$$f_1(k) = \sum_{i=1}^{k-1} C_{ij} n_i n_{k-i} \approx \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(i) V_{\alpha}(k-i) n_i n_{k-i} = \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R \widehat{U}_{\alpha}(i) \widehat{V}_{\alpha}(k-i), \quad (8)$$

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

Таким образом, в (8) 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 $k = \overline{1, M}$ [7]. В результате, сложность вычисления первой суммы из системы (1) при $k = \overline{1, M}$ снизится с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций.

Далее рассмотрим дискретную функцию

$$f_2(k) = \sum_{i=1}^M C_{ik} n_i, \quad k = \overline{1, M}. \tag{9}$$

Вычисление значений $f_2(k)$ при $k = \overline{1, M}$ напрямую из (9) потребует $O(M^2)$ арифметических операций. Заметим, что операция (9) эквивалентна операции умножения матрицы C на вектор значений n_i . Через разложение (6) вычисление (9) можно свести к поочередному умножению факторов разложения U, V^T на соответствующие векторы. Таким образом, сложность вычисления (9) снижается до $O(MR)$ операций.

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

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M C_{ij} i n_i n_j &= [n_1 \ 2n_2 \ \dots \ Mn_M] \times \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1M} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M1} & C_{M2} & \dots & C_{MM} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \dots \\ n_M \end{bmatrix} \approx \\ &\approx [n_1 \ 2n_2 \ \dots \ Mn_M] \times UV^T \times \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \dots \\ n_M \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{10}$$

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

Используя построенные методы для вычисления (7), (9), (10) в схеме (5), получаем снижение сложности шага разностной схемы с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций, где R — число столбцов в факторах U, 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. Ниже мы приводим ряд случаев, когда кинетические коэффициенты, используемые для моделирования разных физических систем, представимы в виде разложений с разделенными переменными с малым значением R .

4. Параллельная реализация быстрого алгоритма. Сформулируем параллельные алгоритмы быстрого вычисления значений функций (8), (9), а также значения кратной суммы (10). Для этого распределим элементы матриц скелетного разложения U, V по p процессорам в виде пар блоков U^k, V^k размеров $\frac{M}{p} \times R$, а вектор n распределим по процессорам в виде блоков длины $\frac{M}{p}$. Строить скелетное разложение с введенным распределением блоков U^k, V^k будем с помощью параллельной реализации крестового алгоритма матричной интерполяции [15].

Вычисление значений (9) будем проводить в три этапа.

Алгоритм 1.

1. Вычисляем по отдельности на каждом процессоре $\tilde{y}_i = V_i n_i, i = \overline{1, p}$.
2. С помощью операции коллективного взаимодействия (редукция по сумме) распределяем на все процессоры вектор $\tilde{y} = \sum_{i=1}^p \tilde{y}_i$ длины R .
3. Вычисляем по отдельности на каждом процессоре итоговый блок $y_i = U_i \tilde{y}$ длины $\frac{M}{p}$.

Таким образом, предложена параллельная реализация быстрого вычисления значений функции $f_1(k)$.

Рассмотрим вспомогательную задачу вычисления значений функции

$$g(k) = \sum_{i=0}^k a_i b_{k-i}, \quad k = \overline{0, M-1}.$$

Вычисление $g(k)$ равносильно задаче умножения треугольной теплицевой матрицы

$$T(a) = \begin{bmatrix} a(v_0) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a(v_1) & a(v_0) & 0 & 0 & 0 \\ a(v_2) & a(v_1) & a(v_0) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix}$$

на вектор значений b . Заметим, что матрицу $T(a)$ можно представить в виде суммы обычного и косоого циркулянтов:

$$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} a(v_0) & a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & a(v_1) \\ a(v_1) & a(v_0) & a(v_N) & \dots & a(v_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a(v_0) & -a(v_N) & -a(v_{N-1}) & \dots & -a(v_1) \\ a(v_1) & a(v_0) & -a(v_N) & \dots & -a(v_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (C^+ + C^-) = T(a).$$

Следовательно, $T(a)b = \frac{1}{2} (C^+b + C^-b)$. Быстрое умножение каждого из циркулянтов на вектор основывается на использовании быстрого дискретного преобразования Фурье (параллельная версия алгоритма быстрого преобразования Фурье реализована, например, в библиотеке Intel MKL), которое при используемом распределении векторов по процессорам можно выполнить параллельно. Далее, пользуясь (8), снова сводим вычисление (7) к R вычислениям функций вида $g(k)$ и вычислению суммы их значений. Отсюда имеем параллельный алгоритм вычислений функции $g(k)$.

Алгоритм 2.

1. Вычисляем параллельно R векторов-сверток с помощью известных параллельных алгоритмов умножения треугольной теплицевой матрицы на вектор.
2. Складываем на каждом процессоре R блоков-результатов умножения.

Параллельное вычисление кратной суммы проводится в два этапа: параллельно вычисляем произведение скелетного разложения матрицы C на вектор \mathbf{n} (см. алгоритм 1), далее вычисляем параллельно скалярное произведение векторов $[n_1 \ 2n_2 \ \dots \ Mn_M] \times [f_1 \ 2f_2 \ \dots \ Mf_M]^T$, где $\mathbf{f} \equiv C\mathbf{n}$.

Таким образом, построены параллельные алгоритмы для вычисления всех составляющих оператора \mathcal{S} . Шаги используемой явной разностной схемы предиктор–корректор будем тоже осуществлять параллельно, работая по отдельности на каждом процессоре с вектор-блоками длины $\frac{M}{p}$. Следовательно, предложен параллельный вариант быстрого алгоритма решения кинетических систем уравнений агрегации и фрагментации.

5. Численные эксперименты. При моделировании процессов агрегации и фрагментации часто используются кинетические коэффициенты (ядра) следующего вида [2, 3, 8, 12]:

$$C_{ij} = (i^{1/3} + j^{1/3})^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}, \quad (11)$$

$$C_{ij} = i^\mu j^\nu + i^\nu j^\mu; \quad \mu + \nu < 1; \quad \mu \geq 0; \quad \nu \geq 0, \quad R \equiv 2,$$

$$C_{ij} = \left((i^{1/3} + j^{1/3})(i^{-1/3} + j^{-1/3}) \right)^3, \quad R \equiv 7,$$

$$C_{ij} = 1, \quad R \equiv 1, \quad (12)$$

$$C_{ij} = ij, \quad R \equiv 1,$$

$$C_{ij} = i + j, \quad R \equiv 2.$$

Заметим, что все приведенные функции, кроме (11), уже представлены в виде разложений с разделенными переменными фиксированного ранга с $R \leq 7$, а для ядра (11) в работе [16] доказана следующая теорема.

Теорема. Ядро $C(u, v) = (u^{1/3} + v^{1/3})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}}$ можно приблизить суммой $C(u, v) \approx \sum_{\alpha=1}^M U_\alpha(u) V_\alpha(v)$

с относительной точностью ε на двумерной сетке по u и v с числом слагаемых $M = O\left(\log \frac{1}{\varepsilon}\right)$.

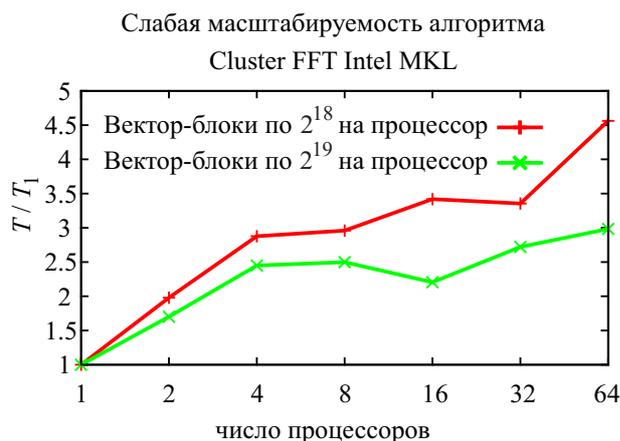


Рис. 1. Слабая масштабируемость алгоритма дискретного преобразования Фурье. Кластер ИВМ РАН

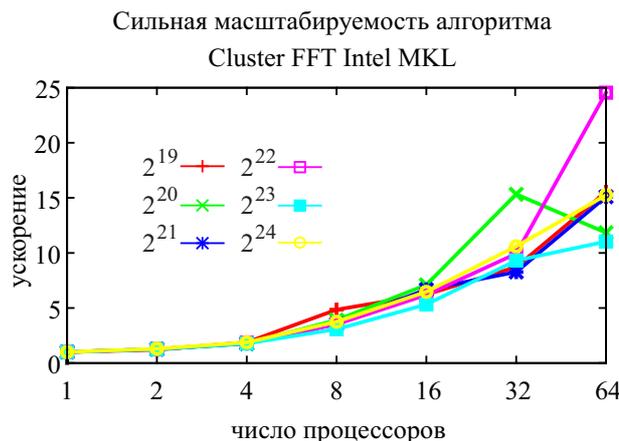


Рис. 2. Сильная масштабируемость алгоритма дискретного преобразования Фурье. Кластер ИВМ РАН

Таким образом, для достаточно широкого класса задач моделирования процессов агрегации и фрагментации описанный метод позволяет существенно ускорить схему предиктор–корректор. Сравнение эффективности рассматриваемого быстрого метода со схемой предиктор–корректор проведено в [14]. При больших значениях M быстрый метод позволяет ускорить исходную схему более чем в 1000 раз.

При программной реализации параллельного алгоритма использовалась версия дискретного параллельного преобразования Фурье, реализованная в библиотеке Intel MKL. Результаты тестирования данной операции согласуются с документацией к параллельному алгоритму дискретного преобразования Фурье библиотеки Intel MKL и теоретическими результатами по его масштабируемости [18] (рис. 1 и 2). Так как алгоритмическая сложность быстрого преобразования Фурье определяет алгоритмическую сложность полного алгоритма, масштабируемость данной операции определяет и масштабируемость параллельного алгоритма решения уравнений агрегации и фрагментации.

Тестовые расчеты с ядрами (11), (12) подтверждают эффективность параллельной реализации быстрого алгоритма: при больших значениях M получено ускорение алгоритма более чем в десятки раз (табл. 1 и 2).

В табл. 1 показано время тестового расчета для $M = 409\,600$, $C_{ij} = (i^{1/3} + j^{1/3})^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}$, $R = 16$, $t \in [0, 1]$, $\lambda = 10^{-3}$, $\tau = 10^{-4}$; кластер ИВМ РАН; вычислительные узлы по 8 ядер (два 4-ядерных процессора Intel Xeon X5355@2.66 ГГц).

В табл. 2 показано время тестового расчета для $M = 4\,194\,304 \equiv 2^{22}$, $C_{ij} = 1$, $R = 1$, $t \in [0, 1]$, $\lambda = 10^{-3}$, $\tau = 10^{-3}$; суперкомпьютер “Ломоносов” (НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова).

При использовании параллельной реализации быстрого алгоритма продемонстрировано качественное влияние значение параметра λ на решение задачи Коши для системы уравнений агрегации и фрагментации. Для задач, отличающихся только значением параметра λ , получены стационарные решения и решения с периодически осциллирующей полной плотностью агрегатов (рис. 3). Для проведения расчетов использовались следующие параметры. Начальное условие $n_{k_0} = \frac{1}{10}$, $k = \overline{1, 10}$, $n_{k_0} = 0$, $k > 10$; ядро $C(i, j) = i^{0.75} j^{-0.75} + i^{-0.75} j^{0.75}$; кластер ИВМ РАН. Для выполнения закона сохранения массы при расчетах для малых значений $\lambda < 0.005$ численно решались конечные системы дифференциальных уравнений порядков вплоть до $M = 204\,800$.

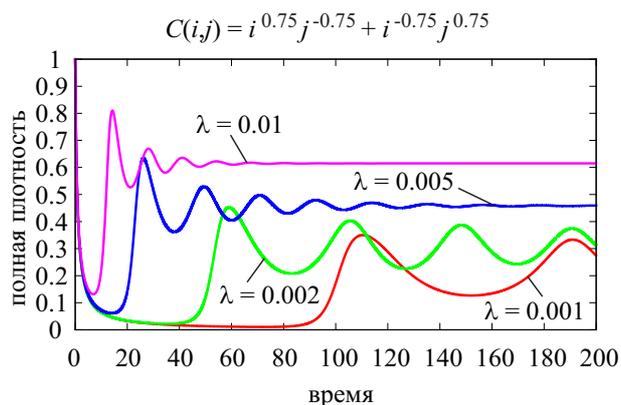


Рис. 3. Эволюция полной плотности агрегатов стационарных решений задачи Коши и решений с осциллирующей полной плотностью агрегатов

Таблица 1

Число ядер	Время, сек.	Ускорение
1	127 106	1.0
2	77 882	1.63
4	41 800	3.04
8	20 576	6.18
16	40 419	3.14
32	30 008	4.24
64	11 317	11.23

Таблица 2

Число ядер	Время, сек.	Ускорение
1	4600	1.0
2	2687	1.71
4	1578	3.54
8	1052	4.37
16	675	6.81
32	464	9.91
64	267	17.28
128	185	24.86
256	104	44.23

6. Заключение. В настоящей статье рассмотрен быстрый алгоритм решения систем уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского [14]. Для ряда ядер приведены точные значения и теоретические оценки рангов их разложений с разделенными переменными, демонстрирующие широкую применимость описанной численной схемы. Предложена параллельная реализация рассмотренного быстрого алгоритма, базирующаяся на использовании параллельных алгоритмов построения малоранговых матричных аппроксимаций [15], параллельных алгоритмов умножения малоранговых матриц на вектор и быстрых параллельных алгоритмов вычисления дискретной свертки массивов. При использовании предложенного алгоритма продемонстрировано влияние значения параметра λ на характер решения задачи Коши — при больших λ найдены стационарные решения, а при малых получены решения с периодически осциллирующей полной плотностью агрегатов. Новый параллельный алгоритм позволяет ускорить расчеты в десятки раз и перейти к исследованию новых задач, для решения которых требуется рассматривать системы из сотен тысяч дифференциальных уравнений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14–11–00806). Численные эксперименты по тестированию программной реализации параллельного алгоритма на суперкомпьютере “Ломоносов” выполнены при поддержке РФФИ (код проекта 13–01–12061–офи_м).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brilliantov N.V., Bodrova A.S., Krapivsky P.L. A model of ballistic aggregation and fragmentation // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2009. 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 S., Ben-Naim E. A kinetic view of statistical physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
4. Pöschel T., Brilliantov N.V., Frömmel C. Kinetics of prion growth // Biophysical Journal. 2003. **85**, N 6. 3460–3474.
5. Cuzzi J.N. et al. An evolving view of Saturn's dynamic rings // Science. 2010. **327**, N 5972. 1470–1475.
6. Brilliantov N. et al. Particle size distribution in Saturn's rings: aggregation-fragmentation model // Proc. National Academy of Sciences of the United States of America. 2014 (submitted).
7. Kazeev V.A., Khoromskij B.N., Tyrtshnikov E.E. Multilevel Toeplitz matrices generated by tensor-structured vectors and convolution with logarithmic complexity // SIAM Journal on Scientific Computing. 2013. **35**, N 3. A1511–A1536.
8. Галкин В.А. Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001.
9. Алоян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. Курс лекций. М.: ИВМ РАН, 2002.
10. Oseledets I., Tyrtshnikov E. TT-cross approximation for multidimensional arrays // Linear Algebra and its Applications. 2010. **432**, N 1. 70–88.
11. Kruijs F.E., Maisels A., Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation // AIChE Journal. 2000. **46**, N 9. 1735–1742.
12. Palaniswamy G., Loyalka S.K. Direct simulation Monte Carlo aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling // Nuclear Technology. 2006. **156**, N 1. 29–38.
13. Ball R.C., Connaughton C., Jones P.P., Rajesh R., Zaboronski O. Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs // Physical Review Letters. 2012. **109**. doi: 10.1103/PhysRevLett.109.168304.

14. *Matveev S.A., Tyrtshnikov E.E., Smirnov A.P., Brilliantov N.V.* Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**. 1–8.
15. *Желтков Д.А., Тьртшышников Е.Е.* Параллельная реализация матричного крестового метода // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 369–375.
16. *Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtshnikov E.E.* A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // Journal of Computational Physics. 2015. **282**. 23–32.
17. *Tyrtshnikov E.E.* Mosaic-skeleton approximations // Calcolo. 1996. **33**, N 1–2. 47–57.
18. *Gupta A., Kumar V.* The scalability of FFT on parallel computers // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. 1993. **4**, N 8. 922–932.

Поступила в редакцию
13.05.2015

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

S. A. Matveev¹

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

Received May 13, 2015

Abstract: A parallel implementation of a fast algorithm for solving systems of the Smoluchowski-type kinetic equations of aggregation and fragmentation processes is proposed. The efficiency and scalability of the proposed implementation are shown for several particular problems of aggregation and fragmentation kinetics. The oscillatory solutions of the Cauchy problems are found using the developed parallel algorithm in terms of total density.

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

References

1. N. V. Brilliantov, A. S. Bodrova, and P. L. Krapivsky, “A Model of Ballistic Aggregation and Fragmentation,” *J. Stat. Mech. Theor. Exp.* (2009). 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, S. Redner, and E. Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010).
4. T. Pöschel, N. V. Brilliantov, and C. Frömmel, “Kinetics of Prion Growth,” *Biophys. J.* **85** (6), 3460–3474 (2003).
5. J. N. Cuzzi, J. A. Burns, S. Charnoz, et al., “An Evolving View of Saturn’s Dynamic Rings,” *Science* **327** (5972), 1470–1475 (2010).
6. 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.
7. V. A. Kazeev, B. N. Khoromskij, and E. E. Tyrtshnikov, “Multilevel Toeplitz Matrices Generated by Tensor-Structured Vectors and Convolution with Logarithmic Complexity,” *SIAM J. Sci. Comp.* **35** (3), A1511–A1536 (2013).
8. V. A. Galkin, *The Smoluchowski Equation* (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
9. A. E. Aloyan, *Dynamics and Kinematics of Gas Impurities and Aerosols in the Atmosphere* (Inst. of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, 2002) [in Russian].
10. I. Oseledets and E. Tyrtshnikov, “TT-Cross Approximation for Multidimensional Arrays,” *Linear Algebra Appl.* **432** (1), 70–88 (2010).
11. F. E. Kruis, A. Maisels, and H. Fissan, “Direct Simulation Monte Carlo Method for Particle Coagulation and Aggregation,” *AICHE J.* **46** (9), 1735–1742 (2000).

12. G. Palaniswaamy and S. K. Loyalka, "Direct Simulation Monte Carlo Aerosol Dynamics: Coagulation and Collisional Sampling," *Nucl. Technol.* **156** (1), 29–38 (2006).
13. R. C. Ball, C. Connaughton, P. P. Jones, et al., "Collective Oscillations in Irreversible Coagulation Driven by Monomer Inputs and Large-Cluster Outputs," *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012).
doi: 10.1103/PhysRevLett.109.168304
14. S. A. Matveev, E. E. Tyrtysnikov, A. P. Smirnov, and N. V. Brilliantov, "A Fast Numerical Method for Solving the Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation and Fragmentation Processes," *Vychisl. Metody Programm.* **15**, 1–8 (2014).
15. D. A. Zheltkov and E. E. Tyrtysnikov, "A Parallel Implementation of the Matrix Cross Approximation Method," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 369–375 (2015).
16. S. A. Matveev, A. P. Smirnov, and E. E. Tyrtysnikov, "A Fast Numerical Method for the Cauchy Problem for the Smoluchowski Equation," *J. Comput. Phys.* **282**, 23–32 (2015).
17. E. Tyrtysnikov, "Mosaic-Skeleton Approximations," *Calcolo* **33** (1–2), 47–57 (1996).
18. A. Gupta and V. Kumar, "The Scalability of FFT on Parallel Computers," *IEEE Trans. Parallel Distrib. Syst.* **4** (8), 922–932 (1993).