

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

На правах рукописи

Загидуллин Ришат Раилевич

**Математическое моделирование пространственно-неоднородных
процессов агрегации**

Специальность 1.2.2

«Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук,
доцент Смирнов Александр Павлович

Москва 2024

Оглавление

Введение	4
1 Моделирование процессов коагуляции в одномерной среде	17
1.1 Базовая модель	17
1.1.1 Численный метод	18
1.1.2 Численные расчеты	22
1.1.3 Результаты	26
1.2 Скейлинговая теория для модели с источником	27
1.2.1 Коэффициенты, не зависящие от массы	28
1.2.2 Коэффициенты, зависящие от массы и седиментация	35
1.2.3 Численные расчеты	41
1.2.4 Результаты	44
1.3 Пример применения модели в изучении динамики аэрозолей	45
1.3.1 Полевые измерения	47
1.3.2 Физическая модель	47
1.3.3 Сравнение численных расчетов с полевыми измерениями	50
2 Процессы коагуляции в пространствах большей размерности	53
2.1 Модель загрязнения реки в 2D	53
2.1.1 Численный метод	55
2.1.2 Численные расчеты	58
2.1.3 Результаты	59
2.2 3D модель движения коагулирующих частиц в атмосфере	62
2.2.1 Описание модели	62
2.2.2 Использование неструктурированных сеток	65
2.2.3 Особенности работы с OpenFOAM	67
2.2.4 Результаты	68

2.3	Вывод ядер агрегации в условиях неоднородности	69
2.3.1	Модель агрегации седиментирующих частиц	71
2.3.2	Численный метод и расчеты	79
2.3.3	Результаты	82
3	Оптимизации алгоритмов и параллельные вычисления	84
3.1	Параллельная реализация одномерной модели	84
3.1.1	Параллельный алгоритм	84
3.1.2	Результаты	87
3.2	Параллельная реализация двумерной модели	89
3.2.1	Параллельный алгоритм	89
3.2.2	Результаты	92
3.3	Параллельная реализация трехмерной модели	95
3.3.1	Парарллельный алгоритм	95
3.3.2	Результаты	96
	Заключение	98
	Список литературы	100

Введение

Процессы образования полимеров в результате их слипания имеют довольно широкие проявления в природе. Для множества таких явлений проведение экспериментов может быть затруднительным с силу неподъемных масштабов, а иногда и в целом не могут быть осуществимы (например моделирование конкретных погодных условий может упираться в ограниченность характерных расстояний, которые можно допустить в условиях эксперимента). Поэтому моделирование подобных процессов является важным с точки зрения науки, так как позволяет проводить эксперименты численно. Важный этап в развитии теории коагуляции наступил в начале 20 века и связан с работами польского физика Мариана Смолуховского. Им изучались процессы слипания частиц, было выведено уравнение агрегации и построена теория коагуляции коллоидов. Рассмотрим уравнение Смолуховского в простейшем случае:

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j} c_j, \quad (1)$$

где $c_k(t)$ — плотности моделируемых кластеров — количество в единице объема агрегатов, состоящих из k мономеров. $K_{i,j}$ — матрица с коэффициентами, характеризующими скорости реакции слияния кластеров $[i] + [j] \rightarrow [i + j]$. Первый член в правой части Ур. (1) описывает увеличение концентрации кластеров размера k за счет слияния i с j . Второй член описывает уменьшение $c_k(t)$ в результате их слияния с всеми другими агрегатами.

Если рассматривать большой диапазон различных размеров частиц, алгоритмическая сложность численного решения данного уравнения масштабируется плохо даже в самом простом случае однокомпонентных парных столк-

новений. Многокомпонентные случаи, трехчастичные столкновения и более (они актуальны, например для газов с высокой плотностью) вычислять намного сложнее.

Одним из возможных способов ускорить вычисление уравнения Смолуховского на алгоритмическом уровне является скелетное разложение ядра коагуляции. Данный метод активно разрабатывался исследователями Московского университета, в результате чего удалось достичь довольно хороших результатов. Множество физически обоснованных ядер коагуляции, как оказалось, имеют малый ранг, что позволяет проводить более оптимальные расчеты (см. приведенную Таблицу 1).

Таблица 1: Время численного решения уравнения коагуляции с различными ядрами размера 1024 на 1024 с использованием и без использования малорангового разложения

ядро коагуляции	ранг	малоранговый расчет	прямой расчет
$u + v$	2	0.000086	0.1478
$(u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^3$	3	0.000113	0.1916
$(u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^3 * (u^{-\frac{1}{3}} + v^{-\frac{1}{3}})$	5	0.000168	0.199242
$(1 + \frac{u^{\frac{1}{3}}}{(v+1)^{\frac{1}{3}}} + \frac{v^{\frac{1}{3}}}{(u+1)^{\frac{1}{3}}})^3$	5	0.000179	0.250354

Применение скелетного разложения ядра коагуляции к уравнению Смолуховского выглядит следующим образом. Рассмотрим функцию

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

С помощью приближений для $K_{i,j}$ функцию $f_1(k)$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} f_1(k) &= \sum_{i=1}^{k-1} K_{i,k-i} n_i n_{k-i} \approx \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(i) V_{\alpha}(k-i) n_i n_{k-i} = \\ &= \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R \widehat{U}_{\alpha}(i) \widehat{V}_{\alpha}(k-i). \end{aligned} \quad (2)$$

В Ур. (2) имеем сумму из R нижнетреугольных дискретных свёрток массивов $\widehat{U}_\alpha(i) \equiv U_\alpha(i)n_i$ и $\widehat{V}_\alpha(i) \equiv V_\alpha(i)n_i$, каждую из которых можно вычислить за $O(M \log M)$ арифметических операций одновременно при всех значениях $k = \overline{1, M}$. В результате сложность численного расчета первого члена правой части Ур. (1) при $k = \overline{1, M}$ снизится с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций. Таким образом, в случае когда ядро коагуляции имеет малый ранг, алгоритмическая сложность значительно падает.

Уравнение Смолуховского моделирует процессы коагуляции в однородной среде. Однако существует множество физических систем, где это условие не выполняется. Рассмотрим процесс агрегации в условиях пространственной неоднородности. Хорошо изученный пример неоднородных физических процессов, управляемых коагуляцией – перенос аэрозолей в атмосфере. Как правило, требование пространственной неоднородности учитывается на уровне модели путем добавления релевантных пространственных операторов: адвекции, диффузии. Например,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(t, \vec{r}, v)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{V}(\vec{r}, v) f(t, \vec{r}, v) = \\ & = \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v-u) f(t, \vec{r}, u) f(t, \vec{r}, v-u) du - \\ & \quad - f(t, \vec{r}, v) \int_0^\infty K(u, v) f(t, \vec{r}, u) du, \end{aligned} \quad (3)$$

где \vec{r} – пространственные координаты, v, u – координаты размера частицы, $\vec{V}(\vec{r}, v)$ – поле скоростей. Оператор коагуляции приведен в интегральной форме. В Ур. (1) он был представлен в виде дискретных сумм.

Из уравнений мы видим, что при подобном моделировании пространственной неоднородности интегралы Смолуховского также можно попытаться оптимально рассчитать при помощи малорангового разложения. Однако возникает вопрос физичности рассматриваемых ядер коагуляции в условиях неоднородной среды. Строго говоря, когда система частиц сама находится в движении, процессы слипания могут проходить другим образом. Тогда необходим вывод ядер с учетом данных допущений. В то же время в некоторых случаях существующие ядра коагуляции могут адекватно отражать физическую систему, пусть и с меньшей точностью.

Тем не менее, если говорить о дальнейших направлениях в теории неоднородной коагуляции, то конечно станет необходимым получение новых ядер, учитывающих движение частиц как ансамбля. Еще более точные модели будут учитывать помимо движения частиц еще и гидродинамические характеристики рассматриваемой физической системы. На данный момент это малоизученная и нераскрытая область в моделировании. Когда данное направление получит достаточное развитие (в том числе в рамках работ по написанию данной диссертации), можно будет говорить о том, что теория коагуляции выйдет на новый уровень, получив новое наполнение в своем содержании.

Цель и задачи. В этом диссертационном исследовании мы ставим целью внесение вклада в формирование теории коагуляции в условиях пространственной неоднородности. Мы хотим получить новые аналитические результаты, представить разработанные численные схемы и валидировать рассмотренные модели на экспериментальных данных. Важной составляющей разработки численных схем является написание программ для решения постановок задач, и их оформление в удобном для других пользователей виде. Таким образом, для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. применить известные методы математического моделирования для исследования процессов агрегации в неоднородной среде в простейшем одномерном случае; использовать полученную модель как базовую для дальнейших работ;
2. изучить возможность получения аналитических выводов при исследовании базовой модели;
3. реализовать численные схемы для более общих моделей в двумерной и трехмерной средах;
4. разработать программный комплекс для моделирования процессов агрегации в неоднородной среде, позволяющий рассматривать модели в $1/2/3D$ пространствах и использовать высокопроизводительные вычисления.

Объектом исследования является уравнение Смолуховского, описывающее процесс агрегации системы частиц, а также уравнения переноса и диф-

фузии, добавляющие в рассматриваемую систему пространственную неоднородность. **Предметом исследования** являются численные и аналитические решения рассматриваемых постановок задач, а также свойства используемых численных схем.

Научная новизна. В рамках данной работы были получены аналитические формулировки для неоднородной коагуляции в одномерном пространстве в стационарном случае. Также было сформулировано ядро агрегации для вещества, находящегося в потоке. Помимо этого была реализована численная схема для решения задач коагуляции в неоднородной среде в одномерном/двумерном/трехмерном случаях. Численные решения можно получить как на декартовой сетке, так и на неструктурированной. При этом написанный программный пакет, в котором представлена реализация численного решения, может запускаться на параллельных архитектурах, что позволяет получить ускорение работы программы в сотни раз.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость работы заключается в получении аналитических результатов важных для обобщения теории коагуляции до случаев неоднородной среды. Предложенные методы моделирования представляют ценность как инструмент анализа и изучения неоднородных агрегирующих систем. Говорить о практической значимости нам позволяет разработанный комплекс программ, включающий в себя инструменты для исследования моделей в 1/2/3D пространствах, визуализацию, построение графиков, высокопроизводительные вычисления.

Методы исследования. В работе используются аналитические и численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, методы вычислительной математики и компьютерного моделирования.

Положения, выносимые на защиту.

- Разработаны методы моделирования процессов агрегации в неоднородной среде путем решения задач переноса-диффузии-коагуляции. Пространственная компонента варьируется от одомерных до трехмерных случаев. Для одномерного случая помимо численных результатов получены также аналитические выводы. На основе моделирования движения агрегирующих частиц в потоке с радиальной симметрией получены корректировки для диффузионного ядра агрегации в пространственно-неоднородных случаях.

- Реализованы оптимальные численные схемы: для коагуляционной составляющей уравнений применены методы быстрого решения операторов Смолуховского. Для переноса и диффузии написан широкий набор схем, позволяющий помимо важных свойств аппроксимации, сходимости и устойчивости, также добиться сохранения монотонности и консервативности. Получены как явные, так и неявные схемы. Также они работают как на регулярной сетке, так и на неструктурированной. Наконец, представлены параллельные варианты численных алгоритмов, позволяющие проводить расчеты на больших вычислительных кластерах с использованием ЦПУ и ГПУ.
- Собраны программные пакеты и выложены в открытый доступ. Предоставлены инструменты для моделирования процессов агрегации (на языке C++ с использованием параллельных технологий MPI, CUDA) а также для визуализации полученных результатов (Python, OpenGL). Код оформлен с использованием принципов объекто-ориентированного программирования, что позволяет другим заинтересованным лицам пользоваться кодами в виде библиотеки, а также без большого труда модифицировать их для своих нужд. Коды находятся по адресу github.com/RishatZagidullin.

Апробация работы. Основные результаты данной диссертационной работы докладывались автором и обсуждались

- на семинаре “Мир в капле” ИКИ РАН,
- а также на конференциях:
- “6th China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications” (МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, 2017)
 - “Тихоновские чтения 2018” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2018),
 - “5th International Conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications” (Сколково, Москва, 2019)
 - “Russian Supercomputing Days” (Москва, 2019)

- “Тихоновские чтения 2020” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2020),
- “Ломоносовские чтения 2021” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2021),
- “Тихоновские чтения 2021” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2021).

Достоверность результатов. Численные решения рассматриваемых постановок задач исследовались на сходимость путем сравнения расчетов на сектах с разной дискретизацией и вычисления относительной погрешности. Также некоторые численные решения сравнивались с аналитическими расчетами и проходили тесты на корректность результатов для упрощенных постановок задач.

Публикации. По теме работы было опубликовано 7 [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] статей (все входят в перечень ВАК).

Личный вклад автора. В работе [1] автор занимался программной реализацией численного решения поставленного уравнения, проведением численных экспериментов, а также построением графиков. Матвеев Сергей Александрович и Тыртышников Евгений Евгеньевич представили постановку задачи а также способ оптимального решения оператора Смолуховского, Смирнов Александр Павлович разработал численную схему. В работах [2, 3] автору принадлежит идея способов параллельной реализации и сами эти реализации алгоритмов и проведение численных экспериментов на суперкомпьютере Ломоносов и построение графиков. Авторству Матвеева С.А. принадлежат проведение численных экспериментов на кластерах Сколтеха и ИВМ РАН, а также построение графиков. В исследовании [4] автору принадлежит оформление постановки задачи, разработка численной схемы, проведение экспериментов, построение графиков, анализ сходимости. В статье [5] постановка задачи и аналитические выводы принадлежат Крапивскому Павлу Львовичу. Идея использования свернутого оператора переноса-диффузии принадлежит Смирнову А.П. Численная реализация, валидация аналитических выводов численными расчетами и построение графиков выполнялось автором. Наконец, в работе [6] постановка задачи принадлежит Бриллиантову Николаю Васильевичу. Аналитические выводы выполнялись совместно Смирновым А.П. и автором диссертации. Идея использования рациональной аппроксимации

принадлежит Бриллиантову Н.В. Численные расчеты и построение графиков проводились автором. Работа [7] полностью выполнена автором.

Структура работы. Работа состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Общий объем – 109 страниц, включая 28 рисунков, 15 таблиц и список литературы из 116 наименований.

Содержание работы. Сперва была рассмотрена простейшая постановка задачи в одномерном пространстве. Мы рассмотрели математическую модель переноса коагулирующих частиц. Был предложен быстрый вычислительный алгоритм, основанный на использовании быстрого метода вычисления интегральных операторов, описывающих процесс коагуляции. Предлагаемая вычислительная схема позволяет снизить алгоритмическую сложность шагов явной разностной схемы по времени.

Далее была решена постановка задачи более общей модели. Мы исследовали аналитически и численно неоднородную агрегацию в системе с источником мономеров. Система характеризуется кинетическими коэффициентами – скоростью переноса, коэффициентом диффузии и ядром коагуляции. Сначала была проанализирована упрощенная модель с независимыми от массы коэффициентами. Далее исследованы случаи с коэффициентами, зависящими от массы, возникающими в контексте агрегации с седиментацией. Для квазистационарного случая и упрощенной модели получено точное решение для пространственно зависимых плотностей агломератов. Для случая коэффициентов, зависящих от массы, выведен новый закон сохранения и разработана скейлинговая теория для плотностей. Численные результаты очень хорошо согласуются с аналитическими выводами.

Далее мы соотнесли рассмотренные модели с полевыми измерениями. Мы изучили уровень загрязнения атмосферного воздуха мелкими и ультрадисперсными частицами в акватории озера Байкал. Учитывая малую заселенность территории вокруг озера, измерения соответствуют практически естественным условиям. Полевые данные ясно демонстрируют сильную антикорреляцию между концентрацией озона в воздухе и средним размером аэрозольных частиц (наряду с их распределением по размерам). При этом данная корреляция подтверждена суточными колебаниями. Мы рассмотрели физическую модель, основанную на уравнениях переноса, диффузии и агрегации, которая позволяет дать полуколичественное описание наблюдаемой динамики.

После изучения одномерных пространственных случаев мы перешли к двумерным и трехмерным моделям. В двумерном случае рассмотрен перенос коагулирующей примеси в потоке, на которую действуют выталкивающая и гравитационная силы. В трехмерном – перенос и диффузию агрегирующих частиц, уносимых порывами ветра. Везде система решается как на регулярной, так и на неструктурированной сетке.

Далее мы исследовали кинетику агрегации седиментирующих частиц, используя уравнение переноса-диффузии. Агрегация, вызванная этими механизмами, важна как для мелких частиц (например, для первичных частиц пепла или сажи в атмосфере), так и для крупных частиц одинакового или близкого размера, где пространственная неоднородность менее выражена. Аналитические результаты можно получить для малых и больших чисел Пекле, определяющих соотношение диффузии и переноса. При малых числах (пространственная неоднородность существует преимущественно из-за диффузии) мы получили выражение для скорости агрегации через разложение чисел Пекле. При больших числах Пекле, когда перенос является основным источником пространственной неоднородности, скорость агрегации выведена из баллистических коэффициентов. Комбинируя эти результаты, мы предложили аппроксимацию рациональной функцией для всего диапазона чисел Пекле.

Наконец, мы рассмотрели различные параллельные реализации численного метода. Для этого пространственная сетка разбивается на подобласти, после чего можно параллельно решать модельное уравнение с помощью технологии MPI. При этом процессор, выполняющий алгоритм на подобласти, может использовать ресурсы ГПУ для расчета операторов Смолуховского. В итоге мы получили почти линейную масштабируемость параллельной реализации вычислительного алгоритма. При этом включение расчетов на ГПУ приводит к дополнительному ускорению вычислений в несколько раз.

Благодарности. Автор выражает огромную признательность своему научному руководителю Смирнову Александру Павловичу за чуткое руководство, помощь и экспертизу при проведении исследований и подготовки публикаций. Только благодаря ему у автора сформировался интерес к научной деятельности, и данная работа была доведена до написания диссертации. Также автор хочет выразить благодарность доценту кафедры ВТМ факультета

ВМК МГУ Матвееву Сергею Александровичу и профессору Сколтеха Бриллиантову Николаю Васильевичу за неоценимый вклад в данное исследование. Без их экспертизы проведение исследований в рамках данной работы было бы невозможным. Наконец, автор очень признателен своей семье и близким: за моральную поддержку, помощь в работе над диссертацией и ценные замечания и исправления автор благодарен Липковой Елизавете; за возможность оказаться на исследовательском пути автор благодарит Загидуллина Раиля, Загидуллину Альфию.

Обзор исследований В качестве начального пункта для данного обзора литературы мы рассматриваем работу [8], написанную Смолуховским и послужившую началом для формулировки уравнения, описывающего процессы агрегации. Это уравнение было записано в дискретной форме. Позднее модель была обобщена Гансом Мюллером [9] в интегро-дифференциальной формулировке. С тех пор было опубликовано множество работ по моделированию агрегирующих систем. Мы рассмотрим лишь некоторые из них, прокладывающие путь к определению проблем, рассматриваемых в рамках данного диссертационного исследования. Будут затронуты темы моделирования пространственно-неоднородных коагулирующих систем, экспериментального вывода и теоретической формулировки необходимых для определения значений коэффициентов, аналитических выводов и численных расчетов имеющих постановок, а также способов алгоритмической оптимизации численного решения.

Приведем примеры коагулирующих систем, в которых для анализа требуется работа с уравнением Смолуховского. Еще раз скажем о такой области как динамика аэрозолей в атмосфере. Например, в работе [10] уравнение диффузии-коагуляции используется для определения конфигурации аэрозоля в больших географических точках. Авторы сравнивают свои численные результаты с экспериментальными данными о распределении аэрозолей над городом Братск в России. Примеры природных и технологических систем, где действуют процессы агрегации и дробления хаотически движущихся частиц, можно изучить в работах [11, 12, 13, 14]. Сюда можно также отнести множество явлений, начиная от роста мелких полимерных цепочек [15, 16] до образования звезд [17, 18, 19], а также примеры из повседневной жизни, таких как скопление аэрозолей в смоге [20, 21, 22], коагуляция в коллоидных

растворах (например, в молоке) [23, 24], агрегация эритроцитов [25] или свертывание крови [26]. Также отметим обширный обзор [27] с многочисленными ссылками.

Уравнение Смолуховского удобно для изучения явления седиментации. Дело в том, что при естественных предположениях [28] нужно лишь ограничить размеры частиц какой-то конечной величиной $v \in [0, V_{\max}]$. На самом деле, класс математических моделей, представляющих потенциальный интерес, чрезвычайно широк и может включать описание различных физических эффектов: появление и сток частиц конкретных размеров [29], процесс унарной фрагментации [30] из-за неустойчивости больших кластеров и многие другие [31, 32, 33]. Хотя ниша для применения пространственно-однородных уравнений агрегации и фрагментации чрезвычайно широка [34, 35], существует еще более широкий класс пространственно-неоднородных моделей [36, 37]. Распространенное физическое явление седиментации сопровождается изменениями размеров частиц в рассматриваемой системе в результате коагуляции. Поэтому для данных процессов важно понимание процессов агрегации. Осаждение коагулирующих частиц происходит в многочисленных природных и промышленных процессах, см., например, [38, 39, 40, 41, 42]. В качестве ярких примеров можно назвать агрегацию пыли, пепла или сажи, попадающих в воздух, коагулирующих органических частиц, оседающих в воде (озера, реки, моря). Частицы, падающие в жидкость, подвергаются действию движущей силы (силы тяжести и силе Архимеда) и силы трения. После короткого переходного периода эти силы уравновешиваются. Устанавливается скорость падающей частицы, которые приводят к столкновению частиц, если их траектории пересекаются. Если частица достаточно мала, становится важной стохастическая сила, возникающая из-за молекулярных флуктуаций в окружающей жидкости. Она порождает случайную, диффузионную составляющую движения частиц. Например, диффузионное движение сравнимо с баллистическим для частиц размером менее 2 микрометра [43, 44, 45] в воздухе, что соответствует первичным частицам сажи [46].

Однородные системы относительно хорошо изучены аналитически и численно для большого класса ядер агрегации. Можно изучить работы [47, 48] в качестве обзорного материала; более того, для некоторых частных ядер агрегации K_{ij} найдены точные решения. Однако во многих системах агрегация

сопровождается потоками, уносящими агрегирующие частицы. Это относится к клеткам крови в сосудах, к молоку в устройствах для производства масла и т.д.; можно также отметить осаждение атмосферной пыли. Несмотря на большое значение таких процессов для многочисленных приложений, общие исследования пространственно-неоднородных систем до сих пор отсутствуют. Проблема заключается в сложности исходного уравнения. В такой ситуации логичным шагом становится введение некоторых допущений. Например, наличие источника мономера, хотя и делает такие системы еще более сложными, но в то же время приводит к возникновению стационарных решений, которые в ряде случаев можно свести к аналитическим выводам. Это один из путей к построению общей теории пространственно-неоднородной системы с агрегацией. Однако плотность кластеров частиц становится стационарной при достаточно больших временах. Определенные результаты в этом направлении уже получены в работах [49, 50, 51] (без учета адвекции) и [52, 53] (с учетом адвекции в одномерном случае). Аналогичные работы для диффузионных систем отсутствуют. Однако учет адвекции может также упростить анализ диффузионных систем, поскольку при рассмотрении асимптотических свойств модели, можно пренебречь диффузией, а значит нам проще применять самосогласованную теорию поля (которая может быть ошибочна в чисто диффузионных системах). Более сложные пространственно-неоднородные модели должны включать в себя гидродинамические характеристики. Работы, которые затрагивали данную проблему аналитически, практически отсутствуют. Например, [54]. В данном исследовании описаны трудности, возникающие при попытке моделирования явлений агрегации в гидродинамической системе. В частности, авторы показывают, какие условия необходимо выполнить, чтобы успешно связать уравнения Смолуховского и Навье-Стокса. Основная трудность связана с разницей в масштабах. Взаимодействие между частицами в уравнении Смолуховского представляет собой «микро-микро» взаимодействие, моделируемое методом среднего поля. Но при добавлении гидродинамики возникает дрейфовый член в уравнении Смолуховского, который должен отвечать за «макро-микро» взаимодействие, где метод среднего поля уже неприменим. Далее авторы цитируют работы, которые смогли показать корректность и существование глобальных решений такой системы в двумерном и трехмерном пространствах.

С точки зрения численного решения уравнения Смолуховского традиционно вычисляются методами конечных разностей. Однако, это не единственный существующий подход. Статья [55] — хороший обзор метода Монте-Карло для решения систем агрегации. Авторы перечисляют недостатки традиционных методов решения уравнения Смолуховского: потерю предыстории отдельных частиц и сложность алгоритмов для многокомпонентных случаев. Затем показано, как методы Монте-Карло могут помочь решить эти проблемы. Соответствующие исследования начались по крайней мере еще в 1976 году. С тех пор исследователи предлагали вариации метода, оптимизацию алгоритмов и применение к экспериментальным системам. Затем авторы описывают различные разработанные методы Монте-Карло, показывают результаты оптимизации и измеряют точность решателей в сравнении с аналитическим решением и численными результатами традиционного подхода.

Пространственно-неоднородные модели агрегации требуют разработки эффективных численных методов. Стоит отметить, что даже исследование однородных систем может потребовать действительно сложных расчетов. Для феноменологических уравнений Смолуховского в пространственно однородном случае известны различные эффективные численные алгоритмы получения приближённых решений [56, 57, 58, 59, 60]. Однако, существует всего несколько работ с результатами численного моделирования пространственно-неоднородной агрегации [31, 61, 62]. Во всех перечисленных работах авторы имеют дело с прикладными системами и сравнивают численные результаты либо проверяют сходимость с помощью измельчения сетки [31], либо с экспериментальными данными [61, 62]. Применение малорангового разложения ядра агрегации для ускорения вычислений можно найти в работах [1, 63].

Глава 1

Моделирование процессов коагуляции в одномерной среде

1.1 Базовая модель

Для начала рассмотрим базовую модель переноса коагулирующих частиц вдоль отрезка, полученную в результате объединения уравнений коагуляции и переноса. Для этого подходит Ур. (3), где $\vec{r} \in R^1$. Также дополнительно укажем максимальный допустимый размер частиц V_{\max} . С точки зрения модели это означает что, при достижении размера V_{\max} частицы перестают участвовать в процессе коагуляции, например, вследствие гравитации [64, 30]. Запишем уравнение заново с учетом указанных выше модификаций:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} + \mathcal{V}(v) \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x} = & \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v-u) f(t, x, u) f(t, x, v-u) du - \\ & - f(t, x, v) \int_0^{V_{\max}} K(u, v) f(t, x, u) du \end{aligned} \quad (1.1)$$

Можно получить задачу Коши в области $(t, x, v) \in [0; \infty] \times [0; \infty] \times [0; V_{\max}]$. Вдоль оси $x \geq 0$ осуществляется перенос коагулирующих частиц со скоростью $\mathcal{V}(v)$. При известном граничном условии $f(t, x=0, v)$ и заданных начальных условиях $f(t=0, x, v)$, имеем задачу Коши для модели переноса

коагулирующих частиц.

Рассмотрение данной математической модели позволяет отказаться от предположения о пространственной однородности процесса коагуляции и расширить класс потенциально решаемых задач.

1.1.1 Численный метод

Для численного решения рассматриваемого уравнения мы приведём схемы вычисления отдельно для интегральных операторов коагуляции [56, 63] и дифференциальных операторов переноса.

Опишем схему моделирования процесса коагуляции частиц в рамках Ур. (1.1). Сначала рассмотрим отдельно уравнение коагуляции с предельным размером частиц V_{\max} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v-u) f(t, x, u) f(t, x, v-u) du - \\ & - f(t, x, v) \int_0^{V_{\max}} K(u, v) f(t, x, u) du. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Для решения Ур (1.2) можно применить метод трапеций для вычисления интегралов и явную схему Рунге-Кутты второго порядка для вычисления изменений по времени [63].

Для ускорения вычисления интегралов построим скелетное разложение ядра коагуляции при помощи крестового алгоритма [65, 66]

$$K(u, v) = \sum_{\alpha=1}^R a_{\alpha}(u) b_{\alpha}(v).$$

Таким образом, для первого интеграла имеем:

$$\begin{aligned} & \int_0^v K(u, v-u) f(t, x, u) f(t, x, v-u) du = \\ & = \int_0^v \sum_{\alpha=1}^R a_{\alpha}(u) b_{\alpha}(v-u) f(t, x, u) f(t, x, v-u) du = \\ & = \sum_{\alpha=1}^R \int_0^v a_{\alpha}(u) f(t, x, u) b_{\alpha}(v-u) f(t, x, v-u) du. \end{aligned}$$

Аналогично для второго интеграла:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty K(u, v) f(t, x, u) du &\approx \int_0^{V_{\max}} \sum_{\alpha=1}^R a_\alpha(u) b_\alpha(v) f(t, x, u) du = \\ &= \sum_{\alpha=1}^R b_\alpha(v) \int_0^v a_\alpha(u) f(t, x, u) du. \end{aligned}$$

Заметим, что первый интеграл является суммой из R нижнетреугольных сверток, каждую из которых можно вычислить с использованием алгоритма быстрого преобразования Фурье за $O(M \log M)$ операций. Скелетное разложение ядра коагуляции позволяет вычислить второй интеграл за $O(MR)$ операций. Таким образом, используя квадратурную формулу трапеций, имеем схему вычисления интегралов Смолуховского, имеющую второй порядок точности с алгоритмической сложностью $O(MR \log M)$ операций. Далее в этой работе мы будем пользоваться именно быстрой схемой вычисления интегральных операторов из правой части уравнения Смолуховского. Подробности вывода схемы и обоснование её эффективности приведены в работах [56, 63].

Далее рассмотрим отдельно уравнение переноса:

$$\frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} = -\mathcal{V} \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x}.$$

Сформулируем численную схему аппроксимации процесса переноса частиц. Как известно, при численном решении уравнений переноса схемой первого порядка точности по времени возникает искусственная диффузия, существенно искажающая расчеты. В то же время, в линейных схемах порядка точности выше первого не выполняется сохранение свойства монотонности схем, что приводит к возникновению неестественных колебаний аппроксимированной функции. В качестве решения проблемы сохранения монотонности и повышения порядка точности был разработан класс схем, представляющих из себя комбинацию схем первого и второго порядка точности под названием TVD-схем. Данные схемы имеют следующее свойство:

$$TV(f^{n+1}) \leq TV(f^n),$$

где $TV(f) = \sum_{j_{min}}^{j_{max}} |f_{j+1} - f_j|$.

Выполнение данного условия обеспечивает монотонность используемой разностной схемы ($f_j^n \leq f_{j+1}^n \rightarrow f_j^{n+1} \leq f_{j+1}^{n+1}$). В работе [67] было выявлено, что схема переноса является TVD-схемой если она имеет следующий вид:

$$f_j^{n+1} = f_j^n - (f_j^n - f_{j-1}^n) \left(\mu + \frac{\mu}{2}(1 - \mu) \left(C_j \left(\frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{f_j^n - f_{j-1}^n} \right) - C_{j-1} \right) \right),$$

где $\mu = \frac{\mathcal{V}dt}{dx}$ - число Куранта. При этом должно выполняться соотношение:

$$0 \leq \mu + \frac{\mu}{2}(1 - \mu) \left(C_j \left(\frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{f_j^n - f_{j-1}^n} \right) - C_{j-1} \right) \leq 1.$$

Если дополнительно потребовать выполнения условия Куранта, получаем условие для C_j :

$$\frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{f_{j+1}^n - f_j^n} \geq 0 \rightarrow 0 \leq C_j \leq 2$$

$$\frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{f_{j+1}^n - f_j^n} < 0 \rightarrow C_j = 0$$

Сеточная функция C_j зовется функцией-ограничителем. Чтобы выяснить практический смысл данной функции, запишем полученную схему следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{dt} = & -\frac{\mathcal{V}}{2dx} (C_j f_{j+1}^n + (2 - C_j - C_{j-1}) f_j^n - (2 - C_{j-1}) f_{j-1}^n) + \\ & + \frac{\mathcal{V}^2 dt}{2dx^2} (C_j f_{i+1}^n - (C_j + C_{j-1}) f_j^n + C_{j-1} f_{j-1}^n) \end{aligned}$$

Имеем схему, по структуре напоминающую схему Лакса-Вендроффа с коэффициентами, зависящими от сеточной функции C_j . Напомним, что значения C_j определяются необходимостью сохранения свойства монотонности TVD-схемы. Таким образом, полученную схему можно определить как схему Лакса-Вендроффа с ограничителями, сохраняющими ее монотонность.

Вопрос выбора конкретной функции C_j был исследован в работах [68, 69, 70]. В результате создано множество функций, удовлетворяющих указанным ограничениям. В данной работе применяется функция, носящая в литературе

название “Montonized Cetnral Flux Limiter” (функция MC)[68].

$$C_j = \max(0, \min(2r_j, 0.5(1 + r_j), 2)), \text{ где } r_j = \frac{f_j - f_{j-1}}{f_{j+1} - f_j}$$

В районах экстремума функции $r_j < 0$ мы получаем разностную схему первого порядка. В остальных случаях схема аппроксимирует со вторым порядком точности по времени.

В качестве условия на правой границе определен поглощающий слой в виде функции $\sigma(x)$, которая принимает нулевые значения везде кроме небольшого слоя, где переносимый сигнал уничтожается. Пободные слои распространены в работах по исследованию задач электродинамики. Мы реализуем поглощение при помощи PML слоя (Perfectly Matched Layer).

Решаемое уравнение переноса заменяется следующим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathcal{V} \frac{\partial f}{\partial x} - c\sigma(x)f,$$

в результате разностной аппроксимации, функция поглощения выражается следующим образом

$$\sigma(x) = \begin{cases} \frac{(m+1)W \ln 10}{d} \left(\frac{x-l}{d}\right)^m & x \in [l; l+d], \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases}$$

где l — ширина области расчета без учета поглощающего слоя, d — ширина поглощающего слоя, W, m — параметры поглощающего слоя

Выбор функции $\sigma(x)$ определяется требованием сохранения непрерывности искомой функции f и ее производной по пространству. В работе [71] было предложено использовать слои вида

$$\sigma(x) = \sigma_{\max} \left(\frac{x-l}{d}\right)^m,$$

где σ_{\max} определяется выражением

$$\frac{(m+1)W \ln 10}{d}.$$

При оптимальных значениях $2 < m < 3$ данный поглощающий слой умень-

шает значение переносимой функции на внешнем слое в 10^W раз.

В результате, с помощью аппроксимаций интегральных операторов правой части уравнения Смолуховского и уравнения переноса мы решаем общую модель переноса коагулирующих частиц, используя явную схему по времени:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = A(f^n) + S(f^n)$$

где оператор $A(f)$ соответствует процессу переноса, $S(f)$ — результат вычисления интегралов Смолуховского. Пусть M — число узлов в сетке, соответствующей распределению частиц по размерам, а N — число узлов вдоль оси x .

Для каждой фиксированной координаты x_i воспользуемся быстрым методом вычисления интегральных операторов Смолуховского за $O(MR \log M)$ арифметических операций, где R — ранг ядра коагуляции. Так как оператор коагуляции, а также разностный шаблон для оператора переноса необходимо вычислить в каждом узле сетки, соответствующем физическим координатам частицы, получаем общую сложность одного шага схемы $O(N + NMR \log M) = O(NMR \log M)$ арифметических операций. Отметим, что без использования быстрого метода вычисления оператора Смолуховского сложность схемы была бы $O(NM^2)$ арифметических операций, что делало бы её практически бесполезной для проведения практических расчётов. Отметим, что сложность шагов предложенной разностной схемы существенно зависит от значения ранга R ядра коагуляции. Так, в работах [63, 72] для широкого класса ядер, используемых в приложениях доказаны оптимистичные оценки на R в зависимости от точности их приближения. Далее приводятся результаты численных экспериментов для задач Коши с постоянным и баллистическим ядрами коагуляции, для которых гарантированно существуют малоранговые представления с небольшими значениями R [63, 72].

1.1.2 Численные расчеты

Результаты численных экспериментов представлены на Рис. 1.1-1.4, а также в Таблице 1.1. Для всех приведённых численных экспериментов брались нуле-

вые начальные условия при следующем граничном условии:

$$f(t, x = 0, v) = e^{-v^2}. \quad (1.3)$$

На Рис. 1.1, 1.2 приведены эксперименты с постоянным ядром коагуляции

$$K(u, v) \equiv 1$$

для двух типов скорости переноса частиц ($\mathcal{V}(v) = 1$ и $\mathcal{V}(v) = \frac{1}{v+1}$ соответственно), а на Рис. 1.3, 1.4 аналогичные эксперименты для баллистического ядра

$$K(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 \left| \frac{1}{u+1} - \frac{1}{v+1} \right|.$$

Из результатов экспериментов следует, что существует такой выбор параметров модели, при котором образуются пространственно неоднородные стационарные распределения частиц по размерам. Из сопоставления пар Рис. 1.2, 1.4 и Рис. 1.1, 1.3 следует существенное влияние выбора, как ядра коагуляции, так и скорости переноса на вид решения: получены различные структуры линий уровня численных решений при одинаковых начальных условиях.

Тестирование производительности предложенной схемы приведено в Таблице 1.1. В случае экспериментов, представленных на Рис. 1.1, 1.2 использовалось постоянное ядро коагуляции с точным рангом скелетного разложения $R = 1$, а при экспериментах, представленных на Рис. 1.3, 1.4 использовалось баллистическое ядро коагуляции при ранге полученных разложений $R = 7$. Результаты данных численных экспериментов согласуются с приведённой арифметической сложностью алгоритма $O(NMTR \log M)$, где N – число узлов в сетке вдоль оси x , M – число узлов в сетке размеров v , T – полное количество шагов по времени, а R – ранг скелетного разложения ядра коагуляции.

Таблица 1.1: Время расчетов экспериментов в секундах, $v, x \in [0, 5], t \in [0, 10], \Delta x = \Delta v := \Delta h = 0.05, \Delta t = 0.01$. В случае экспериментов, представленных на Рис. 1.3, 1.4 использовалось баллистическое ядро коагуляции при ранге полученных разложений $R = 7$.

№	$2\Delta h, 2\Delta t$	$\Delta h, \Delta t$	$\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}$	$\frac{\Delta h}{4}, \frac{\Delta t}{4}$
Рис. 1.1	0.737	4.190	35.213	228.024
Рис. 1.2	0.707	4.346	34.718	248.944
Рис. 1.3	2.643	21.176	301.308	1779.738
Рис. 1.4	2.522	21.332	270.761	2087.567

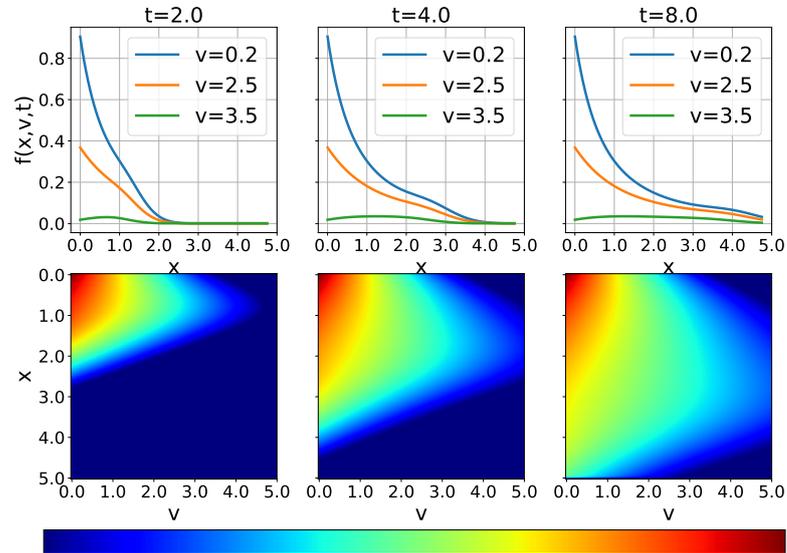


Рис. 1.1: Перенос вдоль оси x частиц фиксированных размеров (сверху). Распределение частиц по размерам (снизу) при нулевых начальных условиях, с граничным условием (1.3) при скорости переноса $\mathcal{V}(v) = 1$ для константного ядра коагуляции $K(u, v) = 1$.

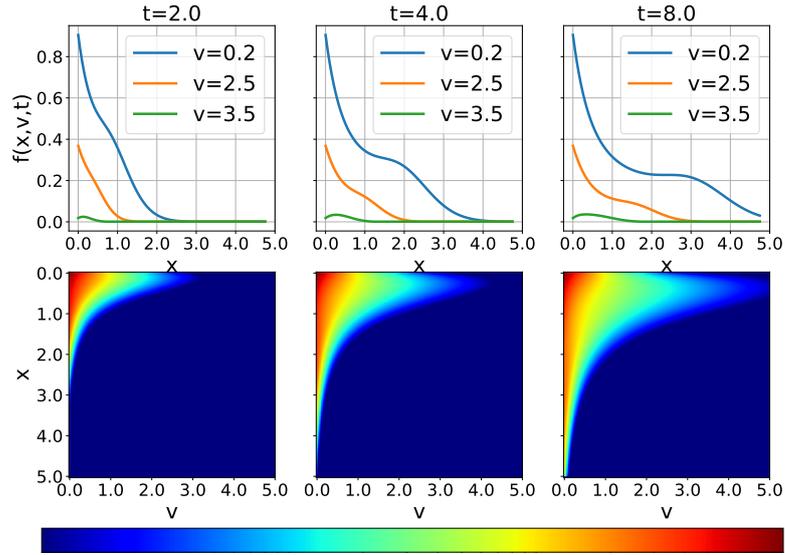


Рис. 1.2: Перенос вдоль оси x частиц фиксированных размеров (сверху). Распределение частиц по размерам (снизу) при нулевых начальных условиях, с граничным условием (1.3) при скорости переноса $\mathcal{V}(v) = \frac{1}{1+v}$ для константного ядра коагуляции $K(u, v) = 1$.

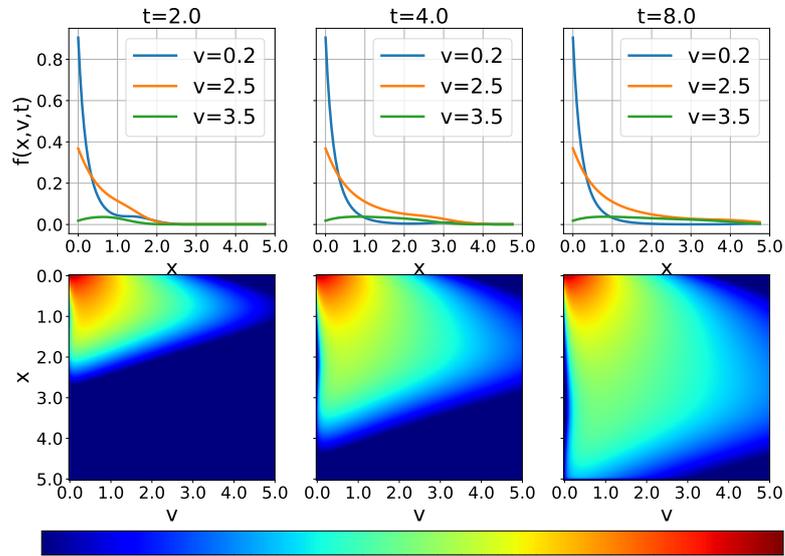


Рис. 1.3: Перенос вдоль оси x частиц фиксированных размеров (сверху). Распределение частиц по размерам (снизу) при нулевых начальных условиях, с граничным условием (1.3) при скорости переноса $\mathcal{V}(v) = 1$ для баллистического ядра коагуляции $K(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 |(u + 1)^{-1} - (v + 1)^{-1}|$.

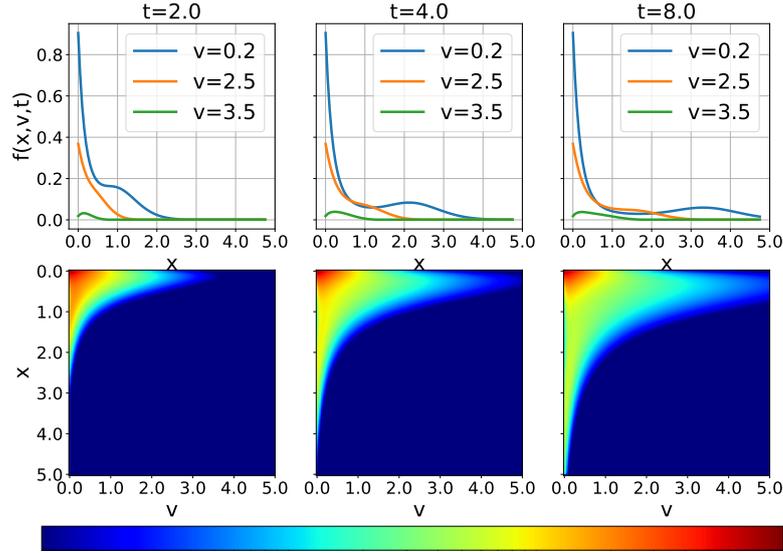


Рис. 1.4: Перенос вдоль оси x частиц фиксированных размеров (сверху). Распределение частиц по размерам (снизу) при нулевых начальных условиях, с граничным условием (1.3) при скорости переноса $\mathcal{V}(v) = \frac{1}{1+v}$ для баллистического ядра коагуляции $K(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 |(u + 1)^{-1} - (v + 1)^{-1}|$.

1.1.3 Результаты

В данной секции был представлен эффективный численный метод решения уравнения, описывающего перенос коагулирующих частиц. Метод основан на использовании монотонной схемы для аппроксимации оператора переноса и быстрого метода вычисления интегрального оператора Смолуховского [63]. Алгоритмическая сложность одного шага численной схемы составляет $O(NRM \log M)$ операций вместо исходных $O(NM^2)$. Снижение сложности получено путем применения малоранговых матричных аппроксимаций ядра коагуляции и быстрых алгоритмов линейной алгебры.

В результате численных экспериментов продемонстрировано существенное влияние выбора функции скорости переноса коагулирующих частиц $s(v)$ и функции ядра коагуляции $K(u, v)$ на вид численного решения рассматриваемой модели.

1.2 Скейлинговая теория для модели с источником

Модель, описанная в предыдущей секции, в исходном виде не поддается чистому анализу. Но получение аналитических результатов было бы полезным для формирования теории агрегации в неоднородной среде. В данной секции мы продолжим разбирать одномерный случай, добавляя в систему некоторые допущения, которые позволили бы нам получить некие аналитические выводы.

Рассмотрим процессы агрегации с пространственно-локализованным источником мономеров. Наша система будет неоднородна только в одном направлении (скажем, x); во всех остальных направлениях (например, y и z) свойства системы не меняются. Тогда плотности $c_k(x, t)$ подчиняются системе дифференциальных уравнений в частных производных.

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_k}{\partial t} + V_k \frac{\partial c_k}{\partial x} &= \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j} c_j \\ &+ D_k \frac{\partial^2 c_k}{\partial x^2} + J \delta_{k,1} \delta(x). \end{aligned} \quad (1.4)$$

По сравнению с предыдущими формулировками уравнения Смолуховского тут добавлены некоторые новые члены. Третий член правой части уравнения – оператор диффузии с коэффициентами D_k для кластеров размера k . Следующий член представляет собой источник мономеров при $x = 0$. Как уже было в предыдущей секции второй член в левой части отвечает за перенос в направлении x со скоростью V_k для агрегатов размера k .

Система (1.4) бесконечного множества связанных нелинейных уравнений в частных производных неразрешима. Однако нас интересует поведение кластеров на больших временах, когда их плотность может стать стационарной.

Целью данной секции является анализ одновременного воздействия переноса и диффузии на процессы агрегации. Мы сосредоточимся на стационарных решениях, поскольку, как будет показано ниже, это позволит нам проанализировать нашу систему в рамках пространственно-однородных уравнений. Мы начинаем с упрощенной модели, которая допускает аналитическую обработку, а затем переходим к более реалистичным случаям, для которых мы

получаем скейлинговое решение. В целях валидации полученных аналитических результатов мы также проводим численное моделирование.

1.2.1 Коэффициенты, не зависящие от массы

Рассмотрим простую модель с независимыми скоростями агрегации, коэффициентами диффузии и скоростями переноса:

$$K_{i,j} = 2K, \quad D_k = D, \quad V_k = V \quad (1.5)$$

Размерности переменных D , K , V и J :

$$[D] = \frac{L^2}{T}, \quad [V] = \frac{L}{T}, \quad [K] = \frac{L^3}{T}, \quad [J] = \frac{1}{L^2 T} \quad (1.6)$$

где L и T обозначают единицы длины и времени.

Далее мы будем использовать K/D как единицу длины и K^2/D^3 как единицу времени. Это равносильно тому, что $K = 1$ и $D = 1$. Получается следующее уравнение:

$$Vc'_k = \sum_{i+j=k} c_i c_j - 2c_k c + c''_k + J\delta_{k,1}\delta(x) \quad (1.7)$$

в стационарном режиме. Здесь $c = \sum_{k \geq 1} c_k$ — полная плотность кластера, а штрих означает производную по x . Скорость V и сила источника J в Ур. (1.7) являются безразмерными величинами. Чтобы не загромождать формулы, мы обозначали их одними и теми же буквами, хотя формально они равны VK/D^2 и JK^4/D^5 в пересчете на исходные величины. Особенно важна размерная величина $Pe = VK/D^2$ — это число Пекле. Действительно, по определению Pe это отношение произведения характеристической скорости V и характерной длины K/D на характеристический коэффициент диффузии D . Заметим, что в принятых единицах времени и длины безразмерная скорость совпадает с числом Пекле, т.е. $Pe = V$. Число Пекле количественно определяет относительную важность адвекции по сравнению с диффузией. При больших Pe диффузия незначительна. Для системы с постоянными коэффициентами число Пекле является величиной, характеризующей все кластеры.

Полная плотность кластеров подчиняется следующему уравнению

$$Vc' = c'' - c^2 + J\delta(x) \quad (1.8)$$

Начнем рассмотрение данного уравнения с частного случая, когда нет переноса ($V = 0$).

Поскольку в силу симметрии $c(x) = c(-x)$ и, следовательно, $c'(x) = -c'(-x)$, достаточно решить

$$c'' - c^2 = 0 \quad (1.9)$$

на интервале $x > 0$ с граничным условием

$$2c'(+0) = -J, \quad (1.10)$$

которое получается из члена-источника. Действительно, интегрируя Ур. (1.8) вблизи начала координат,

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} [c'' - c^2 + J\delta(x)] dx = 0, \quad (1.11)$$

где $\epsilon \rightarrow 0$, мы видим, что из первого члена получается $c'(\epsilon) - c'(-\epsilon) = 2c'(\epsilon) \rightarrow 2c'(+0)$, из второго члена получается $-2\epsilon c^2(0) \rightarrow 0$ и из третьего члена получается J . Тогда решение для (1.9),(1.10) выглядит так [49]

$$c(x) = \frac{6}{(|x| + \ell)^2}, \quad \ell = \left(\frac{24}{J}\right)^{1/3}. \quad (1.12)$$

В частности

$$c(0) = \frac{3}{2} \left(\frac{J}{3}\right)^{2/3}. \quad (1.13)$$

Для определения плотности стационарных кластеров можно использовать метод производящих функций. Удобно использовать производящую функцию

$$\mathcal{C}(x, z) = \sum_{k \geq 1} (1 - z^k) c_k(x) \quad (1.14)$$

Она удовлетворяет уравнению, математически идентичному Ур. (1.9), а имен-

но. $\mathcal{C}'' - \mathcal{C}^2 = 0$. Граничное условие почти такое же, как и раньше

$$2\mathcal{C}'(+0, z) = -J(1 - z) \quad (1.15)$$

Поэтому решение следующее [48, 49, 51]

$$\mathcal{C}(x, z) = \frac{6}{(|x| + \ell(1 - z)^{-1/3})^2} \quad (1.16)$$

Плотности остаются конечными в начале координат. Подставим в Ур. (1.16) $x = 0$ и разлагая по степеням z , найдем:

$$c_k(0) = \left(\frac{J}{3}\right)^{2/3} \frac{\Gamma(k - \frac{2}{3})}{\Gamma(\frac{1}{3})\Gamma(k + 1)} \sim k^{-5/3}, \quad (1.17)$$

где $\Gamma(x)$ – Гамма-функция.

Также запишем точные выражения для некоторых кластеров

$$\begin{aligned} c_1(x) &= \frac{4\ell}{(|x| + \ell)^3} \\ c_2(x) &= \frac{8}{3} \frac{\ell}{(|x| + \ell)^3} - \frac{2\ell^2}{(|x| + \ell)^4} \\ c_3(x) &= \frac{56}{27} \frac{\ell}{(|x| + \ell)^3} - \frac{8}{3} \frac{\ell^2}{(|x| + \ell)^4} + \frac{8}{9} \frac{\ell^3}{(|x| + \ell)^5} \end{aligned}$$

и асимптотику

$$c_k(x) \simeq \frac{12\ell}{\Gamma(\frac{1}{3})} k^{-2/3} |x|^{-3} \quad (1.18)$$

которая верна при $1 \ll k \ll (|x|/\ell)^3$. Эти результаты следуют из точного выражения Ур. (1.16) для производящей функции.

Интересно сравнить приведенные выше результаты с точным решением для плотностей кластеров для постоянного ядра, приведенным в [73]. Для пространственно-однородной системы с источником мономеров плотность кластеров сводится к $c_k \sim k^{-3/2}$, для $k \gg 1$ [73]. Следовательно, в пространственно-неоднородной системе с диффундирующими кластерами и источником мономеров в начале координат плотность кластеров падает быстрее при k в начале координат, поскольку $c_k \sim k^{-5/3}$ (см. Ур. (1.17)) и медленнее с k , как $c_k \sim k^{-2/3}$, вдали от источника мономеров (см. Ур. (1.18)).

Полные концентрации кластеров

$$C_k = \int_{-\infty}^{\infty} dx c_k(x), \quad C = \int_{-\infty}^{\infty} dx c(x) \quad (1.19)$$

также приходят в стационар с течением достаточного количества времени. Используя Ур. (1.12), мы находим общее количество кластеров

$$C = \frac{12}{\ell}. \quad (1.20)$$

Используя Ур. (1.16) мы находим производящую функцию

$$C(z) = \sum_{k \geq 1} (1 - z^k) C_k = \frac{12}{\ell} (1 - z)^{1/3} \quad (1.21)$$

из чего следует

$$C_k = \frac{4}{\ell} \frac{\Gamma(k - \frac{1}{3})}{\Gamma(\frac{2}{3})\Gamma(k + 1)}. \quad (1.22)$$

Не все величины доходят до установившегося решения на больших временах. Например, полная масса

$$M(t) = Jt. \quad (1.23)$$

Также плотность масс

$$m(x, t) = \sum_{k \geq 1} k c_k(x, t). \quad (1.24)$$

Данная величина удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial^2 m}{\partial x^2} + J \delta(x) \quad (1.25)$$

при решении которого получаем

$$m(x, t) = J\sqrt{t} \left[\pi^{-1/2} e^{-\xi^2} - |\xi| \operatorname{Erfc}(|\xi|) \right] \quad (1.26)$$

где $\xi = x/\sqrt{4t}$. В частности, плотность масс в окрестностях источника выглядит так

$$m(0, t) = J\sqrt{\frac{t}{\pi}}. \quad (1.27)$$

Таким образом, плотности в начале координат стационарны и описываются

Ур. (1.17) до некоторой переходной массы $K(t)$, а при $k > K(t)$ плотности быстро обращаются в нуль. Используя Ур. (1.17) и асимптотику $\frac{\Gamma(k-\frac{2}{3})}{\Gamma(k+1)} \simeq k^{-5/3}$ получаем

$$m(0, t) \sim \sum_{k=1}^K k c_k(0) \sim J^{2/3} \sum_{k=1}^K k^{-2/3} \sim J^{2/3} K^{1/3}$$

что согласуется с Ур. (1.27) когда переходная масса масштабируется как

$$K \sim Jt^{3/2} \quad (1.28)$$

Практически важный случай (например, седиментация агрегирующих частиц) соответствует $V > 0$ в полупространстве $x \geq 0$, когда кластеры отталкиваются (скажем, под действием силы тяжести) от источника. Аналогично случаю без переноса решение для текущего кейса также симметрично, $c(x) = c(-x)$, поэтому достаточно рассмотреть полупространство $x \geq 0$.

$$Vc' = c'' - c^2 \quad (1.29)$$

при $x > 0$ при краевом условии (1.10). Ур. (1.29) не допускает аналитического решения, поэтому стационарную плотность кластера $c(x)$ запишем в формальном виде

$$c(x) = \Phi(x; J, V) \quad (1.30)$$

укажем зависимость от параметров. Положим в Ур. (1.30) $x = 0$ и получаем

$$c(0) = F(J, V), \quad F(J, V) = \Phi(0; J, V) \quad (1.31)$$

Мы знаем $\Phi(x; J, V)$ и $F(J, V)$, когда $V = 0$,

$$\Phi(x; J, 0) = \frac{6}{(|x| + \ell)^2}, \quad F(J, 0) = \frac{6}{\ell^2} = \frac{3}{2} \left(\frac{J}{3} \right)^{2/3}.$$

При $x \gg V^{-1}$ адвекция преобладает над диффузией. Таким образом, Ур. (1.29) упрощается до $Vc' \simeq -c^2$, из которого

$$c(x) \simeq V x^{-1} \quad \text{для } x \gg V^{-1} \quad (1.32)$$

Восстанавливая размерные единицы, Ур. (1.32) переписывается как

$$c(x) \simeq \frac{V}{K} x^{-1} \quad \text{для } x \gg \frac{D}{V} \quad (1.33)$$

Примечательно, что это поведение *не зависит* от силы J источника. Пока $J > 0$ ведущая асимптотика (1.32) одна и та же. Подчеркнем также, что распад x^{-1} намного медленнее, чем x^{-2} (см. Ур. (1.12)), возникающий в случае отсутствия адвекции.

Плотность мономеров подчиняется уравнению (возвращаемся к безразмерным переменным)

$$Vc_1' = c_1'' - 2cc_1 \quad (1.34)$$

и граничному условию

$$2c_1'(+0) = -J \quad (1.35)$$

Асимптотическое поведение выводится из $Vc_1' \simeq -2cc_1$. Данное выражение можно упростить (см. Ур. (1.32)) до $c_1' \simeq -2c_1/x$. В итоге получаем

$$c_1(x) \simeq \frac{A_1}{x^2} \quad \text{для } x \gg V^{-1} \quad (1.36)$$

Аналогично $c_k \simeq A_k/x^2$ для $x \gg V^{-1}$. Чтобы определить A_k , мы сначала упростим Ур. (1.7) до

$$Vc_k' = \sum_{i+j=k} c_i c_j - 2c_k c \quad (1.37)$$

которое действует, при $x \gg V^{-1}$. Это уравнения Смолуховского с независимыми скоростями агрегации [11, 12, 74]. В пределе $k \rightarrow \infty$ и $x \rightarrow \infty$ с конечным соотношением k/x решение имеет известную скейлинговую форму [48, 47]

$$c_k(x) = \frac{A}{x^2} e^{-kB/x} \quad (1.38)$$

Чтобы определить A и B используем формулы

$$c(x) = \sum_{k \geq 1} c_k \simeq \frac{V}{x} \quad (1.39a)$$

$$m(x) = \sum_{k \geq 1} kc_k \simeq \frac{J}{2V} \quad (1.39b)$$

которые действуют, когда $x \gg V^{-1}$. Формула (1.39a) является преобразованием Ур. (1.32), а формула (1.39b) установлена ниже. Используя Ур. (1.38) и если $A = 2V^3/J$ и $B = 2V^2/J$ получаем:

$$c_k(x) = \frac{2V^3}{J} x^{-2} \exp\left[-\frac{2V^2}{J} \frac{k}{x}\right] \quad (1.40)$$

Чтобы вывести формулу (1.39b), мы полагаемся на уравнение

$$\frac{\partial m}{\partial t} + V \frac{\partial m}{\partial x} = \frac{\partial^2 m}{\partial x^2} + J \delta(x) \quad (1.41)$$

для массовой плотности. В рассматриваемом диапазоне $x \gg V^{-1}$ диффузией снова можно пренебречь:

$$\frac{\partial m}{\partial t} + V \frac{\partial m}{\partial x} = 0 \quad (1.42)$$

Решение постоянно на интервале $(-Vt, Vt)$, за исключением центральной области $|x| < V^{-1}$, где имеется диффузия; массовая плотность быстро обращается в нуль вне интервала $(-Vt, Vt)$. Суммарная масса составляет $2mVt$ с поправками до $O(\sqrt{t})$ за счет пограничных слоев вблизи границ интервала $(-Vt, Vt)$, где плотность массы быстро обращается в нуль. Сравнивая с точным значением (1.23) полной массы, мы получаем $m = \frac{J}{2V}$, как указано в (1.39b).

Наконец, мы перепишем наши основные результаты в терминах исходных размерных переменных. Формула (1.39a) становится (1.33). Формула (1.39b) сохраняет свою форму до переходной длины:

$$m(x) \simeq \frac{J}{2V} \quad \text{для } x \gg \frac{D}{V} \quad (1.43)$$

Скейлинговое выражение (1.40) для распределения масс кластеров становится

$$c_k(x) = \frac{2V^3}{JK^2} x^{-2} \exp\left[-\frac{2V^2}{JK} \frac{k}{x}\right] \quad \text{для } x \gg \frac{D}{V} \quad (1.44)$$

Полное количество кластеров

$$\begin{aligned} C_k &\simeq \frac{4V^3}{JK^2} \int_{D/V}^{\infty} \frac{dx}{x^2} \exp\left[-\frac{2V^2}{JK} \frac{k}{x}\right] \\ &= \frac{2V}{K} k^{-1} \left[1 - e^{-\frac{2V^3}{JKD}k}\right] \end{aligned}$$

При $k \gg JKD/V^3$, можно упростить асимптотику до

$$C_k \simeq \frac{2V}{K} k^{-1} \quad (1.45)$$

1.2.2 Коэффициенты, зависящие от массы и седиментация

Рассмотрим систему (1.4) с коэффициентами, зависящими от массы. Здесь мы рассматриваем важный случай осаждения частиц под действием силы тяжести. Предположим, что мономеры выделяются с постоянной скоростью J на границе раздела газ-жидкость (воздух-вода). Они опускаются под действием силы тяжести и сливаются, образуя скопления. Скопления движутся со скоростью, растущей с ростом их массы; кластеры также диффузны. Предполагается, что системы разбавлены, так что события соударения частиц являются парными, а движение каждого кластера практически не зависит от других кластеров, за исключением событий слияния. Точное описание событий слияния представляет собой сложную задачу, выходящую за рамки нашей работы. Мы лишь предполагаем, что этот процесс достаточно быстрый и вновь образованные кластеры быстро достигают своей конечной скорости; “быстро” означает, что характерные времена этих процессов много меньше типичного времени между столкновениями для данного кластера. Число Рейнольдса, связанное с движением каждого кластера, предполагается малым, что гарантирует, что система находится в стоксовом режиме и частицы движутся с установившимися скоростями.

Пусть кластер размера k имеет массу $m_1 k$ и радиус $R_k = r_1 k^{1/3}$, где m_1 и r_1 – масса и размеру мономеров соответственно. Пусть плотность мономеров равна ρ , а плотность жидкости – ρ_l , тогда сила, действующая на частицу, связанная с плавучестью и гравитацией, имеет вид $(4\pi/3)k r_1^3(\rho - \rho_l)g$. При движении в жидкости частица также испытывает силу вязкости. В стоксовом режиме она пропорциональна скорости V_k и коэффициенту трения $\gamma_k = 6\pi\eta R_k = 6\pi\eta r_1 k^{1/3}$, где η вязкость жидкости. То есть эта сила читается как $-\gamma_k V_k$ [75, 47]. Постоянная скорость соответствует исчезающей полной

силе, $(4\pi/3)k r_0^3(\rho - \rho_l)g = 6\pi\eta r_0 k^{1/3}V_k$, что дает,

$$V_k = V_1 k^{2/3}; \quad V_1 = \frac{2}{9} r_1^2 g (\rho - \rho_l). \quad (1.46)$$

Коэффициент диффузии для кластера размером k подчиняется соотношению Стокса-Эйнштейна, $D_k = k_B T / \gamma_k$, где k_B — постоянная Больцмана, а T — температура [75, 47]. Это приводит к следующей зависимости для D_k ,

$$D_k = D_1 k^{-1/3}; \quad D_1 = \frac{k_B T}{6\pi\eta r_1}. \quad (1.47)$$

Слияние происходит в основном за счет баллистического движения, когда одна частица размера R_i , падающая со скоростью V_i , сталкивается с другой частицей размера R_j , падающей с меньшей скоростью V_j . Сечение столкновения и относительная скорость составляют соответственно $\pi(R_i + R_j)^2 = \pi r_1^2 (i^{1/3} + j^{1/3})^2$ и $|V_i - V_j| = V_1 |i^{2/3} - j^{2/3}|$. Следовательно:

$$K_{ij}^{\text{ball}} = K_1^{\text{ball}} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 |i^{2/3} - j^{2/3}|, \quad (1.48)$$

где $K_1^{\text{ball}} = \pi r_1^2 V_1$; как и ранее положим $K_1^{\text{ball}} = 1$. Следует отметить, что баллистические скорости (1.48) аналогичны скоростям агрегации Смолуховского для сдвигового течения [76].

Скорости агрегации, контролируемые диффузией, задаются броуновским ядром, $K_{ij}^{\text{Br}} = 4\pi(D_i + D_j)(R_i + R_j)$, т.е.

$$K_{i,j}^{\text{Br}} = K_1^{\text{Br}} (i^{1/3} + j^{1/3})(i^{-1/3} + j^{-1/3}), \quad (1.49)$$

с $K_1^{\text{Br}} = 2k_B T / (3\eta)$. Оба эти ядра однородны, $K_{ai,aj} = a^\lambda K_{i,j}$, с $\lambda = 4/3$ для баллистического ядра (1.48) и $\lambda = 0$ для броуновского ядра (1.49). Таким образом, баллистическое ядро быстро растет с массой агрегатов, что дает дополнительное основание для его использования и игнорирования слияния за счет диффузии. Для $i = j$ однако $K_{ij}^{\text{ball}} = 0$, т.е. нельзя пренебрегать механизмом диффузии. Следовательно, для $i = j$ мы используем $K_{i,i}^{\text{Br}}$ из Ур. (1.49), предполагая, что $K_1^{\text{Br}} = 1$.

Предположим, что плотности становятся стационарными в пределе боль-

ших времен. В этой ситуации Ур. (1.4) дает

$$\frac{dc_k}{dx} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \frac{K_{i,j}^{\text{ball}}}{(i+j)^{2/3}} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} \frac{K_{k,j}^{\text{ball}}}{k^{2/3}} c_j, \quad (1.50)$$

где мы используем уравнение (1.46) и предполагаем $V_1 = 1$. Эти уравнения можно записать в форме, аналогичной уравнениям Смолуховского

$$\frac{dc_k}{dx} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j}^{(1)} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j}^{(2)} c_j \quad (1.51)$$

с ядрами

$$K_{i,j}^{(1)} = \frac{K_{i,j}^{\text{ball}}}{(i+j)^{2/3}}; \quad K_{i,j}^{(2)} = \frac{K_{i,j}^{\text{ball}}}{j^{2/3}}. \quad (1.52)$$

Оба ядра $K_{i,j}^{(1/2)}$ однородны с показателем $\lambda = 2/3 < 1$. Второй индекс однородности ν определяется так

$$K_{1,j}^{(1)} \sim j^{\nu_1}; \quad K_{j,1}^{(2)} \sim j^{\nu_2} \quad \text{когда } j \rightarrow \infty. \quad (1.53)$$

Здесь $\nu_1 = \nu_2 = \nu = 2/3$ для обоих ядер $K_{i,j}^{(1)}$ и $K_{i,j}^{(2)}$. Следовательно, если существует стационарное решение (доказать это непросто), гелеобразования не происходит [77, 78, 79, 80, 33, 48]. Здесь имеется в виду пространственный аналог гелеобразования, когда вся масса накапливается либо при $x = 0$ (аналог мгновенного гелеобразования [81]), либо при $x = x_0 < \infty$. Это позволяет разработать скейлинговый подход по аналогии с обычными уравнениями Смолуховского.

Тем не менее сохранение массы является главным свойством уравнений Смолуховского, лежащим в основе масштабирования. В нашей постановке с пространственной координатой x вместо времени закон сохранения массы означает, что плотность массы пространственно однородна. В нашем случае это неверно, поскольку $m(x) \sim x^{-2/3}$, полученное ниже, таковым не является. К счастью, существует другой закон сохранения, то есть момент порядка $5/3$ $M_{5/3} = \sum_{k \geq 1} k^{5/3} c_k(x)$. Действительно, умножая

$$k^{2/3} \frac{dc_k}{dx} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j}^{\text{ball}} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j}^{\text{ball}} c_j \quad (1.54)$$

на k и суммируя по всем $k \geq 1$, получаем

$$\frac{dM_{5/3}}{dx} = \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} (i+j) K_{i,j}^{\text{ball}} c_i c_j - \sum_{k \geq 1} \sum_{j \geq 1} k K_{k,j}^{\text{ball}} c_j c_k.$$

Правая часть равна нулю для любого симметричного ($K_{i,j} = K_{j,i}$) ядра, поэтому $M_{5/3} = \text{const}$. Заметим, что этот закон сохранения справедлив для $x \gg 1/V$ (поскольку мы пренебрегаем диффузионным членом) и для $x \ll X(t)$, где $X(t)$ определяется ниже; также t должно быть достаточно большим, чтобы система стала стационарной в этом интервале x .

Скейлинговое решение уравнений Смолуховского для пространственно-однородных систем имеет вид $c_k(x) = s^{-2} \Phi(k/s)$. Здесь $s = s(t)$ — средний размер кластера, увеличивающийся со временем [82]. Физически это проявляется в том, что “форма” распределения кластеров по размерам, характеризуемая скейлинговой функцией $\Phi(x)$, сохраняется. В отсутствие источника мономеров плотность масс также неизменна:

$$\sum_{k \geq 1} k c_k(x) \simeq \int_1^{\infty} s^{-2} \Phi(k/s) dk \simeq \int_0^{\infty} d\xi \xi \Phi(\xi) = \text{const}.$$

В приведенном выше уравнении мы аппроксимируем суммирование по дискретным k соответствующим интегрированием по k . Это оправдано для скейлингового режима, когда средний размер кластера велик, $s(t) \gg 1$, [82, 48].

В нашем случае скейлинговое решение имеет вид $c_k(x) = s^{-(1+5/3)} \Phi(k/s)$, что обеспечивает пространственную однородность $M_{5/3}$:

$$M_{5/3} = \sum_{k \geq 1} k^{5/3} c_k(x) = \int_0^{\infty} d\xi \xi^{5/3} \Phi(\xi) = \text{const}.$$

Мы также делаем стандартное предположение (обоснованное ниже), что средний размер кластера масштабируется алгебраически с x , поэтому форма масштабирования имеет вид

$$c_k(x) = x^{-8b/3} \Phi(\xi), \quad \xi = \frac{k}{x^b}. \quad (1.55)$$

Показатель степени b фиксируется согласованием скейлингового предположения с утверждёнными уравнениями (1.54). Подставив (1.55) в (1.54), мы

обнаружим, что левая часть масштабируется как x^{-2b-1} , в то время правая часть как x^{-3b} . Следовательно, $b = 1$ и форма масштабирования (1.55) становится

$$c_k(x) = x^{-8/3}\Phi(\xi), \quad \xi = \frac{k}{x} \quad (1.56)$$

Подставив (1.56) в формулы для плотности кластеров и массы, $c(x) = \sum_{k \geq 1} c_k(x)$ и $m(x) = \sum_{k \geq 1} kc_k(x)$, и заменив суммирование интегрированием, получим

$$c(x) = C_0 x^{-5/3}, \quad C_0 = \int_0^\infty d\xi \Phi(\xi) \quad (1.57a)$$

$$m(x) = C_1 x^{-2/3}, \quad C_1 = \int_0^\infty d\xi \xi \Phi(\xi) \quad (1.57b)$$

Амплитуды C_0, C_1 нам неизвестны, так как масштабированная плотность масс неизвестна аналитически.

Исследуем асимптотику плотности мономеров. Задав в (1.54) $k = 1$, получим

$$\frac{dc_1}{dx} = -c_1 \sum_{j \geq 1} c_j (j^{1/3} + 1)^2 (j^{2/3} - 1) \quad (1.58)$$

Подстановка скейлинговой формы (1.56) в (1.58) и замена суммирования интегрированием дает

$$\frac{dc_1}{dx} = -\frac{2}{3}Ax^{-1/3}c_1, \quad A = \frac{3}{2} \int_0^\infty d\xi \xi^{4/3}\Phi(\xi)$$

откуда получаем

$$c_1 \sim e^{-Ax^{2/3}} \quad (1.59)$$

Предположим, что скейлинговая форма (1.55) выполняется для мономеров. Соответствующее значение масштабирующей переменной равно $\xi = x^{-1}$ и (1.56) совместим с (1.59), если

$$\Phi \sim e^{-A\xi^{-2/3}} \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow 0 \quad (1.60)$$

Подставив скейлинговую форму (1.56) в (1.50), мы получим основное уравнение для скейлингового распределения массы:

$$-\left[\frac{8}{3}\Phi + \xi\Phi'\right]\xi^{2/3} = G - L \quad (1.61)$$

c

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{2} \int_0^\xi d\eta K(\eta, \xi - \eta) \Phi(\eta) \Phi(\xi - \eta) \\ L &= \Phi(\xi) \int_0^\infty d\eta K(\eta, \xi) \Phi(\eta), \end{aligned} \quad (1.62)$$

и где мы учитываем, что ядро

$$K(\eta, \xi) = \left(\eta^{1/3} + \xi^{1/3} \right)^2 \left| \eta^{2/3} - \xi^{2/3} \right| \quad (1.63)$$

имеет показатель однородности $\lambda = 4/3$, то есть $K(x\eta, x\xi) = x^{4/3} K(\eta, \xi)$.

Ожидается, что в пределе $\xi \rightarrow \infty$ ведущее поведение масштабированного распределения масс будет экспоненциальным с точностью до алгебраического предфактора:

$$\Phi \sim \xi^{-\theta} e^{-B\xi} \quad (1.64)$$

Этот выбор отстаивался в области теории масштабирования [82], и он также применим к нашей ситуации. Вставив (1.64) в (1.61)-(1.62), мы обнаружим, что экспоненциальные множители одинаковы, поэтому мы должны сравнить алгебраические множители в пределе $\xi \rightarrow \infty$. Левая часть (1.61) масштабируется как $\xi^{5/3-\theta}$, а $G \sim \xi^{7/3-2\theta}$ и $L \sim \xi^{4/3-\theta}$. Таким образом, L пренебрежимо мала по сравнению с левой частью. Приравнивание левой части к G дает $\theta = 2/3$. Подводя итог, можно определить экстремальное поведение масштабированного распределения массы:

$$\Phi \sim \begin{cases} \xi^{-2/3} e^{-B\xi} & \xi \gg 1 \\ e^{-A\xi^{-2/3}} & \xi \ll 1 \end{cases} \quad (1.65)$$

В любой конечный момент времени t приведенное выше описание справедливо до некоторой длины $X(t)$. Используя

$$M \sim \int_0^X dx m(x) \sim X^{1/3} \quad (1.66)$$

и $M(t) = Jt$ мы оцениваем переходную длину как

$$X(t) \sim (Jt)^3 \quad (1.67)$$

Заметим, что сохранение момента $M_{5/3}$ на интервале $V^{-1} \ll x \ll X(t)$ и соответствующий скейлинг (1.56) остаются верны для любого симметричного ядра в уравнении (1.54) (не только для баллистического, $K_{i,j}^{\text{ball}}$). Следовательно, все приведенные выше результаты справедливы для любого симметричного ядра $K_{i,j}$ с одним и тем же показателем однородности $\lambda = 4/3$

1.2.3 Численные расчеты

Для проверки аналитических выводов мы численно решили систему уравнений Смолуховского (1.4) для различных ядер коагуляции. Оператор коагуляции вычислялся в явном виде, как он записан в правой части уравнения (1.4). Оператор диффузии и переноса реализован стандартным образом [83]. Источник мономеров моделировался граничными условиями второго рода согласно уравнению (1.10): $c'_1(+0) = -J/2$ и $c'_k(+0) = 0$ для $k \geq 2$. Для оператора диффузии и переноса использовалась неявная схема. Кроме того, мы применили следующую модификацию адвекции:

$$\Delta_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q(x)}{p(x)} \frac{\partial(p(x)c_k(x))}{\partial x} \right)$$

Вышеупомянутое преобразование было необходимо, чтобы стабилизировать числовую ошибку, которая имеет место для больших чисел Пекле. С новой структурой числовой оператор приобретает члены, которые могут подавить дестабилизирующее влияние слишком интенсивного потока; это делается за счет меньших шагов дискретизации [83]. В нашем случае комбинированный оператор переноса выглядит так:

$$\Delta_x = \partial_x \left(D_k e^{\frac{V_k}{D_k} x} \partial_x \left[e^{-\frac{V_k}{D_k} x} c_k(x) \right] \right)$$

Результаты численного моделирования проиллюстрированы на Рис. 1.5-1.7. На Рис. 1.5 стационарные плотности кластеров разных размеров c_k и полная плотность c для случая постоянных кинетических коэффициентов показаны как функции от расстояния x . Случай без переноса, $V = 0$, представлен Рис. 1.5а, а случай с переносом – на Рис. 1.5b.

Далее мы выполняем расчеты для случая коэффициентов, зависящих от массы, как указано в уравнениях (1.46) и (1.47) с $V_1 = 1$ и $D_1 = 1$. К со-

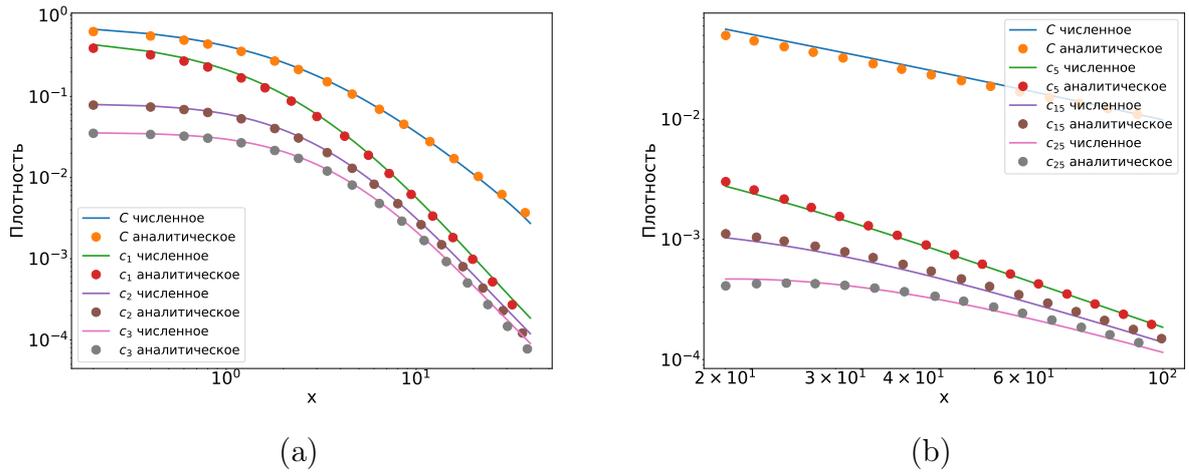


Рис. 1.5: Стационарные решения ($t = 200$). Сравнение аналитических выводов (точки) с численным решением (линии) Ур. (1.4). **(а)** Система без переноса. $D = 1, K = 1, J = 1$ и $V = 0$. Аналитические формулы: (1.18) и (1.12). **(б)** Система с переносом. $D = 1, K = 1, J = 1$ и $V = 1$. Аналитические формулы: (1.40) и (1.33).

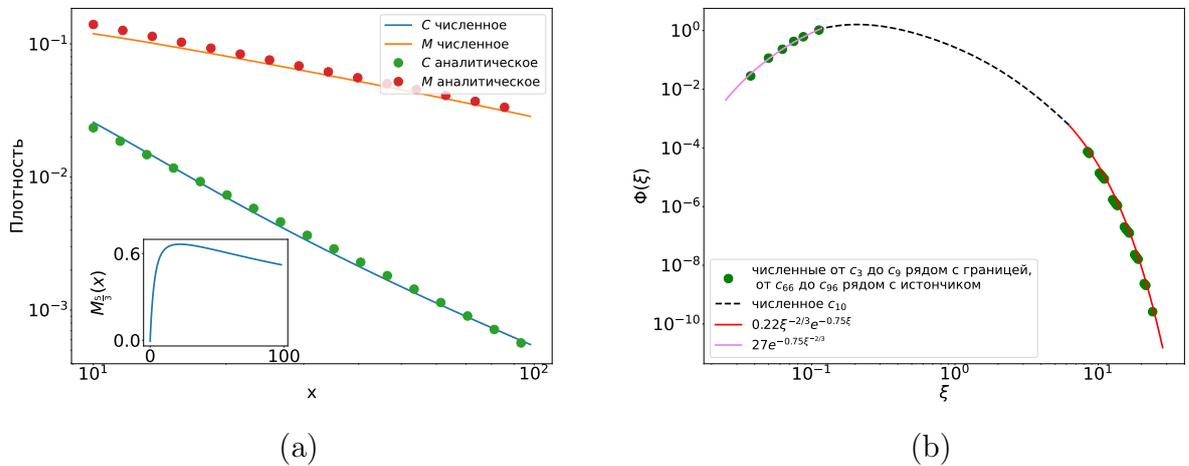


Рис. 1.6: Стационарные решения ($t = 200$) для системы диффузии-адвекции-коагуляции (1.4) с массозависимыми коэффициентами с баллистическим ядром. **(а)** Полная масса $m(x)$ и полная концентрация $c(x)$ как функции расстояния x от начала координат. Линии — численные результаты, точки — теория масштабирования, уравнения. (1.57a), (1.57b) с $C_0 = 1,09$ и $C_1 = 0,65$ в качестве подгоночных констант. На вставке показана зависимость $M_{5/3}$ от x . **(б)** График зависимости $x^{8/3}c_k(x)$ от $\xi = k/x$ для различных значений k . Нахождение точек на одной кривой, соответствующей скейлинговой функции $\Phi(x)$, иллюстрирует справедливость скейлинговой теории (1.56).

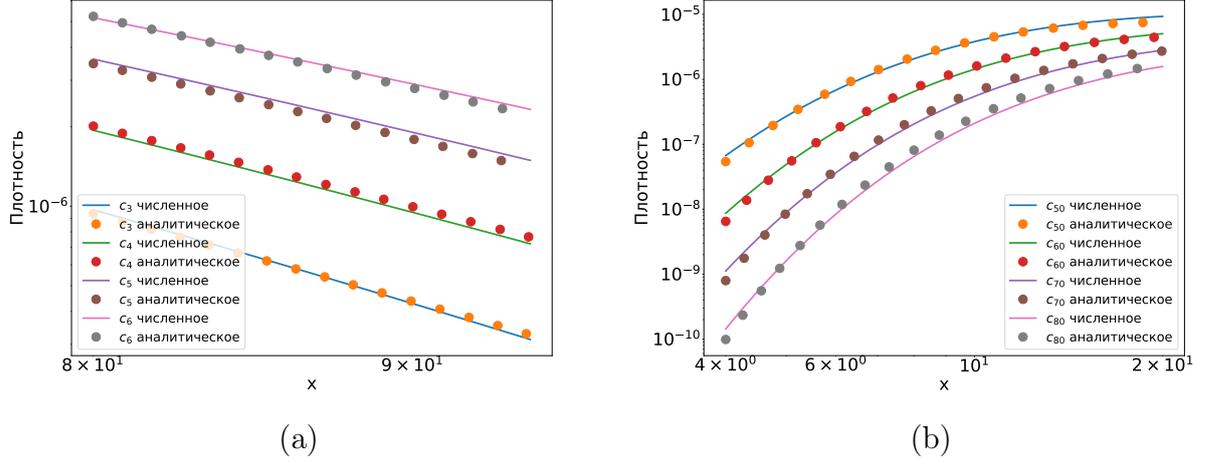


Рис. 1.7: Стационарные решения ($t = 200$) для системы диффузии-адвекции-коагуляции (1.4) с массозависимыми коэффициентами с баллистическим ядром. Линии - численные результаты, точки - скейлинговое решение, уравнения (1.56), (1.65). **(a)** Данные подгоняются для малых $\xi = k/x \ll 1$, где $\Phi = ae^{-A\xi^{-2/3}}$, с константами подгонки $a = 27$ и $A = 0,75$. **(b)** Данные подгоняются для больших $\xi = k/x \gg 1$, где $\Phi = b\xi^{-2/3}e^{-B\xi}$, с константами подгонки $b = 0,22$ и $B = 0,75$.

жалению, баллистическое ядро (1.48) или (1.63) не допускает малоранговой аппроксимации (из-за наличия множителя с модулем). Поэтому уравнения решались традиционными численными методами. Чтобы избавиться от нулей на диагонали баллистического ядра, мы добавляем в матрицу диагональные элементы броуновского ядра (1.49). Таким образом, мы учитываем, что частицы того же размера, движущиеся с той же скоростью осаждения, все же могут агрегировать. Это может происходить за счет диффузионного механизма, учитываемого броуновским ядром. Тем не менее, в скейлинговом режиме решение определяется в основном показателями однородности ядра λ и ν . Более того, результаты приведенной выше теории скейлинга зависят не от конкретной формы ядра коагуляции, а только от показателя однородности.

Результаты для расчетов с зависимыми от масс коэффициентами показаны на Рис. 1.6, 1.7. На Рис. 1.6a числовая зависимость стационарной полной плотности и массы сравнивается с аналитической. Рисунок ясно указывает на справедливость скейлинговой теории. Дальнейшее подтверждение теории масштабирования дано на Рис. 1.6b. Здесь зависимости $x^{8/3}c_k(x)$ от $\xi = k/x$ сходятся на одной и той же масштабирующей функции $\Phi(\xi)$ для всех k , как и предполагает Ур. (1.56). Стоит отметить отсутствие каких-либо подгоноч-

ных параметров в этом случае. Далее можно также проверить теоретическое предсказание формы функции $\Phi(\xi)$, из Ур. (1.65). Это показано на Рис. 1.7a и 1.7b. Здесь численная зависимость для плотностей $c_k(x)$ сравнивается с теоретической (Ур. (1.56), (1.65)) для $\xi = k/x$. Снова мы наблюдаем соответствие между результатами моделирования и аналитической теорией.

Наконец, мы проверили закон сохранения момента массы порядка $5/3$ при $V^{-1} \ll x \ll (Jt)^3$. В исследованном интервале $15 < x < 100$ этот момент слабо зависел от x , меняясь в диапазоне около 10%, (см. вставку на Рис. 1.6a).

1.2.4 Результаты

Таким образом, нами проведен аналитический и численный анализ агрегирующих систем с диффузией частиц, адвекцией и источником мономеров. Математически система описывается уравнениями в частных производных типа Смолуховского, куда добавляются члены, отвечающие за адвекцию и диффузию агрегатов. В данной работе рассматриваются квазиодномерные системы с пространственной неоднородностью только в одном направлении, скажем x , и с локализованным при $x = 0$ источником мономеров. Наличие источника мономеров влечет за собой появление квазистационарных решений. Такие решения не зависят от времени в пределах некоторого интервала длины, неограниченно расширяющегося с течением времени. Сначала мы рассмотрели простейшую модель постоянных кинетических коэффициентов, как для транспортных, так и для коэффициентов скорости реакции, управляющих агрегацией. Для этой модели получено точное аналитическое решение для плотности агломератов разного размера в зависимости от пространственной координаты. Далее мы рассмотрели более реалистичную модель с массозависимыми коэффициентами в контексте процесса седиментации. Мы показали, что для стационарного случая уравнения диффузии-адвекции-коагуляции могут быть сведены к зависящим от времени уравнениям типа Смолуховского для пространственно-однородной системы. Мы также показываем, что в отличие от обычных уравнений Смолуховского, где полная масса кластеров сохраняется, в наших системах сохраняется момент порядка $5/3$. Именно, момент порядка $5/3$ функции распределения кластеров по размерам является постоянным на достаточно далеком от источника пространственном интервале; длина этого интервала бесконечно растет со временем. На основе

этого квазизакон сохранения развита скейлинговая теория плотностей агломератов и их массы. Мы также выводим асимптотические соотношения для скейлинговой функции, описывающей плотности кластеров.

Чтобы проверить корректность аналитического решения, мы провели численное моделирование. Поскольку задача является вычислительно сложной, мы применяем эффективную численную схему малоранговой аппроксимации для ядра коагуляции. Так мы можем исследовать большие системы уравнений в частных производных с малым шагом по вычислительной области и большим количеством уравнений агрегации в каждой точке пространственной сетки.

1.3 Пример применения модели в изучении динамики аэрозолей

Ранее мы получили некоторые численные и аналитические результаты по моделированию процессов агрегации в неоднородной среде. Здесь мы изучим их применимость на реальных полевых измерениях.

Одним из самых высоких рисков для здоровья человека в современном мире является сильное загрязнение воздуха. Мелкие и сверхмелкие частицы (PM_{2,5}) легко вдыхаются, повреждают легкие и даже попадают в кровоток. Для изучения уровней загрязнения акватории озера Байкал проводятся измерения динамики аэрозолей в окрестностях озера. Полевые данные показывают нам корреляцию между распределением частиц аэрозоля по размерам и уровнями озона в воздухе. Мы предлагаем связанную модель, основанную на обыкновенных дифференциальных уравнениях и уравнениях в частных производных, позволяющую качественно объяснить наблюдаемые корреляционные эффекты. Короче говоря, ежедневные колебания уровня озона влияют на скорость агрегации, что приводит к различному распределению частиц по размерам в дневное и ночное время.

В Европейском союзе до 500 000 преждевременных смертей ежегодно вызваны загрязнением воздуха ([84]). Исследования показывают, что воздействие загрязненного воздуха в жилых помещениях в значительной степени связано с повышенным риском (63%) рака легких в Соединенном Королевстве ([85]). Особенно вредно наличие в воздухе твердых частиц малого

диаметра – РМ 2,5 и РМ 10, то есть частиц размером менее 2,5 мкм и 10 мкм соответственно ([85, 86]). Этот тип загрязнения воздуха является причиной не менее 30 000 смертей в Соединенных Штатах каждый год ([87]). Поэтому важно прогнозировать (а затем регулировать) загрязнение воздуха твердыми частицами, поскольку оно напрямую влияет на здоровье населения. Частицы (промышленные выбросы, выхлопные газы, сажа от лесных пожаров и др.) следуют за движением воздуха, диффундируют и агрегируют. Агрегация имеет первостепенное значение, так как приводит к образованию более крупных агломератов, которые оседают и в конечном итоге оседают на землю ([14, 13]). Скорость агрегации определяется диффузией, пространственным распределением скорости воздуха и сил взаимодействия между твердыми частицами ([64, 88, 89]). Поэтому самосогласованная математическая модель процесса должна включать несколько компонентов: (i) физическую модель агрегации твердых частиц, описывающую скорость агрегации в зависимости от размера частиц, скоростей адвекции, коэффициентов диффузии и механизма агрегации; (ii) система уравнений гидродинамического типа, описывающая адвекцию и диффузию частиц в пространственно-неоднородных системах, а также их коагуляцию. То есть модель должна быть многомасштабной, описывающей процессы в масштабе частиц (от десятков до сотен нанометров) и в макромасштабе (метры).

Об этом сообщалось в ряде исследований, см., например, [90, 91, 86, 92], что загрязнение воздуха твердыми частицами демонстрирует значительные суточные и сезонные периодические колебания. Они были связаны в основном с антропогенными факторами, такими как антропогенные выбросы (автомобили и суда) в [91, 92] и с метеорологическими факторами, такими как скорость и направление ветра, температура и относительная влажность в [90, 86]. Было также показано, что концентрация озона оказывает сильное влияние на распределение твердых частиц в воздухе по размерам, см., например, [93, 94], что подразумевает значительное увеличение скорости агрегации ([93]). Концентрация озона может иметь суточные/сезонные колебания из-за антропогенных факторов ([94]), а также из-за естественных факторов, таких как солнечная активность.

Здесь мы исследуем суточные изменения концентрации частиц и распределения по размерам, вызванные естественными изменениями концентрации

озона. Полевые опыты проводились на борту парусника, во время плавания по озеру Байкал – озеру довольно большому, с малонаселенными берегами. Твердые частицы здесь в основном природного происхождения — они образуются при лесных пожарах и переносятся ветром, см. 1.8. Мы наблюдаем периодическое изменение среднего размера частиц, которое антикоррелирует с периодическим изменением концентрации озона; аналогичным образом изменяет распределение частиц по размерам. Отсюда делаем вывод, что наблюдаемые вариации свойств аэрозолей подчинены вариации концентрации озона, вызванной суточным ходом солнечной освещенности. Кажущиеся антикорреляции в вариациях концентрации озона и среднего размера аэрозоля могут являться проявлением временного лага между началом усиленной агрегации и образованием более крупных частиц, которое происходит позже.

1.3.1 Полевые измерения

Для проведения измерений мы используем спектрометр DAS 2702M, разработанный Аэронанотех, Москва, подробно описанный ранее [95, 96]. Время однократного измерения составляло от 1 мин до 3 мин в зависимости от условий измерения. Диапазон измеряемых размеров частиц составляет от 5 нм до 10 мкм, а концентрация — от 1 см^{-3} до 10^5 см^{-3} . DAS 2702M работает в автоматическом режиме, каждое измерение записывается в формате Excel. Измерения одного дня записываются в один файл, новый файл создается в начале следующего дня. Использованы данные, собранные в летние даты 2021 г.: (а) станция Боярская ([97]), а также (б) судовые измерения в ходе экспедиций НИС «Г.Ю. Верещагин» и «Академик В.А. Коптюг». Помимо метеорологических параметров, таких как температура, атмосферное давление, скорость горизонтального ветра, концентрации NO_2 , NO , SO_2 и влажности, прибор также измеряет концентрации аэрозолей для определенных диапазонов размеров: 0-5 нм, 5- 10 нм и т. д., до 195-200 нм. Он автоматически предоставляет средний размер частиц и стандартное отклонение.

1.3.2 Физическая модель

Здесь мы развиваем пространственно-неоднородную модель (ее краткая схема представлена в 1.8а), описывающую одномерное адвективное движение ча-

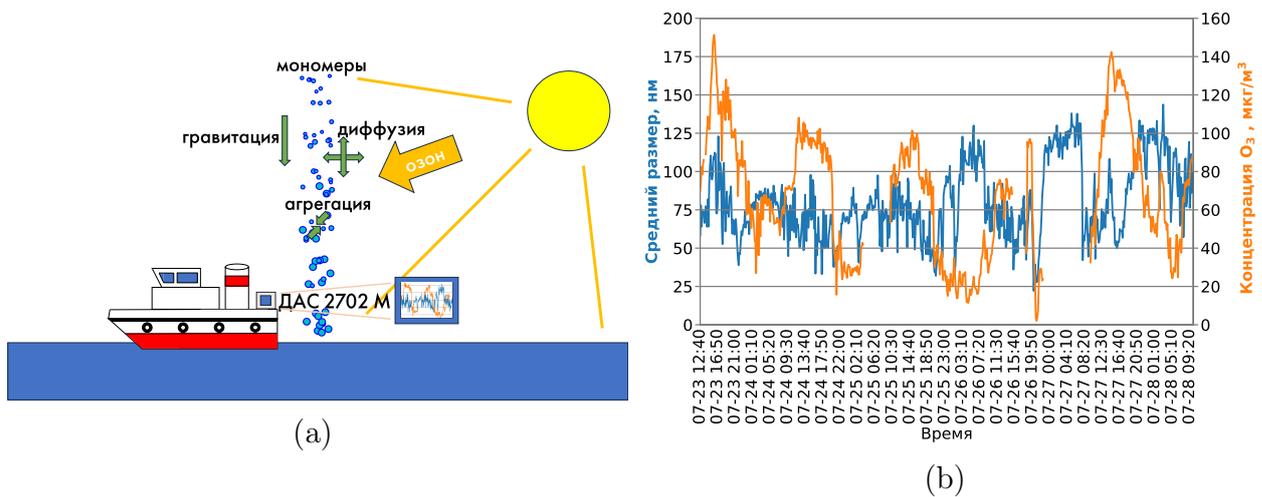


Рис. 1.8: **(а)** Схематическое изображение нашей модели и процессов. В нашей работе мы учитываем перенос аэрозольных частиц за счет их силы тяжести, их естественной локальной диффузии, а также процесса агрегации. Скорость агрегации зависит от концентрации озона, которая колеблется в течение 24-часового периода. Полевые измерения проводятся с использованием спектрометра ДАС 2702М ([95, 96]). **(б)** Недельная динамика среднего размера частиц (в нм, синий) и концентрации озона (в $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, оранжевый). Даты: с 23 по 28 июля 2021 года.

стиц в вертикальном направлении Ox – частицы падают вниз, под действие силы тяжести и заполнителя; они также совершают диффузионное движение. Считаем систему однородной в поперечном направлении и пренебрегаем поперечной адвекцией. Мы также предполагаем, что на некоторой верхней границе системы (положим $x = 0$) существует постоянный источник первичных аэрозольных частиц – “мономеров”. Мономеры агрегируют при столкновениях, образуя димеры, тримеры, k -меры и т. д. Таким образом, применим следующее одномерное уравнение адвекции-диффузии-коагуляции с источником мономеров на верхней границе ([64, 5, 88]). Следовательно, мы можем использовать Ур. (1.4).

Наше основное предположение состоит в том, что присутствие озона усиливает межчастичное взаимодействие, способствуя слиянию частиц. Иными словами, благодаря озону значительно увеличивается доля столкновений частиц, приводящих к агрегации. С точки зрения физической модели мы рассматриваем систему, в которой агрегация управляется барьером притяжения, который предотвращает отскок двух сталкивающихся частиц. А именно, если кинетическая энергия относительного движения сталкивающихся партнеров сразу после столкновения меньше энергии притягивающего барьера,

частицы сливаются и образуют совместный агрегат. В противном случае они отскакивают. В рассматриваемом случае наноразмерных частиц барьер притяжения можно отнести к поверхностным взаимодействиям, т.е. к барьеру поверхностного сцепления, т.е. [98, 99]. Следовательно, взаимодействие аэрозольных частиц с озоном приводит к увеличению коэффициента сцепления их поверхности. Физическая природа такого усиления адгезии может быть весьма различной — образование ненасыщенных связей, противоположных электрических зарядов и т. д., см. обсуждение ниже. Однако здесь мы описываем все эти эффекты просто в терминах коэффициента сцепления.

Мы уже рассмотрели относительное движение за счет седиментации. Здесь мы применим ту же логику при определении коэффициентов скорости и диффузии и ядра коагуляции ([5]).

Рассмотрим теперь коэффициент сцепления γ . Мы предполагаем, что это связано с поверхностной плотностью активированных центров (которые могут быть ненасыщенными связями, “химическими радикалами”, некомпенсированными поверхностными зарядами противоположного знака и т. д., см., например, [99]), которые появляются из-за взаимодействия с молекулами озона. Пусть q — поверхностная плотность активированных центров, при которой каждый активированный сайт увеличивает энергию адгезии на среднюю энергию, E_{ad} , см. [99]. Тогда энергия сцепления может быть записана как $\gamma_0 S + (qS)E_{ad}$, где S — площадь контакта сталкивающихся частиц, а γ_0 — коэффициент сцепления, для случая, когда активные сайты отсутствуют. Тогда коэффициент сцепления можно записать как

$$\gamma_a = \gamma_0 + E_{ad}q. \quad (1.68)$$

Зависимость плотности активированных центров от времени подчиняется уравнению

$$\frac{dq}{dt} = \chi C_{oz} \cdot (q_{max} - q)\Theta(q_{max} - q) - \xi q, \quad (1.69)$$

где C_{oz} - концентрация озона, а q_{max} — максимальная плотность активных центров. Параметры χ и ξ определяют соответственно скорость реакции озона с поверхностью, приводящую к образованию активных центров и исчезновению активных центров из-за различных химических или физических процессов. Аналогично можно написать кинетическое уравнение для концентрации

озона:

$$\frac{dC_{oz}}{dt} = I(t) - \alpha C_{oz} - \beta \sum_{k=1}^{\infty} c_k k^{2/3} C_{oz} \quad (1.70)$$

где $I(t) \geq 0$ — интенсивность образования озона (связанная с солнечной активностью), кинетический коэффициент α описывает распад озона, а β характеризует скорость реакции озона с поверхностью частиц S_k размера k , которая пропорциональна $k^{2/3}$, то есть $S_k \sim k^{2/3}$.

Можно переписать ядро агрегации как функцию от q :

$$K_{ij}(q) = K_1^{\text{ball}} (1 + \gamma_1 q)^{5/3} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 |i^{2/3} - j^{2/3}|, \quad i \neq j, \quad (1.71)$$

Подчеркнем, что механизм агрегации является баллистическим, применимым для $i \neq j$. Уравнения (1.4), (1.69) и (1.70) вместе с ядрами (1.49) и (1.71) образуют замкнутую систему уравнений, которая мы решили численно. В расчетах используются единицы с $K_0^{\text{ball}} = 1$ и $K_0^{\text{Br}} = 1$.

1.3.3 Сравнение численных расчетов с полевыми измерениями

Чтобы найти численное решение уравнений (1.4), (1.69), (1.70), (1.71) и (1.49), необходимо дополнить их исходный член $I(t)$ в уравнении (1.70), который определяет изменение концентрации озона. Мы применяем здесь две формулы:

$$I(t) = (0.042t + 0.5) \sin(0.375t + 2.4) + 2.28, \quad t \in [0; 24], \quad (1.72)$$

что дает удовлетворительное воспроизведение поведения $C_{oz}(t)$ во времени, см. 1.9а, (ii) другой источник синусоидального сигнала:

$$I(t) = \sin(0.262t + 0.9) + 2, \quad t \in [0; 24], \quad (1.73)$$

см. 1.9б (синусоидальные источники мотивированы суточной вариацией солнечной активности)

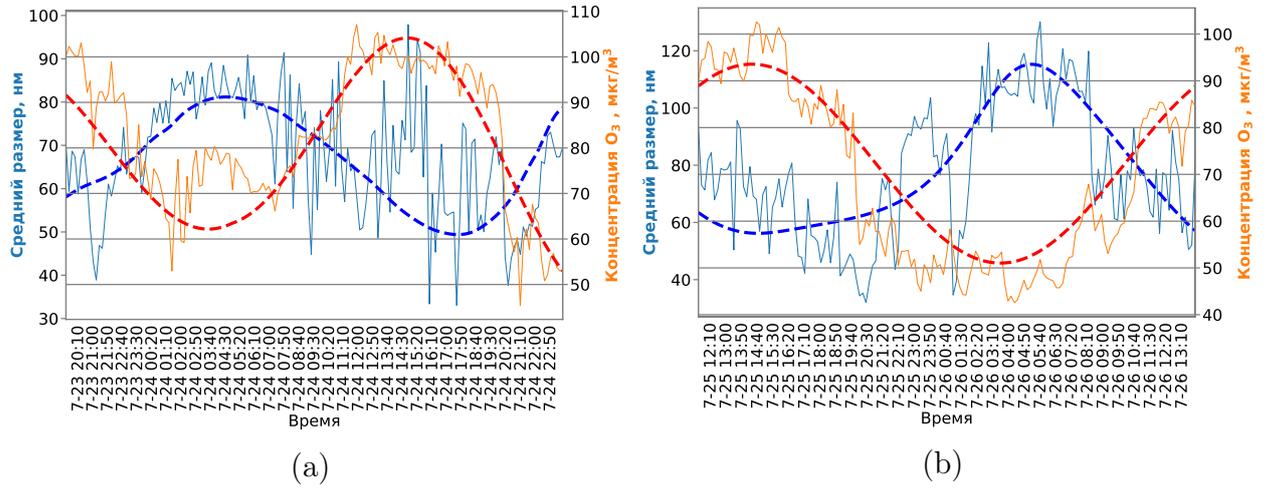


Рис. 1.9: Динамика среднего размера частиц (D_m , синий график) в аэрозолях и динамика концентрации озона (O_3 , красный график), полученные из численных расчетов (сглаженные пунктирные линии), в сравнении с экспериментальными наблюдениями. В случае **(а)** данные собраны 23-24 июля. В случае **(б)** данные собраны 25-26 июля 2021 г. Местонахождение: окрестности поселка Боярский.

Средний размер частиц рассчитывается следующим образом:

$$D_m(x, t) = \sum_{k=1}^N c_k(x, t)k / \left(\sum_{k=1}^N c_k(x, t) \right). \quad (1.74)$$

где N — максимальный размер агрегатов, а $c_k(x, t)$ — числовая плотность агрегатов размера k в координате x .

Детали численного подхода представлены в следующем разделе, здесь мы упомянем, что на верхней границе ($x = 0$) применяется источник мономеров единичной силы, а на нижней границе ($x = 100$) мы используем адсорбционные граничные условия $c_k(100, t) = 0$, которые имитируют исчезновение частиц из-за погружения в воду. Основная неоднозначность заключается в выборе координаты x , соответствующей месту сбора данных. Здесь мы используем $x = 55$ в безразмерных единицах, что дает приемлемые результаты для нашей полуколичественной модели.

Будем считать, что расчеты ведутся для интервала времени *качественно соответствующего* периоду экспериментальных измерений. Границей расчетной области считается физически “верхняя” точка, откуда падает аэрозоль, поэтому сам процесс происходит в направлении “сверху вниз” (седиментация), поверхность воды/земли считается конечной точкой вдоль оси Ox .

В целом, в 1.9 мы наблюдаем, что модель позволяет получить корреляцию между динамикой концентрации озона в воздухе и средним размером частиц в аэрозолях, качественно аналогичную наблюдаемой при натуральных измерениях.

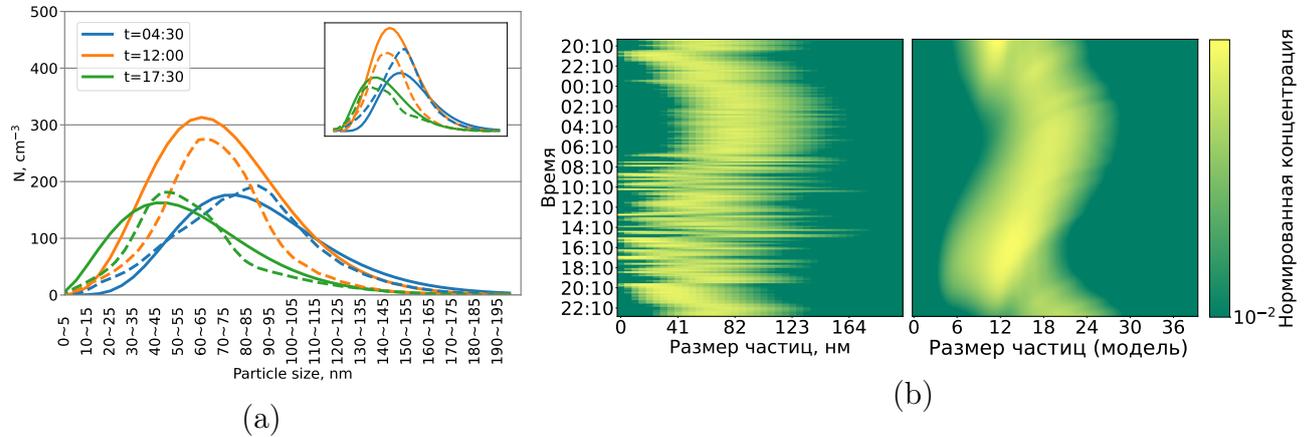


Рис. 1.10: **a**: Распределение размеров высокодисперсного аэрозоля в озере Байкал в разное время. Дата: 24 июля 2021 г. Сплошные линии — полевые измерения, пунктирные — численное распределение при $x = 95$. Вставка: сравнение того же набора полевых измерений (сплошные линии) с числовыми данными при $x = 75$. **b**: Тепловая карта суточного распределения аэрозольных частиц по размерам на расстоянии $x = 55$ от источника, полученная в результате численного расчета. В качестве источника озона использовался гладкий синусоидальный источник (1.72).

На 1.10a показано распределение размеров высокодисперсного аэрозоля в озере Байкал в разные моменты времени. Распределения, полученные численно хорошо соотносятся с полевыми измерениями. При этом распределение зависит от дальности источника. С точки зрения модели это объясняется тем, что на разных расстояниях от источника мономеров формируются разные исходные спектральные профили по размерам частиц, с которых начинается расчет динамики аэрозоля. На 1.10b мы демонстрируем нормализованные распределения частиц по размерам, полученные в результате расчетов и наблюдений. В обоих случаях графики следуют аналогичной логике: при высоком уровне озона в них преобладают более мелкие частицы, а при более низком уровне озона они больше смещаются в сторону больших размеров.

Глава 2

Процессы коагуляции в пространствах большей размерности

2.1 Модель загрязнения реки в 2D

До сих пор мы рассматривали неоднородную среду лишь по одной из пространственных осей. Логичным продолжением работы видится построение моделей для двумерных, а затем трехмерных пространств. В данной секции мы моделируем динамику загрязнения реки агрегирующим веществом. Неоднородность будет распространяться в направлении течения реки а также в ее глубину. Приведем описание решаемого уравнения:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(t, x, y, v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{\mathcal{V}}(x, y) f(t, x, y, v)) = \\ & = \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v - u) f(t, x, y, u) f(t, x, y, v - u) du - \\ & \quad - f(t, x, y, v) \int_0^\infty K(u, v) f(t, x, y, u) du, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где компоненты $\vec{\mathcal{V}}(x, y)$ определяются следующим образом:

$$\mathcal{V}_x = \mathcal{V}_0 \frac{y}{H}$$
$$\mathcal{V}_y = \frac{2g}{9\eta_w} (\rho_p - \rho_w) \varphi_p^{-\frac{2}{3}} r_0^2 i^{\frac{2}{3}}$$

(установим, что положительные значения c_x будут означать направление потока вправо, положительные значения c_y означают направление потока в сторону дна реки. Коэффициенты обозначают следующее:

- \mathcal{V}_0 – скорость течения реки на поверхности (при $y = H$);
- H – глубина реки;
- g – ускорение свободного падения;
- η_w – коэффициент динамической вязкости воды;
- φ_p – объемная доля частиц грязи;
- ρ_p – плотность частиц грязи;
- ρ_w – плотность воды;
- r_0 – радиус мономера загрязняющего вещества;
- i – количество -меров в полимере.

Горизонтальная компонента вектора скорости коагулирующих частиц определяется скоростью потока в реке. Предполагается, что на поверхности достигается максимальная скорость потока реки, далее она линейно убывает по мере достижения дна реки. На дне горизонтальная компонента вектора скорости равняется нулю.

Вертикальная компонента вектора скорости берется из уравнений динамики. На частицы вещества действуют следующие силы (в вертикальном направлении): архимедова сила, сила трения, сила тяжести. Предполагается,

что любые полимеры загрязняющего вещества имеют форму шара. Тогда:

$$\begin{aligned} F_a &= \rho_w g \cdot \frac{4}{3} \pi R_i^3 \\ F_s &= 6\pi\eta_w R_i \mathcal{V}_y \\ F_g &= Mg = \rho_p \cdot \frac{4}{3} \pi R_i^3 g \\ R_i &= \varphi_p^{-\frac{1}{3}} r_0 i^{\frac{1}{3}} \end{aligned}$$

где $R_i = (\frac{1}{\varphi_p})^{\frac{1}{3}} r_0 i^{\frac{1}{3}}$ – радиус i -мера. F_a – архимедова сила (направлена вверх) F_s – сила трения (может быть направлена как вверх так и вниз) F_g – сила тяжести (направлена вниз).

Если мы предполагаем, что частицы не ускоряются, то можно вывести \mathcal{V}_y уравняв все силы, и получить выражение, указанное ранее.

Подобным уравнением можно моделировать процессы загрязнения рек, в том случае если грязь участвует в процессе коагуляции. При этом достигнув определенных размеров, коагулирующие вещества, идут на дно из-за силы тяжести, или можно предположить, что если после коагуляции плотность получившихся веществ становится меньше плотности воды, то загрязнение должно вылезти наружу посредством архимедовой силы. Для последнего случая целесообразно, если источник загрязнения находится на дне реки.

2.1.1 Численный метод

Приведем описание численной схемы [4]. Уравнение переноса:

$$\frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} + \mathcal{V}_x \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial x} + \mathcal{V}_y \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial y} = 0$$

Проинтегрируем по произвольной пространственной области (R) правую и левую части уравнения:

$$\iint_R \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} dR + \iint_R \nabla \cdot \vec{F} dR = 0$$

где $\vec{F} = \vec{\mathcal{V}} f(t, x, y)$.

Предположим, что область интегрирования достаточно маленькая, что

первое слагаемое можно заменить произведением функции на площадь области интегрирования. Ко второму слагаемому применим формулу Гаусса-Остроградского:

$$A_R \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} + \oint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS_R = 0$$

Аппроксимируем интеграл по замкнутому контуру для областей треугольной формы. Аппроксимируем производную по времени конечными разностями:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -\frac{1}{A_R} \sum_{k=1}^3 \vec{F}_k \cdot \vec{s}_k$$

где \vec{s}_k вектор внешней нормали к стороне треугольника, длина которой равна длине стороны этого треугольника, \vec{F}_k поток частиц проходящий по k -той стороне треугольника. Предположим, что процесс коагуляции частиц не влияет на процесс переноса, тогда численно можно решать уравнение переноса-коагуляции с помощью расщепления операторов, применяя следующую схему:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = A(f^n) + S(f^n)$$

где оператор $A(f)$ соответствует процессу переноса, $S(f)$ – результат вычисления интегралов Смолуховского. Особенности численного решения интегралов были представлений в предыдущих секциях.

На Рис. 2.1 указаны необходимые геометрические данные для определения значения функции на новом временном слое в этой области пространства.

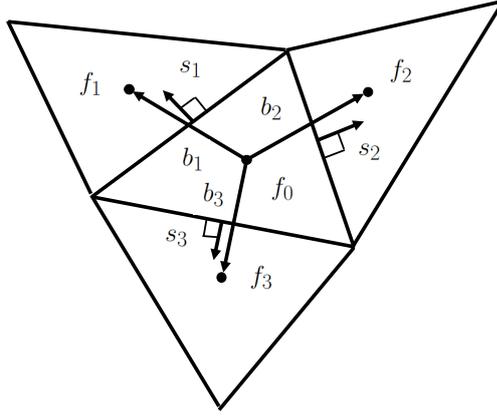


Рис. 2.1: Элемент расчетной сетки с необходимыми данными для численного моделирования. b_1, b_2, b_3 – векторы расстояния между точками центра треугольников, s_1, s_2, s_3 – векторы нормали к сторонам треугольника.

Значения искомой функции определены в центрах треугольников. Для применения численной схемы необходимо определить значения функции на сторонах треугольника. Эти значения интерполируются по значениям в центрах двух смежных треугольников с весами, зависящими от расстояния (будет обозначаться $|\vec{d}|$) от центров треугольников до общей стороны, по следующей формуле:

$$f^* = \left(1 - \frac{\phi(r)}{L}\right) f_C + \frac{\phi(r)}{L} f_D$$

где C – обозначение треугольника из которого происходит перенос частиц, D – треугольник куда переносятся частицы (downwind), $L = \frac{|\vec{d}_C| + |\vec{d}_D|}{|\vec{d}_C|}$ – удельный вес треугольника C , ϕ – функция ограничитель, сохраняющая монотонность решения. Особенности применения функций-ограничителей на неструктурированных сетках и вычисление градиентов на неструктурированных сетках можно изучить в работах [100, 101, 102].

Вычисления производились в по трем измерениям $0 \leq x \leq 6.0; 0 \leq y \leq 1.0; 0 \leq v \leq 1.0$. Для получения единственного решения нам нужны граничные условия только по пространственной области. В модели использовались три разных вида граничных конфигураций граничных ячеек. Нулевой поток ставится на нижней и на верхней границах пространства реки. Для этого нужно приравнять поток \vec{F}_k через интерфейс граничных треугольников, образующий дно реки, и через интерфейс граничных треугольников, образу-

ющий верхнюю поверхность реки нулю. При этом вещество может свободно продвигаться вдоль границы. Также имеется постоянный поток в той области, где установлен источник. Для этого мы используем клетки-призраки с постоянными значениями $f(v)$, из которых мы вычисляем поток \vec{F}_k . Наконец, на правой границе мы используем PML слой [71] чтобы избежать отражения в численной схеме.

2.1.2 Численные расчеты

Далее будут представлены результаты численных экспериментов. Графики представляют данные в безразмерных переменных, потому что пока не удалось найти подходящие экспериментальные данные.

Моделировались две разные задачи: в одном случае источник загрязнения находился на поверхности реки (Рис. 2.2-2.3), и грязь оседает на дне, во второй постановке источник загрязнения находился на дне реки (Рис. 2.4-2.5), и грязь выходила на поверхность (для этого необходимо чтобы плотность вещества была меньше плотности воды). Исходя из вывода поля скоростей на графике получен ожидаемый результат: крупные частицы тонут/всплывают быстрее поэтому профиль их передвижения характеризуется более крутой параболой.

Таким образом, учет процессов агрегации при прогнозировании загрязнения реки может внести существенный вклад в итоговый результат. Учет агрегации позволяет разброс по размерам частиц загрязненной области реки. Наглядно это можно увидеть на Рис. 2.6. На Рис. 2.6a показана зависимость длины загрязненной части реки от изменения ее глубины в первой исходной задаче (когда частицы падают на дно). Дальше какого-то расстояния загрязняющее вещество не может переместиться из-за оседания на дне. На Рис. 2.6b приводится график конфигурации частиц по размерам на дне реки на последнем временном слое. Видно что крупные частицы “загрязняют” меньшее пространство дна реки, в то время как более мелкие частицы могут проходить более длинные расстояния перед тем как осесть на дне.

В Таблице 2.1 можно увидеть результаты тестов сходимости с использованием условий относительной погрешности. Получаем первый порядок сходимости в нашей численной схеме.

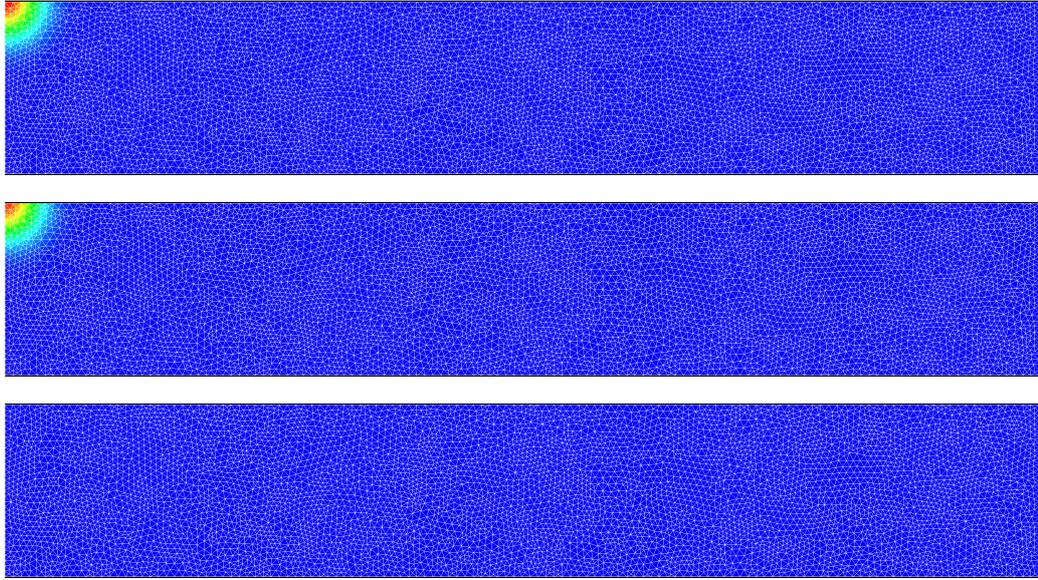


Рис. 2.2: Распределение частиц в результате их переноса размеров $v = 0.2$, $v = 0.5$, $v = 0.8$, плотность частиц больше плотности воды. Начальный временной слой

Таблица 2.1: Разность численных решений на 50-м временном шаге с использованием нормы Чебышева $\|f^{\Delta h, \Delta t} - f^{\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}}\|_C$. Сетка становится в два раза тоньше, и результаты сравниваются с предыдущей сеткой. В таблице $\Delta h, \Delta t$ обозначается как Δr

начальные условия	$\ f^{\Delta r} - f^{\frac{\Delta r}{2}}\ _C$	$\ f^{\frac{\Delta r}{2}} - f^{\frac{\Delta r}{4}}\ _C$	$\ f^{\frac{\Delta r}{4}} - f^{\frac{\Delta r}{8}}\ _C$	$\ f^{\frac{\Delta r}{8}} - f^{\frac{\Delta r}{16}}\ _C$
гладкие	0.01537	0.00321	0.00052	0.00001
разрывные	0.06002	0.032	0.02322	0.00951

2.1.3 Результаты

В данной главе мы предложили способ моделирования динамики загрязнения рек с использованием уравнений адвекции и коагуляции. Решение позволяет определить, какие участки реки загрязняются и какими концентрациями загрязнения по отношению к их размерам. Расчеты могут быть использованы для определения наилучшего места для установки границ безопасности, которые предотвращают распространение загрязнения. Учет коагуляции важен, так как она приводит к тому, что частицы изменяют свою y -составляющую

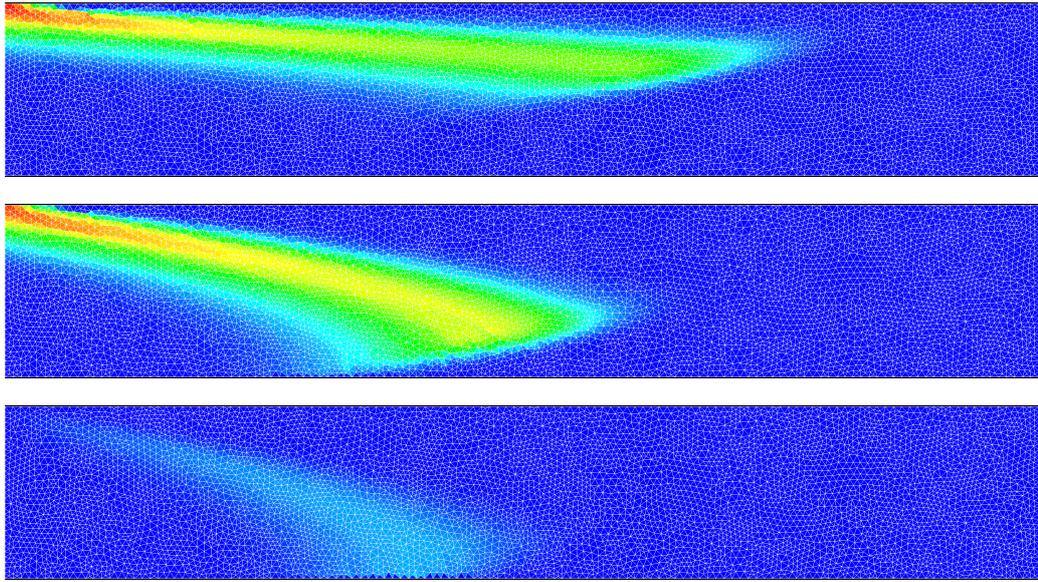


Рис. 2.3: Распределение частиц в результате их переноса размеров $v = 0.2$, $v = 0.5$, $v = 0.8$, плотность частиц больше плотности воды. В левом верхнем углу – постоянный поток частиц. 50-я итерация алгоритма решения

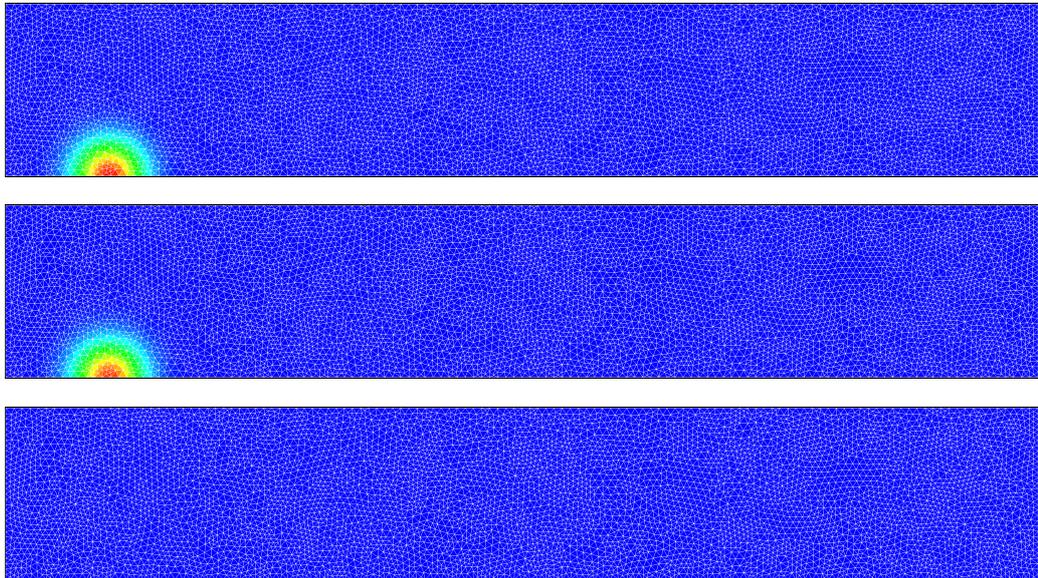


Рис. 2.4: Распределение частиц в результате их переноса размеров $v = 0.2$, $v = 0.5$, $v = 0.8$, плотность частиц меньше плотности воды. Начальный временной слой.

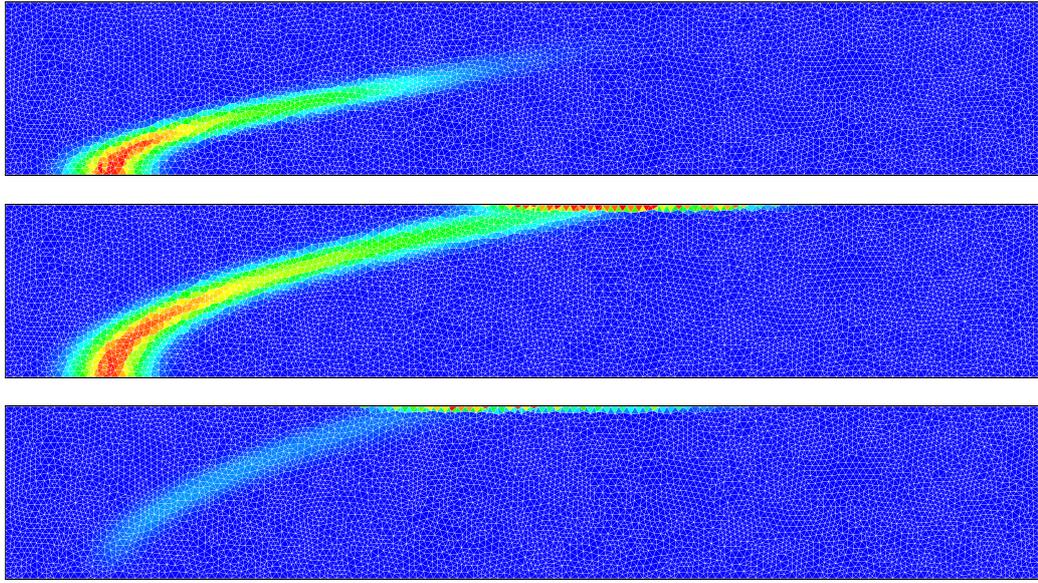
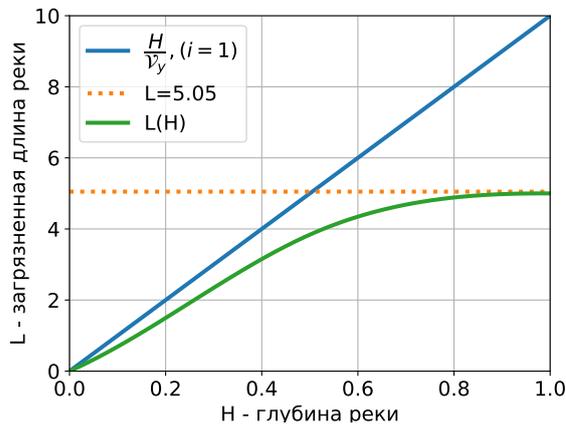
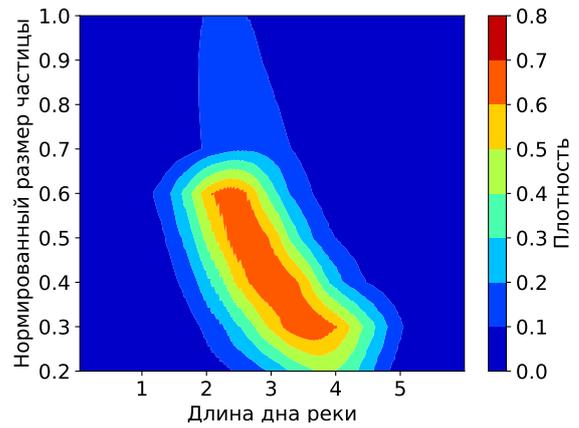


Рис. 2.5: Распределение частиц в результате их переноса размеров $v = 0.2$, $v = 0.5$, $v = 0.8$, плотность частиц меньше плотности воды. 50-я итерация алгоритма решения.



(a)



(b)

Рис. 2.6: **(a)** Зависимость длины загрязненной части реки от ее глубины – для случая когда частицы падают на дно. **(b)** Распределение частиц по размерам и длине реки на дне. По оси OY – размеры частиц, по оси OX – x -координата дна реки. 80-я итерация численного решения. Для случая когда частицы падают на дно.

скорости, что приводит к более быстрому падению или всплыванию. Это изменяет площадь загрязнения реки.

Дальнейшие исследования в этой области включают в себя внедрение вычислительной гидродинамики и решение других наборов задач, которые моделируют загрязнение водных потоков произвольной конфигурации (например, озер или труб).

2.2 3D модель движения коагулирующих частиц в атмосфере

Теперь применим выработанные принципы моделирования агрегации в неоднородной среде к трехмерному случаю. До сих пор движение частиц происходило в устоявшемся поле скоростей. В этот раз добавим в модель возможность работы с турбулентными течениями. Для этого необходимо решить уравнение Навье-Стокса при больших числах Рейнольдса. В рамках данной работы подобный решатель написан не был. Поэтому воспользуемся существующими разработками. Наиболее популярной открытой библиотекой для моделирования гидродинамических систем является программный пакет OpenFOAM. В данной секции мы будем пользоваться именно этим пакетом.

2.2.1 Описание модели

Для моделирования турбулентных течений существует множество разработанных методов. В данной работе будет использоваться метод Large Eddy Simulation (LES). Его преимущество заключается в том, что данный метод способен моделировать турбулентные течения, при этом за счет удаления из расчетов высоких пространственных частот не нуждается в слишком подробной дискретизации расчетной области.

Процессы агрегации в условиях турбулентности затрагивают широкий круг физических систем. Например, в [103] моделируется нуклеация аэрозолей в турбулентной среде методом LES и подходом, основанном на методе частиц. Показано, что перенос и коагуляция могут описывать турбулентный синтез пламени. В [104] также можно найти использование метода LES для моделирования образования сажи в газовых турбинах.

Построим 3D-модель, описывающую движение загрязнения в атмосфере от локализованного источника. Этот источник мы можем трактовать как кратер вулкана, а вылетающие частицы – как агрегирующую сажу.

Уравнение выводится по той же логике, что и в Ур. (1.4). Но на этот раз поле скоростей неоднородно вдоль всех осей. Перепишем уравнение.

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_k}{\partial t} + \vec{V}_k \cdot \nabla c_k = & \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} c_i c_j - c_k \sum_{j \geq 1} K_{k,j} c_j \\ & + D_k \Delta c_k + J e^{-(x-x_s)^2/\sigma_x^2 - (y-y_s)^2/\sigma_y^2} \delta_{k,1} \delta(z - z_s), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $[x_s, y_s, z_s]$ – расположение источника мономеров. Будем считать, что ось z задает вертикальную ориентацию. Расчетная область по данной оси будет начинаться с координаты z_s . Тогда в постановке задачи дельта-функция заменяется на граничное условие (см. [5]). Положим $z_s = 0$:

$$\begin{aligned} x \in [X_{min}, X_{max}], \quad y \in [Y_{min}, Y_{max}], \quad z \in [0, Z_{max}], \quad k \in [1, 2, \dots, 32], \\ \frac{\partial c_k(t, x, y, z = 0)}{\partial z} = \begin{cases} -\frac{J}{2} e^{-(x-x_s)^2/\sigma_x^2 - (y-y_s)^2/\sigma_y^2}, & k = 1, \\ 0 & k > 1. \end{cases}, \\ \frac{\partial c_k(t, x, y, z = Z_{max})}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial c_k(t, x, y = Y_{min/max}, z)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial c_k(t, x = X_{min/max}, y, z)}{\partial x} = 0, \\ c_k(t = 0, x, y, z) = 0. \end{aligned}$$

Получаем задачу на расчетной области с источником мономеров на нижней границе с интенсивностью J и локализованной по горизонтальным осям в виде распределения Гаусса со средними x_s, y_s и дисперсиями σ_x^2, σ_y^2 . Далее будут приведены результаты для расчетов со следующими наборами параметров:

$$x_s = 0; \quad y_s = 0; \quad \sigma_x = 0.2 \quad \sigma_y = 0.2; \quad Z_{max} = 3;$$

$$X_{min} = -1; \quad X_{max} = 5; \quad Y_{min} = -1; \quad Y_{max} = 1.$$

Для моделирования диффузии и коагуляции будут браться простые модельные коэффициенты. Допустим, что частицы разных размеров диффундируют и сталкиваются с одинаковой интенсивностью, тогда коэффициенты не являются массозависимыми, и их можно задать константой:

$$D_k = 1; \quad K_{i,j} = 1.$$

Получаем задачу на расчетной области с источником мономеров на нижней границе с интенсивностью J и локализованной по горизонтальным осям в виде распределения Гаусса со средними x_s, y_s и дисперсиями σ_x^2, σ_y^2 .

Ранее мы выводили только вертикальную составляющую поля скоростей. Теперь нам нужно смоделировать поведение ветра в атмосфере с турбулентностью. Для этого мы используем OpenFOAM. Поле скоростей моделируется методом LES. Это требует определения параметров турбулентности: турбулентной кинетической энергии, турбулентной кинетической скорости диссипации и масштабов флуктуаций. Кроме того, необходимы специальные граничные условия для моделирования источника ветра. В OpenFOAM это достижимо с использованием атмосферных пограничных слоев (ABL).

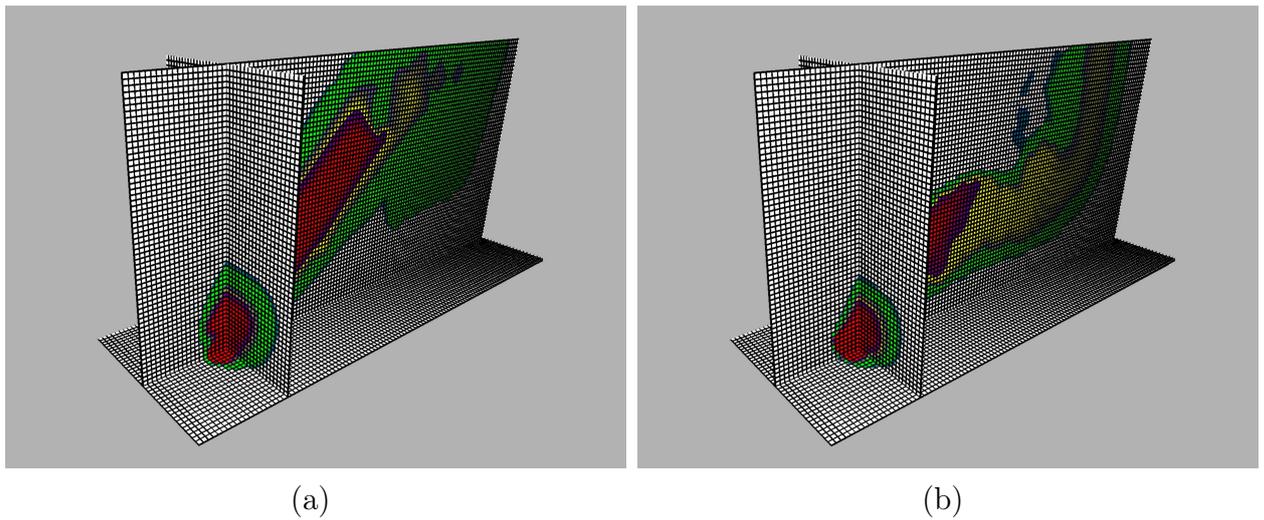


Рис. 2.7: Симуляция трехмерной модели Ур. (2.2): (a) мелкие частицы (b) крупные частицы

Результаты моделирования приведены на Рис. 2.7. На нем показаны проекции на оси распределения малых и крупных частиц, которые образовались из источника мономеров в результате агрегации и образовали неоднородную систему в результате переноса и диффузии. По аналогии с двумерным случаем на крупные частицы гравитация действует сильнее, поэтому им сложнее набрать высоту. Подобная модель может определить зависимость профиля загрязнения от расстояния до источника. Численный эксперимент происходил при следующих значениях характерных чисел (в различные моменты времени скорость может принимать различные величины, поэтому некоторые числа представлены в виде диапазонов): число Рейнольдса – от 5000 до 8000, число Кнудсена $\sim 10^{-5}$, число Пекле – от 5 до 8.

2.2.2 Использование неструктурированных сеток

Ранее были показаны результаты моделирования на декартовой сетке. Рассмотрим как выглядит реализация пространственно-неоднородных операторов на неструктурированной сетке. Сетка строится библиотекой CGAL с помощью реализованного в ней алгоритма Делоне. Для решения уравнений переноса и диффузии метод конечных разностей в классическом понимании довольно затруднителен. Поэтому, как и в двумерном случае, мы используем метод конечных объемов.

Подробное описание метода было дано в этой секции ранее. В трехмерном случае изменяется лишь формула для численного расчета интеграла по

замкнутому контуру (теперь вместо контура треугольника нам нужно рассматривать поверхность тетраэдра):

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -\frac{1}{A_R} \sum_{k=1}^4 \vec{F}_k \cdot \vec{s}_k, \quad (2.3)$$

где \vec{s}_k — направленный наружу вектор нормали, длина которого равна площади соответствующей грани тетраэдра, \vec{F}_k — поток частиц, проходящий через k -ю границу раздела тетраэдра (значение \vec{F}_k хранится на интерфейсах). Для вычисления \vec{F}_k нам нужно интерполировать функцию f из барицентров, которым принадлежит данный интерфейс.

При реализации метода конечных объемов для адвективных схем, важным аспектом числовой схемы является уменьшение вариации (TVD). Это условие необходимо для того, чтобы избежать числовых ошибок. Обычно это достигается ограничением градиентов (добавлением так называемых “функций-ограничителей”). Это позволяет избежать быстрых скачков функции, и численная схема становится “монотонной”. Подробнее по этой теме можно узнать из [100, 101]. Однако в 3D ограничение потоков вызывает дополнительные сложности. Решение рассеивается слишком быстро, подобно ошибкам численной диффузии. Чтобы решить эту проблему, исследователи разработали “многонаклонные” градиенты ([105]). Для реализации нашего решателя мы используем этот метод.

Таблица 2.2: Относительная сходимость решателя неструктурированной сетки. $r, r/2, r/4, r/8$ – верхние границы описанных радиусов тетраэдров.

дискретизация	r	$r/2$	$r/4$	$r/8$
относительная L1 погрешность	0.15	0.072	0.042	0.025
сравнение с решением на регулярной сетке (L1)	0.3	0.15	0.08	0.05

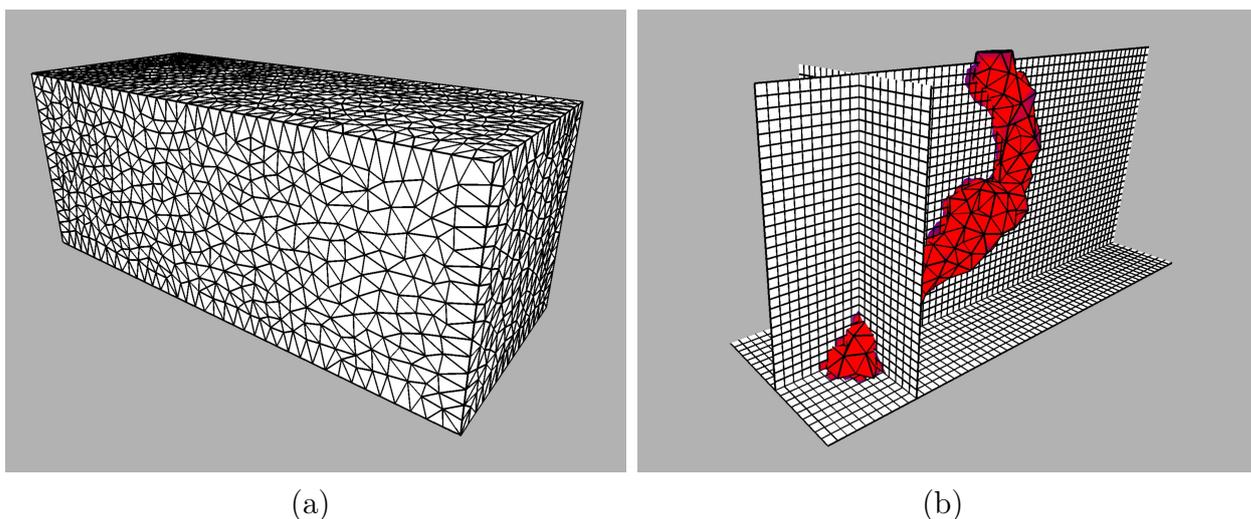


Рис. 2.8: **(a)** пример неструктурированной трехмерной вычислительной области **(b)** построение графика решения с использованием поверхностей уровня на неструктурированной сетке

2.2.3 Особенности работы с OpenFOAM

Результаты моделирования показаны на рис. 2.8. На изображении слева показано использование триангулированной вычислительной области. На изображении справа представлена визуализация с помощью поверхностей уровня. В табл. 2.2 можно увидеть результаты анализа сходимости с использованием относительной погрешности. Помимо этого, сходимость численного алгоритма к аналитическому решению проверялась для упрощённой модельной квазитрёхмерной задачи, аналитическое решение которой было получено в работе [5].

Работа в OpenFOAM сводится к составлению нескольких конфигурационных файлов, упорядоченных по папкам в порядке, установленном библиотекой. Эти файлы конфигурации определяют область вычислений, дискретизацию, решаемое уравнение, граничные условия, расположение входов и выходов и решатель. Для нахождения турбулентного поля скоростей решаем уравнение Навье-Стокса, используя LES в качестве численного метода. Для имитации начального ветра библиотека предоставляет возможность задать ABL в отдельном файле конфигурации. Пограничный слой имеет логарифмический профиль. Его высоту, интенсивность и направление можно настроить с помощью параметров: $Uref$, $Zref$, $zDir$, $flowDir$, $z0$, $zGround$. См. рис. 2.9 для наглядного представления о роли параметров. $z0$ определяет форму ло-

гарифмического профиля. U_{ref} – значение скорости на высоте Z_{ref} .

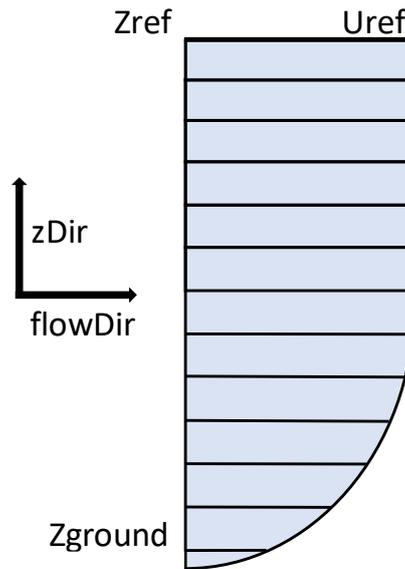


Рис. 2.9: Профиль слоя ABL.

После того, как расчеты выполнены, мы можем извлечь необходимые данные из командной строки. Нам нужны местоположения центров ячеек, чтобы правильно интерполировать поле скоростей в решатель агрегации. Таким образом, расчёт поля скоростей для процесса переноса выполняется заранее. Координаты центров ячеек можно извлечь с помощью команды:

```
1 || postProcess -func 'writeCellCentres' -time 0
```

Поля скоростей могут быть извлечены в удобочитаемом формате из выходных файлов с помощью кода, написанном на языке Python.

2.2.4 Результаты

В данной работе представлена трехмерная модель агрегирующих частиц. С численной точки зрения решатель реализован с использованием метода разделения операторов. Каждый физический процесс инкапсулирован в отдельную схему.

Решатель может работать как на декартовой, так и на неструктурированной сетках. Анализ сходимости позволяет нам сказать, что обе реализации сходятся к единому решению. Стоит отметить, что вычисления на произвольной сетке занимают значительно больше времени, чем решатель на декартовой сетке. Это происходит из-за необходимости отслеживать отображение

индексов тетраэдров в вычислительной области. Поэтому алгоритм необходимо оптимизировать и реализовать параллельно в будущем. Тогда производительность должна стать сопоставима со скоростью решателя на декартовой сетке.

В работе был использован пакет OpenFOAM для получения турбулентного поля скоростей с помощью метода LES.

Код, использованный для написания данной секции, выложен в открытый доступ и находится по адресу github.com/RishatZagidullin/coagulation-convection-3d (файлы для OpenFOAM, код для записи в файл поля скоростей на Python, построение неструктурированной сетки на CGAL, визуализация на OpenGL, решатель уравнения на C++).

2.3 Вывод ядер агрегации в условиях неоднородности

До сих пор мы использовали ядро агрегации как входной параметр решаемого уравнения. В то время как, строго говоря, это ядро может иметь другой вид из-за того, что частицы находятся в потоке. Изучение влияния неоднородности среды на ядро агрегации является важной составляющей частью построения теории агрегации в пространстве и рассматривается в данной секции.

Диффузия частиц может вызвать столкновения. Если частицы связаны, что всегда имеет место для мелких частиц из-за молекулярных поверхностных сил, они слипаются, образуя совместный агрегат. Эти агрегаты могут в дальнейшем сталкиваться с другими агрегатами или частицами. По мере эволюции системы появляются все более крупные кластеры, и распределение агрегатов по размерам в системе постоянно расширяется. Будем характеризовать агрегаты, состоящие из k частиц (мономеров), их концентрацией $n_k(t)$ и радиусом R_k , считая их сферическими. Соответственно, концентрация первичных частиц (мономеров) радиуса R_1 равна $n_1(t)$.

Скорость процесса коагуляции, то есть количество агрегатных столкновений в единицу времени и единицу объема агрегатов размера i и j , можно записать как $K_{ij}n_i n_j$ [47, 48, 11]. Она пропорциональна концентрации частиц n_i и n_j и константе скорости K_{ij} , которая зависит от природы ча-

стиц, их размера и конкретного процесса агрегации. В классическом случае Смолуховского для диффундирующих частиц, равномерно распределенных в пространстве и в отсутствие внешних сил, эти константы имеют вид $K_{ij} = 4\pi(D_i + D_j)(R_i + R_j)$, где D_i и D_j — соответственно коэффициенты диффузии агрегатов i и j [47, 48, 11]. Следовательно, агрегация обусловлена взаимной диффузией частиц.

Если все агрегаты будут двигаться с одинаковой установившейся скоростью, то кинетические константы, естественно, не изменятся. Однако разница в установившихся скоростях меняет механизм агрегации, поскольку частицы могут сталкиваться, обгоняя друг друга. Если частицы достаточно велики, чтобы диффузионным движением можно было пренебречь, константы скорости следуют из чисто баллистических траекторий частиц, что дает $K_{ij}^{\text{bal}} = \pi(R_i + R_j)^2|v_i - v_j|$, где v_i и v_j — суммарные установившиеся скорости, соответствующие скоростям агрегации Смолуховского для сдвигового течения [76, 106]. Для учета гидродинамических взаимодействий между падающими частицами эти скорости модифицируются с помощью коэффициента эффективности столкновения $E(R_i, R_j)$, из которых получаем: [43, 13, 14],

$$K_{ij}^{\text{bal}} = \pi(R_i + R_j)^2 E(R_i, R_j)|v_i - v_j|. \quad (2.4)$$

Множитель $E(R_i, R_j)$ может быть получен в результате численного решения сложной гидродинамической задачи для двух обтекаемых сфер. К сожалению, в настоящее время отсутствует явное выражение для этого фактора; он доступен в виде таблиц со значениями E для различных размеров частиц и давления воздуха [43].

Для случая осаждения мелких частиц важны оба механизма — диффузионный и за счет разности скоростей. Кроме того, даже для крупных частиц уравнение (2.4) предсказывает исчезающие скорости агрегации для частиц одинакового размера, для которых установившиеся скорости равны. Для частиц близкого размера скорости также малы, так что нельзя пренебрегать механизмом диффузии.

Относительная важность адвективного движения и диффузионного движения количественно определяется числом Пекле Pe (см. определение ниже). В работе [107, 108] аналитически исследована кинетика агрегации седиментирующих частиц с сильным преобладанием диффузионной составляющей

(малые значения Re), а в работе [109] рассмотрен другой предел сильного преобладания адвективного движения (большие значения Re). В работе [41] было проведено обширное численное моделирование с использованием метода решеточных уравнений Больцмана в сочетании с методом больших вихрей. Однако во всех этих работах не было дано аналитического выражения для ядра скорости K_{ij} , адекватного для всего диапазона Re .

Целью настоящей работы является построение явных выражений для ядра коагуляции K_{ij} , описывающих агрегацию седиментирующих частиц, которые можно использовать для произвольных значений числа Пекле. Такие коэффициенты скорости особенно важны для процесса агломерации, когда значения Re очень малы для первичных частиц и становятся большими для зрелых агрегатов. Для получения этих выражений рассмотрим отдельно два предельных случая малого и большого Re . Затем мы строим простое рациональное приближение, которое точно описывает кинетику агрегации для всего диапазона числа Пекле. В этом подходе мы пренебрегаем гидродинамическими взаимодействиями между частицами; для учета последних взаимодействий мы предлагаем простое обобщение нашей аппроксимации.

2.3.1 Модель агрегации седиментирующих частиц

В данном разделе мы рассматриваем седиментацию частиц при малых числах Рейнольдса, что подразумевает справедливость линейной гидродинамической теории. Проблема многочастичной седиментации очень сложна, поэтому мы предполагаем, что система очень разбавлена, и важны только парные взаимодействия между соседними частицами; мы также пренебрегаем гидродинамическими взаимодействиями между частицами.

Рассмотрим первую осевшую одиночную частицу массы m , радиуса R и плотности ρ_p . Если частица достаточно мала, она совершает случайное движение, которое подчиняется уравнению Ланжевена:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_{st}. \quad (2.5)$$

Здесь сила вязкого трения равна $-\gamma \mathbf{v}$ с $\gamma = 6\pi\eta R$, где η — вязкость жидкости. Она действует вместе с силой \mathbf{F}_b , объединяющей гравитацию и плавучесть $(4/3)\pi R^3(\rho_p - \rho_f)g$, где ρ_f — плотность жидкости. g — ускорение свободного

падения. Стохастическая сила $\mathbf{F}_{\text{st}}(t)$ имеет нулевое среднее значение и дисперсию в соответствии с теоремой диссипации-флуктуации (FDT) [47]:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{F}_{\text{st}}(t) \rangle &= 0 \\ \langle F_{\text{st}}^\alpha(t) F_{\text{st}}^\beta(t') \rangle &= \Gamma \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'), \quad \Gamma = 2k_B T \gamma,\end{aligned}\tag{2.6}$$

где $\alpha, \beta = x, y, z$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Для малых частиц инерционные эффекты, связанные с членом $m\dot{\mathbf{v}}$, пренебрежимо малы, что приводит к передемпфированному уравнению движения:

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \gamma^{-1} \mathbf{F}_b + \gamma^{-1} \mathbf{F}_{\text{st}}.\tag{2.7}$$

В приведенном выше уравнении Ланжевена рассматривается случайная величина — координата частицы \mathbf{r} , а роль стохастической силы играет $\gamma^{-1} \mathbf{F}_{\text{st}}$. Соответственно коэффициент Γ в рамках флуктуационно-диссипационной теоремы следует заменить на $\Gamma' = \Gamma/\gamma^2 = 2k_B T/\gamma$. Соответствующая функция распределения $P(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, 0)$ дает вероятность пребывания частицы в точке \mathbf{r} в момент времени t при условии, что в начальный момент времени $t = 0$ находился в точке \mathbf{r}_0 . Она подчиняется уравнению Фоккера-Планка [47, 110]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{U} P + D \Delta_{\mathbf{r}} P,\tag{2.8}$$

где $\mathbf{U} = \gamma^{-1} \mathbf{F}_b$ — скорость установившегося движения частицы под действием силы \mathbf{F}_{mb} и

$$D = \frac{\Gamma'}{2} = \frac{k_B T}{\gamma} = \frac{k_B T}{6\pi\eta R}$$

— коэффициент диффузии.

Теперь применим приведенный выше анализ для двух частиц с массами m_1 и m_2 и соответствующими радиусами R_1 и R_2 . Соответствующие уравнения Ланжевена с избыточным демпфированием получают следующие:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_1 &= \gamma_1^{-1} \mathbf{F}_{b,1} + \gamma_1^{-1} \mathbf{F}_{\text{st},1}, \\ \dot{\mathbf{r}}_2 &= \gamma_2^{-1} \mathbf{F}_{b,2} + \gamma_2^{-1} \mathbf{F}_{\text{st},2},\end{aligned}\tag{2.9}$$

где, как и ранее, $\gamma_{1/2} = 6\pi\eta R_{1/2}$ и объединенные силы $\mathbf{F}_{b,1/2}$ и стохастические

силы $\mathbf{F}_{\text{st},1/2}$ подчиняются тем же соотношениям, что и выше, при соответствующих значениях параметров частиц. Мы предполагаем, что эти стохастические силы не скоррелированы, $\langle \mathbf{F}_{\text{b},1}(t)\mathbf{F}_{\text{b},2}(t') \rangle = 0$.

Из уравнений (2.9) получаем уравнение Ланжевена для межчастичного расстояния \mathbf{r}_{12}

$$\dot{\mathbf{r}}_{12} = \mathbf{U}_{12} + \mathbf{F}_{\text{st},12}, \quad (2.10)$$

где

$$\mathbf{U}_{12} = \gamma_1^{-1}\mathbf{F}_{\text{b},1} - \gamma_2^{-1}\mathbf{F}_{\text{b},2} = \mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2 \quad (2.11)$$

это относительная установившаяся скорость со стохастической силой

$$\langle \mathbf{F}_{\text{st},12} \rangle = 0 \quad (2.12)$$

$$\langle F_{\text{st},12}^\alpha(t)F_{\text{st},12}^\beta(t') \rangle = \Gamma_{12}\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$$

$$\Gamma_{12} = \frac{2k_B T}{\gamma_1} + \frac{2k_B T}{\gamma_2} = 2(D_1 + D_2).$$

Аналогично, как и для случая одной частицы, мы можем записать уравнение Фоккера-Планка для плотности вероятности $P_{12}(\mathbf{r}_{12}, t | \mathbf{r}_{12,0}, 0)$ межчастичного расстояния \mathbf{r}_{12} :

$$\frac{\partial P_{12}}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{r}_{12}} \cdot \mathbf{U}_{12}P_{12} + D_{12}\Delta_{\mathbf{r}_{12}}P_{12}, \quad (2.13)$$

где $D_{12} = \frac{1}{2}\Gamma_{12} = D_1 + D_2$ — относительный коэффициент диффузии для пары частиц. Отметим, что это уравнение получено без учета гидродинамических взаимодействий между частицами.

Теперь мы будем использовать уравнение (2.13), чтобы найти скорость агрегации. Сначала выберем направление силы тяжести по оси OZ и запишем \mathbf{U}_{12} как $\mathbf{U}_{12} = (2/9)\Delta\rho g(R_1^2 - R_2^2)\mathbf{k} = v_{12}\mathbf{k}$, где $\Delta\rho = \rho_p - \rho_f$ и \mathbf{k} — единичный вектор в направлении z . Далее рассмотрим поток частиц радиуса R_2 (частиц сорта “2”) на поверхность частиц радиуса R_1 (частиц сорта “1”). Пусть частица сорта 1 находится в начале координат и $P(\mathbf{r}_{12}, t | \mathbf{r}_{12,0}, 0)$ дает вероятность нахождения частиц сорта 2 на расстоянии \mathbf{r}_{12} от центра частиц сорта 1 в момент времени t . Удобно работать с концентрацией $n_2(\mathbf{r}, t)$ частиц сорта 2, которая просто пропорциональна плотности вероятности. Чтобы найти скорость агрегации, необходимо вычислить стационарное течение частиц сорта 2

на поверхности частицы сорта 1 в начале координат [47, 107, 108]. Мы предполагаем, что как только частицы касаются друг друга в точке $|\mathbf{r}_{12}| = R_1 + R_2$, мгновенно образуется совместный агрегат, и частицы сорта 2 исчезают. Это означает, что концентрация частиц 2 на поверхности $r_{12} = (R_1 + R_2)$ равна нулю. С другой стороны на очень большом расстоянии от частицы сорта 1 концентрация частиц сорта 2 равна $n_{2,\infty}$. Тогда уравнение (2.13) может быть преобразовано в стационарном виде в форму,

$$\begin{aligned} D\Delta n - v\frac{\partial n}{\partial z} &= 0 & (2.14) \\ n(r = R) &= 0 \\ n(r \rightarrow \infty) &= n_\infty. \end{aligned}$$

Чтобы не загромождать обозначения, мы опускаем здесь все нижние индексы (т.е. $D = D_{12}$, $n = n_2$, $v = v_{12}$, $n_\infty = n_{2,\infty}$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{12}$) и используем сокращенную запись $R = R_1 + R_2$. Далее введем безразмерные переменные $\mathbf{r} \rightarrow R\mathbf{r}$ и $n \rightarrow n_\infty n$, сохранив для простоты те же обозначения, что и для размерных величин. Тогда в сферических координатах с осью OZ по силе тяжести (т.е. по скорости \mathbf{U}_{12}) безразмерное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta n - 2\mu\partial_z n &= 0, & (2.15) \\ \partial_z n &= \cos\theta\frac{\partial n}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial n}{\partial\theta}, \end{aligned}$$

где константа

$$\mu = \frac{vR}{2D} \quad (2.16)$$

соответствует числу Пекле. Также используя замену,

$$n = u(r, \theta)e^{\mu z} + 1,$$

мы преобразуем приведенное выше уравнение в форму,

$$\Delta u - \mu^2 u = 0 \quad (2.17)$$

$$u(r \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.18)$$

$$u(r = 1, \theta) = -e^{-\mu\cos\theta}. \quad (2.19)$$

где мы выбираем сферические координаты с осью OZ вдоль скорости U_{12} и используем симметрию системы относительно азимутального угла ϕ .

Разделение переменных $u(r, \theta) = \mathcal{R}(r)\Theta(\theta)$ дает два уравнения:

$$r^2 \frac{\partial^2 \mathcal{R}}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r} - (\mu^2 r^2 + n(n+1)) \mathcal{R} = 0 \quad (2.20)$$

$$\Delta_{\theta\phi} \Theta + n(n+1)\Theta = 0, \quad (2.21)$$

где $\Delta_{\theta\phi}$ — угловая часть лапласиана и $n = 0, 1, \dots$. Решение первого уравнения. (2.20) можно представить в виде $\mathcal{R}(r) = K_{n+\frac{1}{2}}(\mu r)/\sqrt{r}$, что является модифицированной функцией Бесселя второго рода разделенной на квадратный корень из r . Решение второго уравнения (2.21) — многочлены Лежандра, $\Theta(\theta) = P_n(\cos\theta)$. Следовательно, общее решение уравнения (2.17) имеет вид,

$$u(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(\cos\theta) K_{n+\frac{1}{2}}(\mu r), \quad (2.22)$$

где коэффициенты A_n следуют из граничных условий уравнений (2.18) и (2.19) [111]. Разлагая граничное условие (2.19) по полиномам Лежандра и используя $r = 1$ в уравнении. (2.22) находим

$$A_n = -\frac{(2n+1)}{2 K_{n+\frac{1}{2}}(\mu)} F_n \quad (2.23)$$

$$F_n = \int_{-1}^1 e^{-\mu x} P_n(x) dx. \quad (2.24)$$

Радиальная часть потока,

$$J_r = -D \frac{\partial n}{\partial r} + v \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_r n = -D \frac{\partial n}{\partial r} + v \cos \theta n, \quad (2.25)$$

где \mathbf{e}_r — единичный вектор в радиальном направлении. На границе $r = R$ получаем поток

$$J_r = -\frac{n_\infty D}{R} \left[\frac{1}{2} - \mu \cos(\theta) - \mu e^{\mu \cos(\theta)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)K'_{n+\frac{1}{2}}(\mu)}{2K_{n+\frac{1}{2}}(\mu)} F_n P_n(\cos \theta) \right], \quad (2.26)$$

где $K'_{n+\frac{1}{2}}$ обозначает производную функции. Коэффициент коагуляции можно получить, интегрируя радиальный поток по поверхности контакта двух частиц. Отсюда получаем:

$$K = \frac{1}{n_\infty} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi R^2 \sin \theta d\theta (-J_r) H(-J_r) \quad (2.27)$$

$$= 2\pi DR \left[1 - \mu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)K'_{n+\frac{1}{2}}(\mu)}{2K_{n+\frac{1}{2}}(\mu)} F_n C_n \right],$$

где

$$C_n = \int_0^\pi P_n(\cos \theta) e^{\mu \cos \theta} H[-J_r(\cos \theta)] \sin \theta d\theta. \quad (2.28)$$

Единичная ступенчатая функция Хевисайда $H(x)$ в подынтегральном выражении уравнений (2.27) и (2.28) гарантирует, что только радиальная составляющая потока, направленная к центру частицы, дает вклад в скорость коагуляции K . Используя соотношение $xK'_{1/2}(x)/K_{1/2}(x) = -(x+1/2)$, легко проверить, что в случае когда $\mu = 0$ получается стандартный результат Смолуховского $K = 4\pi RD$.

Трудности вычисления коэффициентов C_n связаны с множителем $H(-J_r)$ под интегралом. Наш численный анализ показал, что при малых числах Пекле $\mu < 0.5$, когда преобладает диффузия, поток отсутствует, то есть $J_r < 0$ для всех углов θ . Это позволяет убрать множитель $H(-J_r)$ в уравнении (2.28) для малых μ . Более того, при малых μ можно также использовать в уравнениях (2.24) и (2.28) для F_n и C_n разложения Тейлора, $e^{\pm \mu x} = 1 \pm \mu x + (\mu x)^2/2 + \dots$. Это дает следующее аналитическое выражение для K при малых μ :

$$K = 4\pi DR \left(1 + \mu - \frac{1}{3}\mu^2 + \dots \right). \quad (2.29)$$

Для очень больших μ , когда преобладает перенос, можно пренебречь диф-

фузионным движением и аппроксимировать поток выражением $J = v\mathbf{k}n_\infty$ с $J_r = vn_\infty \cos \theta$. Тогда из уравнения (2.27) получаем:

$$\begin{aligned} K &= 2\pi \int_0^\pi R^2 v \sin \theta \cos \theta H(-\cos \theta) d\theta = \pi R^2 v \\ &= 2\pi R D \mu. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Стоит найти экстраполяционное выражение, которое могло бы описать не только предельные случаи $\mu \rightarrow 0$ и $\mu \rightarrow \infty$, но и весь диапазон μ . Это можно сделать, применив приближение, которое правильно воспроизводит предельные случаи и, как мы надеемся, обеспечивает приемлемую точность для промежуточных значений μ .

Стоит отметить, что выбранный вид рациональной аппроксимации может оказаться неоптимальным с точки зрения точности приближения искомой функции, однако целью данной работы мы считаем в первую очередь корректное качественное соответствие построенного аппроксиманта асимптотикам исходного ядра в нуле и на бесконечности. Необходимость подбора подобных аппроксимаций часто встречается в математической физике [112]. Поэтому мы воспользуемся стандартным методом ее получения [113]. Составим аппроксиманту следующего вида:

$$\mathcal{F}(\mu) = \frac{A_0 + A_1\mu + A_2\mu^2}{1 + B\mu} \quad (2.31)$$

Если поделить числитель и знаменатель на μ и допустить, что $\mu \rightarrow \infty$. Тогда для выполнения условия (27) надо чтобы

$$\frac{A_2}{B} = \frac{1}{2} \quad (2.32)$$

Для получения других уравнений, которые позволили бы однозначно определить коэффициенты, разложим знаменатель в ряд Тейлора до квадратичного члена. Тогда при соответствующих степенях и в соответствии с (26) получаем

следующие соотношения:

$$A_0 = 1 \quad (2.33)$$

$$A_1 - A_0 B = 1 \quad (2.34)$$

$$A_2 - B A_1 + A_0 B^2 = -\frac{1}{3} \quad (2.35)$$

Тогда мы находим соответствующие коэффициенты и подставляем их в ядро коагуляции:

$$K = 4\pi D R \mathcal{F}(\mu) \quad (2.36)$$

$$\mathcal{F}(\mu) = \left(\frac{1 + \frac{5}{3}\mu + \frac{1}{3}\mu^2}{1 + \frac{2}{3}\mu} \right).$$

Также стоит записать ядро коагуляции в начальных размерных обозначениях:

$$K_{ij} = 4\pi D_{ij} (R_i + R_j) \mathcal{F}(\mu_{ij}) \quad (2.37)$$

$$\mu_{ij} = \frac{|v_i - v_j| (R_i + R_j)}{2D_{ij}}, \quad (2.38)$$

где

$$D_{ij} = (D_i + D_j) \quad (2.39)$$

$$|v_i - v_j| = \frac{2}{9} |\Delta\rho| g (R_i^2 - R_j^2), \quad (2.40)$$

– коэффициент взаимной диффузии и стоксова относительная скорость оседающих частиц, при этом $D_l = k_B T / (6\pi\eta R_l)$, $l = i, j$. Функция $\mathcal{F}(x)$ определена в уравнении (2.36).

При выводе аналитического выражения (2.37) мы пренебрегаем гидродинамическими взаимодействиями между агрегирующими частицами. Для количественной оценки гидродинамической коррекции необходимо решение уравнений гидродинамики для двух сфер в жидкости. Это сложно сделать даже численно. В то время как поправочный коэффициент $E(R_i, R_j)$ для баллистических столкновений представлен в виде нескольких таблиц, анализ коэффициента взаимной диффузии был выполнен аналитически, см.,

например, [108, 114, 107]. К сожалению, все эти исследования основаны на разложениях гидродинамических сил при большом межчастичном расстоянии; аналитические выражения для сил для малых расстояний в настоящее время отсутствуют. Однако наиболее важным является воздействие гидродинамических сил в условиях близкого расположения частиц, непосредственно перед столкновением. Поэтому получение надежных аналитических оценок представляется маловероятным. Хотя вывод соответствующих гидродинамических поправок является сложной задачей, возможно, стоит получить хотя бы грубую аналитическую оценку этого влияния на кинетику агломерации.

Мы предлагаем следующую феноменологическую модификацию (2.37) с гидродинамическими поправками:

$$K_{ij}^{(h)} = 4\pi D_{ij}(R_i + R_j) \left(\frac{1 + \mu_{ij} + \mu_{ij}^3 E_{ij}}{1 + \mu_{ij}^2} \right), \quad (2.41)$$

где $E_{ij} = E(R_i, R_j)$ - коэффициент эффективности столкновений [43]. Для больших $\mu_{ij} \gg 1$, когда диффузией можно пренебречь, приведенное выше уравнение даст кинетические скорости (2.4). В то же время при $\mu_{ij} \ll 1$ скорости (2.41) будут совпадать со скоростями (2.37) с точностью до членов порядка $\mathcal{O}(mu_{ij}^2)$. Обратите внимание, что уравнение (2.41) не учитывает гидродинамические поправки для коэффициентов взаимной диффузии из-за отсутствия надежных аналитических выражений для гидродинамических сил ближнего поля.

Мы ожидаем, что приведенное выше выражение (2.41) будет особенно полезно для описания кинетики агрегации для частиц близкого размера, когда $R_i \approx R_j$, так как стандартное соотношение (2.4) дает нулевые скорости агрегации, что не может быть верно. Потому что при малой разности плотностей $\Delta\rho$ диапазон разности радиусов $R_i^2 - R_j^2$, приводящий к малым относительным скоростям $|v_i - v_j| \rightarrow 0$ может быть достаточно большим.

2.3.2 Численный метод и расчеты

Чтобы проверить точность нашей теории для коэффициентов коагуляции, когда присутствуют как диффузия, так и перенос, мы численно решаем уравнение (2.14) для различных чисел Пекле $\mu = vR/(2D)$. Мы используем неяв-

ный метод конечных разностей для видоизмененных радиальной и угловой операторов. А именно:

$$\Delta_r n = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r^2}{g} \frac{\partial (gn)}{\partial r} \right) \quad (2.42)$$

$$\Delta_\theta n = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\sin \theta}{g} \frac{\partial (gn)}{\partial \theta} \right) \quad (2.43)$$

$$g = e^{-2\mu r \cos \theta}. \quad (2.44)$$

Это преобразование необходимо для стабилизации численной ошибки, возникающей при больших числах Пекле μ . Включение экспоненциального множителя g приводит к членам $\mu (\cos \theta_j - \cos \theta_{j\pm 1/2})$ и μdr (нижние индексы относятся к узлам сетки), которые могут уменьшить дестабилизирующий эффект больших μ за счет применения меньших шагов дискретизации [83].

Таким образом получается следующая численная схема:

$$\Lambda_r = \frac{1}{r_i^2} \frac{1}{h_r} \left(r_i r_{i+1} \frac{n_{i+1,j} e^{-2\mu \cos \theta_j (r_{i+1} - r_{i+0.5})} - n_{i,j} e^{-2\mu \cos \theta_j (r_i - r_{i+0.5})}}{h_r} - r_i r_{i-1} \frac{n_{i,j} e^{-2\mu \cos \theta_j (r_i - r_{i-0.5})} - n_{i-1,j} e^{-2\mu \cos \theta_j (r_{i-1} - r_{i-0.5})}}{h_r} \right) \quad (2.45)$$

$$\Lambda_\theta = \frac{1}{r_i^2} \frac{1}{\sin \theta_j h_\theta} \left(\sin \theta_{j+0.5} \frac{e^{-2\mu r_i (\cos \theta_{j+1} - \cos \theta_{j+0.5})} n_{i,j+1} - e^{-2\mu r_i (\cos \theta_j - \cos \theta_{j+0.5})} n_{i,j}}{h_\theta} - \sin \theta_{j-0.5} \frac{e^{-2\mu r_i (\cos \theta_j - \cos \theta_{j-0.5})} n_{i,j} - e^{-2\mu r_i (\cos \theta_{j-1} - \cos \theta_{j-0.5})} n_{i,j-1}}{h_\theta} \right) \quad (2.46)$$

$$\Lambda_r + \Lambda_\theta = 0, \quad (2.47)$$

где $i = \{1..N-2\}$, $j = \{0..M-1\}$, h_r - шаг по радиальной переменной, h_θ - шаг по угловой переменной. При $i = 0$, $i = N - 1$ схема заменяется граничными условиями для уравнения (2.14). Если разбить сетку по θ таким образом, что $\theta_{-0.5} = 0$ ($j = 0$) и $\theta_{M-1+0.5} = \pi$ ($j = M - 1$), то благодаря множителям $\sin \theta_{j-0.5}$ и $\sin \theta_{j+0.5}$ угловой оператор остается в границах расчетной области по n без необходимости явно определять граничные условия для численной

схемы по угловой переменной.

Наконец, из полученной схемы мы строим систему линейных уравнений с разреженной матрицей размера NM на NM , где N - количество точек по r , M - количество точек по θ , решение которой дает нам численное решение уравнения (2.14). Для решения систем линейных уравнений мы использовали стандартный прямой решатель из пакета `umfpack` [115] через интерфейс `scipy.sparse.linalg` на языке программирования Python3.

С помощью численной схемы исследуем следующий диапазон числа Пекле, $\mu \in [0, 01, 100, 0]$, используя сетку из 100 точек для угловой координаты θ и 500 точек для радиальной координаты r . Погрешность численной схемы по норме Чебышева во всех расчетах не превышала 0,01. Результат для распределения концентрации n показан на рис. 2.10 для трех различных чисел Пекле. Мы видим, что диффузионное “гало” исчезает при больших μ и существует при меньших μ . Данный результат соотносится с интуитивными ожиданиями, что при больших числах Пекле диффузия не дает никакого вклада в коагуляцию.

На Рис. 2.11 представлены результаты для скорости агрегации K , полученные прямым численным решением уравнения. (2.14) сравнивается с аналитическим результатом (2.36). Рисунок демонстрирует близость аналитического приближения для всего диапазона чисел Пекле, охватывающего четыре порядка величины μ .

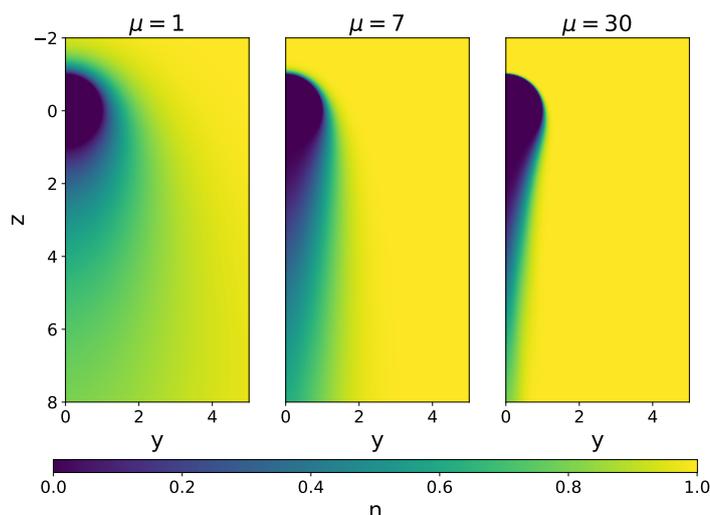


Рис. 2.10: Численное решение стационарного уравнения переноса-диффузии (2.14) для различных чисел Пекле $\mu = vR/(2D)$.

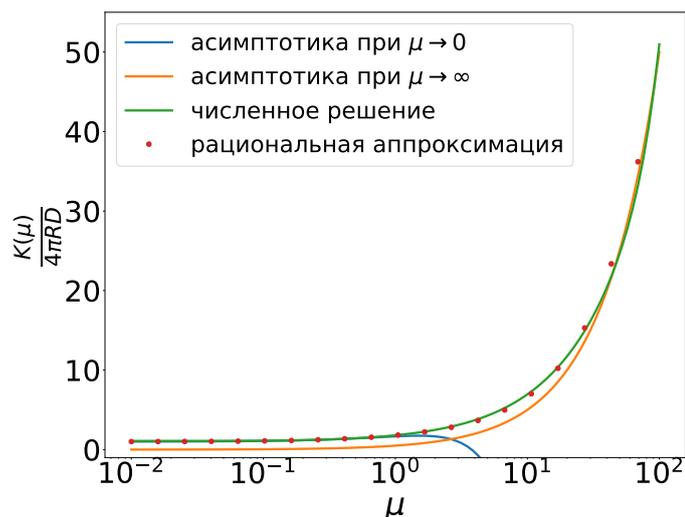


Рис. 2.11: Приведенная скорость агрегации $K/(4\pi RD)$ как функция числа Пекле $\mu = vR/(2D)$. Результат, полученный прямым численным решением уравнения переноса-диффузии (2.14) (сплошная зеленая линия), очень близок к аналитической аппроксимации (2.36) для всего диапазона μ . Также показаны асимптотики (2.29) для $\mu \rightarrow 0$ (сплошная синяя линия) и (2.30) для $\mu \rightarrow \infty$ (сплошная коричневая линия). Аналитическое выражение близко аппроксимирует численные результаты.

2.3.3 Результаты

Мы численно и аналитически исследовали кинетику агломерации оседающих частиц на основе уравнения переноса-диффузии. Оба транспортных механизма — диффузия и перенос важны для агрегации в двух случаях. Во-первых, для мелких частиц, таких как, например, первичные частицы пепла или сажи в атмосфере. Во-вторых, для крупных частиц одинакового или близкого размера, такие частицы осаждаются почти с одинаковой скоростью, что делает адвективный механизм агрегации слабым, сравнимым или даже слабее диффузионного. Следовательно, желательно иметь скорости агрегации для таких систем, где относительная значимость перечисленных выше механизмов (скажем, диффузионных) колеблется от преобладающего до пренебрежимо малого. В нашем анализе мы не рассматривали явно гидродинамические взаимодействия между агломерирующими частицами: для доминирующей адвекции мы использовали феноменологический фактор эффективности столкновения. Для доминирующей диффузии мы пренебрегли гидродинамическими силами из-за отсутствия надежных выражений для

этих сил при близких межчастичных расстояниях.

Для малых чисел Пекле мы получили аналитическое выражение для скоростей агрегации в виде разложения чисел Пекле. При очень больших числах Пекле мы использовали соответствующее выражение для чисто баллистического относительного движения частиц. Используя эти результаты, мы построили аппроксимацию рациональной функцией для большого диапазона чисел Пекле. Мы также решали уравнение переноса-диффузии численно, применяя прием, повышающий точность численной схемы. Результаты численного моделирования находятся в согласии с аналитической теорией для всех исследованных чисел Пекле, варьирующихся на четыре порядка.

Глава 3

Оптимизации алгоритмов и параллельные вычисления

3.1 Параллельная реализация одномерной модели

Ранее было сказано об эффективном численном методе решения задачи Коши для уравнения пространственно-неоднородной коагуляции[1]. Тем не менее, даже скромные симуляции, представленные в этой работе, требовали довольно много процессорного времени. Поэтому мы предлагаем параллельную реализацию этого алгоритма. Подчеркнем также, что существует специальный параллельный алгоритм, позволяющий производить вычисления сумм агрегации и фрагментации аналогичной по структуре интегралам коагуляции. Несмотря на то, что в работе [58] было представлено разумное ускорение вычислений, параллельная масштабируемость алгоритма была относительно плохой. В случае пространственной неоднородности масштабируемость можно улучшить за счет декомпозиции области вдоль пространственной координаты x [2].

3.1.1 Параллельный алгоритм

Численное решение уравнения адвекции-коагуляции можно описать следующими тремя шагами, реализованными в цикле:

- использовать скелетное разложение ядра коагуляции для вычисления

интегралов Смолуховского;

- решить адвективную составляющую уравнения;
- объединить результаты шагов 1 и 2, чтобы вычислить решение для небольшого временного шага.

Есть несколько возможностей для распараллеливания численных расчетов. Во-первых, мы можем выполнять одновременный расчет, распределяя точки фиксированного размера частиц по разным процессорам. Однако этот вариант плохо масштабируется из-за того, что вычисление интегралов для определенного кластера зависит от результатов вычисления интегралов в предыдущих точках на оси размера частиц. Они могут быть решены независимо, но не все могут быть решены одновременно, из-за чего процессоры выделенные под большие кластеры частиц должны ждать пока другие процессоры выполнят расчеты для малых кластеров.

Более приемлемым видится вариант параллельных вычислений по пространственной координате. Каждый процессор вычисляет интегралы для всех размеров частиц на определенной точке. Для выполнения шага переноса процессоры обмениваются своими граничными по пространству данными. На Рис. 3.1 представлена схема распараллеливания. Данный вариант позволяет получить хорошую масштабируемость.

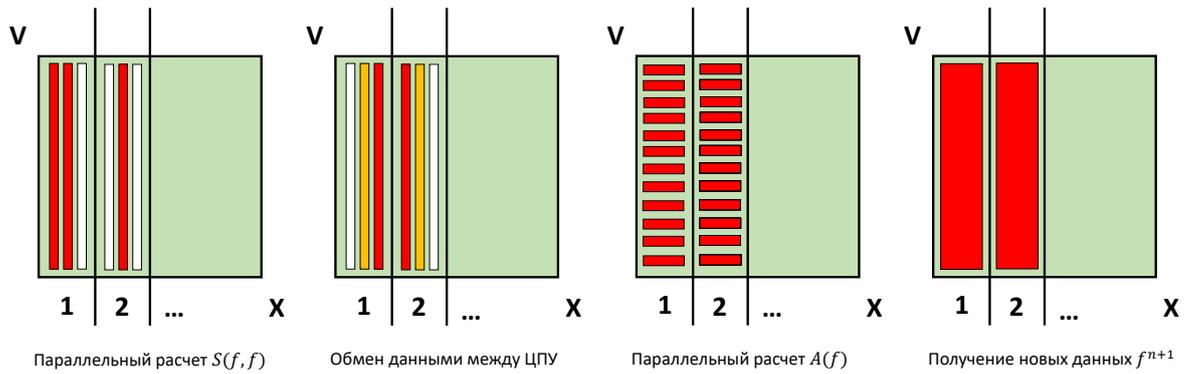


Рис. 3.1: Структура распараллеливания численной схемы и сообщаемые друг с другом области сетки. Области, отделенные черными линиями, представляют области сетки, выделенные для разных процессоров. Красные полосы показывают, как выполняются вычисления. Желтые полосы представляют собой данные, которые необходимо передать соседним процессорам. В приведенной выше схеме второе изображение показывает, что процессор 1 должен отправить свою желтую полосу процессору 2, который будет хранить эти данные в своей крайней левой красной полосе, и наоборот. Эти данные необходимы для расчета адвективной составляющей.

За один временной шаг каждый процессор выполняет алгоритм:

```

1  foreach (i in X)
2  {
3      foreach (j in V)
4      {
5          result_smol[i][j] = compute_Smoluchowski(i, j);
6      }
7  }
8  exchange_data_with_left_and_right_neighbours();
9  foreach (j in V)
10 {
11     foreach (i in X)
12     {
13         result_adv[i][j] = compute_advection(i, j);
14     }
15 }
16 foreach (i in X)
17 {
18     foreach (j in V)
19     {
20         new_result[i][j] = old_result[i][j] + dt * (result_smol[i][j]
21                                                     + result_adv[i][j]);
22     }
23 }

```

Таблица 3.1: Lomonosov: Константное ядро, $R = 1$, расчетная область : 8192x8192x32.

№	Кол-во узлов	Время, с	Ускорение
1	1	34.476	1
2	2	17.468	1.97
3	4	9.126	3.778
4	8	5.124	6.728
5	16	2.576	13.384
6	32	1.306	26.398
7	64	0.66	52.236
8	128	0.342	100.807
9	256	0.185	186.357
10	512	0.11	313.418

3.1.2 Результаты

Оценим качество параллельной реализации алгоритма. Масштабируемость была протестирована на нескольких вычислительных кластерах.

Таблицы показывают, что масштабируемость параллельной программы является линейной при количестве узлов меньше 128. Если количество процессоров, вычисляющих решение, превышает это число, отдача от параллельной реализации медленно снижается. Ускорение также перестает давать удовлетворительные результаты, когда сетка недостаточно велика. Этот результат согласуется с теоретической алгоритмической сложностью численного решения. Чтобы мы могли получить выгоду от распараллеливания, нам нужно рассмотреть достаточно большую расчетную область. Одна из возможных модификаций, способных увеличить скорость расчета данного уравнения, заключается в дальнейших матричных преобразованиях численной схемы. В частности, мы могли бы рассматривать решение $f(x, v)$ как матрицу и посмотреть, достаточно ли низок ее ранг, чтобы мы могли извлечь выгоду из скелетного разложения. В Таблице 3.5 представлены ранги матриц решения в фиксированные моменты времени.

Таблица 3.2: Cluster2 INM: Баллистическое ядро, $R = 12$, расчетная область: 2048x2048x32.

№	Кол-во узлов	Время, с	Ускорение
1	1	133.43	1
2	2	66.112	2.018
3	4	34.49	3.869
4	8	17.775	7.507
5	16	8.997	14.83
6	32	4.618	28.893
7	64	2.353	56.706
8	128	1.227	108.745
9	256	0.943	141.495

Таблица 3.3: Pardus Skoltech: Баллистическое ядро, $R = 14$, расчетная область: 8064x8046x32.

№	Кол-во узлов	Время, с	Ускорение
1	1	1202.947	1
2	2	604.34	1.99
3	4	301.304	3.992
4	8	152.223	7.903
5	16	78.681	15.289
6	32	40.3	29.85
7	64	20.175	59.626
8	128	9.848	122.151

Таблица 3.4: Supermicro Skoltech: Баллистическое ядро, $R = 14$, расчетная область: 8064x8046x32.

№	Кол-во узлов	Время, с	Ускорение
1	1	2373.189	1
2	2	1168.678	2.03
3	4	601.246	3.947
4	8	318.474	7.452
5	16	168.127	14.115
6	32	85.922	27.62
7	64	42.952	55.252
8	128	23.838	99.555

Таблица 3.5: Ранги аппроксимированных решений в фиксированные моменты времени. Точность: 10^{-4} , матрицы 200x200

время	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
ранг	1	26	12	12	11	14	14

3.2 Параллельная реализация двумерной модели

Если для одномерного случая параллельной реализации на ЦПУ может быть достаточно для получения оптимальных ускорений (хотя для достаточно мелких сеток ГПУ тоже может быть полезно), то в 2D случае использование новых ресурсов более актуально. Ур. (2.1) можно решать с помощью параллельного алгоритма как на ЦПУ, так и ЦПУ+ГПУ [3].

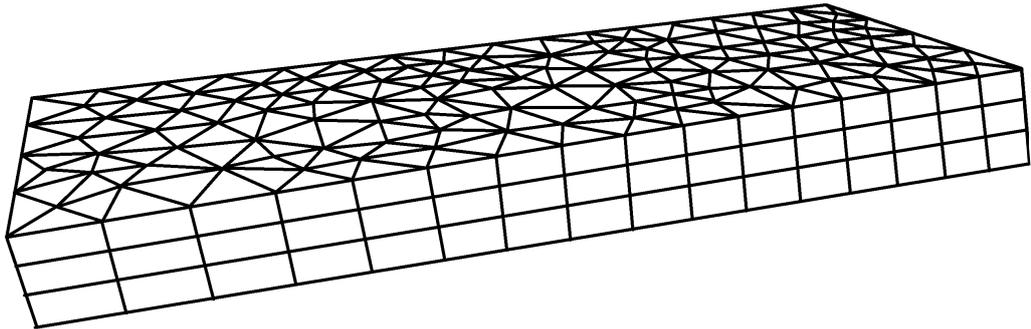


Рис. 3.2: Пример области для численного моделирования с использованием уравнения адвекции-коагуляции. По оси размера частиц сетка структурирована. По пространственным осям – триангулирована.

3.2.1 Параллельный алгоритм

Полный алгоритм выглядит следующим образом:

1. Получить исходные данные $f^n(x, y, v)$;
2. Интерполировать значения на границах треугольников для каждого заданного размера частиц;
3. Применить оператор переноса, используя значения интерфейса для каждого заданного размера частиц — $\text{find } A(f^n(x, y, v))$;

4. Найти R сверток из первого интеграла Смолуховского для каждого центра треугольника в двумерной области;
5. Вычислить второй интеграл для каждого центра треугольника и найти $S(f^n(x, y, v))$;
6. Через $A(f^n(x, y, v))$ и $S(f^n(x, y, v))$ найти $f^{n+1}(x, y, v)$;
7. Взять $f^{n+1}(x, y, v)$ в качестве новых исходных данных, вернуться к шагу 1.

Представим схему распараллеливания алгоритма. Вычислительный процесс может быть распараллелен с помощью декомпозиции расчетной области. Всего имеются 3 координатные оси, однако в работе [58] показано, что разложение по оси размера частиц требует большого количества операций обмена для параллельного преобразования Фурье и имеет определенные недостатки с точки зрения параллельной масштабируемости. Этот факт мотивирует нас проводить декомпозицию только по пространственным координатам. Вычисление интегралов коагуляции в каждой точке сетки не требует дополнительных обменов данными. В то же время локальное вычисление оператора переноса требует данных только от соседних ячеек. Пример декомпозиции расчетной области показан на Рис. 3.3,3.4.

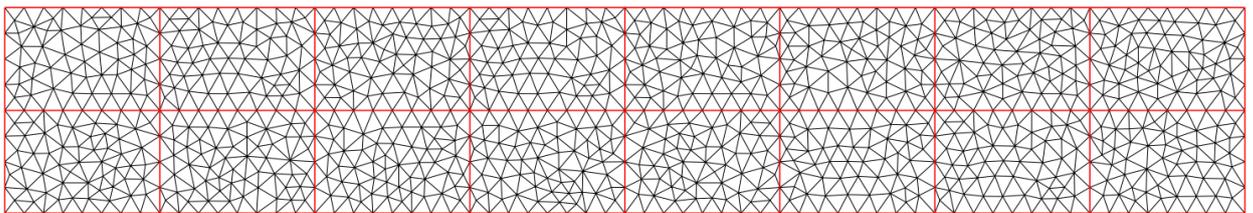


Рис. 3.3: Разделение расчетной области между 16 процессами. Алгоритм Делоне выполнялся с использованием библиотеки Fade2D (www.geom.at). Границы между процессорами можно заложить в саму триангуляцию области.

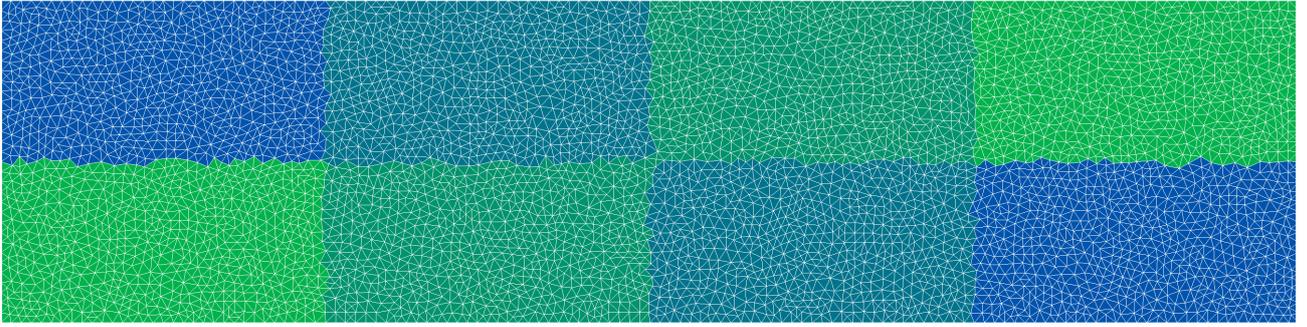


Рис. 3.4: Другой пример разделения области между 8 процессами. Тут границы между процессорами естественные.

Используя MPI, мы можем назначить каждый поддомен отдельному процессу. Следовательно, каждый процесс вычисляет компоненты адвекции и коагуляции последовательно для соответствующей подобласти. Перед вычислением оператора переноса нам необходимо интерполировать данные по интерфейсам f^* . Таким образом, обмен данными необходим для интерполяции значений для соседних интерфейсов. Затем каждый процесс имеет дело с компонентом переноса, вычисляет свертки для оператора коагуляции и подготавливает компоненту коагуляции к следующему временному шагу. В целом, мы заводим этот процесс в цикл, позволяющий численно решить исходное уравнение адвекции-коагуляции за произвольное количество временных шагов. На Рис. 3.5 показано содержимое этого цикла.

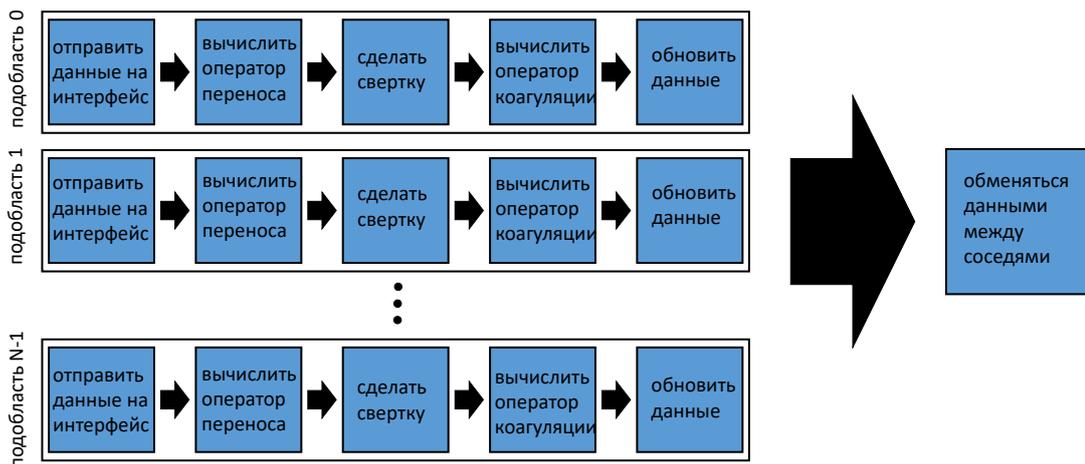


Рис. 3.5: Цикл построения численного решения. Расчет на ЦПУ для каждого поддомена выполняется параллельно. Затем процессы обеспечивают необходимые обмены данными и повторяют схему для обновленных данных.

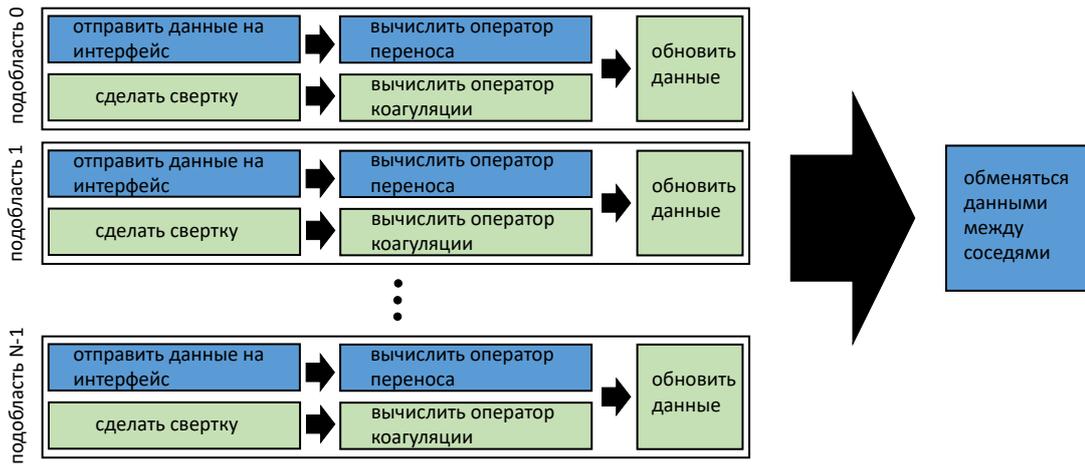


Рис. 3.6: Цикл численного решения. Расчет CPU и GPU для каждого поддомена “выполняется” параллельно. Коагуляция “работает” на GPU (зеленый), адвекция “работает” на CPU (синий). Обновление данных обеспечивается GPU. Затем процессы обмениваются данными и повторяют схему с новыми данными.

Рассматривая численную схему, получаем, что расчет адвективной и коагуляционной составляющих не обязательно должен быть последовательным. Следовательно, мы можем ввести еще больше параллелизма в вычислительный процесс. Возможны несколько способов отдельной аппроксимации адвективной и коагуляционной составляющих. Они могут либо “запускаться” в состоянии гонки на общем ЦПУ, либо «запускаться» одновременно на разных ЦПУ. Но они также могут «работать» одновременно на ГПУ и ЦПУ! Первый вариант требует изменения контекста, что может занять много времени по сравнению с двумя другими вариантами. Второй вариант требует обмена данными между процессорами для целых поддоменов, что приводит к непропорциональному росту объема необходимых для обмена данных и провоцирует явное снижение производительности. Третий вариант также требует обмена данными целых поддоменов, но между GPU и CPU. Таким образом, мы предпочитаем использовать третий из перечисленных вариантов и отмечаем, что библиотеки Cuda содержат ориентированные на GPU реализации FFT [116]. В целом, параллельная схема с использованием GPU показана на рис. 3.6.

3.2.2 Результаты

Измерим масштабируемость и контрольные показатели чистой MPI и гибридной реализации MPI/Cuda численной схемы для уравнения адвекции-

Таблица 3.6: Время вычислений для 32 шагов интегрирования по времени (в секундах) для разных размеров сетки на ПК с использованием только ядер ЦПУ (Intel Core i7-7700HQ). Первое число в сетке указывает количество узлов сетки по пространственной координате, второе — по оси размера частиц.

№ ядер	$2^{13} \times 2^{10}$	$2^{12} \times 2^{10}$	$2^{11} \times 2^{10}$	$2^{10} \times 2^{11}$	$2^{10} \times 2^{12}$	$2^{10} \times 2^{13}$
1	381.868	203.763	89.0121	92.48	201.05	412
2	192.71	124.673	45.31	65.606	136.338	300.9
4	98.5735	75.0756	25.4674	35.0096	71.12	152.94

Таблица 3.7: Время вычисления 2-х шагов интегрирования по времени (в секундах) для сетки 5000×8192 на студенческом кластере (с межсоединением Ethernet 1 Гбит/с) ИВМ им. Марчука РАН с использованием только ядер ЦПУ.

№ ядер	время, с	ускорение
1	138.64	1.00
2	96.69	1.43
4	58.2	2.38
8	33.31	4.16
16	18.53	7.48
32	10.16	13.65

коагуляции. Расчеты проводились на суперкомпьютере “Ломоносов”, суперкомпьютере “Жорес” и ПК с графическим процессором Nvidia.

В этой части работ мы моделируем источник частиц в верхнем левом углу расчетной области. Скорости постоянны и провоцируют перенос частиц из области источника в правую нижнюю часть расчетной области. При этом частицы коагулируют, а более крупные частицы быстрее движутся вниз. Производительность параллельных реализаций можно увидеть в таблицах 3.6–3.10.

Из наших экспериментов мы пришли к выводу, что обе параллельные реализации хорошо масштабируемы. К сожалению, мы приходим к выводу, что использование ГПУ-ускорителей приводит к довольно скромному ускорению вычислений (примерно в 2-4 раза, для более подробной информации см. Таблицу 3.9), а простой рост используемых ЦПУ-ядер в чистом MPI-режиме может быть лучше за счет соображения экономии или энергопотребления (см. таблицу 3.8). Тесты гибридной версии на ПК (для этого использовались центральные процессоры Intel Core i7-7700HQ и графические процессо-

Таблица 3.8: Время вычислений (в сек) для сетки 7700×8192 и 2 шага интегрирования по времени на суперкомпьютерной очереди Ломоносова *regular4* (интерконнект QDR 40 Гб/сек) с использованием только ядер ЦПУ.

№ ядер	время, с	ускорение
1	159.312	1.0
2	74.6913	2.13
4	38.9939	4.08
8	21.54	7.4
16	10.5112	15.16
32	5.53312	28.79
64	2.94353	54.12
128	1.59911	99.63
256	0.931789	170.97
512	0.504464	315.8
1024	0.328353	485.19

Таблица 3.9: Время вычислений (в сек) для сетки 3830×32768 и 2 шага интегрирования по времени на суперкомпьютере Жорес *GPU big* очередь (интерконнект EDR 100 Гб/сек). В гибридной версии каждый процесс MPI соответствует одному устройству GPU NVidia V100.

№ ядер	без ГПУ, с	ускорение без ГПУ	с ГПУ, с	ускорение с ГПУ
1	396.512	1.0	186.47	2.13
2	219.966	1.8	101.12	3.92
4	123.606	3.2	65.33	6.07
8	73.52	5.39	35.32	11.22
16	42.51	9.33	18.53	21.4
32	36.06	11.0	12.18	32.6
64	17.86	22.2	5.93	66.87

Таблица 3.10: Время вычислений (в секундах) для различных размеров сетки и 32 шагов интегрирования по времени на ПК с использованием ядер ЦПУ (Intel Core i7-7700HQ) и графического процессора (NVIDIA GeForce GTX 1050). Первое число в сетке указывает количество узлов сетки по пространственной координате, второе — по оси размера частиц.

№ ядер	$2^{13} \times 2^{10}$	$2^{12} \times 2^{10}$	$2^{11} \times 2^{10}$	$2^{10} \times 2^{11}$	$2^{10} \times 2^{12}$	$2^{10} \times 2^{13}$
1	241.73	120.015	58.1369	54.15	106.46	226.809
2	142.204	97.5476	34.8797	40.5617	78.719	168.944
4	98.5735	65.3446	23.42	23.0669	46.69	90.57

ры NVIDIA GeForce GTX 1050) показывают признаки длительных простоев ЦПУ, поскольку каждое ядро ЦПУ назначает задачи одному устройству с графическим процессором. То же самое происходит и с суперкомпьютером Жорес на ГПУ: если мы связываем более одного MPI-процесса с одним ГПУ-ускорителем, мы получаем стагнацию или даже деградацию производительности. Мы получаем хорошие результаты с точки зрения сильной масштабируемости, которые сохраняются как в тестах суперкомпьютеров, так и для ПК. Однако, если узел имеет одно устройство ГПУ и несколько ядер ЦПУ, может возникнуть остановка ЦПУ, поскольку назначения от каждого ядра ЦПУ выстраиваются в очередь. Если это произойдет, лучшим решением будет дать устройству питание только подмножеству ядер ЦПУ, в то время как остальные ядра будут выполнять вычисления способом MPI без использования ГПУ.

3.3 Параллельная реализация трехмерной модели

3.3.1 Параллельный алгоритм

Вариант решателя на декартовой сетке также был реализован с параллельной архитектурой. Для распределения работы между процессами мы разбиваем пространственную вычислительную область. Обмен данными происходит через MPI (Message Passing Interface). Ось размеров частиц целиком принадлежит каждому процессору на своей пространственной подобласти. Вычисление операторов Смолуховского реализовано как на ГПУ так и на ЦПУ. Таким образом, мы имеем в качестве опции возможность выполнения гибридных расчетов.

Варианты параллельной реализации представлены на Рис. 3.7. Слева указана схема с декомпозицией расчетной области и обменом граничных данных. Если в силу архитектуры вычислительной машины потребности в обмене данных нет (все процессы имеют общую память) то параллельный решатель может быть реализован с помощью OpenMP. Правая часть Рис. 3.7 показывает возможность асинхронного использования устройства ГПУ для вычисления интегралов Смолуховского. Для этого подобласть делится на две части, на

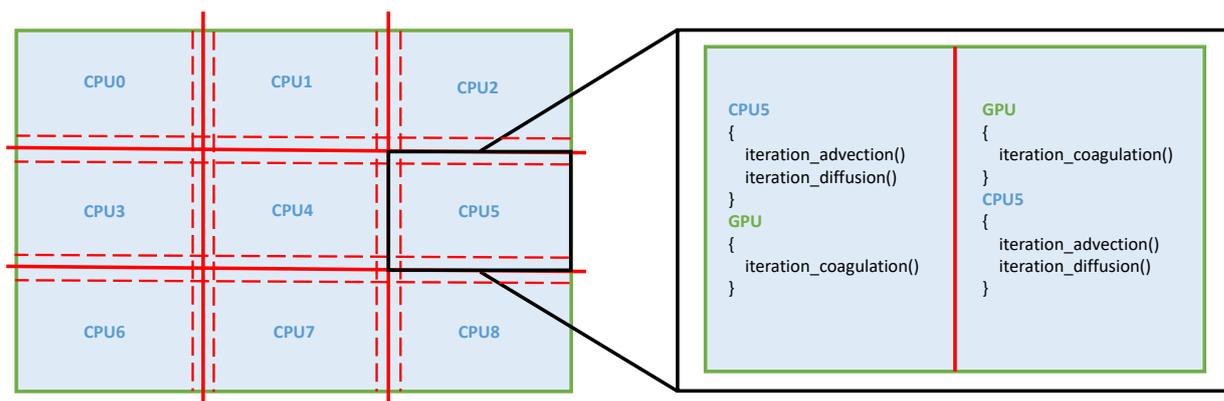


Рис. 3.7: Схема параллельной реализации решателя. Слева: разбиение домена на 9 процессоров, справа: вариант гибридного решения

каждой из которых можно параллельно выполнить шаг численной схемы для пространственных операторов на ЦПУ и шаг оператора коагуляции на ГПУ в разном порядке. Оставшиеся процессоры на узле могут работать с OpenMP. Данный вариант асинхронного использования актуален для случаев года расчеты на ГПУ и ЦПУ занимают соразмерное количество времени.

Таблица 3.11: Время вычислений (в секундах) различных версий решателя уравнения переноса-диффузии-коагуляции в трехмерном пространстве на декартовой сетке

Версия	OpenMP	MPI	OpenMP+CUDA
1 CPU	59.9764	55.3257	18.8531
2 CPU	30.8832	27.4235	10.8875
4 CPU	17.1866	15.1223	6.9816

3.3.2 Результаты

В Табл. 3.11 показаны результаты тестирования схем распараллеливания. Первый столбец данных показывает время вычислений с использованием разного количества ядер на одном узле. Весь параллелизм обеспечивается OpenMP. Второй столбец также выполняется на одном узле, но параллелизм достигается с помощью MPI. Третий столбец показывает время гибридного расчета с помощью ЦПУ и графического устройства. Во всех случаях ускорения заметны. Использование ГПУ в вычислениях наряду с вычислениями на ЦПУ может дать дополнительный прирост к производительности вычислений. Отметим, что в текущей постановке задачи ($k \in [1, 2, \dots, 32]$) малое

количество размеров частиц избавляет нас от необходимости использовать оптимальный алгоритм вычисления интегралов Смолуховского при помощи быстрого преобразования Фурье. Однако по мере увеличения количества рассматриваемых размеров частиц переход на оптимизированный вариант алгоритма необходим.

Мы реализовали решатель пространственно-неоднородной агрегации в 3D на регулярной сетке. Мы используем высокопроизводительные вычисления, чтобы приспособить симуляцию модели к архитектуре суперкомпьютера. Обнаружено, что метод декомпозиции области имеет хорошую масштабируемость. Гибридное моделирование ЦПУ-ГПУ обеспечивается реализацией численного решения интегралов Смолуховского на ГПУ при помощи CUDA.

Заключение

В данной работе были предприняты шаги к формированию теории коагуляции в условиях пространственной неоднородности. Построение завершенной теории требует последующих исследований. Однако на основе того, что уже сделано, мы можем сделать некоторые значимые выводы и определить вектор, в направлении которого нам нужно приложить дальнейшие усилия.

Мы приводим следующие научные результаты:

- Реализован эффективный численный метод решения уравнения, описывающего перенос коагулирующих частиц в $1/2/3D$ пространствах;
- Получено аналитическое решение для агрегирующей системы с диффузией частиц, адвекцией и источником мономеров в одномерном случае;
- Предложен способ моделирования динамики загрязнения рек с использованием уравнений адвекции и коагуляции, а также представлена трехмерная модель динамики агрегирующих частиц в атмосфере;
- Исследована численно и аналитически кинетика агрегации седиментирующих частиц на основе уравнения переноса-диффузии;
- Представлен и протестирован способ численного решения уравнений пространственно-неоднородной коагуляции на параллельных архитектурах, позволяющий получить ускорение вычислений более чем в 300 раз;
- Продемонстрированы способы гибридной эксплуатации ЦПУ и ГПУ в параллельной реализации численного алгоритма, приводящий к дополнительному ускорению вычислений в 2 – 4 раза.

Дальнейшие исследования будут включать в себя:

- Разработку методов математического моделирования, позволяющих учитывать влияние гидродинамических характеристик системы на ядро коагуляции;
- Обобщение пространственно-неоднородных систем до случаев многочастичных столкновений и многокомпонентной коагуляции;
- Дополнение программной библиотеки для проведения физических расчетов, связанных с процессами агрегирования, с учетом исследованных обобщений.

Литература

1. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, and E. Tyrtysnikov. An efficient numerical method for a mathematical model of a transport of coagulating particles. *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*, 41:179–186, 2017.
2. S. Matveev, R. Zagidullin, A. Smirnov, and E. Tyrtysnikov. Parallel numerical algorithm for solving advection equation for coagulating particles. *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 5:43–54, 2018.
3. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, and E. Tyrtysnikov. Supercomputer modelling of spatially-heterogeneous coagulation using MPI and CUDA. *Communications in Computer and Information Science*, 1129:403–414, 2019.
4. R. Zagidullin. Solving the transport-coagulation problem in a two-dimensional spatial region. *Computational Mathematics and Modeling*, 31:19–24, 2020.
5. R. Zagidullin, A. Smirnov, S. Matveev, N. Brilliantov, and P. Krapivsky. Aggregation in non-uniform systems with advection and localized source. *Journal of Physics A*, 55:265001, 2022.
6. N. Brilliantov, R. Zagidullin, S. Matveev, and A. Smirnov. Aggregation kinetics in sedimentation: Effect of diffusion of particles. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 63:596–605, 2023.
7. R. Zagidullin. Construction of a three-dimensional model of the convection of aggregating particles. *Numerical Methods and Programming (Vychislitel'nye Metody i Programirovanie)*, 24:430–439, 2023.
8. M. von Smoluchowski. Drei Vorträge über Diffusion, brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Physikalische Zeitschrift*, 17:557–585, 1916.
9. H. Müller. Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation. *Fortschrittsberichte über Kolloide und Polymere*, 27:223–250, 1928.

10. A. Aloyan, V. Arutyunyan, A. Lushnikov, and V. Zagaynov. Transport of coagulating aerosol in the atmosphere. *Journal of Aerosol Science*, 28:67–85, 1997.
11. M. von Smoluchowski. Versuch Einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 92:129–168, 1917.
12. S. Chandrasekhar. Stochastic problems in physics and astronomy. *Reviews of Modern Physics*, 15:1–89, 1943.
13. G. Falkovich, A. Fouxon, and M. Stepanov. Acceleration of rain initiation by cloud turbulence. *Nature*, 419:151–154, 2002.
14. G. Falkovich, M. Stepanov, and M. Vucelja. Rain initiation time in turbulent warm clouds. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 45:591–599, 2006.
15. T. Pöschel, N. Brilliantov, and C. Frömmel. Kinetics of prion growth. *Biophysical Journal*, 85:3460–3474, 2003.
16. M. Eigen. Prionics or the kinetic basis of prion diseases. *Biophysical Chemistry*, 63:A1–A18, 1996.
17. N. Brilliantov, P. Krapivsky, A. Bodrova, F. Spahn, H. Hayakawa, V. Stadnichuk, and J. Schmidt. Size distribution of particles in Saturn’s rings from aggregation and fragmentation. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112:9536–9541, 2015.
18. J. Silk and S. White. The development of structure in the expanding universe. *The Astrophysical Journal*, 223:L59–L62, 1978.
19. J. Oort and H. van de Hulst. Gas and smoke in interstellar space. *Bulletin of the Astronomical Institutes of the Netherlands*, 10:187, 1946.
20. S. Friedlander. *Smoke, Dust and Haze*. Wiley, New York, 1997.
21. H. Pruppacher and J. Klett. *Microphysics of Clouds and Precipitations*. Kluwer, Dordrecht, 1998.
22. J. Seinfeld and S. Pandis. *Atmospheric Chemistry and Physics*. Wiley, New York, 1998.
23. V. Anderson and H. Lekkerkerker. Insights into phase transition kinetics from colloid science. *Nature*, 416:811–815, 2002.

24. A. Stradner, H. Sedgwick, F. Cardinaux, W. Poon, S. Egelhaaf, and P. Schurtenberge. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature*, 432:492–495, 2004.
25. R. Samsel and A. Perelson. Kinetics of rouleau formation. i. a mass action approach with geometric features. *Biophysical Journal*, 37:493–514, 1982.
26. M. Anand, K.B. Rajagopal, and K.R. Rajagopal. A model for the formation and lysis of blood clots. *Pathophysiology of Haemostasis and Thrombosis*, 34:109–120, 2005.
27. K. Semeniuk and A. Dastoor. Current state of atmospheric aerosol thermodynamics and mass transfer modeling: a review. *Atmosphere*, 11:156, 2020.
28. В. Галкин. *Уравнение Смолуховского*. Физматлит, Москва, 2001.
29. R. Ball, C. Connaughton, P. Jones, R. Rajesh, and O. Zaboronski. Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs. *Physical Review Letters*, 109:168304, 2012.
30. А. Алюян. *Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. Курс лекций*. ИВМ РАН, Москва, 2002.
31. A. Chaudhury, I. Oseledets, and R. Ramachandran. A computationally efficient technique for the solution of multi-dimensional PBMs of granulation via tensor decomposition. *Computers and Chemical Engineering*, 61:234–244, 2014.
32. V. Piskunov. Analytical solutions for coagulation and condensation kinetics of composite particles. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 249:38–45, 2013.
33. R. Ball, C. Connaughton, T. Stein, and O. Zaboronski. Instantaneous gelation in Smoluchowski’s coagulation equation revisited. *Physical Review E*, 84:011111, 2011.
34. A. Sorokin, V. Strizhov, M. Demin, and A. Smirnov. Monte-Carlo modeling of aerosol kinetics. *Atomic Energy*, 117:289–293, 2015.
35. V. Stadnichuk, A. Bodrova, and N. Brilliantov. Smoluchowski aggregation–fragmentation equations: fast numerical method to find steady-state solutions. *International Journal of Modern Physics B*, 29:1550208, 2015.
36. K. Sabelfeld. A random walk on spheres based kinetic Monte-Carlo method for simulation of the fluctuation-limited bimolecular reactions. *Mathematics and Computers in Simulation*, 143:46–56, 2016.

37. S. Okuzumi, H. Tanaka, H. Kobayashi, and K. Wada. Rapid coagulation of porous dust aggregates outside the snow line: a pathway to successful icy planetesimal formation. *The Astrophysical Journal*, 752:106, 2012.
38. B. Vowinckel, J. Withers, P. Luzzatto-Fegiz, and E. Meiburg. Settling of cohesive sediment: particle-resolved simulations. *Journal of Fluid Mechanics*, 858:5–44, 2019.
39. A. Fischer, A. Chatterjee, and T. Speck. Aggregation and sedimentation of active Brownian particles at constant affinity. *Journal of Chemical Physics*, 150:064910, 2019.
40. Y. Yang, A. Kelkar, D. Corti, and E. Franses. Effect of interparticle interactions on agglomeration and sedimentation rates of colloidal silica microspheres. *Langmuir*, 32:5111–5123, 2016.
41. H. Chen, W. Liu, Z. Chen, and Z. Zheng. A numerical study on the sedimentation of adhesive particles in viscous fluids using LBM-LES-DEM. *Powder Technology*, 391:467–478, 2021.
42. J. Whitmer and E. Luijten. Sedimentation of aggregating colloids. *Journal of Chemical Physics*, 134:034510, 2011.
43. M. Pinsky, A. Khain, and M. Shapiro. Collision efficiency of drops in a wide range of Reynolds numbers: effects of pressure on spectrum evolution. *Journal of Atmospheric Science*, 58:742–766, 2001.
44. T. Khodzher, V. Zagaynov, A. Lushnikov, V. Chausov, G. Zhamsueva, A. Zayakhanov, V. Tsydypov, V. Potemkin, I. Marinaite, V. Maksimenko, and I. Agranovski. Study of aerosol nano-and submicron particle compositions in the atmosphere of Lake Baikal during natural fire events and their interaction with water surface. *Water, Air and Soil Pollution*, 232:266, 2021.
45. G. Zhamsueva, A. Zayakhanov, T. Khodzher, V. Tsydypov, T. Balzhanov, and A. Dementeva. Studies of the dispersed composition of atmospheric aerosol and its relationship with small gas impurities in the near-water layer of Lake Baikal based on the results of ship measurements in the summer of 2020. *Atmosphere*, 13:139, 2022.
46. H. Shahad. An experimental investigation of soot particle size inside the combustion chamber of a diesel engine. *Energy Conversion and Management*, 29:141–149, 1989.
47. P. Krapivsky, A. Redner, and E. Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

48. F. Leyvraz. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation. *Physics Reports*, 383:95–212, 2003.
49. Z. Cheng, S. Redner, and F. Leyvraz. Coagulation with a steady point monomer source. *Physical Review Letters*, 62:2321–2324, 1989.
50. P. Krapivsky. Diffusion-limited-aggregation processes with three-particle elementary reactions. *Physical Review E*, 49:3233–3238, 1994.
51. P. Krapivsky. Aggregation-annihilation processes with injection. *Physica A*, 198:157–178, 1993.
52. H. Hinrichsen, V. Rittenberg, and H. Simon. Universality properties of the stationary states in the one-dimensional coagulation-diffusion model with external particle input. *Journal of Statistical Physics*, 86:1203–1235, 1997.
53. A. Ayer and K. Mallick. Exact results for an asymmetric annihilation process with open boundaries. *Journal of Physics A*, 43:045003, 2010.
54. P. Constantin and N. Masmoudi. Global well-posedness for a Smoluchowski equation coupled with Navier-Stokes equations in 2D. *Communications in Mathematical Physics*, 278:179–191, 2008.
55. F. Kruis, A. Maisels, and H. Fissan. Direct simulation Monte-Carlo method for particle coagulation and aggregation. *AIChE Journal*, 46:1735–1742, 2000.
56. S. Matveev, E. Tyrtysnikov, A. Smirnov, and N. Brilliantov. A fast numerical method for solving the Smoluchowski-type kinetic equations of aggregation and fragmentation processes. *Vychislitel'nye Metody i Programirovanie*, 15:1–8, 2014.
57. E. Debry, B. Sportisse, and B. Jourdain. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols. *Journal of Computational Physics*, 184:649–669, 2003.
58. S. Matveev. A parallel implementation of a fast method for solving the Smoluchowski-type kinetic equations of aggregation and fragmentation processes. *Vychislitel'nye Metody i Programirovanie*, 16:360–368, 2015.
59. A. Osinsky. Low-rank method for fast solution of generalized smoluchowski equations. *Journal of Computational Physics*, 422:109764, 2020.
60. A. Boje and M. Kraft. Stochastic population balance methods for detailed modelling of flame-made aerosol particles. *Journal of Aerosol Science*, 159:105895, 2022.

61. W. Hackbusch, V. John, A. Khachatryan, and C. Suciú. A numerical method for the simulation of an aggregation-driven population balance system. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 69:1646–1660, 2012.
62. R. Bordás, V. John, E. Schmeýer, and D. Thévenin. Numerical methods for the simulation of an aggregation-driven droplet size distribution. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 27:253–271, 2013.
63. S. Matveev, A. Smirnov, and E. Tyrtýshnikov. A fast numerical method for the cauchy problem for the Smoluchowski equation. *Journal of Computational Physics*, 282:23–32, 2015.
64. Н. Фукс. *Механика аэрозолей*. Издательство Академии наук СССР, Москва, 1955.
65. E. Tyrtýshnikov. Incomplete cross approximation in the mosaic-skeleton method. *Computing*, 64(4):367–380, 2000.
66. D. Zheltkov and E. Tyrtýshnikov. A parallel implementation of the matrix cross approximation method. *Vychislitel'nye Metody i Programirovanie*, 16:369–375, 2015.
67. P. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM journal on numerical analysis*, 21:995–1011, 1984.
68. B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. a new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, 23:276–299, 1977.
69. P. Lyra, K. Morgan, J. Peraire, and J. Peiró. TVD algorithms for the solution of the compressible euler equations on unstructured meshes. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 19:827–847, 1994.
70. B. Koren. A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, 45:117–138, 1993.
71. J. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, 114:185–200, 1994.
72. S. Matveev, D. Zheltkov, E. Tyrtýshnikov, and A. Smirnov. Tensor train versus Monte-Carlo for the multicomponent smoluchowski coagulation equation. *Journal of Computational Physics*, 316:164–179, 2016.
73. H. Hayakawa. Irreversible kinetic coagulations in the presence of a source. *Journal of Physics A*, 20:L801–L805, 1987.

74. R. Drake. *Topics in Current Aerosol Research*. Pergamon Press, New York, 1972.
75. A. Ovchinnikov, S. Timashev, and A. Belyi. *Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Processes*. Nova Science, New York, 1989.
76. K. Higashitani, R. Ogawa, G. Hosokawa, and Y. Matsuno. Kinetic theory of shear coagulation for particles in a viscous fluid. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 15:299–304, 1982.
77. Е. Домиловский, А. Лушников, and В. Пискунов. Моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло. *Доклады Академии Наук СССР*, 240:108–110, 1978.
78. E. Hendriks, M. Ernst, and R. Ziff. Coagulation equations with gelation. *Journal of Statistical Physics*, 31:519–563, 1983.
79. J. Spouge. Monte-Carlo results for random coagulation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 107:38–43, 1985.
80. P. van Dongen. On the possible occurrence of instantaneous gelation in Smoluchowski's coagulation equation. *Journal of Physics A*, 20:1889, 1987.
81. N. Brilliantov and P. Krapivsky. Nonscaling and source-induced scaling behaviour in aggregation model of movable monomers and immovable clusters. *Journal of Physics A*, 24:4789, 1991.
82. P. van Dongen and M. Ernst. Scaling solutions of Smoluchowski's coagulation equation. *Journal of Statistical Physics*, 50:295–329, 1988.
83. А. Самарский and П. Вабищевич. *Вычислительная теплопередача*. УРСС, Москва, 2003.
84. T. Purnat, N. Fietje, T. Kuchenmüller, N. Ghith, S. Umachandran, and C. Stein. *European health report 2018: more than numbers – evidence for all*. World Health Organization. Regional Office for Europe, Copenhagen, 2018.
85. Y. Huang, M. Zhu, M. Ji, J. Fan, J. Xie, X. Wei, X. Jiang, J. Xu, L. Chen, R. Yin, Y. Wang, J. Dai, G. Jin, L. Xu, Z. Hu, H. Ma, and H. Shen. Air pollution, genetic factors, and the risk of lung cancer: A prospective study in the uk biobank. *American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine*, 204(7):817–825, 2021.
86. Z. Wang, X. Shi, and X. Wei. Variation characteristics of mass concentration of inhalable particles in Qingdao, China. *Journal of Geoscience and Environment Protection*, 8:192–201, 2020.

87. J. Bennett, H. Tamura-Wicks, R. Parks, R. Burnett, C. Pope III, M. Bechle, J. Marshall, G. Danaei, and M. Ezzati. Particulate matter air pollution and national and county life expectancy loss in the USA: A spatiotemporal analysis. *PLoS medicine*, 16:e1002856, 2019.
88. В. Волощук and Ю. Седунов. *Процессы коагуляции в дисперсных системах*. Ленинград, 1975.
89. В. Волощук and Ю. Седунов. Кинетика конденсационно-коагуляционных процессов в атмосфере Земли. *Доклады Академии Наук СССР*, 235:50–52, 1977.
90. Z. Shi, K. He, X. Yu, Z. Yao, F. Yang, Y. Ma, Y. Yia, and J. Zhang. Diurnal variation of number concentration and size distribution of ultrafine particles in the urban atmosphere of beijing in winter. *Journal of Environmental Sciences*, 19:933–938, 2007.
91. Y.-L. Tseng, K.-W. Wong, C.-S. Yuan, and C. Lin. Diurnal variation of chemical characteristics and source identification of fine particles in the kaohsiung harbor. *Aerosol and Air Quality Research*, 7:220100, 2022.
92. M. Canagaratna, T. Onasch, E. Wood, S. Herndon, J. Jayne, E. Cross, R. Miake-Lye, C. Kolb, and D. Worsnop. Evolution of vehicle exhaust particles in the atmosphere. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 60:1192–1203, 2010.
93. T. Wainman, J. Zhang, C. Weschler, and P. Liroy. Ozone and limonene in indoor air: A source of submicron particle exposure. *Environmental Health Perspectives*, 108:1139, 2000.
94. P. Bonasoni, P. Cristofanelli, F. Calzolari, U. Bonafe, F. Evangelisti, A. Stohl, S. Sajani, R. van Dingenen, T. Colombo, and Y. Balkanski. Aerosol-ozone correlations during dust transport episodes. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4:1201–1215, 2004.
95. Y. Julanov, A. Lushnikov, and V. Zagaynov. Diffusion aerosol spectrometer. *Atmospheric Research*, 62:295–302, 2002.
96. A. Ankilov, A. Baklanov, M. Colhoun, K.-H. Enderle, J. Gras, Yu. Julanov, D. Kaller, A. Lindner, A. Lushnikov, R. Mavliev, F. McGovern, A. Mirme, T. O'Connor, J. Podzimek, O. Preining, G. Reischl, R. Rudolf, G. Sem, W. Szymanski, E. Tamm, A. Vrtala, P. Wagner, W. Winklmayr, and V. Zagaynov. Intercomparison of number concentration measurements by various aerosol particle counters. *Atmospheric Research*, 62:177–207, 2002.

97. V. Tsydypov, G. Zhamsueva, A. Zayakhnov, A. Dementeva, and T. Balzhanov. Measurements of aerosol particle concentrations in the atmosphere of the south-eastern coast of lake baikal (at boyarsky station) in the summer of 2020. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, volume 1023, page 012005, 2022.
98. K. Saitoh, A. Bodrova, H. Hayakawa, and N. Brilliantov. Negative normal restitution coefficient found in simulation of nanocluster. *Physical Review Letters*, 105:238001, 2010.
99. A. Tsukanov and N. Brilliantov. Collision of nanoparticles of covalently bound atoms. impact of stress-dependent adhesion. *Physical Review E*, 105:014607, 2022.
100. M. Darwish and F. Moukalled. TVD schemes for unstructured grids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46:599–611, 2003.
101. F. Denner and B. Wachem. TVD differencing on three-dimensional unstructured meshes with monotonicity-preserving correction of mesh skewness. *Journal of Computational Physics*, 298:566–479, 2015.
102. E. Sozer, C. Brehm, and C. Kiris. Gradient calculation methods on arbitrary polyhedral unstructured meshes for cell-centered CFD solvers. In *52nd Aerospace Sciences Meeting*, 2014.
103. G. Neuber, A. Kronenburg, O. Stein, and M. Cleary. MMC-LES modelling of droplet nucleation and growth in turbulent jets. *Chemical Engineering Science*, 167:204–218, 2017.
104. L. Gallen, A. Felden, E. Riber, and B. Cuenot. Lagrangian tracking of soot particles in LES of gas turbines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37:5429–5436, 2019.
105. C. Le Touze, A. Murrone, and H. Guillard. Multislope MUSCL method for general unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 284:389–418, 2015.
106. P. Saffman and N. Turner. On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1:16–30, 1956.
107. T. van de Ven and S. Mason. The microrheology of colloidal dispersions VIII. effect of shear on perikinetic doublet formation. *Colloid and Polymer Science*, 255:794–804, 1977.
108. D. Melik and H. Fogler. Effect of gravity on Brownian flocculation. *Journal of Colloid Interface Science*, 101:84–97, 1984.

109. D. Feke and W. Schowalter. The effect of Brownian diffusion on shear-induced coagulation of colloidal dispersions. *Journal of Fluid Mechanics*, 133:17–35, 1983.
110. N. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Elsevier, Amsterdam, 1992.
111. А. Тихонов and А. Самарский. *Уравнения математической физики*. Наука, Москва, 2004.
112. I. Andrianov and Shatrov A. Padé approximants, their properties, and applications to hydrodynamic problems. *Symmetry*, 13:1869, 2021.
113. C. Brezinski. *History of Continued Fractions and Padé Approximants*. Springer, Berlin, 1991.
114. C. Reed and J. Anderson. Hindered settling of a suspension at low Reynolds number. *AIChE Journal*, 26:816–827, 1980.
115. T. Davis. Algorithm 832. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 30:196–199, 2004.
116. P. Steinbach and M. Werner. gearshifft – the FFT benchmark suite for heterogeneous platforms. In *High Performance Computing*, pages 199–216, Cham, 2017. Springer International Publishing.