

УДК 519.6

doi 10.26089/NumMet.v19r325

ЭФФЕКТИВНЫЙ РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ АГРЕГАЦИИ С УЧЕТОМ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Д. А. Стефонишин¹, С. А. Матвеев², А. П. Смирнов³, Е. Е. Тыртышников⁴

Рассмотрена модель агрегационных процессов для класса уравнений типа уравнений Смолуховского, допускающих тройные взаимодействия агрегатов. Предложен численный метод быстрого решения задачи Коши для указанной системы уравнений, позволяющий снизить алгоритмическую сложность $O(N^3)$ шага выполнения разностной схемы предиктор–корректор до $O(RN \log N)$ без потери точности, где N задает количество используемых уравнений, а R определяет ранг массивов кинетических коэффициентов. Эффективность и точность нового численного метода продемонстрированы для модельных задач агрегационной кинетики.

Ключевые слова: трехчастичное уравнение Смолуховского, кинетика процессов агрегации, схема предиктор–корректор, малоранговые тензорные аппроксимации, дискретная свертка.

1. Введение. Многие формально не связанные друг с другом природные и технологические явления часто описываются процессами агрегации и фрагментации, т.е. взаимодействиями неупруго сталкивающихся элементов сложной физической системы. Например, выпадение атмосферных осадков, образование звезд в облаках космической пыли, явление свертываемости крови, рост полимеров, рост дефектов в материалах, развитие человеческого общества, экологических систем и др. При определенных предположениях в случае однородности рассматриваемой системы, отсутствия процесса фрагментации и при учете только парных взаимодействий элементов системы соотношение баланса взаимодействующих частиц может быть записано в виде уравнений Смолуховского [1]. Системам указанных кинетических уравнений уделено значительное внимание в различных исследованиях и их свойства хорошо изучены [2–4]. Эта математическая модель описывает эволюцию системы вследствие объединений ее элементов при бинарных столкновениях. Учет лишь двухчастичных столкновений является разумным приближением при невысокой плотности рассматриваемой системы, когда одновременные столкновения большого числа частиц редки.

Тем не менее, одновременные тройные, четверные и столкновения большого числа частиц тоже могут иметь место в реальных физических процессах, когда среда достаточно плотна либо продукты множественных столкновений являются существенно более стабильными, чем в случае двойных столкновений. Процессы агрегации, допускающие множественные столкновения, могут быть описаны так называемыми “многочастичными” уравнениями типа Смолуховского. Изучение и использование таких многочастичных уравнений в приложениях существенно затруднено увеличением их сложности при росте числа возможных типов взаимодействий (по количеству участвующих во взаимодействии частиц). В настоящей статье рассматривается математическая модель, в которой имеют место только двойные и тройные столкновения, однако полученные результаты могут быть перенесены на общий случай.

В нашей работе исследуется дискретный вариант кинетических уравнений, когда все частицы (агрегаты) состоят из определенного числа частиц минимально возможного в заданной системе размера (мономеров). Пусть величина $n_k(t)$ в момент времени t задает концентрацию агрегатов, состоящих из k мономеров. Уравнения типа Смолуховского описывают эволюцию концентраций n_k во времени. При агрегации образуются все большие и большие частицы, что означает наличие бесконечного числа уравнений в системе. Последний факт сам по себе представляет большую трудность для прямого применения классических вычислительных методов. Например, использование разностных схем оказывается слишком затратным по времени и объемам задействованной памяти. При наличии тройных столкновений формальная алгоритмическая сложность каждого шага разностной схемы растет как $O(N^3)$ от числа N задействованных

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, 119992, Москва; аспирант, e-mail: stefonishin@gmail.com

² Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля, 3, 121205, Москва; мл. науч. сотр., e-mail: s.matveev@skoltech.ru

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

⁴ Институт вычислительной математики им. Г. И. Марчука РАН, ул. Губкина, 8, 119333, Москва; директор, e-mail: eugene.tyrtysnikov@gmail.com

уравнений, аппроксимирующих бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений. В то же время распространенные для решения систем двухчастичных кинетических уравнений методы Монте-Карло имеют ряд преимуществ [5–7]. Однако в силу большей сложности трехчастичной задачи построение эффективного соответствующего метода Монте-Карло может оказаться затруднительным.

В настоящей статье обобщаются результаты работ [8, 9] о численном методе решения систем двухчастичных кинетических уравнений типа Смолуховского. Предлагается эффективный метод приближенного численного решения системы уравнений более общего вида, допускающих как двойные, так и тройные столкновения агрегатов. При этом снижается асимптотика алгоритмической сложности разностной схемы предиктор–корректор и количество используемых ячеек оперативной памяти. Разработанный метод основывается на применении малоранговых тензорных аппроксимаций и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Метод может быть использован для обобщения результатов работ [8, 10] на случай трехчастичных кинетических уравнений при наличии процесса фрагментации, источников, стоков частиц и многокомпонентной агрегации.

2. Постановка задачи. Через $[k]$ обозначим агрегат, состоящий из k мономеров. Рассматриваемые процессы агрегации, допускающие двойные и тройные столкновения, символически записываются в виде $[i_1] + [i_2] \rightarrow [i_1 + i_2]$ и $[i_1] + [i_2] + [i_3] \rightarrow [i_1 + i_2 + i_3]$ соответственно. Для каждого из типов столкновений определены соответствующие кинетические коэффициенты $C_{i_1, i_2}^{(2)}$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}$, характеризующие число возникающих агрегатов размеров $i_1 + i_2$ и $i_1 + i_2 + i_3$ в единице объема за единицу времени при двойных столкновениях частиц размеров i_1, i_2 и при тройных столкновениях частиц размеров i_1, i_2, i_3 . Пусть $\mathbf{n}(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots]^T$. Тогда кинетические уравнения процесса агрегации могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \frac{dn_k}{dt} &= S_k^{(2)}(\mathbf{n}) + S_k^{(3)}(\mathbf{n}), \quad k = \overline{1, \infty}, \\ S_k^{(2)}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{2} \sum_{i_1+i_2=k} C_{i_1, i_2}^{(2)} n_{i_1} n_{i_2} - n_k \sum_{i_1=1}^{\infty} C_{i_1, k}^{(2)} n_{i_1}, \\ S_k^{(3)}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{6} \sum_{i_1+i_2+i_3=k} C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2} n_{i_3} - \frac{n_k}{2} \sum_{i_1, i_2=1}^{\infty} C_{i_1, i_2, k}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2}. \end{aligned} \quad (1)$$

В этой записи операторы $S_k^{(2)}$ и $S_k^{(3)}$ целиком отвечают только за свой тип столкновений (двойные и тройные столкновения соответственно), приводящих к изменению концентрации агрегатов размера k . Первое слагаемое в операторе $S_k^{(2)}$ описывает скорость образования частиц размера $k = i_1 + i_2$ при столкновении пары частиц всевозможных размеров i_1 и i_2 . Множитель $1/2$ необходим, чтобы избежать повторного суммирования. Второй член в $S_k^{(2)}$ определяет скорость, с которой частицы размера k исчезают за счет двойных столкновений с частицами любого другого размера i_1 . Аналогичным образом первое и второе слагаемые в операторе $S_k^{(3)}$ соответствуют скоростям образования и исчезновения агрегатов размера k за счет тройных столкновений. Необходимо отметить, что из физических соображений следуют неотрицательность каждого из ядер (массивов кинетических коэффициентов) $C^{(2)} = [C_{i_1, i_2}^{(2)}]$ и $C^{(3)} = [C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}]$ и их симметричность относительно размеров взаимодействующих частиц.

Имеет смысл выделить отдельно два важных частных случая системы уравнений (1), описывающих столкновения только одного типа, т.е. когда равны нулю кинетические коэффициенты, отвечающие за другой тип столкновений. Указанные системы уравнений имеют вид

$$\frac{dn_k}{dt} = S_k^{(2)}(\mathbf{n}), \quad k = \overline{1, \infty}; \quad (2)$$

$$\frac{dn_k}{dt} = S_k^{(3)}(\mathbf{n}), \quad k = \overline{1, \infty}. \quad (3)$$

Здесь уравнения (2) являются исходными двухчастичными уравнениями Смолуховского. Эффективный метод приближенного численного решения данной системы обсуждался в работе [8]. Рассмотрение случая (3) только тройных столкновений может быть важно при наличии процесса фрагментации агрегатов, когда продукты трехчастичных взаимодействий $[i_1] + [i_2] + [i_3] \rightarrow [i_1 + i_2 + i_3]$ являются существенно более стабильными, чем у двухчастичных взаимодействий [11].

При задании начальных условий

$$n_k(0) = n_{k,0}, \quad k = \overline{1, \infty}, \quad (4)$$

получаем три задачи Коши для бесконечных систем обыкновенных дифференциальных уравнений (1), (2) или (3).

В качестве характеристик состояния системы в момент времени t могут быть введены полная концентрация агрегатов n и общая масса вещества m , а именно $n(t) = \sum_{k=1}^{\infty} n_k(t)$, $m(t) = \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot n_k(t)$. Для систем кинетических уравнений, допускающих только двухчастичные столкновения, известны ограничения $\sup_{i_1, i_2} C_{i_1, i_2}^{(2)} \cdot (1 + i_1 + i_2)^{-1} < \infty$, гарантирующие выполнение закона сохранения массы $m(t) = m(0)$ для определенного достаточно широкого класса начальных условий [3]. Можно показать, что для более общей системы (1), (4) закон сохранения массы не обязан выполняться, если хотя бы для одного из ядер $C^{(2)}$ или $C^{(3)}$ наблюдается сверхлинейный рост $C_{i_1, i_2}^{(2)} \geq i_1 + i_2$ или $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \geq i_1 + i_2 + i_3$.

Для каждой из задач Коши для систем уравнений (2) и (3) известно явное решение в случае начальных условий $n_k(0) = \delta_{1,k}$ (называемых монодисперсными; через δ_{i_1, i_2} обозначен символ Кронекера) и ядер $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$ специального простого вида [11–13]. Например, для постоянных кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ решение задачи Коши для уравнений (3) при указанных начальных условиях можно записать в виде

$$n_{k=2s-1}(t) = \frac{\Gamma(s - 0.5)}{\Gamma(0.5)\Gamma(s)} \cdot n^{1.5}(t) \cdot (1 - n(t))^{s-1}, \quad n(t) = \sqrt{\frac{3}{3 + 2t}}; \quad n_{k=2s}(t) \equiv 0; \quad s = \overline{1, \infty}. \quad (5)$$

Здесь $\Gamma(\cdot)$ обозначает гамма-функцию. Тривиальность всех концентраций с четными номерами $n_{k=2s}$ естественным образом следует из выбора начального условия, отсутствия процесса фрагментации и двухчастичных столкновений. Достаточно заметить, что в начальный момент все элементы системы имеют нечетный размер 1, а при тройных столкновениях частиц нечетных размеров невозможно возникновение четноразмерных агрегатов.

3. Численный метод. В настоящем разделе приводится детальное обсуждение эффективного численного метода для решения рассмотренной выше задачи (1), (4).

Пусть $\mathbf{n}_N(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots, n_N(t)]^T$. Исходная бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений (1) аппроксимируется конечной системой

$$\begin{aligned} \frac{dn_k}{dt} &= S_k^{(2)}(\mathbf{n}_N) + S_k^{(3)}(\mathbf{n}_N), \quad k = \overline{1, N}, \\ S_k^{(2)}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{2} \sum_{i_1+i_2=k} C_{i_1, i_2}^{(2)} n_{i_1} n_{i_2} - n_k \sum_{i_1=1}^N C_{i_1, k}^{(2)} n_{i_1}, \\ S_k^{(3)}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{6} \sum_{i_1+i_2+i_3=k} C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2} n_{i_3} - \frac{n_k}{2} \sum_{i_1, i_2=1}^N C_{i_1, i_2, k}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2}. \end{aligned}$$

В новых обозначениях $\mathbf{n}_{N,0} = [n_{1,0}, n_{2,0}, \dots, n_{N,0}]^T$ и $S^{(p)}(\mathbf{n}) = [S_1^{(p)}(\mathbf{n}), S_2^{(p)}(\mathbf{n}), \dots, S_N^{(p)}(\mathbf{n})]^T$ для $p = 2, 3$ аппроксимация исходной задачи Коши может быть записана в компактном виде

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{n}_N}{dt} = S^{(2)}(\mathbf{n}) + S^{(3)}(\mathbf{n}), \\ \mathbf{n}_N(0) = \mathbf{n}_{N,0}. \end{cases}$$

Явная разностная схема предиктор–корректор для полученной задачи задается соотношениями

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{n}_N^{t+1/2} - \mathbf{n}_N^t}{\Delta t/2} = S^{(2)}(\mathbf{n}_N^t) + S^{(3)}(\mathbf{n}_N^t), \\ \frac{\mathbf{n}_N^{t+1} - \mathbf{n}_N^t}{\Delta t} = S^{(2)}(\mathbf{n}_N^{t+1/2}) + S^{(3)}(\mathbf{n}_N^{t+1/2}), \\ \mathbf{n}_N^0 = \mathbf{n}_{N,0}. \end{cases} \quad (6)$$

Схема (6) имеет второй порядок точности по времени и арифметическую сложность шага $O(N^3)$ операций (за счет вычисления оператора $S^{(3)}$). Аналогичным образом могут быть записаны разностные схемы, аппроксимирующие системы уравнений (2) и (3).

Пусть ядра $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$ приближаются соответственно билинейным (скелетным матричным) и трилинейным (каноническим тензорным) разложениями ранга R следующего вида:

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} \approx \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha, i_1}^{(2)} v_{\alpha, i_2}^{(2)}, \quad C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \approx \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha, i_1}^{(3)} v_{\alpha, i_2}^{(3)} w_{\alpha, i_3}^{(3)}. \quad (7)$$

Указанные разложения, аппроксимирующие рассматриваемые ядра, позволяют хранить $O(RN)$ элементов вместо соответствующих N^2 и N^3 элементов исходных массивов $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$.

Далее на примере ядра $C^{(3)}$ показывается, как с помощью разложений (7) может быть снижена алгоритмическая сложность разностной схемы (6). Пусть дискретная функция $f^{(3)}$ задается своими значениями

$$f_k^{(3)} = \sum_{i_1+i_2+i_3=k} C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2} n_{i_3} \equiv \sum_{i_1=1}^{k-2} \sum_{i_2=1}^{k-i_1-1} C_{i_1, i_2, k-i_1-i_2}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2} n_{k-i_1-i_2}, \quad k = \overline{1, N}.$$

При аппроксимации ядра $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}$ в обозначениях $\hat{u}_{\alpha, i}^{(3)} = u_{\alpha, i}^{(3)} n_i$, $\hat{v}_{\alpha, i}^{(3)} = v_{\alpha, i}^{(3)} n_i$ и $\hat{w}_{\alpha, i}^{(3)} = w_{\alpha, i}^{(3)} n_i$ выполнено

$$f_k^{(3)} \approx \sum_{i_1=1}^{k-2} \sum_{i_2=1}^{k-i_1-1} \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha, i_1}^{(3)} v_{\alpha, i_2}^{(3)} w_{\alpha, k-i_1-i_2}^{(3)} \cdot n_{i_1} n_{i_2} n_{k-i_1-i_2} \equiv \sum_{i_1=1}^{k-2} \sum_{i_2=1}^{k-i_1-1} \sum_{\alpha=1}^R \hat{u}_{\alpha, i_1}^{(3)} \hat{v}_{\alpha, i_2}^{(3)} \hat{w}_{\alpha, k-i_1-i_2}^{(3)}.$$

При изменении порядка суммирования в последнем выражении приближенные равенства для значений $f^{(3)}$ переписываются в виде

$$f_k^{(3)} \approx \sum_{\alpha=1}^R \sum_{i_1=1}^{k-2} \hat{u}_{\alpha, i_1}^{(3)} \cdot \sum_{i_2=1}^{k-i_1-1} \hat{v}_{\alpha, i_2}^{(3)} \hat{w}_{\alpha, k-i_1-i_2}^{(3)}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (8)$$

Для каждого $\alpha = \overline{1, R}$ слагаемые во внешней сумме правой части (8) могут быть вычислены в два этапа сразу при всех значениях k . Для этого при фиксированном значении α сначала находятся для $k = \overline{1, N}$

элементы $z_{\alpha, k} = \sum_{i_2=1}^{k-1} \hat{v}_{\alpha, i_2}^{(3)} \hat{w}_{\alpha, k-i_2}^{(3)}$. Последнее равенство эквивалентно расчету дискретной свертки массивов $[\hat{v}_{\alpha, 1}^{(3)}, \hat{v}_{\alpha, 2}^{(3)}, \dots, \hat{v}_{\alpha, N}^{(3)}]$ и $[\hat{w}_{\alpha, 1}^{(3)}, \hat{w}_{\alpha, 2}^{(3)}, \dots, \hat{w}_{\alpha, N}^{(3)}]$ и может быть выполнено одновременно при всех значениях

$k = \overline{1, N}$ за $O(N \log N)$ арифметических операций [14]. Затем находятся элементы $\sum_{i_1=1}^{k-2} \hat{u}_{\alpha, i_1}^{(3)} z_{\alpha, k-i_1}$, что

эквивалентно расчету свертки массивов $[\hat{u}_{\alpha, 1}^{(3)}, \hat{u}_{\alpha, 2}^{(3)}, \dots, \hat{u}_{\alpha, N}^{(3)}]$ и $[z_{\alpha, 1}, z_{\alpha, 2}, \dots, z_{\alpha, N}]$. Из сказанного выше следует, что приближение первого слагаемого из оператора $S^{(3)}$ разностной схемы (6) может быть найдено за $O(RN \log N)$ арифметических операций вместо $O(N^3)$ при непосредственном вычислении.

Теперь, пусть дискретная функция $g^{(3)}$ задана своими значениями

$$g_k^{(3)} = n_k \sum_{i_1, i_2=1}^N C_{i_1, i_2, k}^{(3)} n_{i_1} n_{i_2}, \quad k = \overline{1, N}.$$

При использовании аппроксимации ядра $C^{(3)}$ трилинейным разложением из (7) во введенных ранее обозначениях справедливо

$$g_k^{(3)} \approx n_k \sum_{i_1, i_2=1}^N \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha, i_1}^{(3)} v_{\alpha, i_2}^{(3)} w_{\alpha, k}^{(3)} \cdot n_{i_1} n_{i_2} \equiv \sum_{\alpha=1}^R \hat{w}_{\alpha, k}^{(3)} \cdot \sum_{i_1=1}^N \hat{u}_{\alpha, i_1}^{(3)} \cdot \sum_{i_2=1}^N \hat{v}_{\alpha, i_2}^{(3)}.$$

Отсюда ясно, что нахождение значений функции $g^{(3)}$ при всех значениях $k = \overline{1, N}$, а равно и приближенное вычисление второго слагаемого из оператора $S^{(3)}$, могут быть организованы за $O(RN)$ арифметических операций вместо $O(N^3)$ при расчете напрямую.

Аналогичным образом в работе [8] было показано, что первое и второе слагаемые из оператора $S^{(2)}$ в разностной схеме (6) могут быть приближенно вычислены за соответствующие $O(RN \log N)$ и $O(RN)$

арифметических операций вместо $O(N^2)$ при непосредственном расчете. Таким образом при использовании предложенных методов вычисления операторов $S^{(2)}$ и $S^{(3)}$ достигается снижение сложности шага исходной схемы предиктор–корректор с $O(N^3)$ до $O(RN \log N)$ арифметических операций, где R задает ранги используемых разложений (7) для аппроксимации ядер $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$. Если величина R мала по сравнению с N , то описанный численный метод потребует существенно меньше арифметических операций и задействует меньше ячеек памяти, чем при наивной реализации исходной схемы.

4. Численные эксперименты. В этом разделе приводятся результаты численных экспериментов для разностной схемы предиктор–корректор (6) для общей задачи Коши системы кинетических уравнений (1) типа Смолуховского, допускающей как двойные, так и тройные столкновения частиц. В качестве начальных условий были выбраны монодисперсные $n_k(0) = \delta_{1,k}$. Для расчетов использовались следующие два типа тестовых массивов кинетических коэффициентов (ядер) $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$:

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = 1 \quad \text{и} \quad C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = 1; \tag{9}$$

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = i_1^{\mu_1} \cdot i_2^{\mu_2} + i_1^{\mu_2} \cdot i_2^{\mu_1} \quad \text{и} \quad C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot i_{\sigma(3)}^{\mu_3}, \quad \mu_1 = 0.35, \quad \mu_2 = 0.25, \quad \mu_3 = 0.15. \tag{10}$$

В формуле (10) подразумевается сумма по всем перестановкам $\sigma: \{1, 2, 3\} \rightarrow \{1, 2, 3\}$. Наряду с общей схемой для каждого из случаев (9) и (10) были рассмотрены аналогичные двухчастичная и трехчастичная схемы, соответствующие системам уравнений (2) и (3). Отметим, что все тестовые ядра $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$ уже представлены в виде точных разложений с рангами $R \leq 6$.

В настоящем разделе сравниваются производительности наивного и предлагаемого эффективного методов организации вычислений для схемы предиктор–корректор при различном количестве задействованных уравнений. Кроме того, сравнивается численное решение трехчастичной задачи Коши с известным аналитическим решением (5) для постоянных кинетических коэффициентов и изучается связь закона сохранения общей массы системы с количеством рассматриваемых уравнений при растущем времени расчета. Помимо этого, исследуется зависимость вида распределения концентраций от типа рассматриваемого ядра.

Все расчеты были выполнены на персональном компьютере (4-ядерный процессор Intel Core i5-4210U CPU 1.77 ГГц). Замеры времени указаны без учета предподсчета массивов кинетических коэффициентов.

Таблица 1

Сравнение времен расчета для схемы предиктор–корректор при наивной и эффективной реализации в зависимости от числа уравнений. Численное решение рассчитано для задачи Коши, определяемой кинетическими коэффициентами $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ и начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$, при шаге $\Delta t = 0.01$ и числе итераций $T = 10$

Число уравнений N	Наивная реализация, сек.	Эффективная реализация, сек.
2048	144.75	0.0122
4096	1131.50	0.0224
8192	9002.03	0.0551

Таблица 2

Измерения времен расчета для эффективных реализаций трех разностных схем в зависимости от типа допустимых столкновений частиц с соответствующими постоянными кинетическими коэффициентами и начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ при шаге $\Delta t = 0.01$ и числе итераций $T = 100$

Число уравнений N	Двухчастичная схема, сек.	Трехчастичная схема, сек.	Общая схема, сек.
16384	0.329	0.424	0.746
32768	0.702	0.851	1.624
65536	1.427	1.758	3.197
131072	3.058	3.888	6.772
262144	7.697	8.660	16.468

В табл. 1 представлены измерения времен расчета для наивной и эффективной реализаций схемы предиктор–корректор при учете только тройных столкновений агрегатов. Указанные измерения подтверждают эффективность предложенной реализации схемы. Для наивной реализации видна зависимость $O(N^3)$ времени расчета от количества уравнений N .

В табл. 2 для постоянных ядер вида (9) и монодисперсных начальных условий $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ представлены измерения времен расчета эффективных реализаций общей схемы предиктор–корректор и сопутствующих схем, допускающих только двойные либо только тройные столкновения агрегатов. В данном случае каждое из ядер $C^{(2)}$ и $C^{(3)}$ имеет ранг соответствующего разложения $R = 1$, причем факторы этих разложений одинаковы для обоих ядер. Однако общая схема реализована без учета таких совпа-

дений, что характеризует ее время расчета как сумму времен для соответствующих схем, допускающих только один тип столкновений агрегатов. Измерения подтверждают зависимость $O(RN \log N)$ времени расчета для каждой из трех рассматриваемых схем от количества уравнений N .

Таблица 3

Измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации агрегатов в зависимости от времени для трехчастичной задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами и начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. Число уравнений $N = 16384$, шаг $\Delta t = 0.01$

Время t	Относительная погрешность аппроксимации полной концентрации агрегатов
1	2.349×10^{-6}
10	1.108×10^{-6}
100	1.422×10^{-7}

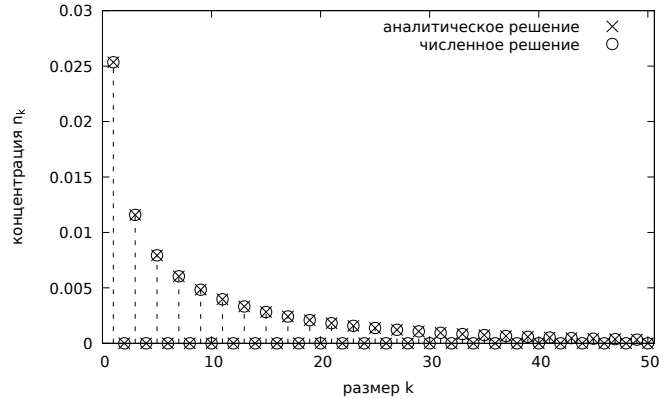


Рис. 1. Соответствие численного решения аналитическому (5) для трехчастичной задачи Коши при постоянных кинетических коэффициентах $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 0$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ и начальных условиях $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ в момент времени $t = 200$. Расчет выполнен при числе уравнений $N = 1000$ и шаге $\Delta t = 0.01$

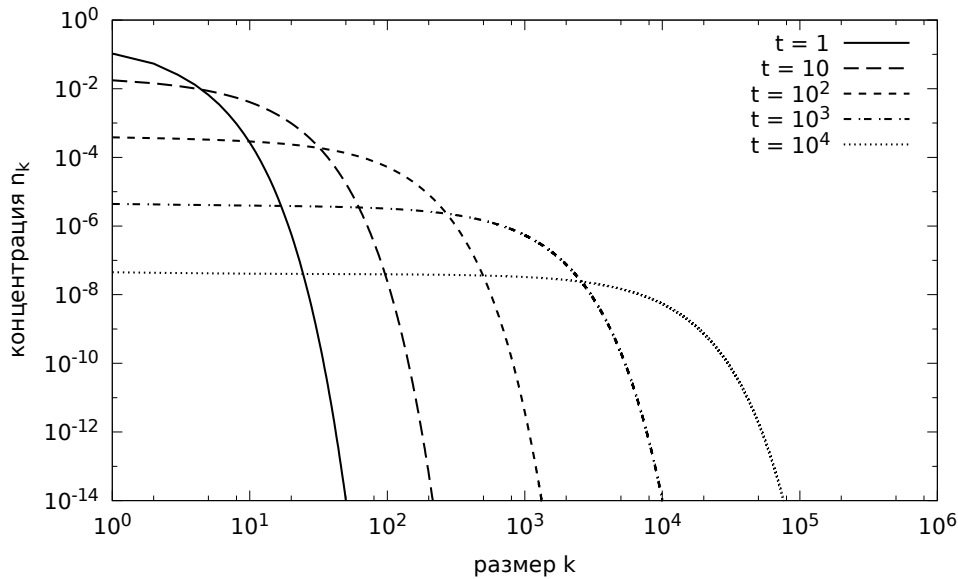


Рис. 2. Эволюция численного решения задачи Коши при постоянных кинетических коэффициентах $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ и начальных условиях $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ в зависимости от времени t . Численное решение рассчитано при числе уравнений $N = 131072$ и шаге $\Delta t = 0.01$. Логарифмическая шкала по каждой из осей

В табл. 3 приведены измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации $n(t)$ агрегатов в различные моменты времени t для задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 0$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ и монодисперсными начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. Расчеты показали согласованность кластерной плотности численного решения и аналитического решения (5). На рис. 1 продемонстрировано фактическое совпадение численного и аналитического решений трехчастичной задачи Коши с указанными кинетическими коэффициентами. Видно обнуление концентраций с четными коэффициентами $n_{k=2s} = 0$, обусловленное спецификой рассматриваемой задачи Коши и выбором начального условия.

На рис. 2 показана эволюция численного решения общей задачи Коши с постоянными ядрами (9) в зависимости от времени t . Вид графиков решений означает, что для выполнения закона сохранения

полной массы системы $m(t) = m(0)$ при увеличении времени расчета t необходимо пропорционально увеличивать число задействованных уравнений. Коэффициент пропорциональности для рассматриваемых отрезков времени при постоянных ядрах приблизительно равен 1, однако в общем случае обусловлен ростом ядра.

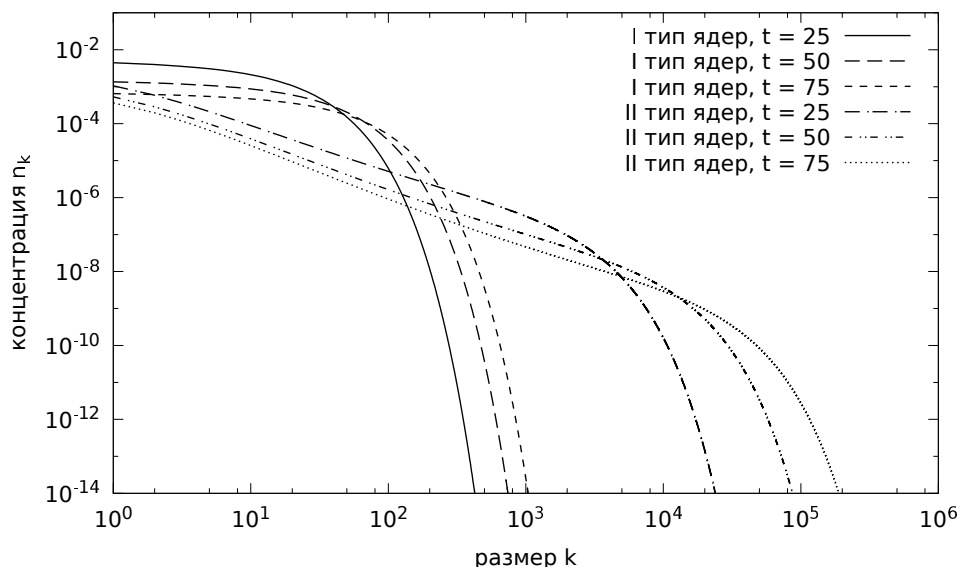


Рис. 3. Сравнение численных решений для общих задач Коши в зависимости от вида кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2}^{(2)}$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}$ при начальных условиях $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ в моменты времени $t = 25, 50, 75$. Расчет выполнен при числе уравнений $N = 262144$ и шаге $\Delta t = 0.01$. Логарифмическая шкала по каждой из осей.

Кинетические коэффициенты задачи Коши определяются типом ядра: (I) постоянные ядра $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$; (II) ядра обобщенного умножения $C_{i_1, i_2}^{(2)} = i_1^{0.35} \cdot i_2^{0.25} + i_1^{0.25} \cdot i_2^{0.35}$ и $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{0.35} \cdot i_{\sigma(2)}^{0.25} \cdot i_{\sigma(3)}^{0.15}$ (сумма по всем перестановкам $\sigma: \{1, 2, 3\} \rightarrow \{1, 2, 3\}$)

На рис. 3 представлены численные решения общих задач Коши для постоянных ядер (9) и так называемых ядер обобщенного умножения (10) в различные моменты времени t . На графиках решений заметно соответствие между ростом значений ядер как функций от размеров взаимодействующих частиц и количеством ненулевых концентраций. Последнее подтверждает необходимость задействовать большее число уравнений при большем росте рассматриваемого ядра для выполнения закона сохранения общей массы системы.

5. Заключение. В настоящей статье рассмотрена задача агрегационной кинетики, сформулированная в классе кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского, допускающих двойные и тройные взаимодействия агрегатов. При использовании быстрых алгоритмов вычисления дискретных сверток мас-сивов построен численный метод, снижающий асимптотику сложности шага разностной схемы предиктор-корректор с $O(N^3)$ до $O(RN \log N)$ арифметических операций, где N задает число уравнений в конечной системе, аппроксимирующей исходную бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений, а R является рангом используемых приближений для массивов кинетических коэффициентов. Предложенный численный метод задействует только $O(RN)$ ячеек памяти вместо $O(N^3)$ для исходной разностной схемы.

Разработанный метод может быть использован для численного решения широкого класса задач, допускающих двойные и тройные столкновения, при задействовании алгоритмов аппроксимации массивов кинетических коэффициентов. Планируется обобщение метода на общий случай множественных столкновений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-11-00806).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Smoluchowski M. Versuch Einer Mathematischen Theorie der Koagulationskinetik Kolloider Lösungen // Z. Phys. Chem. 1918. **92**. 129–168.

2. Melzak Z.A. A scalar transport equation // Transactions of the American Mathematical Society. 1957. **85**, N 2. 547–560.
3. Галкин В.А. Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001.
4. Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation // Physics Reports. 2003. **383**, N 2/3. 95–212.
5. Sorokin A.A., Strizhov V.F., Demin M.N., Smirnov A.P. Monte-Carlo modeling of aerosol kinetics // Atomic Energy. 2015. **117**, N 4. 289–293.
6. 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.
7. Palaniswamy G., Loyalka S.K. Direct simulation Monte Carlo aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling // Nuclear Technology. 2006. **156**, N 1. 29–38.
8. Матвеев С.А., Тыртышников Е.Е., Смирнов А.П., Бриллиантов Н.В. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**. 1–8.
9. 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.
10. Smirnov A., Matveev S., Zheltkov D., Tyrtshnikov E. Fast and accurate finite-difference method solving multicomponent Smoluchowski coagulation equation with source and sink terms // Procedia Computer Science. 2016. **80**. 2141–2146.
11. Krapivsky P.L. Aggregation processes with n -particle elementary reactions // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1991. **24**, N 19. 4697–4703.
12. Krapivsky P.L., Redner S., Ben-Naim E. A kinetic view of statistical physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
13. Jiang Y., Gang Hu. Generalized Smoluchowski equation with gelation // Physical Review B: Condens. Matter. 1989. **39**, N 7. 4659–4665.
14. Kazeev V., Khoromskij B., Tyrtshnikov E. Multilevel Toeplitz matrices generated by tensor-structured vectors and convolution with logarithmic complexity // SIAM J. Sci. Comp. 2013. **35**, N 3. A1511–A1536.

Поступила в редакцию
30.04.2018

An Efficient Finite-Difference Method for Solving Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation with Three-Body Collisions

D. A. Stefonishin¹, S. A. Matveev², A. P. Smirnov³,
and E. E. Tyrtshnikov⁴

¹ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Graduate Student, e-mail: stefonishin@gmail.com

² Skolkovo Institute of Science and Technology; ulitsa Nobelya, 3, Skolkovo Innovation Center, Moscow Region, 121205, Russia; Ph.D., Junior Scientist, e-mail: s.matveev@skoltech.ru

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

⁴ Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Gubkina 8, Moscow, 119333, Russia; Dr. Sci., Professor, Academician of Russian Academy of Sciences, Director, e-mail: eugene.tyrtshnikov@gmail.com

Received April 30, 2018

Abstract: We consider a model of aggregation processes for the Smoluchowski-type kinetic equations with three-body collisions of particles. We propose a numerical method for the fast solving of Cauchy problems for the corresponding systems of equations. The proposed method allows one to reduce the step complexity $O(N^3)$ of the finite-difference predictor–corrector scheme to $O(RN \log N)$ without loss of accuracy. Here the parameter N specifies the number of considered equations and R is the rank of kinetic coefficient arrays. The efficiency and accuracy of the proposed numerical method are demonstrated for model problems of aggregation kinetics.

Keywords: three-body Smoluchowski equation, kinetics of aggregation processes, predictor–corrector scheme, low-rank tensor approximations, discrete convolution.

References

1. M. Smoluchowski, "Versuch Einer Mathematischen Theorie der Koagulationskinetik Kolloider Lösungen," *Z. Phys. Chem.* **92**, 129–168 (1918).
2. Z. A. Melzak, "A Scalar Transport Equation," *Trans. Am. Math. Soc.* 1957. **85** (2), 547–560 (1957).
3. V. A. Galkin, *Smoluchowski equation* (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
4. F. Leyvraz, "Scaling Theory and Exactly Solved Models in the Kinetics of Irreversible Aggregation," *Phys. Rep.* **383** (2–3), 95–212 (2003).
5. A. A. Sorokin, V. F. Strizhov, M. N. Demin, and A. P. Smirnov, "Monte-Carlo Modeling of Aerosol Kinetics," *Atomic Energy* **117** (4), 289–293 (2015).
6. 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).
7. G. Palaniswamy and S. K. Loyalka, "Direct Simulation Monte Carlo Aerosol Dynamics: Coagulation and Collisional Sampling," *Nucl. Technol.* **156** (1), 29–38 (2006).
8. 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).
9. 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).
10. A. P. Smirnov, S. A. Matveev, D. A. Zheltkov, and E. E. Tyrtysnikov, "Fast and Accurate Finite-Difference Method Solving Multicomponent Smoluchowski Coagulation Equation with Source and Sink Terms," *Procedia Comput. Sci.* **80**, 2141–2146 (2016).
11. P. L. Krapivsky, "Aggregation Processes with n -Particle Elementary Reactions," *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (19), 4697–4703 (1991).
12. P. L. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010).
13. Y. Jiang and H. Gang, "Generalized Smoluchovski Equation with Gelation," *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **39** (7), 4659–4665 (1989).
14. V. A. Kazeev, B. N. Khoromskij, and E. E. Tyrtysnikov, "Multilevel Toeplitz Matrices Generated by Tensor-Structured Vectors and Convolution with Logarithmic Complexity," *SIAM J. Sci. Comput.* **35** (3), A1511–A1536 (2013).