

УДК 519.61

Быстрое вычисление стационарных решений моделей агрегации и фрагментации

С. А. Матвеев^{1,3}, Е.Е. Тыртышников^{1,2,3}, А. П. Смирнов^{1,3}

¹Факультет вычислительной математики и кибернетики, МГУ им. М.В. Ломоносова

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

³Институт вычислительной математики российской академии наук

В данной работе представлен быстрый численный метод поиска стационарных решений моделей агрегации и фрагментации, записанных с помощью уравнений типа Смолуховского [1]. Уравнения Смолуховского описывают эволюцию функции распределения по размерам взаимодействующих частиц сложной системы. В предельном случае, при $t \rightarrow \infty$ модели рассматриваемых процессов принимают вид систем нелинейных уравнений, решениями которых являются стационарные распределения частиц по размерам. Поиск решений нелинейных систем рассматриваемого типа оказывается исключительно трудоёмким с точки зрения требований к вычислительным временам, необходимым для получения численных решений с приемлемой в приложениях точностью, поэтому требуется построение новых высокоточных и эффективных численных методов.

Предлагаемый в работе метод основан на использовании малоранговых представлений коэффициентов ядра агрегации для ускорения итераций метода простой итерации, а также схемы ускорения Андерсона [2]. Ранее малоранговые представления коэффициентов агрегации и быстрые алгоритмы линейной алгебры уже использовались для ускорения шагов разностной схемы предиктор-корректор, однако ещё не тестировались при поиске стационарных распределений [3]. В этой работе, на основе быстрых методов вычисления оператора Смолуховского мы формулируем быстрый численный метод поиска стационарных распределений на примере модели процесса необратимой коагуляции с источником мономеров [4]. Отметим, что предлагаемая методология легко адаптируется и для решения систем нелинейных уравнений, порождённых другими математическими моделями процессов агрегации и фрагментации вещества.

При тестировании эффективности программной реализации предлагаемой методологии с точностью 10^{-12} по евклидовой норме невязки менее, чем за два часа решены системы нелинейных уравнений, состоящие из сотен тысяч нелинейных уравнений. Сравнение численных решений с аналитической асимптотикой приведено на рис. 1. Аналогичные расчёты по поиску стационарных решений с использованием схемы динамического интегрирования системы дифференциальных уравнений по времени на

отрезок $t \in [0; 400]$ потребовали более 4 суток расчётного времени. Следовательно, предложенная методология позволяет существенно ускорить расчёты по поиску стационарных распределений в моделях агрегационно-фрагментационной кинетики.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-01-00804-А.

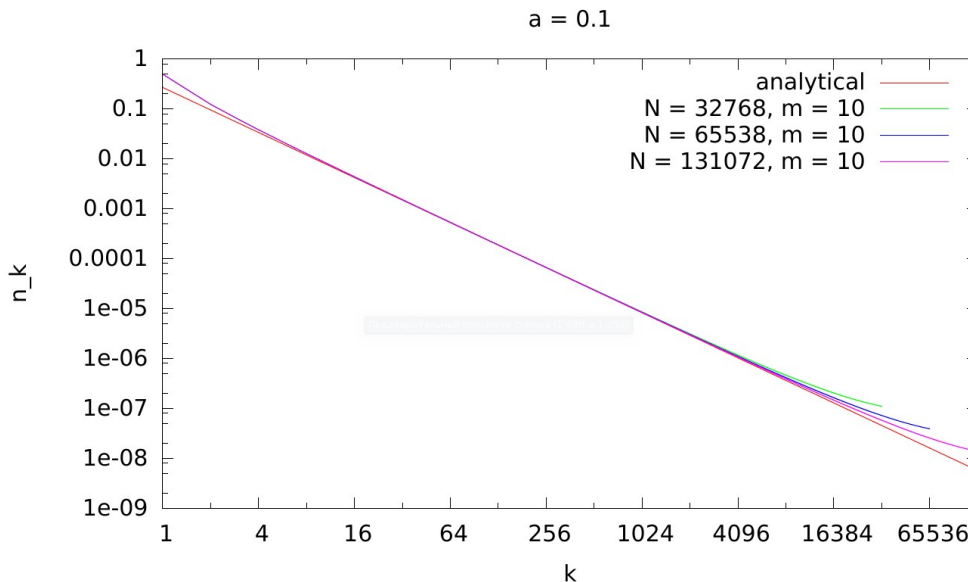


Рис. 1. Сравнение полученных численных стационарных решений конечных систем нелинейных уравнений с аналитической асимптотикой для формально бесконечной системы.

Литература

1. Галкин В. А. Уравнение Смолуховского. – М. : Физматлит, 2001.
2. Anderson D. G. Iterative procedures for nonlinear integral equations //Journal of the ACM (JACM). – 1965. – Т. 12. – №. 4. – С. 547-560.
3. 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. – Т. 15. №. 1. – С. 1-8.
4. Ball, R. C., Connaughton, C., Jones, P. P., Rajesh, R., Zaboronski, Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs //Physical review letters. 2012. – Т. 109. №. 16. – С. 168304.