Автономная некоммерческая образовательная организация высшего профессионального образования «Сколковский институт науки и технологий»

На правах рукописи

Осинский Александр Игоревич

Кинетика агрегации и фрагментации в неоднородных системах

Специальность 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель: доктор физико-математических наук Бриллиантов Николай Васильевич

Оглавление

Введение			
Глава 1	. Современное состояние исследований	18	
1.1	Броуновская агрегация: диффузионно ограниченная и реакционно ограниченная	19	
1.2	Баллистическая агрегация	21	
1.3	Среднеполевое приближение: критические размерности для диффузионной и		
	баллистической агрегации	23	
1.4	Теория масштабирования	23	
1.5	Фрагментация при столкновениях		
1.6	Функция распределения скоростей для неагрегирующихся газов в пространствен-		
	но неоднородной среде	29	
	1.6.1 Метод Чепмена-Энскога	29	
	1.6.2 Метод моментов Грэда	31	
1.7	Численное решение уравнений Смолуховского	32	
Глава 2	. Обобщенные уравнения Смолуховского	36	
2.1	Уравнения Смолуховского для неоднородных систем. Общий подход	36	
2.2	Точные решения	39	
2.3	Системы без агрегации. Распределение кинетической энергии для гранулярных		
	газов и смесей гранулярного и молекулярного газов	39	
2.4	Тройные столкновения. Скорости реакции для тройных соударений при балли-		
	стическом транспорте	43	
	2.4.1 О тройных столкновениях при броуновской агрегации	47	
2.5	Немаксвелловское распределение. Вид распределения скоростей частиц в систе-		
	мах с баллистической агрегацией	47	
	2.5.1 Распределение скоростей для мономеров	51	
	2.5.2 Распределение скоростей больших кластеров	54	
Глава 3	. Уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем .	57	
3.1	Уравнения Смолуховского-Эйлера	57	
3.2	Описание кода для пошагового вывода ядер		
3.3	Решение для агрегации падающих частиц		
3.4	Уравнения Смолуховского-Навье-Стокса. Вывод транспортных коэффициентов	68	
3.5	Задача сдвигового течения	71	
	3.5.1 Численное решение для вязкости	73	

3.6	Уравнения для смеси гранулярного и молекулярного газа	75		
Глава 4	. Распределения осколков при фрагментации	77		
4.1	Описание моделей	77		
4.2	Численный алгоритм			
4.3	Результаты			
	4.3.1 Качественный анализ распределения скоростей	81		
	4.3.2 Распределение скоростей и масс осколков	82		
	4.3.3 Угловое распределение осколков	83		
	4.3.4 Зависимость распределения от скорости столкновения	83		
	4.3.5 Построение функции фрагментации	87		
4.4	Наблюдаемые типы столкновений	88		
	4.4.1 Слипание и отскок в модели JKR	88		
	4.4.2 Другие виды поведения	89		
4.5	Уравнения Смолуховского-Эйлера с фрагментацией	94		
	4.5.1 Быстрое решение уравнений с фрагментацией	100		
Глава 5.	. Численные методы решения обобщенных уравнений Смолуховского	102		
5.1	Быстрые алгоритмы метода Монте-Карло	102		
	5.1.1 Структура методов Монте-Карло	102		
	5.1.2 Малоранговый Монте-Карло метод	103		
	5.1.3 Моделирование температурно-зависимой агрегации	109		
	5.1.4 Прямое моделирование методом Монте-Карло (DSMC)	115		
5.2	Быстрые алгоритмы решения систем ОДУ	119		
	5.2.1 Дополнительное ускорение метода	123		
	5.2.2 Улучшение точности метода	126		
	5.2.3 Параллельные свойства	128		
5.3	Сравнение теоретических предсказаний и численных решений для температурно-			
	зависимой агрегации	128		
	5.3.1 Теоретический анализ различных режимов эволюции	132		
	5.3.2 Фазовая диаграмма	137		
	5.3.3 Поведение при сильной диссипации	138		
Заключ	тение	142		
Список сокращений и условных обозначений				
Список литературы				

Приложение А	Температурно-зависимая модель и параметры	157
Приложение В	Анализ распределения температур при отсутствии агрегации	158
Приложение С листиче	Наилучшее приближение для распределения скоростей при бал- еской агрегации	161
Приложение D	Интегралы в коэффициентах уравнений Смолуховского-Эйлера	163
Приложение Е	Малоранговая аппроксимация ядер агрегации	168

Введение

Актуальность

Адекватное моделирование агрегации и фрагментации необходимо для описания широкого класса явлений, включая природные и производственные процессы. Особый интерес представляют указанные процессы, отвечающие баллистическому механизму переноса частиц. Среди природных явлений можно упомянуть атмосферные явления агрегации загрязняющих воздух частиц, образование дождевых капель, формирование протопланет, планетных колец и другие. Производственные процессы, связанные с напылением на подложку новой фазы, с использованием струйных мельниц, для получения ультрадисперсных продуктов сухим способом, также основаны на баллистической агрегации и фрагментации частиц.

Теоретической основой описания указанных процессов являются классические уравнения Смолуховского, для решения которых был развит обширный арсенал численных методов. Тем не менее моделирование баллистической агрегации и фрагментации связано с целым рядом сложностей. Это связано, во-первых, с отсутствием строго полученных уравнений Смолуховского для указанных процессов, включая уравнения для пространственно-неоднородных систем. Во-вторых, отсутствием эффективных численных методов решения таких уравнений. Существующие подходы для описания баллистической агрегации и фрагментации основаны на феноменологическом обобщении классических уравнений Смолуховского. Кинетические коэффициенты в этих уравнениях, как правило, представляют собой феноменологические или модельные соотношения, не отражающие микроскопические механизмы изучаемых процессов.

Уравнения Смолуховского представляют собой бесконечную систему дифференциальных уравнений, что, само по себе, существенно усложняет численное решение последних. Несмотря на то, что к настоящему времени были разработаны быстрые малоранговые методы для решения классических уравнений Смолуховского, они не могут быть непосредственно применены к новым моделям, где матрицы кинетических коэффициентов имеют более сложный вид и зависят от времени. Поэтому необходимо обобщение малорангового подхода для задач, отвечающих обобщенным уравнениям Смолуховского. Последнее относится и к моделированию методами Монте-Карло, применение которых к полидисперсным (многокомпонентным) системам сопряжено с высокими вычислительными затратами. Потребность в более эффективных методах моделирования особенно важна в системах, для которых нельзя аналитически вывести соответствующие им уравнения Смолуховского. Следовательно, актуальным является рассмотрение возможности применения малоранговой аппроксимации для ускорения численных экспериментов на основе методов Монте-Карло.

Таким образом, микроскопический вывод и анализ обобщенных уравнений Смолуховского, описывающих агрегацию и фрагментацию частиц и учитывающих пространственную неодно-

родность системы, а также разработка эффективных численных методов для их решения представляет собой важную и актуальную научную проблему.

Постановка проблемы

Уравнения Смолуховского широко используются для моделирования многочисленных агрегационных процессов на различных пространственных и временных масштабах, начиная с молекулярного уровня и заканчивая масштабами астрофизических систем [1, 2]. В общем случае, они записываются следующим образом:

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$

где *n_k* – это концентрации кластеров, состоящих из *k* частиц (мономеров). Таким образом, уравнения Смолуховского описывают эволюцию указанных концентраций.

Две наиболее часто используемые модели уравнений Смолуховского отвечают броуновской и баллистической агрегации. Первая описывает скорость агрегации в случае, когда кластеры испытывают броуновское движение в нейтральной среде. Вторая предполагает баллистические траектории частиц и их взаимодействие на малых расстояниях; в настоящей работе рассматривается второй случай. Основной класс природных объектов, в которых происходит баллистическая агрегация – это гранулярные газы. Гранулярные газы представляют собой разреженные системы (с объемной долей твердой фазы менее 20%), в которых частицы двигаются свободно между соударениями, и сталкиваются с потерей кинетической энергии. Типичный размер частиц в гранулярных газах варьируется от нанометров (частицы сажи), до нескольких метров (ледяные частицы в кольцах Сатурна). Диссипация энергии при столкновениях характеризуется коэффициентом восстановления ε , определенным как отношение

$$\varepsilon = \frac{\left| \left(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e} \right) \right|}{\left| \left(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e} \right) \right|}.$$
(1)

Здесь \vec{v}_{12} и \vec{v}'_{12} – относительные скорости двух частиц до и после удара, \vec{e} – единичный вектор между центрами частиц в момент соударения. Примерами агрегации в гранулярных газах могут служить агрегация сажи в атмосферных процессах [3, 4], пыли в протопланетных дисках [5], частиц в планетарных кольцах, типа колец Сатурна [6]. Ядро баллистической агрегации C_{ij} может быть записано как

$$C_{ij} = 2\sqrt{2\pi} \left(R_i + R_j\right)^2 \sqrt{\frac{T}{m_i} + \frac{T}{m_j}}$$

где R_i и R_j – это (эффективные) радиусы сталкивающихся частиц, m_i и m_j – их массы, а $T = \left\langle \frac{m\vec{v}^2}{3} \right\rangle$ – кинетическая температура, задаваемая средней кинетической энергией кластеров.

К сожалению, классические уравнения Смолуховского далеко не всегда применимы для описания баллистической агрегации. Например, для систем, в которых температуры частиц разного размера различны, или для пространственно неоднородных систем для которых изменение частот столкновений C_{ij} из-за неоднородности не учитывалось. У стандартного ядра баллистической агрегации есть и другие недостатки.

Во-первых, оно предполагает, что температуры (средние кинетические энергии) частиц задаются внешне. В результате такая модель в принципе игнорирует потери кинетической энергии в агрегационных столкновениях и в неупругих столкновениях кластеров. Более того, она предполагает температурное равновесие, что, в частности, означает равенство температур кластеров различного размера. С другой стороны, само существование процесса агрегации уже означает, что система не находится в равновесии, что может существенно повлиять на (парциальные) температуры, даже когда вероятность агрегации невелика. Агрегация влияет не только на кинетические температуры, но также и на коэффициенты переноса – вязкость и теплопроводность, причем по-разному для кластеров разного размера.

Во-вторых, баллистическое ядро предполагает, что как только столкновение произошло, вероятность агрегации уже не зависит от размеров столкнувшихся кластеров. Это, очевидно, не всегда справедливо, так как большие, медленно движущиеся кластеры, объединятся после столкновения с гораздо большей вероятностью, чем небольшие и быстро движущиеся кластеры. В последнем случае чаще происходят столкновения с отскоком.

Наконец, баллистическое ядро выведено на основе предположения о максвелловском распределении скоростей для каждого размера частиц. Такое предположение может быть далеко от реальности, так как изучаются системы, не находящиеся в равновесии. К настоящему времени данное предположение не проверялось. Однако, наши численные эксперименты показали, что разница между реальным и максвелловским распределением невелика.

Для приложений также крайне важно обладать эффективными численными методами решения уравнений Смолуховского. Стандартные методы конечных разностей и конечных объемов имеют квадратичную сложность на каждом шаге по времени, с точки зрения числа уравнений. Так как общее число уравнений может достигать миллионов, применимость данных методов сильно ограничена. Для решения этой проблемы в последние годы были разработаны малоранговые методы, применимые для классических уравнений Смолуховского. Тем не менее, их нельзя использовать напрямую для случая, когда частота столкновений изменяется с течением времени, что вызвано, в частности, изменением парциальных температур в обобщенных уравнениях Смолуховского.

Схожая проблема возникает для методов Монте-Карло. В современной литературе [7, 8, 9, 10] используются методы, которые позволяют проводить симуляции для порядка 10000 частиц, что не всегда является достаточным. Еще более сложным оказывается решение температурно-

зависимых уравнений Смолуховского. Современные методы моделирования агрегации не решают проблему высокой вычислительной стоимости выбора пар сталкивающихся частиц, в то время как это всегда самая затратная часть всего алгоритма.

Наличие процесса фрагментации заметно усложняет проблему. Крайне редко можно встретить исследования, посвященные распределению масс и скоростей осколков. Данная проблема рассматривалась лишь в нескольких работах [11, 12], при этом случай столкновения сферических кластеров был рассмотрен только для потенциала Леннарда-Джонса. Естественно, результаты могут существенно отличаться для более реалистичных потенциалов и сил взаимодействия, в частности, для силы Джонсона-Кендалла-Робертса, которая описывает соударение частиц с адгезией.

Цель и задачи исследования

Диссертация преследует следующие цели:

- Вывод обобщенных уравнений Смолуховского, а именно Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса на основе микроскопических моделей столкновений частиц для адекватного описания пространственно-неоднородных систем;
- Аналитический и численный анализ полученных уравнений, в том числе с использованием скейлингового подхода и точных решений для модельных кинетических коэффициентов;
- Построение эффективных численных методов для решения больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений, отвечающих полученным обобщенным уравнениям Смолуховского, и соответствующих методов Монте-Карло.

Далее мы обсудим эти цели более подробно.

Первая задача – это вывод новой модели баллистической агрегации, свободной от недостатков классического подхода в рамках Смолуховского. Это необходимо сделать, используя основополагающие физические принципы, а именно на основе микроскопического (мезоскопического) уравнения Больцмана.

Уравнения Больцмана для многокомпонентных агрегирующих систем записываются следующим образом [13] (ниже мы приводим уравнение с градиентным членом, который отсутствовал в [13]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_k\left(\vec{v}_k\right) + \vec{v}_k \vec{\nabla} f_k\left(\vec{v}_k\right) &= \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} I_{\text{agg},1}\left(m_i, f_i\left(\vec{v}_i\right), m_j, f_j\left(\vec{v}_j\right)\right) \\ &- \sum_j I_{\text{agg},2}\left(m_k, f_k\left(\vec{v}_k\right), m_j, f_j\left(\vec{v}_j\right)\right) - \sum_j I_{\text{res}}\left(m_k, f_k\left(\vec{v}_k\right), m_j, f_j\left(\vec{v}_j\right)\right). \end{aligned}$$

где $I_{\text{agg},1/2}$ и I_{res} – это интегралы столкновений Больцмана, которые содержат в явном виде интегрирование по всем возможным скоростям \vec{v}_i , \vec{v}_j , всем возможным направлениям столкновений, и напрямую учитывают механизм взаимодействия сталкивающихся частиц. Они описывают, соответственно, изменение функций распределения скоростей $f_k(\vec{v}_k)$ в агрегационных столкновениях и столкновениях с отскоком (реституционных).

В случае, когда все столкновения агрегационные, система пространственно однородна, все функции распределения скоростей являются максвелловскими с равными, постоянными температурами, интегрирование уравнений Больцмана по скоростям частиц приводит к стандартным уравнениям Смолуховского с баллистическим ядром.

Отметим, что ни одно из вышеперечисленных предположений не является необходимым для вывода уравнений Смолуховского. Более того, возможно построение моделей, где часть или все вышеперечисленные предположения не выполняются, что позволяет, тем не менее, получить замкнутую систему уравнений; такие уравнения будут в явном виде описывать эволюцию всех дополнительных параметров. Последнее кардинально отличается от стандартных подходов, где дополнительные параметры приходится подбирать в зависимости от модели.

Таким образом, первой задачей является обобщение уравнений Смолуховского на основе уравнений Больцмана.

Далее, необходимо разработать эффективные методы решения обобщенных уравнений Смолуховского. Они должны включать в себя не только методы решения больших систем ОДУ, но также и соответствующие им методы Монте-Карло. В частности, до сих пор не было предложено эффективных методов моделирования уравнений Больцмана для многокомпонентных систем. Как утверждается в [14], моделирование полидисперсных систем даже в отсутствии агрегации в настоящее время практически невозможно. Это препятствует исследованию не только агрегации, но и кинетики полидисперсных газов в целом. Таким образом, второй задачей является разработка эффективных алгоритмов для моделирования кинетики агрегации полидисперсных гранулярных газов.

Третьей задачей является проверка точности численных методов, что может быть сделано путем сравнения численных методов и аналитических решений для специальных ядер (частот столкновений). Кроме того, целесообразно воспользоваться теорией масштабирования, которая позволяет предсказывать общую скорость агрегации и форму распределения частиц по размерам для классических уравнений Смолуховского.

Наконец, как уже было упомянуто, на данный момент не существует адекватных моделей фрагментации, обусловленной столкновением частиц. Данных для построения таких моделей в настоящее время недостаточно. Они могут быть получены из моделирования на основе молекулярной динамики. Затем, эти данные могут быть использованы для построения соответствующих ядер фрагментации в обобщенных уравнениях Смолуховского.

Степень разработанности проблемы

В последнее время был достигнут определенный прогресс в обобщении баллистических уравнений Смолуховского. А именно, в [13] была построена новая температурно-зависимая модель, которая позволяет учесть изменения парциальных температур. Тем не менее, численных экспериментов было недостаточно, чтобы обосновать или опровергнуть гипотезы о поведении данной системы.

С точки зрения численных решений, в [15] был достигнут существенный прогресс путем построения схемы на основе конечных объемов с неравномерной сеткой. К сожалению, она существенно увеличивает погрешность аппроксимации и не решает проблему квадратичной сложности.

Существенное улучшение в этом направлении было сделано в [16], где была использована малоранговая аппроксимация ядра столкновений в уравнениях Смолуховского. Она позволила снизить сложность шага по времени с $O(N^2)$ до $O(Nr \log N)$, где N – размер системы уравнений, а r – ранг аппроксимации. Тем не менее построение аппроксимации более сложных матриц может вызвать трудности, более того, в случае обобщенных уравнений Смолуховского аппроксимацию потребуется делать на каждом шаге.

Что касается методов Монте-Карло, существует множество модификаций [17, 18, 19], большинство из которых представляют собой обобщения стандартных методов. В то же время, новые методы, даже те, что специально создаются для улучшения производительности, не дают преимущества с точки зрения процесса выбора пары сталкивающихся частиц, что является наиболее затратной частью алгоритма. Вместо этого, много исследований было посвящено использованию параллельных вычислений [10, 19, 20] или применения взвешенных фиктивных частиц [21], что, как ни удивительно, позволяет повысить точность моделирования.

Исследования фрагментации в основном рассматривают столкновения частиц со стенкой или кластеры специальной формы [22, 23], которые не представляют интереса с точки зрения уравнений Смолуховского. Как упоминалось ранее, существует недостаточное количество исследований распределения массы при столкновениях сферических кластеров [11].

Также важно упомянуть один из наиболее часто используемых аналитических методов, который называется гипотезой масштабирования (скейлинговой теорией). Неформально, она утверждает, что для широкого класса возможных ядер (частот) агрегации решение сходится к некоторой определенной форме, которая затем лишь масштабируется с течением времени. Важно то, что некоторые свойства этого скейлингового распределения, так же как и эволюция моментов распределения концентраций, могут быть предсказаны заранее. Теория масштабирования и её следствия хорошо описаны в [1].

Описание методологии исследования

Вывод адекватных уравнений Смолуховского из уравнений Больцмана предполагает использование адекватной модели агрегации. А именно, важно определить вероятность агрегации для каждой пары сталкивающихся частиц; то есть необходимо наличие условия агрегации. Условие, используемое в диссертации, было получено для гранулярных газов в [13, 24]. В нем предполагается, что вероятность агрегации зависит от соотношения между относительной кинетической энергией пары частиц и потенциального барьера W_{ij} между ними. Во многих важных случаях, включая диполь-дипольное и адгезионное взаимодействие, энергию потенциального барьера можно записать как

$$W_{ij} = a \left(\frac{R_i R_j}{R_i + R_j} \right)^{\Lambda},$$

где a и Λ – это параметры, зависящие от конкретного вида потенциала, а R_i и R_j – радиусы сталкивающихся частиц. Условие агрегации, заключающееся в том, что относительная кинетическая энергия не превышает энергии данного барьера, может быть использовано в интеграле столкновений Больцмана. Таким образом можно учесть различие в вероятности агрегации для частиц с различными размерами и скоростями.

Для учета пространственных неоднородностей, достаточно при интегрировании уравнений Больцмана оставить слагаемые, содержащие градиенты гидродинамических полей. Кроме того, в общем случае следует учесть, что средние скорости $\langle \vec{v}_k \rangle = \vec{u}_k$ и парциальные температуры $T_k = \left\langle \frac{m_k |\vec{v}_k - \vec{u}_k|^2}{3} \right\rangle$ могут отличаться для разных размеров *k*. Это существенно усложняет вывод, но наиболее технически сложные шаги могут быть выполнены автоматически, с использованием таких программ, как Octave или Wolfram Mathematica.

Чтобы учесть вязкость и теплопроводность, можно воспользоваться подходом Чепмена-Энскога. Он основан на учете в функции распределения скоростей слагаемых, содержащих градиенты потоков и температур. Для однокомпонентной системы подобный подход дает следующее выражение для $f(\vec{v})$:

$$f\left(\vec{v}\right) = \frac{n}{\left(2\pi T/m\right)^{3/2}} e^{-\frac{m|\vec{v}-\vec{u}|^2}{2T}} \left(1 + \eta\hat{\gamma}: \vec{\nabla}\vec{u} + \kappa\vec{\beta}\cdot\vec{\nabla}T\right),$$

где η – это вязкость, κ – теплопроводность, и компоненты тензора $\hat{\gamma}$ и вектора $\vec{\beta}$ являются компонентами полиномов небольшой степени от \vec{v} .

Значения *η* и *к* определяются подстановкой возмущенного распределения в уравнение Больцмана и сравнением слагаемых, линейно зависящих от градиентов. Используя схожую методику для многокомпонентных систем с агрегацией позволяет вывести уравнения для парциальных вязкостей и теплопроводностей.

Если требуется оценить, насколько агрегация влияет на распределение скоростей, можно

воспользоваться разложением функции распределения по полиномам Сонина:

$$f(\vec{v}) = \frac{n}{(2\pi T/m)^{3/2}} e^{-\frac{m|\vec{v}-\vec{u}|^2}{2T}} \left(1 + \sum_{k=2}^{\infty} \alpha_k S_k \left(\frac{m|\vec{v}-\vec{u}|^2}{2T} \right) \right).$$

Здесь S_k – это многочлен Сонина степени k. Данное выражение также может быть подставлено в уравнение Больцмана для получения уравнений для коэффициентов разложения α_k . Явные выражения для $\hat{\gamma}$, $\vec{\beta}$ и α_k будут приведены ниже.

Для быстрого и точного решения обобщенных уравнений Смолуховского можно адаптировать малоранговые методы для классических уравнений Смолуховского. При этом, для построения новой аппроксимации на каждом шаге по времени (что требуется в случае изменения парциальных температур) можно воспользоваться быстрыми алгоритмами крестовой аппроксимации, такими как maxvol [25].

Чтобы получить необходимые данные по фрагментационным столкновениям, можно воспользоваться пакетом LAMMPS для молекулярной динамики. После нахождения распределений масс и кинетических энергий осколков для различных скоростей соударения и их приближения аналитическими выражениями, становится возможным их использование в уравнениях Больцмана, что позволяет вывести уравнения Смолуховского с фрагментацией.

Проверка результатов, полученных с помощью новых методов и уравнений может быть проведена путем сравнения результатов решения температурно-зависимых ОДУ, прямого Монте-Карло моделирования и теории масштабирования.

В заключение отметим, что основные цели исследования были достигнуты путем решения следующих конкретных задач:

- Использование быстрой малоранговой аппроксимации для решения обобщенных уравнений Смолуховского с ядрами коэффициентов, зависящих от времени;
- Ускорение методов моделирования Монте-Карло, путем использования малоранговых мажорирующих ядер;
- Автоматическое вычисление интегралов столкновения Больцмана для получения аналитических выражений для правых частей обобщенных уравнений Смолуховского;
- Получение точных аналитических решений обобщенных уравнений Смолуховского для модельных кинетических коэффициентов;
- Построение скейлинговой теории, позволяющей качественно предсказывать поведение решений на больших временах и ее сравнение с данными численных экспериментов;
- Вывод функций распределений температур и скоростей в гранулярных газах и их подтверждение с помощью прямого моделирования Монте-Карло;

• Проведение численных экспериментов моделирования фрагментационных столкновений с использованием методов молекулярной динамики для получения кинетических коэффициентов в обобщенных уравнениях Смолуховского, описывающих дробление частиц.

Основные результаты, выносимые на защиту

- Написан код на языке символьного программирования Wolfram Mathematica, позволяющий автоматически получать аналитические соотношения для интегралов столкновений Больцмана. На его основе найдены микроскопические выражения для кинетических коэффициентов в обобщенных уравнениях Смолуховского, включая уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, отвечающие баллистической агрегации и фрагментации частиц. Также получены соотношения для коэффициентов вязкости и теплопроводности, и коэффициенты разложения функции распределения скоростей агрегатов по полиномам Сонина;
- Разработан метод решения температурно-зависимых уравнений Смолуховского, обобщающий метод малорангового решения классических уравнений. Показано, как можно увеличить точность малоранговой аппроксимации и использовать адаптивный шаг по времени. Новый способ ускоряет решение обобщенных температурно-зависимых уравнений Смолуховского примерно в 60 раз;
- Построены малоранговые методы Монте-Карло для решения классических и температурно-зависимых уравнений Смолуховского, и уравнений Больцмана. Использование малорангового мажоранта приводит к ускорению в 7 и более раз по сравнению со стандартными методами Монте-Карло.
- Разработана скейлинговая теория кинетики агрегации, предсказывающая режимы и скорость агрегации в зависимости от параметров системы. Показано, как на основе показателей однородности ядра столкновений и вероятности агрегации можно определить на больших временах функцию распределения концентраций и температур агрегатов;
- С использованием новых численных методов установлен ряд новых режимов агрегации автомодельного роста температур и разделения распределения концентраций на большие и малые кластеры. Подтверждены предсказания скейлинговой теории и доказано отсутствие режима гелеобразования для баллистической агрегации;
- Проведено прямое моделирование методом Монте-Карло уравнения Больцмана для агрегирующих систем. Установлено незначительное отличие функции распределения скоростей частиц от Максвелловского распределения. Теоретически описано отклонение фактического распределения скоростей частиц от Максвелловского с использованием поли-

номов Сонина; показано хорошее согласие теории с результатами численного моделирования;

 Методом молекулярной динамики проведены численные эксперименты по столкновению агрегатов с различным потенциалом взаимодействия частиц в кластерах. Эксперименты показали полиномиальную зависимость размеров и кинетических энергий осколков от их массы, а также экспоненциальную зависимость числа осколков, состоящих из нескольких мономеров, от скорости столкновения.

Научная новизна

Научная новизна диссертации заключается в следующем.

- Впервые из базовых физических принципов выведены обобщенные уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем – уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса и проведен их аналитический и численный анализ. Вывод ядер для этих и более сложных уравнений выполняется автоматически, с использованием программы символьных вычислений.
- Впервые получено прямое численное решение обобщенных уравнений Смолуховского и разработана скейлинговая теория, предсказывающая вид решения на больших временах.
- Впервые предложен малоранговый метод решения обобщенных уравнений Смолуховского.
- Впервые малоранговый метод был успешно использован для ускорения моделирования гранулярных газов методом Монте-Карло. Получено существенное ускорение численных методов решения уравнений Смолуховского и моделирования методом Монте-Карло гранулярных газов.
- Впервые получены точные решения температурно-зависимых уравнений Смолуховского для целого ряда модельных кинетических коэффициентов.
- Благодаря высокой скорости новых методов, впервые удалось проанализировать распределение скоростей и температур частиц в агрегирующих гранулярных газах и распределение температур в полидисперсных неагрегирущих гранулярных газах.

Теоретическое и практическое значение

Ценность полученных результатов определяется тем, что в диссертации решаются актуальные проблемы моделирования баллистической агрегации и фрагментации. Полученные результаты позволяют учитывать пространственную неоднородность системы, включая неоднородность распределения температур, скоростей потоков агрегирующих частиц и их изменение в процессе фрагментации, а также влияние размеров частиц на вероятность агрегации, вклад в кинетику агрегации тройных столкновений.

Полученные результаты могут быть использованы для моделирования целого ряда атмосферных явлений, таких как агрегация и распространение твердых частиц, загрязняющих воздух, агрегация водяных капель в облаках и во время дождя, где важную роль играет неоднородность распределения скоростей и размеров по вертикали. Обобщенные уравнения Смолуховского могут быть также использованы для построения более точных моделей формирования планетных колец и протопланет, где существенное влияние на агрегацию частиц оказывает неоднородность распределения температур в протопланетном диске. Наконец, результаты работы могут найти применение в моделировании струйных мельниц, используемых для получения ультрадисперсных продуктов, и многих других природных и производственных процессов.

Достоверность и апробация результатов

Достоверность результатов подтверждается использования широкого спектра дополняющих друг друга аналитических и численных методов. Теоретические выводы подтверждаются как прямым численным решением обобщенных уравнений Смолуховского, так и моделированием агрегирующих систем методами Монте-Карло. Положения и выводы, сформулированные в диссертации, получили квалифицированную апробацию на международных научных конференциях. Достоверность также подтверждается публикацией результатов исследований в рецензируемых научных журналах.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 6 работ, из них 6 в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, в том числе 6 публикаций в изданиях, включенных в международные системы цитирования WoS и/или Scopus:

 Osinsky A.I., Bodrova A.S., Brilliantov N.V. Size-polydisperse dust in molecular gas: Energy equipartition versus nonequipartition // Physical Review E. — 2020. — Vol. 101, no. 2. — P. 022903.
 DOI: 10.1103/PhysRevE.101.022903 Импакт-фактор 2.353 Q1

2. Bodrova A.S., Osinsky A.I., Brilliantov N.V. Temperature distribution in driven granular mixtures does not depend on mechanism of energy dissipation // Scientific Reports. — 2020. — Vol. 10, no. 1.
— P. 693. DOI: 10.1038/s41598-020-57420-0 Импакт-фактор 4.011 Q1

3. Osinsky A.I. Low-rank method for fast solution of generalized Smoluchowski equations // Journal of Computational Physics. — 2020. — Vol. 422. — P. 109764. DOI: 10.1016/j.jcp.2020.109764 Импакт-фактор 2.985 Q1

4. Brilliantov N.V., Osinsky A.I., Krapivsky P.L. Role of energy in ballistic agglomeration // Physical Review E. — 2020. — Vol. 102, no. 4. — P. 042909. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.042909 Импакт-фактор 2.353 Q1

15

5. Osinsky A.I., Brilliantov N.V. Anomalous aggregation regimes of temperature-dependent Smoluchowski equations // Physical Review E. — 2022. — Vol. 105, no. 3. — P. 034119. DOI: 10.1103/Phys-RevE.105.034119 Импакт-фактор 3.343 Q1

6. Osinsky A.I., Brilliantov N.V. Scaling laws in fragmentation kinetics // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2022. — Vol. 603. — Р. 127785. Импакт фактор 3,263 Q1

Личный вклад соискателя в работах с соавторами заключается в следующем:

- 1. Публикация 1. Значительная часть численных экспериментов и систематизации полученных данных, вывод части теории, построение и описание алгоритмов были выполнены соискателем. Соискателем был получен строгий вывод вида распределения температур для различных типов притока энергии и достаточные для этого условия. Были проведены все Монте-Карло симуляции, получен и описан эффективный алгоритм для них.
- 2. Публикация 2. Значительная часть численных экспериментов и систематизация полученных данных, теоретические выводы, построение и описание алгоритмов были выполнены соискателем. Соискателем был получен строгий вывод вида распределения парциальных температур гранулярного газа в присутствии молекулярного газа и достаточные для этого условия. Были проведены все Монте-Карло симуляции, получен и описан эффективный алгоритм для них.
- 3. Публикация 4. Численные эксперименты, систематизация полученных данных, вывод части теории, построение и описание алгоритмов были выполнены соискателем. Соискателем было получено выражение для сходимости решения температурно-зависимых уравнений Смолуховского, получен вид распределения концентраций по размерам, зависимость общей концентрации и температуры от времени в 2D и 3D, зависимость числа мономеров от времени и получены аналитические аппроксимации для всего вышеперечисленного.
- 4. Публикация 5. Численные эксперименты, систематизация полученных данных, вывод большей части теории, построение и описание алгоритмов были выполнены соискателем. Соискателем были получены распределения концентраций и температур и их эволюция во времени, выведены параметры автомодельных решений и границы областей фазовой диаграммы. Был выведен и применен малоранговый метод Монте-Карло для температурнозависимых уравнений Смолуховского.
- 5. Публикация 6. Численные эксперименты, систематизация полученных данных, описание алгоритма были выполнены соискателем. Соискателем были получены распределения масс осколков и их кинетических энергий, получено угловое распределение фрагментов, предложен способ разделения типов столкновений, обнаружен скейлинг для числа «немономеров» и потерь кинетической энергии.

Результаты работы были представлены на ведущих российских и международных конференциях, в том числе: 1. Osinsky A.I. Low-rank based ODE and Monte-Carlo methods for temperature dependent aggregation // The 5th International Conference on Matrix Methods in Mathematics and applications (MMMA 2019). — August 2019.

2. Brilliantov N.V., Osinsky A.I., Formella A., Pöschel T. Temperature-dependent Smoluchowski equations (poster) // 33rd M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics. — December 2020.

3. Osinsky A.I., Brilliantov N.V. Numerical solution of temperature-dependent Smoluchowski equations (poster) // 33rd M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics. — December 2020.

Структура и объем диссертации

Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и пяти приложений. Полный объём работы составляет 171 страницу. Работа включает 37 рисунков и 12 таблиц. Список литературы содержит 129 наименований.

Благодарности

Автор выражает признательность за ценные обсуждения с С. Матвеевым и Н. Бриллиантовым. Суперкомпьютер Zhores Сколковского института науки и технологий [26] использовался для моделирования молекулярной динамики.

Глава 1. Современное состояние исследований

Уравнения Смолуховского широко используются для моделирования многочисленных процессов агрегации в различных пространственных и временных масштабах, начиная от молекулярных [27, 28, 29, 30] и заканчивая планетарными и астрофизическими масштабами [6, 13, 31, 32, 33, 34, 35]. Агрегация может иметь место в социальных сетях, где агрегирующие объекты могут иметь очень разную природу, см., например, [36, 37, 38]. Другим ярким примером агрегирующих систем являются гранулированные газы. Агрегирующие гранулированные газы, как астрофизический объект, интенсивно изучаются в контексте межзвездной пыли, формирования протопланетных дисков и пленетезималей, планетарных колец и т.д. [6, 24, 33, 34, 35, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46]. Промышленное применение уравнений Смолуховского включает доставку лекарственных средств [47], очистку сточных вод [48] и сборку нанополимеров [27, 29, 49, 50].

Классические уравнения коагуляции Смолуховского представляют собой бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), которые описывают произвольную систему агрегирующих частиц. Впервые они были получены Смолуховским [51]. Уравнения Смолуховского также были изучены в непрерывной форме Мюллером [52]. В дискретной форме они записываются следующим образом

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j, \quad k = \overline{1,\infty},$$
(2)

где *i* задает размер частиц, а n_i – соответствующую плотность числа частиц (концентрацию). C_{ij} – это ядро коагуляции, которое определяется числом агрегационных соударений между частицами размера *i* и *j*. Первый член в правой части приведенного выше уравнения описывает процесс, когда частицы размера *i* и *j* сливаются, образуя частицу размера *k*, тем самым увеличивая количество таких частиц (коэффициент 1/2 исключает двойной подсчет). Второй член в этом уравнении описывает агрегацию частиц размера *k* с любыми другими частицами, что уменьшает количество частиц размера *k*.

Уравнения Смолуховского образуют бесконечную систему нелинейных уравнений, что препятствует нахождению аналитического решения и значительно увеличивает сложность любого анализа. Однако есть несколько особых случаев точно решенных моделей. Первый – это случай постоянного ядра $C_{ij} = 1$, решенный Смолуховским [53]. Другими моделями, для которых известно точное решение, являются:

- 1. Ядро суммы $C_{ij} = i + j$, решенное в [54, 55].
- 2. Ядро произведения $C_{ij} = ij$ [56, 57].
- 3. Конечные версии вышеуказанных ядер (заданные конечными системами дифференциальных уравнений с максимальным размером частиц *N*) [58].

- 4. Билинейное ядро $C_{ij} = A + B(i + j) + Cij$ [59, 60].
- 5. Ядро с зависимостью от четности [61, 62]:

$$C_{ij} = \begin{cases} A, & i \text{ и } j \text{ оба нечетные,} \\ B, & i \text{ и } j \text{ оба четные,} \\ C, & i \text{ и } j \text{ разной четности.} \end{cases}$$

6. Ядро «*q*-суммы» $C_{ij} = 2 - q^i - q^j, q < 1$ [63].

Существуют также точно решенные модели для постоянного ядра в системах с фрагментацией [34] и для случая, когда перемещаются только мономеры, а все остальные кластеры неподвижны [64]. С точки зрения теоретических результатов, например, проблем существования и единственности решений задачи Коши, первые общие результаты были получены Мельзаком [65, 66, 67, 68], а затем расширены Галкиным [69]. Эти результаты касаются только ядер без геляции (определение который мы дадим позже), т.е. ядер вида $C_{ij} \leq C(1+i+j)$. Ядра, которые растут быстрее, гораздо труднее поддаются решению. Хотя существуют некоторые результаты, где рассмотрены вопросы существования и единственности решения для таких ядер [70], единой теории до сих пор нет. Существуют также результаты, которые доказывают сходимость процессов стохастической агрегации к решению, полученному из уравнений Смолуховского [70].

Другим весьма продуктивным качественным подходом является теория масштабирования [1], которая была разработана Фридландером [3, 71, 72], а также Эрнстом и ван Донгеном [73, 74]. Основная гипотеза теории масштабирования состоит в том, что решение слабо сходится к автомодельному виду

$$n_k(t) = \frac{1}{s^2(t)} \Phi\left(k/s(t)\right),$$

таким образом, динамическая задача агрегации превращается в стационарную, поскольку функция масштабирования $\Phi(x)$ не зависит от времени.

Ниже приводится краткий обзор современных аналитических и численных подходов решения задач кинетики агрегации и фрагментации. В их контексте рассматриваются основные цели настоящего исследования.

1.1. Броуновская агрегация: диффузионно ограниченная и реакционно ограниченная

Одна из основных агрегационных моделей [1, 2] задается броуновским ядром вида

$$C_{ij} = 4\pi \left(D_i + D_j \right) \left(R_i + R_j \right), \tag{3}$$

которое определяет скорость агрегации частиц с радиусами R_i и R_j , которые диффундируют с коэффициентами диффузии D_i и D_j .

Соотношение (3) можно вывести следующим образом. Предположим сначала, что существует сферическая ловушка радиуса R, которая адсорбирует точечные частицы с концентрацией n(r). Пусть адсорбция происходит в тонком пограничном слое шириной $l, l \ll R$. Предположим, что частица адсорбируется с вероятностью $P = e^{-t/\tau}$, где τ - среднее время адсорбции, а t - время, проведенное в пограничном слое. Если точечные частицы диффундируют с коэффициентом диффузии D, то

$$\dot{n} = D\Delta n.$$

Рассмотрим стационарный поток и предположим, что адсорбция необратима. Тогда

$$D\Delta n = 0$$

и решение для n(r) записывается как

$$n(r) = n(\infty) - (n(R) - n(\infty))(R/r),$$

где $n(\infty) = \lim n(r)$ задает концентрацию на бесконечности.

Так как полный диффузионный поток $4\pi DR$ ($n(\infty) - n(R)$) должен совпадать со скоростью адсорбции в пограничном слое $4\pi lR^2 n(R)/\tau$, то мы получаем, что

$$n(R) = n(\infty) / (1 + Rl/(D\tau))$$

И

$$n(r) = n(\infty) \left(1 - \frac{R/r}{1 + D\tau/(Rl)} \right)$$

Тогда общая скорость адсорбции равна

$$I = 4\pi DRn(\infty) / (1 + D\tau / (Rl)).$$

Если теперь ловушка имеет радиус R_i , а частицы не являются точечными, но имеют радиус R_j , то их центры масс не могут приблизиться ближе, чем на $R = R_i + R_j$ к центру ловушки, и в остальном мы можем рассматривать их как точечные в терминах адсорбции. Если частицы диффундируют с коэффициентом D_j , а ловушка диффундирует с коэффициентом D_i , то в системе отсчета, где ловушка неподвижна, другие частицы диффундируют с коэффициентом $D = D_i + D_j$. В результате мы получаем скорость реакции

$$C_{ij} = I/n (\infty)$$

= $4\pi DR/(1 + D\tau/(Rl))$
= $4\pi (D_i + D_j) (R_i + R_j) / (1 + (D_i + D_j) \tau/((R_i + R_j) l))$

Уравнение (3) соответствует $\tau = 0$ и называется агрегацией, контролируемой транспортом (ограниченной диффузией), поскольку скорость реакции бесконечна. Случай $\tau \to \infty$ называется агрегацией, контролируемой реакцией (ограниченной реакцией). В этом случае диффузия не играет никакой роли, и агрегация ограничена только скоростью реакции и размером пограничного слоя. Следует отметить, что в обоих пограничных случаях для τ эта упрощенная модель дает тот же результат (при $R \gg l$), что и более сложная модель, где скорость реакции зависит от расстояния до ловушки $\tau = \tau_0 e^{-(r-R)/l}$ [75].

1.2. Баллистическая агрегация

Баллистическая агрегация происходит тогда, когда полидисперсный гранулярный или молекулярный газ не слишком плотный и потенциал взаимодействия быстро уменьшается с расстоянием. В этом случае частицы имеют баллистические траектории между столкновениями. Частота столкновений между частицами со скоростями \vec{v}_i и \vec{v}_j определяется средним числом частиц внутри так называемого «цилиндра столкновения» с длиной $|(\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{e}| \Delta t$. Эта длина соответствует расстоянию, которое частица *i* проходит относительно каждой частицы *j*, спроецированному на единичный вектор направления столкновения \vec{e} . Ширина цилиндра при этом равна $\sigma_{ij} = R_i + R_j$ – всякий раз, когда центр частицы *j* находится внутри цилиндра с этим радиусом, она может столкнуться с частицей *i* (рисунок 1).

Предполагая, что распределение скоростей частиц *i* и *j* является максвелловским, можно проинтегрировать размер цилиндра по распределениям скоростей и всем возможным направлениям столкновений \vec{e} , чтобы найти полную частоту столкновений. Интегралы такой структуры называются интегралами столкновений или кинетическими интегралами, см., например, [76]



Рис. 1: Полный цилиндр столкновений (с учетом всех возможных направлений \vec{e}). \vec{e} на рисунке показывает направление одного из возможных столкновений внутри цилиндра.

$$C_{ij} = \sigma_{ij}^2 \iiint d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e} \; \theta \left(-\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \vec{e} \right) \left| \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \vec{e} \right| f_i^M(\vec{v}_i) f_j^M(\vec{v}_j), \tag{4}$$

где $\theta(x)$ – единичная ступенчатая функция Хевисайда, и

$$f_i^M(\vec{v}_i) = \left(\frac{m_i}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v_i^2}{2T}}.$$

Здесь предполагается, что кластеры любого размера имеют одну и ту же температуру *T*. Общий случай будет рассмотрен нами в разделе 2.1.

Интегрирование (4) по скоростям с учетом равенства температур приводит к баллистическому ядру

$$C_{ij} = 2\sqrt{2\pi} \left(R_i + R_j\right)^2 \sqrt{\frac{T}{m_i} + \frac{T}{m_j}}$$

где m_i и m_j – это массы частиц размера *i* и *j*. Предположение о равентсве температур или какое-либо другое предположение, которое фиксирует распределение температур по размерам,

необходимо при работе с классическими уравнениями Смолуховского. Это является их существенным ограничением. В частности, классические уравнения Смолуховского не позволяют предсказать изменение температуры в результате агрегации. Поэтому в последнее время были изучены более сложные модели.

Например, если опустить предположение о равных температурах и о том, что все столкновения являются агрегационными, мы получим [13, 34, 35]:

$$C_{ij} = 2\sqrt{2\pi}P_{ij}\left(R_i + R_j\right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}}$$

где T_i и T_j – это парциальные температуры, а P_{ij} – это вероятности агрегации, которые могут зависеть от температур и определяются конкретным механизмом агрегации. Для случая, когда температуры определяются взаимодействием с молекулярным газом, они выведены для полидисперсного гранулярного газа в [77] и для молекулярного газа в [78].

Как следует из приведенного выше обсуждения, для полного описания эволюции системы необходимо определить функции $T_i = T_i(t)$. Это можно сделать, связав исходные уравнения Смолуховского (2) с другим набором уравнений вида

$$\frac{d}{dt}(n_k T_k) = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} B_{ij} n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} D_{kj} n_k n_j, \quad k = \overline{1, \infty}.$$
(5)

Тогда получается замкнутая система уравнений, где все ядра $C_{ij} = C_{ij} (T_i, T_j), B_{ij} = B_{ij} (T_i, T_j), D_{ij} = D_{ij} (T_i, T_j)$ зависят от парциальных температур.

Поскольку температуры меняются с течением времени, новая связанная система (2, 5) теперь намного сложнее. Например, мы не можем аппроксимировать ядро C_{ij} заранее, как это было сделано, например, в [16], поскольку оно меняется со временем.

Используя (5), можно также получить уравнение для средней температуры $\langle T \rangle = \frac{\sum_{k=1}^{\infty} n_k T_k}{\sum_{k=1}^{\infty} n_k}$ путем суммирования по всем размерам:

$$\frac{d}{dt}n\langle T\rangle = \sum_{i,j} \left(\frac{1}{2}B_{ij}\left(T_i, T_j\right) - D_{ij}\left(T_i, T_j\right)\right) n_i n_j,\tag{6}$$

где n – полная концентрация. Если мы также заменим T_i и T_j на среднюю температуру $\langle T \rangle$ в правой части уравнения (6), мы получим модель, используемую в [35, 77].

Следует отметить, что любая полидисперсная система без агрегации также является частным случаем (2, 5). Например, система в [79, 80] вида

$$\frac{d}{dt}T_i = -T_i \sum_{j=1}^{\infty} \xi_{ij}, \quad i = \overline{1, \infty}$$
(7)

эквивалентна случаю $C_{ij} = B_{ij} = 0$ и обозначению $D_{ij}n_in_j = T_i\xi_{ij}n_i$.

1.3. Среднеполевое приближение: критические размерности для диффузионной и баллистической агрегации

Известны точные результаты и предсказания теории масштабирования для диффузионного ядра на решетке с T = const в размерностях пространства d = 1,2, а также для одномерного баллистического ядра [1]. Отличительной особенностью агрегации в пространствах меньшей размерности является несостоятельность гипотезы среднего поля, которая гласит, что во время агрегации не возникает пространственных корреляций. Когда они появляются, уравнения Смолуховского (как и уравнения Больцмана, на которых они основаны) более не выполняются. Одним из возможных подходов к преодолению этого ограничения в двумерном численном моделировании является разделение рассматриваемой области на блоки, чтобы частицы в разных блоках не сталкивались друг с другом [14]. Более того, хотя некоторые структуры могут появляться в d = 2, утверждается [1], что только d = 1 может привести к неприменимости теории среднего поля для баллистической агрегации, в то время как для диффузионно ограниченной агрегации для d = 2 появляется логарифмический множитель. В численном моделировании баллистической аннигиляции *A* + *A* → Ø с помощью молекулярной динамики (где частицы исчезают вместо объединения в более крупные) [81] частота агрегации лежит очень близко или совпадают с предсказаниями среднего поля. В этой работе мы сосредоточимся только на трехмерном случае, где предполагается, что гипотеза среднего поля выполняется.

1.4. Теория масштабирования

Теория масштабирования (англ. scaling theory) не является строгой теорией, но весьма полезна для качественного анализа. Она исследует так называемые скейлинговые решения уравнений Смолуховского, которые (в отсутствие геляции) записываются следующим образом [1]:

$$\lim_{t \to \infty} M_1^{-1} \int_0^\infty mn(m, t) f(m/s) = \int x \Phi(x) f(x) dx.$$
 (8)

Для геляции (определение которой мы дадим далее) используется более общая форма сходимости:

$$\lim_{t \to \infty} M_2^{-1}(t) \int_0^\infty m^2 n(m,t) f(m/s) = \int x^2 \Phi(x) f(x) dx.$$
(9)

Здесь f(x) – произвольная непрерывная ограниченная функция, $M_k(t) = \int m^k n(m,t) dm$ обозначает k-й момент функции распределения по размерам n(m,t), s(t) – соответствующий коэффициент масштабирования (параметр масштаба), а $\Phi(x)$ называется скейлинговым решением (функцией масштабирования). В самом общем виде гипотеза масштабирования гласит, что для любого ядра без мгновенного гелеобразования (достаточные условия на ядро будут описаны позже, хотя ни одно из них не является необходимым; гелеобразованием называется случай, когда общая масса M_1 не сохраняется) существует функция масштабирования $\Phi(x)$, такая, что уравнения (8), (9) или их некоторый аналог, использующий более высокие моменты, выполняется для любого начального распределения n(x, t = 0) с достаточно быстро уменьшающимся хвостом (достаточно существования $M_3(0)$). Пренебрегая строгостью формулировки, качественно, можно сказать, что для масс $m \gg 1$ и времен $t \gg 1$ решение обычно сходится к некоторой фиксированной самоподобной форме, которая только масштабируется и растягивается во времени. В [82] было доказано существование автомодельных решений вида (8) для некоторых простых однородных ядер.

Условия для ядра обычно описываются в терминах показателей масштабирования λ , μ и $\nu = \lambda - \mu$ [1]. λ определяется пределом

$$\tilde{C}(i,j) = \lim_{a \to \infty} \frac{C(ai,aj)}{a^{\lambda}},$$

когда существует ненулевое конечное ядро $\tilde{C}(i, j)$.

µ тогда определяется из условия существования конечного предела

$$\lim_{a \to 0} \frac{\tilde{C}(i, aj)}{a^{\mu}} > 0$$

На основе этих параметров определяется один из четырех классов (случаев) для ядра [74], которые определяют, как можно выбирать функцию s(t) (параметр масштаба s(t) всегда может быть выбран как $s(t) = M_{p+1}/M_p$ для достаточно большого p) и каково поведение $\Phi(x)$ при $x \to 0$. Эти случаи принято обозначать римскими цифрами.

Случай I соответствует $v < \lambda \leq 1$. В этом случае, если $\Phi(x) \sim x^{-\tau}$ для малых x, то $\tau = 1 + \lambda$. Если $\lambda < 1$, можно использовать либо (8), либо (9) и $s(t) = M_2/M_1$. Если $\lambda = 1$, можно использовать только (9), и необходимы моменты более высокого порядка, такие как $s(t) = M_3/M_2$. Для функции масштабирования $\Phi(x)$ тогда справедливо (при условии, что ядро $\tilde{C}(x, y)$ и скейлинговое решение непрерывны):

$$0 = \left(x\frac{d}{dx}\Phi(x) + 2\Phi(x)\right)\iint x'y\tilde{C}(x',y)\Phi(x')\Phi(y)dx'dy + \frac{1}{2}\int_0^x \left(\tilde{C}(x-y,y)\Phi(x-y)\Phi(y) - \tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y) - \tilde{C}(x-y,x)\Phi(x-y)\Phi(x)\right)dy$$
(10)
$$-\int_x^\infty \tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y)dy,$$

исходя из (8), и

$$0 = \left(x\frac{d}{dx}\Phi(x) + 3\Phi(x)\right) \iint x'y (3y-1)\tilde{C}(x',y)\Phi(x')\Phi(y)dx'dy - \Phi(x) \iint x'y\tilde{C}(x',y)\Phi(x')\Phi(y)dx'dy + \int_0^x \Phi(y) \left((1-y/x)\tilde{C}(x-y,y)\Phi(x-y) - \tilde{C}(x,y)\Phi(x)\right)dy - \int_x^\infty \tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y)dy.$$
(11)

исходя из (9). Уравнение (10) можно использовать (в сочетании с $s(t) = M_2/M_1$) всегда, когда $\tau < 2$. Следует обратить внимание, что отдельные члены внутри интегралов в правой части в уравнениях (10) и (11) должны быть интегрированы только вместе, в целом, поскольку сами по себе отдельные интегралы бесконечны. Таким образом, невозможно разделить интегралы от 0 до *x* на части.

Случай II соответствует $v = \lambda \leq 1$. Тогда можно выбрать $s(t) = M_2/M_1$, что приводит к

$$\tau = 2 - \frac{\int \tilde{C}(x,0)\Phi(x)dx}{\iint xy\tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y)dxdy}$$

Затем можно использовать (10), чтобы найти решение $\Phi(x)$.

Случай III соответствует $\lambda < \nu \leq 1$. Здесь возможно определенть $s(t) = M_1/M_0$, что вместе с (8) дает следующее уравнение для функции масштабирования:

$$0 = \frac{d}{dx} \left(x\Phi(x) \right) + \Phi(x) + \frac{\int_0^x \tilde{C}(y, x - y)\Phi(x - y)\Phi(y)dy - 2\int_0^\infty \tilde{C}(x, y)\Phi(x)\Phi(y)dy}{\iint \tilde{C}(x', y)\Phi(x')\Phi(y)dx'dy}.$$
 (12)

Данное уравнение (в комбинации с $s(t) = M_1/M_0$) может быть справедливо и в других случаях, если $\tau < 1$. Здесь $\Phi(x)$ экспоненциально стремится к нулю при малых x.

Последний случай соответствует геляции: $\nu \leq 1$, $1 < \lambda$. Когда $\lambda \leq 2$, можно выбрать $s(t) = M_3/M_2$ и использовать (11) для определения $\Phi(x)$ (для $\lambda > 2$ необходимо уравнение, полученное при использовании более высоких моментов для s(t)). τ определяется из

$$\tau = 3 - \frac{\iint xy\tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y)dxdy}{\iint xy(3y-1)\tilde{C}(x,y)\Phi(x)\Phi(y)dxdy}.$$

Можно также найти следующий член аппроксимации для малых *x*. А именно, $\Phi(x) \approx C_1 x^{-\tau} + C_2 x^{1+\lambda-2\tau}$, где

$$C_2 = C_1^2 \frac{\int_1^{\infty} \tilde{C}(1, y) y^{-\tau} dy + \int_0^1 \left((1 - y)^{1 - \tau} \tilde{C}(1 - y, y) - \tilde{C}(1, y) \right) y^{-\tau} dy}{\iint xy \left(1 - (3y - 1)(4 + \lambda - 2\tau) \right) \tilde{C}(x, y) \Phi(x) \Phi(y) dx dy}.$$

Случай $\nu > 1$ всегда ведет к мгновенной геляции, и для него скейлингового решения не существует, как и решения соответствующего уравнения Смолуховского.

Дифференцируя скейлинговое решение, (8) или (9), и используя метод разделения переменных, можно вывести скорость роста параметра масштаба:

$$s(t) \sim \begin{cases} t^{\frac{1}{1-\lambda}}, & \lambda < 1, \\ e^{C(t+o(t))}, & \lambda = 1, \\ (t_{gel} - t)^{-\frac{1}{1+\lambda-\tau}} & 1 < \lambda \leq 2, \end{cases}$$

вне зависимости от того, какие моменты M_p и M_{p+1} были использованы для определения s(t)(необходимо лишь $p > \tau - 1$). Здесь t_{gel} – это момент времени, после которого $M_1(t)$ перестает быть постоянным (начинается гелеобразование). o(t) обычно можно заменить на гораздо меньшую величину, но нет никакой теории о точном размере этого дополнительного слагаемого, даже если ядро C_{ij} однородно. Конечно, o(t) также неявно присутствует для $\lambda \neq 1$, но тогда им можно пренебречь, потому что s(t) определяется с точностью до постоянного множителя (и любых добавочных слагаемых с более медленным ростом). Но в экспоненциальном случае o(t) может создать дополнительный множитель, который может как расти, так и убывать со временем.

Если изначально распределение концентраций имело экспоненциальный хвост, то он всегда остается экспоненциальным и сходится (в терминах теории масштабирования) к

$$\Phi(x) \sim e^{-cx}/x^{\lambda}, \quad x \to \infty,$$

кроме случая v = 1, для которого степень может отличаться от λ .

В наиболее изученном Случае III скейлинговое решение может порождать для однородных ядер самоподобное (автомодельное) решение уравнений Смолуховского, которое удовлетворяет (для $M_1 = 1$)

$$n_k(t)n(0) = n^2(t)\Phi(kn(t)/n(0)).$$

Кластеры фиксированного размера в Случае III на достаточно больших временах исчезают из системы пропорционально $e^{-Ct^{\frac{1-\nu}{1-\lambda}}}$ (с точностью до множителей меньшего порядка), а функция $\Phi(x)$ для малых *x* пропорциональна $e^{-Cx^{\lambda-\nu}}$ (опять же, с точностью до множителей меньшего порядка). В частности, баллистическая агрегация с ядром

$$C(i,j) = \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \sqrt{1/i + 1/j}$$
(13)

приводит к

$$n_1(t) = c_1 \exp\left[-\frac{5}{3}M_{2/3}\left(\frac{5}{6}S\right)^{-2/5}t^{3/5} - 10M_{1/3}\left(\frac{5}{6}S\right)^{-4/5}t^{1/5} + O\left(t^{-1/5}\right)\right], \quad t \to \infty$$

И

$$\Phi(x) = \frac{c_2}{x^2} \exp\left[-4x^{-1/2}M_{2/3}/S - 24x^{-1/6}M_{1/3}/S + O\left(x^{1/6}\right)\right], \quad x \to 0$$

где параметры $M_{1/3}, M_{2/3}$ и S определяются интегрированием функции масштабирования $\Phi(x)$:

$$\begin{split} M_{1/3} &= \int_{0}^{\infty} x^{1/3} \Phi(x) dx \approx 0,8933, \\ M_{2/3} &= \int_{0}^{\infty} x^{2/3} \Phi(x) dx \approx 0,8998, \\ S &= \lim_{t \to \infty} \frac{2}{(1-\lambda) n^{1-\lambda} t} = \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} C(x, y) \Phi(x) \Phi(y) dx dy \approx 6,559. \end{split}$$

Для больших кластеров точные параметры в выражении для их концентраций определить сложнее. Тем не менее, можно показать, что показатель в экспоненте пропорционален коэффициенту перед ней:

$$\Phi(x) = \frac{C}{x^{\lambda}} e^{-CBx/S} \left(1 + o(1)\right),$$
$$B = \int_{0}^{1} \frac{C(x, 1-x)}{x^{\lambda}(1-x)^{\lambda}} dx.$$

Для баллистического ядра (13) коэффициент В равен

$$B = 6 + \frac{14\pi^{3/2}}{9\sqrt[3]{2}\sqrt{3}\Gamma(4/3)\Gamma(13/6)} \approx 10,1068.$$

Для броуновского ядра приближение для малых и больших х может быть найдено в [72].

В целом, можно довольно точно приблизить скейлинговое решение, как показано на рисунке 2. Рисунок 2 также показывает, что сходимость к автомодельному решению происходит довольно быстро. Подгонка дает относительную поточечную ошибку менее 0,5% в диапазоне [0,001, 10]. Обращаем внимание, что функция $\Phi(x)$ в температурно-зависимом случае такая же, как и в температурно-независимом случае, если все парциальные температуры равны.

Теория масштабирования для температурно-зависимых уравнений Смолуховского описана в разделе 5.3.

1.5. Фрагментация при столкновениях

Изучение столкновений агрегатов из частиц пыли является важной частью понимания формирования планетезималей в протопланетных дисках и эволюции поясов астероидов. Наименее понятный режим столкновений при этом – это фрагментация.

Одной из открытых проблем является правильное включение фрагментации в уравнения Смолуховского. Это непростая задача, поскольку точных моделей, позволяющих определить ядро фрагментации, не существует. В настоящее время большинство моделей обычно ограничиваются включением фрагментации как имеющей то же влияние, что и агрегация, вплоть до универсального постоянного коэффициента [84].



Рис. 2: Приведенное распределение числа частиц $n_k(t)/n^2(t)$ как функция от kn(t) в различные моменты времени t для $C_{ij}(T) = \sqrt{2\pi} \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \sqrt{T/i + T/j}$. Сходимость к скейлинговому решению $\Phi(x)$ с x = kn(t) наблюдается уже при t = 10. Функция масштабирования хорошо приближается выражением $\left(\frac{0.785}{x^{0.28}} + \frac{0.65}{x}\right) e^{-0.61/\sqrt{x} - 0.81x}$. Рисунок опубликован в [83].

При моделировании фрагментации обычно учитывается только распределение осколков по размерам. Различные виды изучаемых столкновений включают столкновения пластин [23], столкновения со стеной [22], распространение трещин [85] и другие типы. В [86] рассматривались столкновения рекурсивно построенных кластеров баллистической кластерной агрегации (БККА) размером $M = 2^k$ без сжатия. Они обнаружили, что распределение количества фрагментов близко к $n \sim m^{-2}$ для небольших агрегатов. Зависимость $n \sim m^{-2,1}$ наблюдалась в [87], где проводились низкоскоростные столкновения сферических металлических кластеров. Сферические, но пористые кластеры рассматривались в [88], где степенное распределение числа фрагментов сильно зависело от скорости сталкивающихся агрегатов, но было близко к $n \sim m^{-2}$ для низких скоростей. Следует отметить, что для гораздо более плотных сферических агрегатов наблюдались более высокие показатели [11]. Однако зависимость распределения фрагментов и их кинетических энергий от скорости столкновения пока не изучалась, за исключением фрагментации пластин, которые по существу сталкиваются с мономером. При этом были обнаружены скорости разлета осколков $v \sim m^{-\gamma}$ с γ между 0 и 1/3 [12]. Распределения для столкновений сферических кластеров будут рассмотрены в главе 4. В разделе 4.5 мы покажем, как новые результаты фрагментации могут быть учтены в уравнениях Смолуховского.

В случае совместной агрегации и фрагментации солекулярных систем существуют различные варианты *H*-теоремы для определения стационарного распределения концентраций [78, 89]. В диссертации, однако, мы исследуем, главным образом, гранулярные газы, для которых использование *H*-теоремы необоснованно прежде всего потому, что гранулярный газ является открытой системой. В качестве альтернативы *H*-теоремы для анализа гранулярных газов существует подход Кульбака-Леблера [90]. Эта весьма интересная тематика, тем не менее, лежит за пределами задач настоящей диссертации.

1.6. Функция распределения скоростей для неагрегирующихся газов в пространственно неоднородной среде

В разделе 1.2 мы предположили максвелловское распределение скоростей кластеров. Однако, если в системе присутствуют градиенты температур или различные потоки, они могут повлиять на вид распределения. Здесь мы описываем уже сложившуюся теорию только для неагрегирующихся монодисперсных газов. В главе 3 мы распространим его на полидисперсные агрегирующие газы.

Существует два наиболее известных метода нахождения приближений функции распределения скорости в неоднородном случае: подход Чепмена-Энскога и метод моментов Грэда.

1.6.1. Метод Чепмена-Энскога

Метод Чепмена-Энскога (для полного описание подхода см. [76]) вводит приближение к функции распределения скоростей в терминах градиентов плотности числа частиц, скорости потока и взвешенной температуры $\theta = T/m$:

$$f(\vec{v}) = f^M(\vec{v}) \cdot \left(1 + \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \log \theta + \vec{\beta} \cdot \vec{\nabla} \log n + \hat{\gamma} : \vec{\nabla} \vec{u}\right) = f^M(\vec{v}) + f^{(1)}(\vec{v}).$$
(14)

Плотность числа частиц n здесь включена в определение распределения Максвелла f^M :

$$f^{M}(\vec{v}) = \frac{n}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{v^{2}}{2\theta}}$$

Коэффициенты в выражении (14) могут быть найдены из уравнения Больцмана

$$\frac{df}{dt} = I(f, f),\tag{15}$$

где правая часть содержит интеграл столкновений I(f, f), описывающий изменение функции распределения в результате столкновения пар частиц. В общем случае полидисперсных систем, в него включаются всевозможные пары распределений скоростей для всех компонент смеси.

Линеаризация обоих частей (15) в терминах малой добавки $f^{(1)}$ приводит к

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} = I\left(f^{M}, f^{(1)}\right) + I\left(f^{(1)}, f^{M}\right) - \vec{v}\left(\frac{v^{2}}{2\theta} - \frac{5}{2}\right)f^{M}\left(\vec{v}\right)\nabla\log\theta$$

$$-\frac{1}{\theta}\left(v_{i}v_{j} - \frac{1}{3}\delta_{ij}v^{2}\right)f^{M}\left(\vec{v}\right)\nabla_{i}u_{j}.$$
(16)

Исходя из вида уравнения (16) можно предположить, что

$$\vec{\alpha} = \alpha_0 \vec{v} \left(\frac{v^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right), \quad \gamma_{ij} = \gamma_0 \frac{1}{\theta} \left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2 \right).$$

Кроме того, исходя из (14), мы сразу видим, что $\vec{\beta} = \vec{0}$.

В итоге функция распределения скоростей записывается в виде

$$f(\vec{v}) = f^{M}(\vec{v}) \cdot \left(1 + \alpha_{0} \frac{1}{\theta} \vec{v} \left(\frac{v^{2}}{2\theta} - \frac{5}{2}\right) \cdot \vec{\nabla}\theta + \gamma_{0} \frac{1}{\theta} \left(v_{i} v_{j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^{2}\right) \nabla_{i} u_{j}\right), \tag{17}$$

Путем подстановки $f^{(1)}$ из (14), домножения (16) на $\vec{v} \left(\frac{v^2}{2\theta} - \frac{5}{2}\right)$ и на $\frac{1}{\theta} \left(v_i v_j - \frac{1}{3}\delta_{ij} v^2\right)$ и интегрирования по скоростям, мы получаем уравнения на α_0 и γ_0

$$\begin{aligned} \frac{15}{2} \frac{\partial (\alpha_0 n\theta)}{\partial t} + \frac{15}{2} n\theta &= \\ &= \int \vec{v} \left(\frac{v^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) \left(I \left(f^M, \alpha_0 \frac{1}{\theta} \vec{v} \left(\frac{v^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) f^M \right) + I \left(\alpha_0 \frac{1}{\theta} \vec{v} \left(\frac{v^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) f^M, f^M \right) \right) d\vec{v}, \\ &10 \frac{\partial (\gamma_0 n)}{\partial t} + 10n = \\ &= \int \frac{\gamma_0}{\theta^2} \left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2 \right) \left(I \left(f^M, \left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2 \right) f^M \right) + I \left(\left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2 \right) f^M, f^M \right) \right) d\vec{v}. \end{aligned}$$

Уравнения для плотности числа частиц, потока и температуры представляют собой хорошо известные уравнения Навье-Стокса, которые гласят

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} (n\vec{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n\vec{u}) + n\vec{u} \cdot \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{u}\vec{\nabla} (n\vec{u}) + \vec{\nabla} (n\theta) + \vec{\nabla} \cdot \hat{p} = \vec{F},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n\theta) + n\vec{u} \cdot \vec{\nabla}\theta + \theta\vec{\nabla} (n\vec{u}) + \frac{2}{3} \left(\hat{p} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \right) = \int \frac{v^2}{3} I(f, f) d\vec{v},$$
(18)

где \vec{F} – это равномерно действующая внешняя сила. В общем случае гранулярного газа с неэластичными столкновениями в правой части также остается выражение, содержащее интеграл столкновений, задающий здесь потери кинетической энергии.

Вязкость и теплопроводность затем определяются путем сравнения интегральных выражений

$$p_{ij} = \int \left(v_i v_j - \frac{1}{3} v^2 \delta_{ij} \right) f\left(\vec{v}\right) d\vec{v},$$
$$\vec{q} = \int \frac{v^2}{2} \vec{v} f\left(\vec{v}\right) d\vec{v} = \int \left(\frac{v^2}{2} - \frac{5}{2} \theta \right) \vec{v} f\left(\vec{v}\right) d\vec{v}$$

и феноменологических выражений

$$p_{ij} = -\eta \left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right),$$
$$\vec{q} = -\kappa \vec{\nabla} \theta,$$

которые дают

$$\eta = -\gamma_0 n\theta, \quad \kappa = -\frac{5}{2}\alpha_0 n\theta.$$
 (19)

В равновесии для модели газа из твердых шаров без потерь энергии в столкновениях (для коэффициента восстановления $\varepsilon = 1$ (1)) получаем

$$\eta = \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}, \quad \kappa = \frac{75}{64\sigma^2} \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}.$$

Подход Чепмена-Энскога используется в главе 3 для вывода уравнений Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, которые позволяют учесть пространственные неоднородности для агрегирующих полидисперсных газов.

1.6.2. Метод моментов Грэда

В методе моментов Грэда [91, 92] производится разложение функции распределения скоростей ортогональными тензорными полиномами Эрмита взвешенной скорости $\vec{x}i = \sqrt{m/T}\vec{v}$, где \vec{v} – скорость в центре масс газа:

$$f\left(\vec{\xi}\right) = n\left(\frac{m}{T}\right)^{3/2} f^{M}\left(\vec{\xi}\right) \cdot \left(1 + \frac{1}{1!}a_{i}H_{i} + \frac{1}{2!}a_{ij}H_{ij} + \frac{1}{3!}a_{ijk}H_{ijk} + \dots\right),$$
(20)

где полиномы Эрмита *H*_{*i*1*i*2}... задаются как

$$H_{i_1...i_N}\left(\vec{v}\right) = \frac{(-1)^N}{f^M\left(\xi\right)} \cdot \frac{\partial^N f^M\left(\xi\right)}{\partial_{i_1}\xi \dots \partial_{i_N}\xi}$$

Первые три полинома следующие:

$$H_i = \xi_i, \quad H_{ij} = \xi_i \xi_j - \delta_{ij}, \quad H_{ijk} = \xi_i \xi_j \xi_k - \left(\xi_i \delta_{jk} + \xi_j \delta_{ik} + \xi_k \delta_{ij}\right).$$

Коэффициенты $a_{i_1...i_N}$ находятся из определений скалярных полей (потока, взвешенной температуры $\theta = T/m$, взвешенного тензора давления p_{ij} и взвешенного теплового потока q_i), выраженных в терминах полиномов Эрмита

$$n = \theta^{3/2} \int f\left(\vec{\xi}\right) d\vec{\xi},$$

$$n \langle v_i \rangle = 0 = \theta^2 \int f\left(\vec{\xi}\right) H_i\left(\vec{\xi}\right) d\vec{\xi},$$

$$3n\theta = \theta^{5/2} \int f\left(\vec{\xi}\right) (H_{ii} + 3) \left(\vec{\xi}\right) d\vec{\xi},$$

$$p_{ij} = \theta^{5/2} \int f\left(\vec{\xi}\right) \left(H_{ij} - \frac{1}{3}H_{kk}\delta_{ij}\right) \left(\vec{\xi}\right) d\vec{\xi},$$

$$2q_i = \theta^3 \int f\left(\vec{\xi}\right) (H_{ijj} + 5H_i) \left(\vec{\xi}\right) d\vec{\xi},$$
(21)

Здесь всего выписаны 13 скалярных полей, которые дают классическую систему Grad-13. В литературе также можно найти более сложные выражения для систем Grad-26 [93] и Grad-29 [94].

После интегрирования (21) и подстановки в (20), находим

$$f\left(\vec{\xi}\right) = n\left(\frac{m}{T}\right)^{3/2} f^M\left(\vec{\xi}\right) \cdot \left(1 + \frac{1}{2\theta}p_{ij}\xi_i\xi_j + \frac{1}{\theta^{3/2}}q_i\xi_i\left(\frac{\xi^2}{5} - 1\right) + \ldots\right),$$

Если теперь использовать подстановки $p_{ij} = -\eta \left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right)$ и $q_i = -\kappa \nabla_i \theta$ с η и κ , определенными из (19), то в итоге получим то же самое распределение скоростей, как и в случае подхода Чепмена-Энскога (17).

Уравнения для плотности числа частиц, потока и температуры остаются такие же, как и в случае Чепмена-Энскога (18).

Уравнения для тензора давления и теплового потока находятся путем интегрирования уравнения Больцмана (15) по $v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2$ и по $\frac{1}{2} v_i v^2$:

$$\begin{split} &\frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + u_k \nabla_k p_{ij} + \frac{2}{5} \nabla_j q_i + \frac{2}{5} \nabla_i q_j - \frac{4}{15} \delta_{ij} \nabla_k q_k + p_{ij} \nabla_k u_k + p_{ik} \nabla_k u_j + p_{jk} \nabla_k u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} p_{kl} \nabla_k u_l \\ &+ n \theta \nabla_j u_i + n \theta \nabla_i u_j - \frac{2}{3} n \theta \delta_{ij} \nabla_k u_k = \int \left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v^2 \right) I(f, f) d\vec{v}, \\ &\frac{\partial q_i}{\partial t} + u_k \nabla_k q_i + \theta \nabla_k p_{ki} + \frac{5}{2} p_{ik} \nabla_k \theta + \frac{5}{2} n \theta \nabla_i \theta \\ &- \frac{p_{ik}}{n} \left(\nabla_j p_{kj} + \theta \nabla_k n \right) + \frac{7}{5} q_i \nabla_k u_k + \frac{7}{5} q_k \nabla_k u_i + \frac{2}{5} q_k \nabla_i u_k = \frac{1}{2} \int v_i v^2 I(f, f) d\vec{v}. \end{split}$$

Метод Грэда для уравнений Смолуховского будет позже использован при рассмотрении потока с постоянным градиентом скорости (раздел 3.5).

1.7. Численное решение уравнений Смолуховского

В [69] было показано, что для симметричных непрерывных ядер удовлетворяющих условию $C(x, y) \leq C(1 + x + y)$, решения для конечного числа уравнений (конечных ядер) в конечный момент времени сходятся при увеличении числа уравнений к решению для соответствующих бесконечных ядер. Поскольку конечные системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) хорошо изучены, мы можем использовать любую подходящую схему интегрирования по времени, и также получить сходимость. Однако, с теоретической точки зрения следует иметь в виду, что в общем случае сходимость определяется в терминах метрических пространств, а не нормированных линейных пространств. Такие расширения были впервые сделаны в [95]. В остальном можно использовать классическую теорию [96]. Здесь мы сосредоточимся на дискретной версии уравнений Смолуховского. Непрерывная версия уравнений Смолуховского также может быть легко дискретизована [16].

Конечная система уравнений Смолуховского записывается следующим образом:

$$\frac{d}{dt}n_k = F_k(t) \stackrel{def}{=} \frac{1}{2} \sum_{i+j=N} C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^N C_{kj}n_kn_j.$$
(22)

Мы обозначаем через $F_k(t)$ всю правую часть. Массы кластеров здесь уже дискретны, поэтому достаточно использовать подходящую схему дискретизации по времени.

Использование неявной разностной схемы является слишком затратным по времени. Среди явных схем рекомендуется выбирать те, которые сохраняют неотрицательность решения, поскольку отрицательные концентрации нефизичны и могут привести к неустойчивости. Схема Эйлера $\frac{d}{dt}n_k \rightarrow \frac{n_k(t+\Delta t)-n_k(t)}{\Delta t}$ дает аппроксимацию лишь порядка $O(\Delta t)$, потому лучшим выбором была бы схема предиктора-корректора или какая-нибудь аналогичная схема более высокого порядка.

Перепишем (22) в векторной форме

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{F}\left(t\right)$$

Схема предиктор-корректор второго порядка для уравнений Смолуховского записывается следующим образом:

$$\tilde{\boldsymbol{n}}(t + \Delta t) = \boldsymbol{n}(t) + \boldsymbol{F}(t),$$
$$\boldsymbol{n}(t + \Delta t) = \frac{1}{2}\boldsymbol{n}(t) + \frac{1}{2}\left(\tilde{\boldsymbol{n}}(t + \Delta t) + \tilde{\boldsymbol{F}}(t + \Delta t)\right).$$

Здесь происходит усреднение между двумя шагами схемы Эйлера и изначальным вектором концентраций. Так как схема Эйлера при достаточно малом шаге сохраняет неотрицательность, как ее не испортит и усреднение, то данная схема также будет сохранять неотрицательность. Аналогично можно дискретизировать произведение n_kT_k и вычислить изменение парциальных температур, используя температурно-зависимые уравнения Смолуховского (раздел 2.1).

Решение классических ОДУ Смолуховского (2) уже является очень сложной задачей. Решить бесконечную систему напрямую невозможно в принципе. Это все еще может оказаться слишком затратным, даже если явно ограничить количество уравнений. В результате на практике часто используются различные методы моделирования типа Монте-Карло [7, 21, 97, 98, 99, 100]. С другой стороны, недавно разработанные малоранговые методы [101] могут превзойти Монте-Карло моделирование с точки зрения скорости и точности вычислений. Мы обобщаем эти идеи на уравнения, зависящие от температуры, в разделе 5.2.

Все методы Монте-Карло основаны на одном из двух алгоритмов, которые описывают, как выбирать сталкивающиеся частицы. Все остальные расширения имеют дело с проблемами того, как виртуальные (численные) частицы связаны с реальными, когда увеличивать их количество, а когда уменьшать, и как обновлять системное время.

Метод Гиллеспи были изначально разработан для моделирования химических реакций [102]. В случае агрегации его аналог обычно зовется «обратным методом» [98]. Один из ва-

риантов этого метода можно описать следующим образом. Обозначим

$$s_i = \sum_{j=1}^{N} C_{ij} N_i N_j,$$
$$S = \sum_{i=1}^{N} s_i.$$

Эти значения будем использовать для того, чтобы найти промежуток времени между столкновениями и размеры сталкивающихся частиц, как указано далее:

1: {Обновление времени системы}

2:
$$t := t - \frac{\ln rand(0,1)}{S}$$

- 3: {Выбор размера *i*}
- 4: $r := rand(0, 1] \cdot S$
- 5: **for** *i* := 1 **to** *N* **do**

$$6: \quad r := r - s_i$$

- 7: **if** $r \leq 0$ **then**
- 8: break
- 9: **end if**
- 10: **end for**
- 11: {Выбор размера *j* }
- 12: $r := rand(0, 1] \cdot s_i$
- 13: for i := 1 to N do
- 14: $r := r C_{ij}N_iN_j$
- 15: **if** $r \leq 0$ **then**
- 16: break
- 17: **end if**
- 18: end for

Следовательно, сначала определяется размер *i* первой частицы, а затем размер *j* второй.

После этого значения s_i , s_j , s_{i+j} и *S* обновляются. Метод требует до 2*N* проверок для определения сталкивающихся частиц и поэтому не является быстрым для больших *N*.

Метод принятия-отклонения. Немного более быстрый метод основан на простом выборе частицы случайным образом [97]. Затем пара принимается для столкновения с вероятностью

$$p_{ij} = \frac{C_{ij}}{\max_{i,j} C_{ij}}.$$

Здесь число отклонений зависит от того, насколько близко среднее значение C_{ij} к максимальному. Поскольку C_{ij} обычно содержат некоторые небольшие положительные степени *i* и *j*, количество проверок равно $O(N^{\alpha})$ с α в зависимости от конкретного ядра агрегации.

С алгоритмической точки зрения описанные обратный метод и метод принятия-отклонения полностью эквивалентны (в противном случае они не описывали бы одну и ту же систему), поскольку они вычисляют одни и те же вероятности столкновений. Единственная разница заключается в их вычислительной сложности.

В разделе 5.1 мы описываем малоранговый метод Монте-Карло, который позволяет выбирать сталкивающиеся частицы быстрее, чем оба вышеописанных метода.

В разделе 5.2 мы описываем, как идея малорангового приближения может быть использована для решения температурно-зависимых уравнений Смолуховского.

Глава 2. Обобщенные уравнения Смолуховского

2.1. Уравнения Смолуховского для неоднородных систем. Общий подход

Частицы разреженных полидисперсных молекулярных или гранулированных газов перемещаются и агрегируют баллистически; возникающие кластеры разного размера при этом имеют разную парциальную температуру. Парциальные температуры при этом определяют частоту столкновений между частицами и, следовательно, скорость агрегации. Температура кластеров меняется со временем и изменяет агрегационную кинетику. Следовательно, для адекватного описания процессов агрегации необходимо дополнить уравнения Смолуховского соответствующими уравнениями для парциальных температур агрегатов.

Первая попытка расширить систему уравнений Смолуховского была предпринята в [77], где авторы дополнили эти уравнения одним уравнением для температуры, предполагая равенство парциальных температур. Эта упрощенная модель была позже расширена в [13], где был выведен полный набор уравнений: уравнения агрегации были объединены с набором уравнений для парциальных температур агрегатов. Также, как и в работах [34, 35], кинетические скорости для обоих наборов уравнений были выражены в [13] в терминах микроскопических параметров.

Расширение набора классических уравнений Смолуховского делает задачу численного анализа очень сложной. Стоит отметить, что некоторые физические процессы могут проявляться через чрезвычайно долгое время, когда начинают появляться достаточно большие агрегаты. Последнее требует использования огромного количества уравнений. Традиционные методы не в состоянии эффективно решить эту проблему, поэтому необходим новый подход. В [16, 84, 103] было продемонстрировано, что методы малоранговой аппроксимации могут быть эффективно использованы для решения системы с независимыми от температуры ядрами. Успех малорангового подхода для случая классических ядер ведет к мысли, что малоранговые методы могут быть применены и для более сложных систем. Эти адаптации описаны нами в главе 5. Для ясности изложения и введения обозначениц, в текущем разделе 2.1 изложены известные результаты. Остальные результаты в главах 2-5 являются новыми.

Перейдем теперь к выводу зависящих от температуры уравнений Смолуховского, следуя [13]. Для этого воспользуемся кинетическим интегралом (4), определенном в разделе 1.2. Мы предполагаем, что частицы размера *i* имеют температуру T_i и что две частицы объединяются с вероятностью P_{ij} ($m_i, m_j, \vec{v}_i, \vec{v}_j$), что приводит нас к уравнению для ядра C_{ij}

$$C_{ij} = \sigma_{ij}^{2} \iiint d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e} \ P_{ij} \ \theta \left(-\left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j}\right) \cdot \vec{e}\right) \left| \left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j}\right) \cdot \vec{e} \right| \left(\frac{m_{i}}{2\pi T_{i}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_{i}v_{i}^{2}}{2T_{i}}} \left(\frac{m_{j}}{2\pi T_{j}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_{j}v_{j}^{2}}{2T_{j}}},$$
(23)

где, как и прежде, $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда, и мы используем функцию распределения Максвелла для скоростей. Далее мы сделаем некоторые упрощения. Во-первых,
определим взвешенные температуры $\theta_i = T_i/m_i$ и нормализуем массу частиц $m_i = i$, выбрав единицы, в которых масса мономеров единична $m_1 = 1$. Во-вторых, сделаем предположение о виде вероятности агрегации. Пусть частицы агрегируют тогда и только тогда, когда их относительная кинетическая энергия достаточно мала, то есть,

$$P_{ij} = \theta \left(W_{ij} - \frac{ij}{i+j} \frac{\varepsilon^2 \left| \vec{v}_i - \vec{v}_j \right|^2}{2} \right), \tag{24}$$

где ε – коэффициент восстановления, который мы для простоты принимаем постоянным. Как указано ранее, мы определили единицу массы равной массе мономера. Тогда величина $\frac{ij}{i+j} \frac{\varepsilon^2 |\vec{v}_i - \vec{v}_j|^2}{2}$ описывает кинетическую энергию после столкновения в центре масс сталкивающихся частиц. Заметим, что условие (24) применимо только для адгезионного взаимодействия, где агрегация макроскопических частиц происходит благодаря диссипации энергии столкновения [104]. Для молекулярной агрегации используется противоположное условие $P_{ij} = \theta \left(\frac{ij}{i+j} \frac{(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e})^2}{2} - W_{ij} \right)$ [78].

Затем мы можем проинтегрировать уравнение (23), чтобы получить

$$C_{ij} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2\sqrt{\theta_i + \theta_j} \left(1 - f_{ij}\right)$$

где

$$f_{ij} = e^{-q_{ij}} \left(1 + q_{ij} \right)$$

И

$$q_{ij} = \frac{W_{ij}}{\varepsilon^2 \frac{ij}{i+j} \left(\theta_i + \theta_j\right)}.$$

 W_{ij} обычно имеет вид

$$W_{ij} = a \frac{\left(i^{1/3} j^{1/3}\right)^{\lambda_1}}{\left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^{\lambda_2}},$$

где a, λ_1 и λ_2 являются параметрами. Параметр a здесь характеризует высоту потенциального барьера, в то время как показатели λ_1 и λ_2 описывают, как эта величина меняется в зависимости от размеров сталкивающихся кластеров. Заметим, что согласно результатам из [104] высокие кинетические энергии приводят к отскоку (рисунок 3).

В результате мы получаем систему температурно-зависимых уравнений Смолуховского

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k} C_{ij} \left(\theta_i, \theta_j\right) n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} C_{kj} \left(\theta_k, \theta_j\right) n_k n_j.$$
(25)

Чтобы получить замкнутую систему, нам также нужно определить уравнения для взвешенных температур θ_k .

Чтобы сделать это, мы должны теперь выяснить, как меняется кинетическая энергия кластеров. Для этого мы используем уравнение Больцмана и соответствующий кинетический интеграл; последний должен содержать дополнительный множитель $v_k^2/3$, чтобы вычислить изменение $\langle v_k^2/3 \rangle = \theta_k$.

В случае агрегации мы добавляем множитель v_k^2 для k = i + j. Значение \vec{v}_k можно найти из \vec{v}_i и \vec{v}_j , используя закон сохранения импульса. Таким образом, ядро агрегации, которое мы обозначаем через *B*, записывается через соответствующий ему кинетический интеграл как



Рис. 3: Пример отскока при столкновении гранулярных частиц, в данном случае кластеров из льда. Рисунок взят из работы [104]. Там же можно найти другие примеры столкновений и конкретные условия на агрегацию.

$$B_{ij} = \sigma_{ij}^2 \iiint d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e} \ P_{ij} \ \frac{v_k^2}{3} \theta \left(-\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \vec{e} \right) \left| \vec{v}_i - \vec{v}_j \cdot \vec{e} \right| \left(\frac{m_i}{2\pi T_i} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v_i^2}{2T_i}} \left(\frac{m_j}{2\pi T_j} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_j v_j^2}{2T_j}} d\vec{v}_j d\vec{v$$

Чтобы вычислить потери кинетической энергии при столкновениях с агрегацией, мы используем коэффициент $v_i^2/3$, поскольку в этом случае k = i. Чтобы рассчитать потери кинетической энергии при столкновениях с отскоком, мы используем коэффициент $v_i^2/3 - v_i'^2/3$, где \vec{v}_i' – скорость частицы после столкновения. Обозначим ядро, которое вычисляет потерянную энергию для кластеров размера k через D и разделим его на две части. Потери энергии при агрегации обозначаются через агрегационную часть D_{ij}^{agg} :

$$D_{ij}^{agg} = \sigma_{ij}^2 \iiint d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e} \ P_{ij} \ \frac{v_i^2}{3} \theta \left(-\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \vec{e}\right) \left| \vec{v}_i - \vec{v}_j \cdot \vec{e} \right| \left(\frac{m_i}{2\pi T_i}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v_i^2}{2T_i}} \left(\frac{m_j}{2\pi T_j}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_j v_j^2}{2T_j}},$$

а потери энергии в столкновениях с отскоком через реституционную часть D_{ii}^{res} :

$$D_{ij}^{res} = \sigma_{ij}^{2} \iiint d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e} \ (1 - P_{ij}) \ \left(\frac{v_{i}^{2}}{3} - \frac{v_{i}^{\prime 2}}{3}\right) \theta \left(-\left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j}\right) \cdot \vec{e}\right) \left|\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j} \cdot \vec{e}\right|$$

$$\times \left(\frac{m_{i}}{2\pi T_{i}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_{i}v_{i}^{2}}{2T_{i}}} \left(\frac{m_{j}}{2\pi T_{j}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_{j}v_{j}^{2}}{2T_{j}}}.$$
(26)

В итоге мы приходим к следующей системе обобщенных уравнений Смолуховского для температур:

$$\frac{d}{dt}\left(n_{k}\theta_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}\left(\theta_{i},\theta_{j}\right)n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}\left(\theta_{k},\theta_{j}\right)n_{k}n_{j}.$$
(27)

Приложение А содержит точные выражения для ядер *B* и *D*.

Аналогично мы можем учесть скорости потоков (когда они отличны от нуля), если мы добавим в кинетический интеграл полную скорость $\vec{V}_k = \vec{v}_k + \vec{u}_k$, которая включает в себя скорость потока \vec{u}_k . Это будет сделано в разделе 3.1 при выводе уравнений Смолуховского-Эйлера.

В следующих подразделах мы сосредоточимся на возможных расширениях или упрощениях зависящих от температуры уравнений Смолуховского: мы строим точные решения, выводим распределение температуры в неагрегирующих системах, рассматриваем влияние тройных столкновений, а также то, как сильно распределение скоростей в агрегирующих системах отличается от распределения Максвелла.

2.2. Точные решения

К сожалению, система температурно-зависимых уравнений Смолуховского для баллистической агрегации в общем случае аналитически не разрешима (как и система классических уравнений Смолуховского). С другой стороны, чтобы лучше понять новую систему, важно иметь несколько точных решений для каких-либо ядер. Для этого выпишем еще раз всю систему в целом:

$$\frac{d}{dt}n_{k} = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}(T_{i}, T_{j})n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}(T_{k}, T_{j})n_{k}n_{j}.$$

$$\frac{d}{dt}(n_{k}T_{k}) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}(T_{i}, T_{j})n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}(T_{k}, T_{j})n_{k}n_{j}.$$
(28)

Здесь мы возвращаемся обратно к невзвешенной температуре T_i и соответствующим образом меняем ядра. Тщательно подобрав ядра B и D и то, как ядро C зависит от температуры, мы можем получить (бесконечно много) точных решений, аналогичных нескольким известным решениям для классического случая. Например, если $T_i = i \cdot f(t)$ и $C_{ij} = T_i + T_j = (i + j)f(t)$, то форма решения будет такой же, как для линейного ядра. Аналогично, решение будет существовать для $T_i = T_j$. Примеры таких решений с f(t) = 1 представлены в таблице 1. Для $f(t) \neq$ const примеры представлены в таблице 2. Если понижение температуры происходит слишком быстро, можно даже увидеть «замерзание», т.е., когда эволюция системы останавливается и общая плотность не стремится к нулю. Такое «замерзание» распределения плотностей числа частиц может даже предотвратить гелеобразование. Напротив, задав D достаточно большим и отрицательным приведет к бесконечным температурам за конечное время. Здесь мы не рассматриваем возможность физической реализации таких сценариев. Точные решения полезны, главным образом, для проверки сходимости численных схем.

2.3. Системы без агрегации. Распределение кинетической энергии для гранулярных газов и смесей гранулярного и молекулярного газов

В этом разделе мы обсуждаем изменение температуры гранулярных газов без агрегации. Распределение плотностей числа частиц по размерам в этом случае остается фиксированным.

C_{ij}	B_{ij}	D_{ij}	T_k	n_k
$T_i + T_j$	$T_i + T_j$	$T_i + T_j$	1	$\left(\frac{t}{t+1}\right)^{k-1} \left(1+t\right)^{-2}$
$\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}$	$\left(\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}\right) \left(T_i + T_j\right)$	$\left(\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}\right)T_i$	k	$\left(\frac{t}{t+1}\right)^{k-1} (1+t)^{-2}$
$iT_i + jT_j$	$iT_i + jT_j$	$iT_i + jT_j$	1	$\frac{k^{k-1}}{k!}e^{-t}\left(1-e^{-t}\right)^{k-1}e^{-k\left(1-e^{-t}\right)}$
$T_i + T_j$	$\left(T_i + T_j\right)^2$	$\left(T_i + T_j\right)T_i$	k	$\frac{k^{k-1}}{k!}e^{-t}\left(1-e^{-t}\right)^{k-1}e^{-k\left(1-e^{-t}\right)}$

Таблица 1: Некоторые точные решения с не зависящими от времени температурами для особых случаев системы (28).

Таблица 2: Некоторые точные решения с зависящими от времени температурами для особых случаев системы (28).

C _{ij}	B_{ij}	D_{ij}	T_k	n_k
$T_i + T_j$	$\left(T_i+T_j\right)^2/2$	$\left(T_i + T_j\right)^2 / 2 \pm jT_i$	$e^{\mp t}$	$\left(\frac{\pm(1-e^{\mp t})}{1\pm(1-e^{\mp t})}\right)^{k-1} \left(1\pm(1-e^{\mp t})\right)^{-2}$
$T_i + T_j$	$\left(T_i + T_j\right)^2$	$\left(T_i + T_j + 1\right) T_i$	$\frac{k}{1+t}$	$\frac{k^{k-1}}{k!(1+t)} \left(\frac{t}{t+1}\right)^{k-1} e^{-kt/(1+t)}$
T_iT_j	$T_i T_j \left(T_i + T_j \right)$	$T_i T_j \left(T_i + 1 \right)$	$\frac{k}{1+t}$	$\frac{k^{k-3}}{(k-1)!} \left(\frac{t}{1+t}\right)^{k-1} e^{-kt/(1+t)}$
$\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}$	$\left(\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}\right) \left(T_i + T_j\right)$	$\left(2\frac{T_i}{i}+\frac{T_j}{j}\right)T_i$	$\frac{k}{\sqrt{1+2t}}$	$\left(1 - \frac{1}{\sqrt{1+2t}}\right)^{k-1} (1+2t)^{-1}$
$\boxed{\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}}$	$\left(\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}\right) \left(T_i + T_j\right)$	$\left(\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j} - T_j\right)T_i$	$\frac{k}{1-t}$	$\left(\frac{-\ln(1-t)}{1-\ln(1-t)}\right)^{k-1} (1-\ln(1-t))^{-2}$

По сравнению с агрегирующими гранулярными газами, распределение температуры в случае без агрегации довольно просто аппроксимировать.

Поскольку частицы не агрегируют, мы можем использовать систему (7):

$$\frac{d}{dt}T_i = -T_i \sum_{j=1}^{\infty} \xi_{ij}, \quad i = \overline{1, \infty}$$
(29)

С

$$\xi_{ij} = \frac{8}{3}\sqrt{2\pi}n_j\sigma_{ij}^2\sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}}\frac{m_j}{m_i + m_j} (1+\varepsilon) \left[1 - \frac{1}{2}(1+\varepsilon)\frac{T_im_j + T_jm_i}{T_i(m_i + m_j)}\right].$$
 (30)

Напомним, что система (7) использует предположение о распределении Максвелла для скоростей. Однако, это предположение можно опустить, сделав разложение по полиномам Сонина, как в [105], что мы сделаем в разделе 2.5 для агрегирующих систем. Однако, как следует из численных результатов далее в этом разделе, система (29) уже обеспечивает достаточно хорошую точность, поскольку решение близко к результатам прямого моделирования Монте-Карло.

Хорошо известно, что постоянный коэффициент восстановления не встречается на практике. Чтобы сделать наши уравнения более общими и приближенными к реальности, мы можем использовать средние (эффективные) коэффициенты восстановления $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ и $\langle \varepsilon_{ij}^2 \rangle$, которые зависят от масс частиц и их температур и могут быть вычислены как

$$\left\langle \varepsilon_{ij} \right\rangle = \frac{\iint d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e} f(v_i) f(v_j) \left| \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \cdot \vec{e} \right|^3 \varepsilon \left(\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \cdot \vec{e}; m_i, m_j \right)}{\iint \vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e} f(v_i) f(v_j) \left| \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) \cdot \vec{e} \right|^3}$$
(31)

И

$$\left\langle \varepsilon_{ij}^{2} \right\rangle = \frac{\iint d\vec{v}_{i}d\vec{v}_{j}d\vec{e}f(v_{i})f(v_{j})\left| \left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j}\right)\cdot\vec{e}\right|^{3}\varepsilon^{2}\left(\left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j}\right)\cdot\vec{e};m_{i},m_{j}\right)}{\iint \vec{v}_{i}d\vec{v}_{j}d\vec{e}f(v_{i})f(v_{j})\left| \left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j}\right)\cdot\vec{e}\right|^{3}}.$$

Отметим, что иногда эффективный коэффициент восстановления неверно вычисляется через $|(\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{e}|$ вместо $|(\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{e}|^3$ и при использовании $(\langle \varepsilon_{ij} \rangle)^2$ вместо $\langle \varepsilon_{ij}^2 \rangle$, что увеличивает ошибку.

Вместе с (31), уравнение (30) превращается в

$$\xi_{ij} = \frac{8}{3} \sqrt{2\pi} n_j \sigma_{ij}^2 \sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}} \\ \times \left(\frac{m_j}{m_i + m_j} \left[1 - \frac{m_j}{2(m_i + m_j)} \left(1 + \left\langle \varepsilon_{ij} \right\rangle \right) \left(1 + \frac{T_j m_i}{T_i m_j} \right) \right] \\ + \frac{m_j}{m_i + m_j} \left[\left\langle \varepsilon_{ij} \right\rangle - \frac{m_j}{2(m_i + m_j)} \left(\left\langle \varepsilon_{ij} \right\rangle + \left\langle \varepsilon_{ij}^2 \right\rangle \right) \left(1 + \frac{T_j m_i}{T_i m_j} \right) \right] \right).$$
(32)

Поскольку $\varepsilon \to 1$, когда относительная скорость стремится к 0, мы имеем $\langle \varepsilon_{ij} \rangle \to 1$. В этом случае для больших размеров *i* температура T_i уменьшается только в том случае, когда T_j/T_i меньше 1 для малых размеров *j*, которые содержат большую часть массы. Следовательно, более крупные частицы не могут иметь (асимптотически) более низкую температуру, даже если для них существует какой-то дополнительный источник энергии.

С другой стороны, без какого-либо дополнительного источника энергии система в конечном итоге достигает энергетического равновесия. Действительно, из (29) следует, что любое другое предельное распределение должно иметь $\frac{d \ln T_i}{dt}$ независимо от *i*. С другой стороны, анализ на основе теории масштабирования уравнения (32) затем приводит к $T_i \sim m_i^{-1/3}$, что невозможно, поскольку, как упоминалось ранее, температуры не могут уменьшаться с размером. Однако, сходимость к температурному равновесию происходит медленно (см. рисунок 4а), и во время эволюции все еще можно наблюдать большие температурные различия.

Более интересная ситуация возникает, когда есть источник энергии. Для общего случая гауссова термостата, имеем

$$\frac{dT_i}{dt} = \Gamma m_i^{\gamma} - T_i \sum_{j=1}^{\infty} \xi_{ij}.$$

Большие значения $\gamma > 0$ приводит к тому, что к частицам с большей массой поступает больше энергии. Например, при применении случайной силы \vec{F} (force-controlled driving), мы имеем

$$\frac{dT_i}{dt} \sim m \frac{d\left<\vec{v}_i^2\right>}{dt} \sim m \left<\left|\vec{F}/m\right|^2\right> \sim m^{-1}$$



(а) Эволюция гранулярных (парциальных) температур T_k при однородном охлаждении. Сплошные линии иллюстрируют решение системы уравнений (29) с ξ_{ki} из (32). Пунктирные линии показывают эволюцию T_k/T_1 частиц, сталкивающихся с эффективным коэффициентом восстановления $(\langle \varepsilon_{ij} \rangle)^2$ вместо $\langle \varepsilon_{ij}^2 \rangle$. Точки – это результаты прямого моделирования методом Монте-Карло.



(b) Зависимость температур T_k от приведенной массы частиц $k = m_k/m_1$ для гранулярного газа с внешним нагревом для различных моделей коэффициентов восстановления: вязкоупругой модели, упруго-пластической модели и экспоненциальной модели. Все результаты получены с использованием прямого моделирования методом Монте-Карло. Пунктирными линиями обозначены предсказанные теоретически наклоны графиков.



(с) Зависимость температур гранул T_k от приведенной массы частиц $k = m_k/m_1$ для гранулярного газа, погруженного в молекулярный газ, при постоянном коэффициенте восстановления. Все результаты получены с использованием прямого моделирования Монте-Карло. Пунктирные линии показывают теоретические предсказания равновесной температуры.

Рис. 4: Прямое моделирование Монте-Карло (DSMC) неагрегирующих гранулярных газов с плотностями числа частиц $n_k \sim k^{-3}$. Моделирование DSMC выполнено автором. Численные решения уравнений получены Анной Бодровой, см. [79, 106].

и потому $\gamma = -1$.

Для случая, когда скорость каждой частицы изменяется на некоторую случайную величину $\Delta \vec{v}$ (velocity-controlled driving), мы имеем

$$\frac{dT_i}{dt} \sim m \frac{d\left\langle \vec{v}_i^2 \right\rangle}{dt} \sim m \left\langle \left| \Delta \vec{v} \right|^2 \right\rangle \sim m^1$$

и потому $\gamma = 1$. $\gamma = 0$ соответствует случаю, когда частицы разной массы получают одинаковое количество энергии.

Анализ скоростей роста для уравнения (32) затем приводит к распределениям

$$T_i \sim m_i^{\alpha}$$

С

$$\alpha = \begin{cases} \frac{5}{9} + \frac{2}{3}\gamma, & \text{if} \qquad \gamma \ge \frac{2}{3}, \\ \gamma + \frac{1}{3}, & \text{if} \qquad -\frac{1}{3} \le \gamma \le \frac{2}{3}. \end{cases}$$
(33)

Меньшие значения γ приводят к выравниванию температур ($\alpha = 0$). Приложение В содержит полный анализ масштабирования. Удивительно, но зависимость температуры от размера частиц (масштабирование) не зависит от конкретной модели коэффициента восстановления, как показано на рисунке 4b. Дополнительную информацию об используемых моделях можно найти в [79]. Более естественный термостат, чем описанный выше, создается благодаря присутствию молекулярного газа с температурой T_g и массой молекул m_g . Он влияет на температуру так [106]:

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{8}{3}\sqrt{2\pi}n_g \frac{\sigma_i^2}{m_i}\sqrt{m_g T_g} \left(T_g - T_i\right) \sim m_i^{-1/3}.$$

Получаем случай $\gamma = -1/3$, что приводит к равномерному распределению температуры (см. рисунок 4с). Мы ссылаемся на [106], где проведен более подробный анализ.

2.4. Тройные столкновения. Скорости реакции для тройных соударений при баллистическом транспорте

Как показано в разделе 1.2, полная частота соударений между частицами размера *i* и *j* составляет

$$C_{ij}n_in_j = \iiint K_{ij} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e} \right) f_i \left(\vec{v}_i \right) f_j \left(\vec{v}_j \right) d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e},$$

где K_{ij} – частота столкновений между частицами размера *i* и *j* со скоростями \vec{v}_i и \vec{v}_j и направлением столкновения \vec{e} . Очевидно, что эта частота зависит от скоростей частиц только через разность $\vec{v}_i - \vec{v}_j$.

Пусть $f_i(\vec{v}_i)$ – распределение скоростей частиц размера *i*, которое мы будем считать максвелловским

$$f_i(\vec{v}_i) = f_i^M(\vec{v}_i) = n_i \left(\frac{i}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-\frac{i|\vec{v}_i|^2}{2T}},$$

где мы использовали единичную массу $m_i = i$.

Если обозначить через $\vec{v}_{C.M.} = \frac{i\vec{v}_i + j\vec{v}_j}{i+j}$ скорость центра масс пары сталкивающихся кластеров, то

$$f_i\left(\vec{v}_i\right)f_j\left(\vec{v}_j\right) = f_{i+j}\left(\vec{v}_{C.M.}\right)f_{\frac{ij}{i+j}}\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right),$$

где $\frac{ij}{i+j}$ – приведенная масса, а общая частота столкновений равна

$$C_{ij}n_{i}n_{j} = \iiint K_{ij} \left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j}, \vec{e} \right) f_{i+j} \left(\vec{v}_{C.M.} \right) f_{\frac{ij}{i+j}} \left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j} \right) d\left(\vec{v}_{i} - \vec{v}_{j} \right) d\vec{e} d\vec{v}_{C.M.}$$

Обратим внимание, что при появлении третьей частицы скорость тройного столкновения будет зависеть только от $\vec{v}_{C.M.}$ первых двух частиц. Следовательно, мы можем заранее проинтегрировать по \vec{e} и $\vec{v}_i - \vec{v}_j$.

В случае баллистической агрегации с мономерами единичной массы и диаметра $m_1 = 1, R_1 = 1/2$, мы получаем после нормировки T = 1:

$$C_{ij} = \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}.$$

Обозначим n_{ij} число пар частиц *i* и *j*, которые находятся в процессе столкновения в некоторый определенный момент времени. Пусть τ_{ij} ($\vec{v}_i - \vec{v}_j$, \vec{e}) обозначает длительность столкновения частиц размером *i* и *j* со скоростями \vec{v}_i и \vec{v}_j , сталкивающихся в направлении \vec{e} . Тогда

$$n_{ij} = \left\langle \tau_{ij} \right\rangle C_{ij} n_i n_j,$$

где среднее время столкновений можно вычислить как

$$\left\langle \tau_{ij} \right\rangle = \frac{\iint \tau_{ij} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e} \right) K_{ij} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e} \right) f_{\frac{ij}{i+j}} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) d(\vec{v}_i - \vec{v}_j) d\vec{e}}{\iint K_{ij} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e} \right) f_{\frac{ij}{i+j}} \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j \right) d(\vec{v}_i - \vec{v}_j) d\vec{e}} = \frac{\left\langle \tau_{ij} K_{ij} \right\rangle}{\left\langle K_{ij} \right\rangle}.$$
(34)

Заметим, что усреднение в (34) сделано так, что, по определению $\langle \tau_{ij} \rangle$, мы получаем $\langle \tau_{ij} K_{ij} \rangle = \langle \tau_{ij} \rangle \langle K_{ij} \rangle$.

В случае баллистической агрегации частота рассчитывается на основе цилиндра столкновения

$$K_{ij}\left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j},\vec{e}\right)=\theta\left(\left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j}\right)\cdot\vec{e}\right)\left|\left(\vec{v}_{i}-\vec{v}_{j}\right)\cdot\vec{e}\right|\sigma_{ij}^{2}$$

Предполагая, что потенциал U_{ij} между парой сталкивающихся частиц зависит от сжатия *x* как $U_{ij} = U_* x^{\alpha}$, мы получаем из сохранения энергии, что

$$\tau_{ij}\left(\vec{v}_i - \vec{v}_j, \vec{e}\right) = \tau_* \left(\frac{ij}{i+j}\right)^{1/\alpha} \left| \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \vec{e} \right|^{2/\alpha - 1},$$

где τ_* – константа, зависящая от свойств потенциала. Для случая $\alpha = 2$, который соответствует закону Гука,

$$\langle \tau_{ij} \rangle = \tau_* \left(\frac{ij}{i+j} \right)^{1/2}.$$
 (35)

Обозначим теперь через $\alpha = \alpha$ (*i*, *j*) вероятность агрегации. Тогда общее количество кластеров размера *k*, которые находятся в процессе агрегации в текущий момент времени, равно

$$n_k^A = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \alpha \left\langle \tau_{ij} \right\rangle C_{ij} n_i n_j, \tag{36}$$

а общее число происходящих в данный момент столкновений с отскоком с участием частиц размера *k* равно

$$n_k^B = \sum_j \left(1 - \alpha\right) \left\langle \tau_{kj} \right\rangle C_{kj} n_k n_j.$$
(37)

Здесь и далее мы пренебрегаем слагаемыми порядка $O(\tau_*^2)$.

Если мы учтем только бинарные столкновения, то получим уравнения

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \alpha C_{ij} \left(n_i - n_i^A - n_i^B \right) \left(n_j - n_j^A - n_j^B \right)$$
$$- \sum_j \alpha C_{kj} \left(n_k - n_k^A - n_k^B \right) \left(n_j - n_j^A - n_j^B \right).$$

Заметим, что они уже отличаются от стандартных уравнений Смолуховского. Это связано с тем, что частицы n_k^A и n_k^B могут агрегировать только при тройных столкновениях, так как в данный момент уже по определению участвуют в бинарном столкновении. А потому при появлении третьей частицы, столкновение уже будет тройным.

Теперь добавим столкновения с частицами n_k^A . Поскольку они еще не агрегировали в один цельный кластер, такие столкновения будут *тройными*. Если мы обозначим через $\beta = \beta(i, j)$ вероятность тройного столкновения, приводящего к агрегации, мы получим

$$\frac{dn_{k}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \alpha C_{ij} \left(n_{i} - n_{i}^{A} - n_{i}^{B} \right) \left(n_{j} - n_{j}^{A} - n_{j}^{B} \right)
- \sum_{j} \alpha C_{kj} \left(n_{k} - n_{k}^{A} - n_{k}^{B} \right) \left(n_{j} - n_{j}^{A} - n_{j}^{B} \right)
+ \sum_{i+j=k} \beta C_{ij} n_{i}^{A} n_{j} - \sum_{j} \beta C_{kj} n_{k}^{A} n_{j} - \sum_{j} \beta C_{kj} n_{k} n_{j}^{A}.$$
(38)

Заметим, что, так как β в общем случае зависит от размеров, мы также можем учесть в β то, как изменяется размер кластера в процессе столкновения. А именно, две отдельные частицы имеют диаметры $i^{1/3}$ и $j^{1/3}$, что может приводить к большему числу столкновений, чем будет иметь конечная частица с диаметром $(i + j)^{1/3}$. Если мы не учитываем тот факт, что форма агрегата непрерывно меняется, мы можем предположить, что переход к конечной форме будет мгновенным, так что радиус агрегата мгновенно становится $(i + j)^{1/3}$ в начале бинарного столкновения. В противном случае можно предположить, например, что частицы остаются в некоторой структуре с большим средним диаметром в течение некоторого времени, прежде чем они сжимаются в сферическую форму с диаметром $(i + j)^{1/3}$. В течение этого времени размер частицы меняется, и она агрегирует с другой скоростью, что может быть включено в параметре β . Например, если мы предположим, что во время столкновения диаметр частицы составляет $i^{1/3} + j^{1/3}$ вместо $(i + j)^{1/3}$, не меняя вероятность агрегации, то, с учетом изменения площади основания цилиндра столкновения, получим $\beta = \left(\frac{i^{1/3}+j^{1/3}}{(i+j)^{1/3}}\right)^2 \alpha$. Следовательно, у нас будет $\beta > \alpha$. В итоге полстановка (36) и (37) в (38) приводить в

с

$$\frac{dn_{k}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \alpha C_{ij} n_{i} n_{j} - \sum_{j} \alpha C_{kj} n_{k} n_{j}
+ \frac{\alpha \left(\beta - \alpha\right)}{2} \sum_{i+j+l=k} C_{ijl}^{(1)} n_{i} n_{j} n_{l} - \sum_{i} \sum_{j} \frac{\alpha \left(\beta - \alpha\right)}{2} C_{ijk}^{(1)} n_{i} n_{j} n_{k} - \sum_{i+j=k} \sum_{l} \frac{\alpha \left(\beta - \alpha\right)}{2} C_{ijl}^{(1)} n_{i} n_{j} n_{l} \quad (39)
- \sum_{i+j=k} \sum_{l} \alpha \left(1 - \alpha\right) C_{ijl}^{(2)} n_{i} n_{j} n_{l} + \sum_{i} \sum_{l} \alpha \left(1 - \alpha\right) C_{ikl}^{(2)} n_{i} n_{k} n_{l} + \sum_{j} \sum_{l} \alpha \left(1 - \alpha\right) C_{kjl}^{(2)} n_{k} n_{j} n_{l},
C_{ijl}^{(1)} = \langle \tau_{ij} \rangle C_{ij} C_{i+j} l_{k}$$

$$C_{ijl}^{(2)} = \langle \tau_{ij} \rangle C_{ij} C_{i+j},$$

$$C_{ijl}^{(2)} = \langle \tau_{jl} \rangle C_{ij} C_{jl}.$$

Подстановка уравнения для $\langle \tau_{ij} \rangle$ (35) приводит к баллистическим ядрам агрегации вида

$$\begin{split} C_{ijl}^{(1)} &= \tau_* \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left((i+j)^{1/3} + l^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{1}{i+j}} + \frac{1}{l}, \\ C_{ijl}^{(2)} &= \tau_* \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left(j^{1/3} + l^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{1}{j}} + \frac{1}{l}. \end{split}$$

Мы также можем переписать ту же систему для непрерывных уравнений Смолуховского:

$$\begin{split} \partial_t n(m,t) &= \int_0^\infty \frac{\alpha}{2} C(m_1,m_2) n(m_1,t) n(m_2,t) \left[\delta(m-m_1-m_2) \right. \\ &\quad - \left. \delta(m-m_1) - \delta(m-m_2) \right] dm_1 dm_2 \\ &\quad + \int_0^\infty \frac{\alpha \left(\beta - \alpha\right)}{2} C^{(1)}(m_1,m_2,m_3) n(m_1,t) n(m_2,t) n(m_3,t) \left[\delta(m-m_1-m_2-m_3) \right. \\ &\quad - \left. \delta(m-m_1-m_2) - \delta(m-m_3) \right] dm_1 dm_2 dm_3 \\ &\quad - \int_0^\infty \alpha \left(1 - \alpha\right) C^{(2)}(m_1,m_2,m_3) n(m_1,t) n(m_2,t) n(m_3,t) \left[\delta(m-m_1-m_2) \right. \\ &\quad - \left. \delta(m-m_1) - \delta(m-m_2) \right] dm_1 dm_2 dm_3. \end{split}$$

Чтобы получить стандартные тройные столкновения, которые случаются, когда бинарных столкновений нет, нам нужно ввести новый случай. Пусть отскакивающие частицы объединяются с третьей частицей с вероятностью γ . То есть мы позволяем кластеру размера i + j + k формироваться даже тогда, когда кластер размера i + j не образовался бы при бинарном столкновении. Тогда (38) будет иметь дополнительные условия

$$\sum_{i+j+l=k} \gamma C_{i+j,l} \left(\frac{\langle \tau_{ij} \rangle}{2} (1-\alpha) C_{ij} n_i n_j \right) n_l - \sum_j \sum_l \gamma K_{k+j,l} \left(\frac{\langle \tau_{kj} \rangle}{2} (1-\alpha) C_{kj} n_k n_j \right) n_l - \sum_i \sum_l \gamma C_{i+k,l} \left(\frac{\langle \tau_{ik} \rangle}{2} (1-\alpha) C_{ik} n_i n_k \right) n_l - \sum_i \sum_j \gamma K_{i+j,k} \left(\frac{\langle \tau_{ij} \rangle}{2} (1-\alpha) C_{ij} n_i n_j \right) n_k,$$

где $\frac{\langle \tau_{ij} \rangle}{2} (1 - \alpha) C_{ij} n_i n_j$ – это число отскакивающих пар кластеров размера *i* и *j* (1/2 вводится из-за счета как пар *i*, *j*, так и *j*, *i*).

В нашем случае баллистической агрегации можно вывести

$$C_{ijl}^{(3)} = C_{ijl}^{(1)}$$

и получить следующие дополнительные слагаемые в (39):

$$\sum_{i+j+l=k} \gamma(1-\alpha) C_{ijl}^{(3)} n_i n_j n_l - \sum_j \sum_l \gamma(1-\alpha) C_{kjl}^{(3)} n_k n_j n_l - \sum_i \sum_l \gamma(1-\alpha) C_{ikl}^{(3)} n_i n_k n_l$$
$$- \sum_i \sum_j \gamma(1-\alpha) C_{ijk}^{(3)} n_i n_j n_k$$

или, в непрерывном случае,

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\gamma (1-\alpha)}{2} C^{(3)} (m_1, m_2, m_3) n(m_1, t) n(m_2, t) n(m_3, t) [\delta (m - m_1 - m_2 - m_3) - \delta (m - m_1) - \delta (m - m_2) - \delta (m - m_3)] dm_1 dm_2 dm_3.$$

2.4.1. О тройных столкновениях при броуновской агрегации

В модели броуновской агрегации понятие столкновения имеет несколько иное значение. А именно, пока одна частица находится в контакте с другой, то происходит процесс агрегации, ведущий с некоторой вероятностью к объединению. Однако, когда частица находится далеко, эта вероятность падает экспоненциально (см. раздел 1.1). Таким образом, мы не можем определить продолжительность столкновения так же, как для баллистической агрегации, поскольку в теории броуновской агрегации все частицы постоянно находятся в состоянии «контакта» друг с другом (согласно модели из раздела 1.1), когда расстояние между их поверхностями меньше l (они находятся в пограничном слое друг друга). Если мы попытаемся создать аналог, например, большей вероятности агрегации в случае столкновения трех частиц, то здесь это будет означать, что скорость агрегации для текущего кластера увеличивается всякий раз, когда в пограничном слое появляется новая частица. Таким образом, будет просто менятся скорость агрегации $1/\tau$, которая уже определена в разделе 1.1, в первом приближении линейно с частотой столкновений:

$$\tau = \tau_0 / \left(1 + \delta \sum_k \left(D_i + D_k \right) \left(R_i + R_k \right) n_k \right), \tag{40}$$

где коэффициент δ должен быть небольшим, чтобы аппроксимация работала. При необходимости аналогичным образом могут быть введены более сложные зависимости. Следовательно, тот факт, что кластер находится в состоянии столкновения с каким-либо третьим кластером, повлияет только на само ядро бинарного столкновения, и никакие другие дополнительные слагаемые не появятся. Теперь плотность числа частиц также будет находиться в самом ядре, но никаких других изменений не требуется, кроме указанного переопределения длительности столкновения (40).

2.5. Немаксвелловское распределение. Вид распределения скоростей частиц в системах с баллистической агрегацией

В разделе 2.1 мы предположили, что распределение скоростей частиц является максвелловским. Однако, это не всегда так. Например, в системах с аннигиляцией [81] было показано, что распределение скоростей отличается от распределения Максвелла, и было построено его приближения полиномами Сонина. Полиномы Сонина также используются для аппроксимации Полиномы Сонина могут быть определены как

$$S_n(x) = \frac{2^n}{n!(2n+1)!!} x^{-1/2} e^x \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x} x^{n+1/2} \right).$$
(41)

Они ортогональны в гауссовой мере

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint S_i(v^2/2)S_j(v^2/2)e^{-v^2/2} d\vec{v} = 0, \quad i \neq j.$$

Когда i = j,

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint S_i^2 (v^2/2) e^{-v^2/2} d\vec{v} = \frac{2^n}{n!(2n+1)!!}$$

Мы можем аппроксимировать любую сферически симметричную функцию распределения скоростей, используя эти полиномы следующим образом:

$$f_{k}(\vec{v}_{k}) = \left(\frac{1}{2\pi\theta_{k}}\right)^{3/2} e^{-\frac{v_{k}^{2}}{2\theta_{k}}} \left(1 + \sum_{j=2}^{\infty} \alpha_{k}^{(j)} S_{j}\left(v_{k}^{2}/2\theta_{k}\right)\right) = f_{k,M}(\vec{v}_{k}) \left(1 + \sum_{j=2}^{\infty} \alpha_{k}^{(j)} S_{j}\left(v_{k}^{2}/2\theta_{k}\right)\right), \quad (42)$$

где $f_{k,M}(\vec{v}_k)$ – это распределение Максвелла.

 $J_{k,M}(v_k)$ – это распределение инакерелли. Коэффициенты $\alpha_k^{(j)}$ могут быть определены путем вычисления средних значений $\left\langle S_j\left(\frac{v_k^2}{2\theta_k}\right) \right\rangle$. Поскольку каждое среднее вычисляется как

$$\left\langle S_j\left(\frac{v_k^2}{2\theta_k}\right)\right\rangle = \iiint S_j\left(\frac{v_k^2}{2\theta_k}\right)f_k\left(\vec{v}_k\right) \ d\vec{v}_k,$$

то в каждом случае останется только коэффициент α_k^j и обнулятся все остальные. Обращаем внимание, что $\alpha_k^{(0)}$ и $\alpha_k^{(1)}$ обращаются в нуль из-за условий, что полная вероятность наличия скорости должна быть равна 1

$$\iiint f_k\left(\vec{v}_k\right) d\vec{v}_k = 1,\tag{43}$$

и что средняя кинетическая энергия связана с температурой как

$$\iiint \frac{v_k^2}{2} f_k\left(\vec{v}_k\right) d\vec{v}_k = \frac{3}{2} \theta_k.$$
(44)

Если мы ограничимся первым ненулевым слагаемым в разложении $\alpha_k = \alpha_k^{(2)}$ и пренебрежем членами, содержащими $\left(\alpha_k^{(2)}\right)^2$, мы получим систему уравнений, аналогичную температурнозависимым уравнениям Смолуховского

$$\frac{2}{15}\frac{d}{dt}\left(n_{k}\alpha_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}P_{ij}\left(\theta_{i},\theta_{j},\alpha_{i},\alpha_{j}\right)n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}R_{kj}\left(\theta_{k},\theta_{j},\alpha_{k},\alpha_{j}\right)n_{k}n_{j}.$$
(45)

Следовательно, с помощью (45), наряду с двумя другими наборами уравнений – для концентраций (25) и температур (27), мы получаем замкнутую систему для n_i , θ_i и α_i .

Для вычисления значений ядер P и R, а также новых значений для ядер C, B и D, которые теперь зависят от α_i , можно использовать специально разработанный код в Mathematica

https://github.com/RodniO/BoltzmannIntegrals/releases/tag/v1.0

Он позволяет интегрировать любые четные многочлены скорости в интеграл Больцмана. Чтобы получить уравнения для системы с аппроксимацией полиномами Сонина, сначала необходимо задать во входных данных (Input)

equalflow = True

поскольку мы пока не ввели разные скорости потока, а затем выбрать соответствующий интеграл:

 C_{ij} : Integral = csonin B_{ij} : Integral = bsonin D_{ij}^{agg} : Integral = daggsonin D_{ij}^{res} : Integral = dressonin P_{ij} : Integral = psonin R_{ij}^{agg} : Integral = raggsonin R_{ij}^{res} : Integral = rressonin

Вывод ядер коэффициентов будет подробно описан на примере коэффициентов для уравнений Эйлера в разделе 3.1.

Осталось выяснить, насколько успешно данное приближение. Чтобы это сделать, рассмотрим случай, когда все столкновения приводят к агрегации. На рисунке 5 показаны отклонения реальных распределений (полученных с помощью прямого моделирования методом Монте-Карло) от распределения Максвелла для $\theta = 1$. На рисунке 6 показано, насколько точно отличие в распределениях может быть аппроксимировано с помощью второго полинома Сонина $S_2(c^2) = S_2(v^2/2) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3}v^2 + \frac{1}{30}v^4$, где $\vec{c} = \frac{\vec{v}}{\sqrt{2\theta}} = \frac{\vec{v}}{\sqrt{2}}$ – безразмерная скорость. При проецировании на компоненту *x* мы получаем многочлен $\frac{1}{10} - \frac{1}{5}v_x^2 + \frac{1}{30}v_x^4$. Следовательно, даже большие значения α_2 (см. рисунок 7) приводят к незначительному общему отклонению.

Мы видим, что приближение верно фиксирует максимумы и минимумы разницы распределений. Теперь обсудим то, каким будет «хвост» распределения скоростей, то есть распределение при скоростях, существенно превышающих тепловую скорость. Подобно случаю неупругих столкновений с отскоком, мы также ожидаем увидеть экспоненциальный «хвост» для агрегационных столкновений. Рассмотрим, почему это так.

При отсутствии источника они лишь исчезают в результате столкновений с другими кластерами. Аналогично рассмотрению столкновений с отскоком [76], определим безразмерную скорость $\vec{c}_1 = \frac{\vec{v}_1}{\sqrt{2\theta_1}}$ и безразмерный интеграл столкновений

$$I(f_1, f_j) = -\iint d\vec{e} d\vec{c}_j \theta \left(-\vec{c}_{1j} \cdot \vec{e}\right) \left|\vec{c}_{1j} \cdot \vec{e}\right| f_1(c_1) f_j(c_j), \qquad (46)$$

где $f_i(c)$ – функции распределения скоростей частиц размера *i* и $\vec{c}_{1j} = \vec{c}_1 - \vec{c}_j$, $\vec{c}_j = \frac{\vec{v}_j}{\sqrt{2\theta_1}}$. Обращаем внимание, что мы масштабируем скорость \vec{v}_j в терминах θ_1 , а не θ_j .

Определим моменты

$$\mu_{1,p} = -\int dc_1 c_1^p \sum_j n_j \sigma_{1j}^2 I(f_1, f_j).$$
(47)

Фиксируя требования на нулевой и второй момент распределения скоростей (43) и (44), мы выводим из уравнений Больцмана для частиц размера 1 следующее соотношение:

$$-\mu_{1,0}f_1(c_1) + \left(\frac{\mu_{1,2}}{3} - \frac{\mu_{1,0}}{2}\right) \left(3 + c_1\frac{\partial}{\partial c_1}\right) f_1(c_1) = \sum_j n_j \sigma_{1j}^2 I\left(f_1, f_j\right), \tag{48}$$

где изменилась только левая часть исходного уравнения (равная df/dt).

Заметим, что если применить гипотезу масштабирования для плотностей числа частиц и распределения скоростей, уравнение (48) становится независимым от времени и, таким образом, позволяет найти вид $f_1(c_1)$.

Рассмотрим высокие скорости $|\vec{c}_1| \gg 1$. Тогда, используя $\vec{c}_{1j} \approx \vec{c}_1$ и $\int d\vec{c}_j f_j(c_j) = 1$, получаем из уравнения (46), что

$$I\left(f_{1},f_{j}\right)\approx-\pi c_{1}f_{1}\left(c_{1}\right).$$
(49)

Используя неравенство $|\vec{c}_1| \gg 1$ снова в (48) и подставляя (49), получаем решение

$$f_1(c_1) \sim \exp\left(-\frac{\pi \sum_j n_j \sigma_{1j}^2}{\frac{\mu_{1,2}}{3} - \frac{\mu_{1,0}}{2}}c_1\right).$$
 (50)

Таким образом, функция распределения для мономеров должна иметь экспоненциальный хвост (распределение должно быть экспоненциальным для больших скоростей). То же самое должно быть верно и для всех размеров кластеров, которые исчезают гораздо быстрее, чем появляются в результате агрегации.

Мы можем приблизительно оценить показатель экспоненты в (50), используя распределение Максвелла с поправкой Сонина для мономеров $\alpha_1 = \alpha_1^{(2)}$ (в выражениях для α верхний индекс (2) используется в качестве индекса полинома Сонина; нижний индекс обозначает размер кластера) и предположение $\theta_j \ll \theta_1$, которое справедливо для всех достаточно больших размеров *j*. Тогда мы получаем из (47), что

$$\mu_{1,0} \approx \sum_{j} n_{j} \sigma_{1j}^{2} \cdot 2\sqrt{\pi} \left(1 - \frac{\alpha_{1}}{30} \right), \quad \mu_{1,2} \approx \sum_{j} n_{j} \sigma_{1j}^{2} \cdot 4\sqrt{\pi} \left(1 + \frac{\alpha_{1}}{10} \right).$$
(51)

В итоге, уравнение (50) превращается в

$$f_1(c_1) \sim \exp\left(-\frac{3\sqrt{\pi}}{1+\alpha_1/2}c_1\right).$$
 (52)

Рисунок 8 показывает, что хвост распределения скоростей для мономеров действительно близок к экспоненциальному. При t = 100 мы имеем $\alpha_1 \approx 1,13$, что приводит к

$$f_1(c_1) \sim \exp(-3, 4c_1)$$

Также видно, что хвост ближе к гауссову для более крупных частиц. Причина этого может заключаться в том, что при столкновении двух частиц из двух максвелловских распределений разных размеров образующиеся кластеры также имеют распределение скоростей по Максвеллу. Относительная скорость (которая имеет другое распределение, нежели скорости сталкивающихся частиц) полностью теряется во время агрегации, в то время как скорость центра масс не зависит от относительной составляющей и остается максвелловской. Следовательно, агрегация имеет тенденцию сохранять гауссово распределение для новых кластеров, хотя и нарушает распределение скоростей их составляющих.



Рис. 5: *х* компонента распределения скоростей при t = 10 и t = 100 для разных размеров по сравнению с нормальным распределением для начальных частиц $3 \cdot 10^7$. Все распределения масштабируются до T = 1.

2.5.1. Распределение скоростей для мономеров

Мы можем найти предельное распределение для мономеров напрямую, если предположим, что распределение других частиц близко к максвелловскому. Действительно, пусть $\theta_s/\theta_1 \rightarrow 0$, когда $t \rightarrow \infty$, где s – коэффициент масштабирования (согласно гипотезе масштабирования его можно выбрать как среднюю массу в системе). Поскольку уравнение (49) выполняется всякий раз, когда $c_1^2\theta_1 \gg \theta_s$, оно должно в пределе выполняться для любого $c_1 > 0$. Подставляя его в



Рис. 6: Абсолютное отличие от нормального распределения для компоненты *x* взвешенного на T = 1 распределения скоростей при t = 10 и t = 100 для разных размеров. Первоначально система содержала $3 \cdot 10^7$ мономеров. Также показано приближение с помощью проекции на многочлен Сонина S_2 : $\frac{1}{10} - \frac{1}{5}v_x^2 + \frac{1}{30}v_x^4$.





Рис. 7: Второй коэффициент Сонина $\alpha^{(2)}$ для нормализованного полинома Сонина $\sqrt{\frac{15}{2}}S_2$ при t = 100, t = 200и t = 400, в зависимости от размера частиц (массы). Начальное количество мономеров в системе составляет 10^7 .

Рис. 8: Безразмерное распределение скоростей при t = 100 для различных размеров кластеров по сравнению с распределением Максвелла и экспоненциальным хвостом. Начальное количество частиц составляет 10^8 .

(48), получаем уравнение

$$-\mu_{1,0}f_1(c_1) + \left(\frac{\mu_{1,2}}{3} - \frac{\mu_{1,0}}{2}\right) \left(3 + c_1\frac{\partial}{\partial c_1}\right) f_1(c_1) = -\pi c_1 f_1(c_1) \sum_j n_j \sigma_{1j}^2,$$
(53)

которое верно для любого $c_1 > 0$ в пределе $t \to \infty$.

Обозначим

$$\mu_0 = \frac{\mu_{1,0}}{\sum_j n_j \sigma_{1j}}, \quad \mu_2 = \frac{\mu_{1,2}}{\sum_j n_j \sigma_{1j}}$$

Решением уравнения (53) является функция

$$f_1(c) = Ac^{\frac{5}{2}\mu_0 - \mu_2}_{\frac{\mu_2/3 - \mu_0/2}{2}} e^{-\frac{\pi}{\mu_2/3 - \mu_0/2}c}.$$
(54)

Коэффициенты μ_0 и μ_2 могут быть найдены в пределе $t \to \infty$ из соотношения

$$\mu_p \approx -\int dc_1 c_1^p \lim_{j \to \infty} I(f_1, f_j), \quad p = \{0, 2\}.$$
(55)

Коэффициент А может быть найден из условия

$$\int f_1(c) \, d\vec{c} = 1,$$

которое дает

$$A = \frac{\left(\frac{\pi}{\mu_2/3 - \mu_0/2}\right)^{\frac{\mu_0}{\mu_2/3 - \mu_0/2}}}{4\pi\Gamma\left(\frac{\mu_0}{\mu_2/3 - \mu_0/2}\right)}.$$
(56)

С другой стороны, тот факт, что с является безразмерной скоростью, дает

$$\int c^2 f_1(c) \, d\vec{c} = \frac{3}{2}$$

приводя к

$$\mu_2 = \frac{9\pi^2}{2\mu_0} - \frac{3}{2}\mu_0$$

Тогда предельное распределение (54) принимает вид:

$$f_{1}(c) = \frac{\left(\frac{2\pi\mu_{0}}{3\pi^{2} - 2\mu_{0}^{2}}\right)^{\frac{2\mu_{0}^{2}}{3\pi^{2} - 2\mu_{0}^{2}}}}{4\pi\Gamma\left(\frac{2\mu_{0}^{2}}{3\pi^{2} - 2\mu_{0}^{2}}\right)}c^{\frac{8\mu_{0}^{2} - 9\pi^{2}}{3\pi^{2} - 2\mu_{0}^{2}}}e^{-\frac{2\pi\mu_{0}}{3\pi^{2} - 2\mu_{0}^{2}}c}$$
(57)

Для $\mu_0 = \frac{3\pi}{2\sqrt{2}} \approx 3,33$ (соответствующего нулевой степени *c*), получаем

$$f_1(c) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} e^{-2\sqrt{2}c}$$

Мы выдвигаем гипотезу, что степень c действительно сходится к нулю. Причина в том, что если предположить, что конечное распределение является непрерывным при $c \rightarrow 0$, то все остальные предельные точки являются неустойчивыми. Действительно, для c = 0 мы получаем из (48):

$$\frac{\partial f_1(0)}{\partial t} = -\left(\mu_2 - \frac{5}{2}\mu_0\right) f_1(0) - O(\theta_s/\theta_1) f_1(0)$$
(58)

для любого $t < \infty$. Из (58) мы видим, что если степень *c* отрицательна и, следовательно, $\mu_2 > \frac{5}{2}\mu_0$, то $f_1(0)$ уменьшается, в то время как она должна увеличиваться до бесконечности, согласно (57).

И наоборот, если конечная степень *с* положительна и, следовательно, с некоторого момента $\mu_2 < \frac{5}{2}\mu_0$, значение $f_1(0)$ увеличивается, в то время как оно должно уменьшаться до 0, согласно (57). В результате либо степень *с* равна нулю, либо конечное распределение не является непрерывным в нуле.

Заметим, что уравнения (54) и (57) не требуют никаких предположений о виде распределения скоростей для других размеров (кроме $\theta_s/\theta_1 \rightarrow 0$), а потому предельное распределение мономеров *обязано* иметь вид $f_1(c) = Ac^B e^{-D \cdot c}$.

2.5.2. Распределение скоростей больших кластеров

Как видно из рисунков 6 и 8, распределение для больших размеров близко к максвелловскому. Поэтому, в отличие от малых размеров, должна быть возможность аппроксимировать отличие с помощью некоторого небольшого параметра, зависящего от размера, который описывает отклонение от распределения Максвелла. Но сначала необходимо определить функциональную форму этого различия. Здесь будет показано, что второй полином Сонина дает лучшее приближение при аппроксимации распределения скоростей кластеров большого размера.

Предположим, что функции распределения частиц большого размера можно записать в виде

$$f_k(\vec{v}_k) = f_{k,M}(\vec{v}_k) + \varepsilon(k)f_{k,NM}(\vec{v}_k) + o(\varepsilon)$$
(59)

где значение $\varepsilon(k)$ мало для достаточно больших k, а $f_{k,NM}(\vec{v}_k)$ описывает немаксвелловсскую часть распределения. Заметим, что индекс k указывает здесь на зависимость от массы. При численном моделировании наблюдается равномерное распределение температуры для больших кластеров. Следовательно, мы можем использовать одну и ту же единичную температуру $T_k = 1$ для больших кластеров.

Максвелловская часть зависит от размера только через дисперсию скорости, т.е. $f_{k,M}(\vec{v}_k) = f_{1,M}(\vec{v}_k/\sqrt{\theta_k})$. Мы потребуем того же от немаксвелловской части:

$$f_{k,NM}\left(\vec{v}_{k}\right) = f_{1,NM}\left(\vec{v}_{k}/\sqrt{\theta_{k}}\right).$$
(60)

Обоснование этого предположения заключается в том, что мы всегда можем использовать произвольные функции $g_j (v_k / \sqrt{\theta_k})$ для записи ряда

$$f_k\left(\vec{v}_k\right) = f_{k,M}\left(\vec{v}_k\right) + \sum_{j=1}^{\infty} \beta_k^{(j)} g_j\left(v_k/\sqrt{\theta_k}\right),$$

если g_j образуют базис. Одним из примеров такого базиса является разложение по полиномам Сонина (42). Неформально говоря, наша задача здесь состоит в том, чтобы найти наилучшее значение для $f_{k,NM}(\vec{v}_k) = g_1(\vec{v}_k/\sqrt{\theta_k})$ и $\varepsilon(k) = \beta_k^{(1)}$, так что все остальные члены ряда были бы значительно меньше для больших k. То есть мы ищем первый член ряда, который был бы в некотором смысле наилучшим для всех достаточно больших размеров. Чтобы вычислить $f_{k,NM}$, мы подставляем разложение (59) в безразмерное уравнение (48) с зависимостью от времени, пренебрегая членами порядка $O(\varepsilon^2)$:

$$\frac{d\varepsilon(k)}{dt}f_{k,NM}(c_k) - \mu_{k,0}f_k(c_k) + \left(\frac{\mu_{k,2}}{3} - \frac{\mu_{k,0}}{2}\right)\left(3 + c_k\frac{\partial}{\partial c_k}\right)f_k(c_k) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\frac{n_in_j}{n_k}\sigma_{ij}^2I_+\left(f_i, f_j\right),$$
(61)

где $I_+(f_i, f_j)$ отвечает той части интеграла столкновений, которая приводит к образованию агрегатов размера k. Действительно, поскольку мы имеем дело с большими кластерами, доминирует положительный интеграл столкновений $I_+(f_i, f_j)$, поэтому мы исключили «отрицательный» член (отвечающий за столкновения кластеров размера k с другими). Это предположение верно до тех пор, пока в текущий момент времени частоты столкновений приводят к ядру столкновений с показателем масштабирования v < 1, см. [1]. Причина заключается в том, что плотности числа частиц больших кластеров экспоненциально уменьшаются, и, следовательно, обычно происходит гораздо больше столкновений всех возможных размеров i и j, таких, что k = i + j, чем столкновений кластеров размера k с другими кластерами. Известно, что классическое баллистическое ядро имеет v = 2/3 (см. раздел 1.4), и, если отличие от распределения Максвелла не доминирует, показатель степени v не должен измениться.

«Положительный» интеграл столкновения равен

$$I_{+}\left(f_{i},f_{j}\right) = \iiint d\vec{e}d\vec{v}_{i}d\vec{v}_{j}\theta\left(-\vec{v}_{ij}\cdot\vec{e}\right)\left|\vec{v}_{ij}\cdot\vec{e}\right|f_{i}\left(\vec{v}_{i}\right)f_{j}\left(\vec{v}_{j}\right)\delta\left(\vec{v}_{k}-\frac{i\vec{v}_{i}+j\vec{v}_{j}}{i+j}\right).$$
(62)

Тот же интеграл присутствует внутри $\mu_{k,0}$ и $\mu_{k,2}$, определенных в уравнении (47). Поскольку большая часть воздействия исходит от интегралов столкновений для больших размеров ($i \sim k$, $j \sim k$), мы можем подставить выражение (59) для f_i и f_j . Тогда

$$I_{+}(f_{i}, f_{j}) = I_{+}(f_{i,M}(\vec{v}_{i}), f_{j,M}(\vec{v}_{j})) + \varepsilon I_{+}(f_{i,M}(\vec{v}_{i}), f_{j,NM}(\vec{v}_{j})) + \varepsilon I_{+}(f_{i,NM}(\vec{v}_{i}), f_{j,M}(\vec{v}_{j})) + o(\varepsilon)$$

$$= 2\sqrt{2\pi}\sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}f_{k,M}(\vec{v}_{k}) + \varepsilon I_{+}(f_{i,M}(\vec{v}_{i}), f_{j,NM}(\vec{v}_{j})) + \varepsilon I_{+}(f_{i,NM}(\vec{v}_{i}), f_{j,M}(\vec{v}_{j})) + o(\varepsilon),$$
(63)

где мы явно проинтегрировали часть интеграла столкновений, содержащую распределения Максвелла. Затем, подставляя (63) в (61), после упрощений находим,

$$\frac{d\varepsilon(k)}{dt}f_{k,NM}(c_k) + \varepsilon(k)\sqrt{2\pi}\sum_{i+j=k}\frac{n_in_j}{n_k}\sigma_{ij}^2\sqrt{\frac{1}{i}+\frac{1}{j}}f_{k,NM}(c_k)
+ \varepsilon(k)\left(\mu_{k,2,NM} - \frac{5\mu_{k,0,NM}}{2}\right) - 2c_k^2\varepsilon(k)\left(\frac{2\mu_{k,2,NM}}{3} - \mu_{k,0,NM}\right)
= \sum_{i+j=k}\frac{n_in_j}{n_k}\varepsilon(i)\varepsilon(j)\sigma_{ij}^2I_+\left(f_{i,M}, f_{j,NM}\right),$$
(64)

где мы подчеркнули оставшиеся немаксвелловские части $\mu_{k,0}$ и $\mu_{k,2}$.

Предполагая, что для достаточно больших значений *k* коэффициенты $\varepsilon(k)$ не меняют знак и разложение функции $f_{k,NM}$ по полиномам Сонина сходится, можно показать, что наибольшее значение $\varepsilon(k)$ соответствует $f_{k,NM} = S_2 f_{k,M}$, см. Приложение С. Подставляя $f_{k,NM} = S_2 f_{k,M}$ в (64) и обозначая $\varepsilon(k) = \alpha_k^{(2)}$, мы получаем следующее дифференциальное уравнение для $\alpha_k^{(2)}$:

$$\frac{d\alpha_k^{(2)}}{dt} = \sqrt{2\pi} \sum_{i+j=k} \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}} \frac{n_i n_j}{n_k} \sigma_{ij}^2 \left(\frac{i^2 \alpha_i^{(2)} + j^2 \alpha_j^{(2)}}{(i+j)^2} - \alpha_k^{(2)} \right) + \dots$$
(65)

Здесь мы пренебрегли слагаемыми порядка $O\left(\left(\alpha_k^{(2)}\right)^2\right)$. Напомним, что мы также не учитываем отрицательную часть интеграла столкновений и полиномы Сонина большего порядка (которые должны сходиться к 0 с ростом *k* быстрее, чем $\alpha_k^{(2)}$).

Заметим, что уравнение (65) является упрощенной версией общих уравнений 45, допускающей непосредственный анализ. Оно имеет решение только в том случае, если положительные и отрицательные члены внутри скобок в правой части компенсируют друг друга. Действительно, если одно из слагаемых доминирует, то $\alpha_k^{(2)}$ будет зависеть от времени как e^{ct} , всегда сходясь к равновесному состоянию $\alpha_k^{(2)} \sim 1/k$, что, опять же, приводит к тому, что положительные и отрицательные члены в правой части компенсируют друг друга. При эволюции системы любой конкретный размер k в конечном итоге станет меньше, чем средний размер s(t), и, следовательно, на него будут существенно влиять слагаемые, которыми мы пренебрегли (например, отрицательная часть интеграла столкновений). Но, если гипотеза масштабирования верна и существует некая предельная функция масштабирования, то мы должны получить $\alpha_s^2 \sim {\rm const.}$ Так как мы определили (при суммарной единичной массе) $s = n^{-1}$, где n – общая плотность числа частиц, то $1/\alpha_k$ будет линейной функцией от $nk = nm_k$, когда nm_k велико. Рисунок 9 иллюстрирует указанную зависимость. Поскольку было доказано, что распределение для больших размеров близко к распределению Максвелла, мы можем использовать теорию масштабирования для температурно-зависимых уравнений Смолуховского с распределением Максвелла. Поскольку $s \sim t$ для температурно-зависимой баллистической агрегации с вероятностью агрегации, равной 1 [13] (см. также раздел 5.3.1), это приводит к окончательному выражению

$$\alpha_k^{(2)}(t) = O(t/k)$$

Из того факта, что мы пренебрегли слагаемыми порядка $O\left(\left(\alpha_k^{(2)}\right)^2\right)$ и используя индукцию, можно в итоге сделать вывод, что

$$\alpha_k^{(n+1)}(t) = O\left((t/k)^n\right).$$
(66)

Однако, поскольку коэффициенты Сонина более высокого порядка намного меньше, в настоящее время невозможно численно проверить справедливость соотношения (66) в общем случае за разумное время вычислений, даже с миллионами частиц.



Рис. 9: Обратное значение к коэффициенту перед вторым полиномом Сонина $1/\alpha_k^{(2)}$ как функция от nm_k , где n – общая плотность числа частиц. Момент времени t = 100. Начальное количество частиц составляет 10^8 .

Глава 3. Уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем

3.1. Уравнения Смолуховского-Эйлера

Перейдем к рассмотрению пространственно неоднородных уравнений. Прежде всего, учтем ненулевую скорость потока \vec{u}_k для частиц размера k. Предполагая максвелловское распределение скоростей

$$f_k\left(\vec{V}_k\right) = \left(\frac{1}{2\pi\theta_k}\right)^{3/2} e^{-\frac{\left|\vec{V}_k - \vec{u}_k\right|^2}{2\theta_k}},$$

где $\vec{V}_k = \vec{v}_k + \vec{u}_k$ – общая скорость кластеров размера k, а \vec{v}_k – это, как и прежде, скорость в центре масс системы кластеров размера k.

Мы можем вывести уравнения гидродинамики, умножив уравнение Больцмана на \vec{V}_k в нулевой, первой и второй степени и интегрируя по \vec{V}_k . Соответствующие интегралы будут кинетическими интегралами вида (23) с дополнительными коэффициентами 1, \vec{V}_k и $\left|\vec{V}_k - \vec{u}_k\right|^2$ соответственно. Таким образом, мы получаем уравнения для плотностей числа частиц n_k

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}\left(\vec{u}_i, \vec{u}_j, \theta_i, \theta_j\right)n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}\left(\vec{u}_k, \vec{u}_j, \theta_k, \theta_j\right)n_kn_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$

скоростей потоков \vec{u}_k

$$\frac{d}{dt}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\vec{P}_{ij}\left(\vec{u}_{i},\vec{u}_{j},\theta_{i},\theta_{j}\right)n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}\vec{R}_{kj}\left(\vec{u}_{k},\vec{u}_{j},\theta_{k},\theta_{j}\right)n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}$$

и взвешенных температур $\theta_k = T_k/k$

$$\frac{d}{dt}\left(n_{k}\theta_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}\left(\vec{u}_{i},\vec{u}_{j},\vec{u}_{i+j},\theta_{i},\theta_{j}\right)n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}\left(\vec{u}_{k},\vec{u}_{j},\theta_{k},\theta_{j}\right)n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}.$$

Компоненты ядер C, \vec{P}, \vec{R}, B и D равны

$$\begin{split} C_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}} + \theta_{j}}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\\ \vec{P}_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\\ &\times \left(\frac{i\vec{u}_{i}+j\vec{u}_{j}}{i+j}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right)\\ &+ \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{i\theta_{i}-j\theta_{j}}{i+j}\right)\\ &\times \left(\frac{1}{|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}|^{2}}I_{H}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right) - \frac{1}{\theta_{i}+\theta_{j}}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right)\right)\\ \vec{R}_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\\ &\times \left(\vec{u}_{i}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right)\\ &+ \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{\theta_{i}}{|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}|^{2}}I_{H}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right) - \frac{\theta_{i}}{\theta_{i}+\theta_{j}}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right)\\ &+ \frac{1}{2}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\frac{j}{i+j}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)\left(1+\varepsilon\right)\frac{1}{|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}|^{2}}\overline{I_{H}}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right)\end{split}$$

Здесь мы обозначили через I_F , I_G , I_H , I_{GH2} , $\overline{I_G}$, $\overline{I_H}$ и $\overline{I_{GH}}$ некоторые интегралы специального вида. Приложение D содержит явные выражения для этих величин: они достаточно громоздки и потому здесь не приводятся.

Явные значения коэффициентов для ядер *C*, *B* и *D* определяются четными полиномами скоростей частиц и, таким образом, могут быть найдены с помощью уже упомянутого ранее кода Mathematica

https://github.com/RodniO/BoltzmannIntegrals/releases/tag/v1.0

Данный код использовался для вычисления аппроксимации с использованием полинома Сонина S₂ в разделе 2.5. Здесь также просто нужно подключить соответствующий интеграл на

$$C_{ij}$$
: Integral = c
 B_{ij} : Integral = b
 D_{ij}^{agg} : Integral = dagg
 D_{ij}^{res} : Integral = dres

Уравнения Эйлера относятся к идеальным жидкостям без теплопроводности и вязкости. Соответствующие градиентные члены связаны только с кинетической частью и могут быть включены отдельно для каждого размера. Это приводит к трем связанным системам уравнений Смолуховского-Эйлера:

$$\frac{\partial}{\partial t}n_k + \vec{\nabla} \left(n_k \vec{u}_k \right) = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} C_{kj} n_k n_j, \quad k = \overline{1, \infty}, \tag{70}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) + n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\vec{u}_{k} + \vec{u}_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) + \vec{\nabla}\left(n_{k}\theta_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\vec{P}_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}\vec{R}_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}, \quad (71)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\theta_{k}\right) + n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\theta_{k} + \theta_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty},$$
(72)

где ядра уже были определены выше.

3.2. Описание кода для пошагового вывода ядер

Здесь будет рассмотрен пример вывода ядра D_{ij} в том виде, в каком это происходит в коде в Wolfram Mathematica.

Как упоминалось выше, ядро D_{ij} разбивается на две части: $D_{ij} = D_{ij}^{agg} + D_{ij}^{res}$, где первый член отвечает за потерю энергии в результате агрегации, а второй соответствует потере энергии из-за реституционных столкновений. Здесь мы выпишем пошаговый вывод части D_{ij}^{res} , чтобы предоставить пример того, как выводятся такие ядра.

Здесь в явном виде будет описано устройство кода "Boltzmann notebook"

https://github.com/RodniO/BoltzmannIntegrals/releases/tag/v1.0

и то, как его можно использовать для вычисления D_{ij}^{res} . Все остальные ядра вычисляются аналогичным образом. В коде приводится построчный вывод, поэтому мы рассмотрим здесь каждый шаг вывода.

Прежде всего, запишем интеграл, который мы хотим вычислить. Обозначим через \vec{v}_i и \vec{v}_j скорости кластеров размера *i* и *j* до столкновения, а через \vec{v}_i^{\dagger} и \vec{v}_j^{\dagger} их скорости после столкновения. Используя соотношение

$$\frac{m\left\langle v^2\right\rangle}{2} = \frac{3k_BT}{2},$$

общее изменение температуры частиц размера *i* при столкновениях с отскоком с частицами размера *j* будет соответствовать

$$n_i \frac{dT_i}{dt} = -D_{ij}^{res} n_i n_j, \tag{73}$$

где D_{ij}^{res} определено через кинетический интеграл

$$D_{ij}^{res} = \sigma_{ij}^{2} \iiint d\vec{v}_{i}d\vec{v}_{j}d\vec{e} F_{ij} \theta \left(\varepsilon^{2} \frac{ij \left| \vec{V}_{i} - \vec{V}_{j} \right|^{2}}{2(i+j)} - W_{ij} \right) \theta \left(- \left(\vec{V}_{i} - \vec{V}_{j} \right) \cdot \vec{e} \right) \\ \times \left| \left(\vec{V}_{i} - \vec{V}_{j} \right) \cdot \vec{e} \right| \left(\frac{1}{2\pi\theta_{i}} \right)^{3/2} e^{-\frac{v_{i}^{2}}{2\theta_{i}}} \left(\frac{1}{2\pi\theta_{j}} \right)^{3/2} e^{-\frac{v_{j}^{2}}{2\theta_{j}}},$$

$$(74)$$

где $\vec{V}_i = \vec{v}_i + \vec{u}_i$, \vec{u}_i – скорость потока частиц размера *i*, \vec{v}_i – скорость в их центре масс и \vec{V}_i – общая скорость частиц размера *i*. Выражение $\theta \left(\varepsilon^2 \frac{ij |\vec{V}_i - \vec{V}_j|^2}{2(i+j)} - W_{ij} \right)$ задает условие относительной кинетической энергии, когда агрегации не происходит (см. Приложение А для определения W_{ij}), а

$$F_{ij}^{(1)} = \frac{v_i^2 - \left(v_i^{\dagger}\right)^2}{3}$$

где, как и ранее, мы используем единицы температуры, соответствующие $k_B = 1$.

Смысл (74) заключается в том, что мы должны интегрировать разность кинетической энергии F_{ij} до и после столкновения по всем возможным скоростям, ведущим к отскоку (без агрегации), и по всем возможным направлениям столкновения \vec{e} , принимая во внимание частоту столкновений исходя из интеграла столкновений (см. раздел 1.2 и уравнение (26) для определения D_{ij}^{res} для случая отсутствия потоков).

Далее мы будем переписывать только функцию F_{ij} , опуская интегрирование по \vec{v}_i , \vec{v}_j и \vec{e} . Сначала мы упростим подинтегральное выражение, а затем будем по очереди брать интегралы.

Обратимся теперь к коду в Mathematica. Он начинается с определения интеграла

Integral = dres

Ниже записано определение подинтегрального выражения для dres

dres =
$$-\frac{\left(v_i^{\dagger}\right)^2}{3} + \frac{v_i^2}{3}$$

что совпадает с нашим определением выражения F_{ij} . Mathematica notebook проинтегрирует F_{ij} так же, как это сделаем мы.

В коде можно также указать некоторые упрощения, такие как i = j для случая равенства масс сталкивающихся кластеров, но здесь мы будем придерживаться общего вывода.

Далее мы переходим к paзделу "Assumptions", где учитываются всевозможные упрощения. Также в нем определены значения для \vec{v}_i , \vec{v}_j и \vec{v}_i^{\dagger} в терминах новых переменных \vec{w} , \vec{w}_d и \vec{u} :

$$\vec{w} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$
$$\vec{w}_d = \vec{V}_i - \vec{V}_j$$
$$\vec{u} = \frac{\theta_j \vec{v}_i + \theta_i \vec{v}_j}{\theta_i + \theta_j}.$$

Здесь \vec{w} – разность скоростей \vec{v}_i и \vec{v}_j (каждая в центре масс частиц размера *i* и *j* соответственно), а \vec{w}_d - общая разница между скоростями, которая включает в себя разность потоков. Используя эти новые переменные, мы можем переписать \vec{v}_i , \vec{v}_j и \vec{v}_i^{\dagger} в терминах \vec{w} , \vec{w}_d и \vec{u} . Эти выражения указаны в нижней части раздела "Assumptions". Используя тот факт, что скорость \vec{v}_i^{\dagger} после столкновения может быть выражена как

$$\vec{v}_i^{\dagger} = \vec{v}_i - \frac{m_j}{m_i + m_j} \left(1 + \varepsilon\right) \left(\vec{e} \cdot \left(\left(\vec{v}_i + \vec{u}_i\right) - \left(\vec{v}_j + \vec{u}_j\right)\right)\right) \vec{e},$$

где ε – постоянный коэффициент восстановления, а $m_i = i$ – масса кластера i, мы, наконец, получаем,

$$\begin{split} F_{ij}^{(1)} &= \frac{1}{3} \left(\frac{\vec{w}\theta_i}{\theta_i + \theta_j} + \vec{u} \right) \cdot \left(\frac{\vec{w}\theta_i}{\theta_i + \theta_j} + \vec{u} \right) \\ &- \frac{1}{3} \left(-\frac{\vec{e} \left(1 + \varepsilon \right) j \vec{w}_d \cdot \vec{e}}{i + j} + \frac{\vec{w}\theta_i}{\theta_i + \theta_j} + \vec{u} \right) \cdot \left(-\frac{\vec{e} \left(1 + \varepsilon \right) j \vec{w}_d \cdot \vec{e}}{i + j} + \frac{\vec{w}\theta_i}{\theta_i + \theta_j} + \vec{u} \right), \end{split}$$

который отображается как "Input with assumptions". Переменная ep1 равна $1 + \varepsilon$.

Далее мы переходим в раздел "Evaluation". Сначала мы раскрываем скобки (здесь и далее иногда будем использовать обозначения из кода):

$$F_{ij}^{(1)} = -\frac{\text{ep}1^2 j^2 (\vec{e}.\vec{w}_d)^2}{3(i+j)^2} + \frac{2\text{ep}1 j\vec{e}.\vec{u} \ \vec{e}.\vec{w}_d}{3(i+j)} + \frac{2\text{ep}1 j\vec{e}.\vec{w} \ \vec{e}.\vec{w}_d\theta_i}{3(i+j) (\theta_i + \theta_j)}.$$

При раскрытии скобок значение $\vec{e}.\vec{e}$ (точка обозначает скалярное произведение) оценивается как 1, поскольку \vec{e} является единичным вектором.

Затем мы интегрируем по направлениям (но не по абсолютному значению) \vec{u} . Чтобы сделать это, нам прежде всего нужно переписать наш кинетический интеграл (74) в терминах новых переменных:

$$D_{ij}^{res} = \sigma_{ij}^2 \iiint d\vec{w} d\vec{u} d\vec{e} F_{ij} \theta \left(q_{ij} - w_d^2 \right) \theta \left(-\vec{w}_d \cdot \vec{e} \right)$$
$$\times \left| \vec{w}_d \cdot \vec{e} \right| \left(\frac{1}{2\pi\theta_i} \right)^{3/2} e^{-\frac{u^2}{2} \left(\frac{1}{\theta_i} + \frac{1}{\theta_j} \right)} \left(\frac{1}{2\pi\theta_j} \right)^{3/2} e^{-\frac{w^2}{2\left(\theta_i + \theta_j\right)}}$$

Теперь все θ -функции зависят только от \vec{w} и \vec{w}_d , поэтому мы можем безопасно интегрировать по всем возможным направлениям \vec{u} .

Сначала мы интегрируем по направлениям \vec{u} для слагаемых, содержащих скалярные произведения *u.ud*, где

$$ud = \frac{i\vec{u}_i + j\vec{u}_j}{(i+j)} - \vec{u}_{i+j}$$

Данный множитель появляется только в агрегации при учете закона сохранения импульса, в нашем случае он отсутствует.

Затем мы интегрируем по направлениям \vec{u} для слагаемых в F_{ij} , содержащих скалярные произведения $\vec{e} \cdot \vec{u}$. Мы используем соответствующим образом взвешенный интеграл

$$F_{ij}^{(2)} = \frac{1}{4\pi} \int_{|\vec{u}|=const} F_{ij} d\vec{u}.$$

В общем случае, интеграл содержит слагаемые с множителями вида $(\vec{e} \cdot \vec{u})^a (\vec{u} \cdot \vec{w})^b$. Их можно вычислить путем перехода в сферические координаты и используя специальную гипергеометрическую функцию, которая обозначена как Func в коде. В нашем случае у нас есть только произведение $\vec{e} \cdot \vec{u}$ в первом слагаемом, интеграл от которого равен 0. Следовательно,

$$F_{ij}^{(2)} = -\frac{\text{ep}1^2 j^2 (\vec{e}.\vec{w}_d)^2}{3(i+j)^2} + \frac{2\text{ep}1 j \ \vec{e}.\vec{w} \ \vec{e}.\vec{w}_d \ \theta_i}{3(i+j) \left(\theta_i + \theta_j\right)}.$$

Далее мы аналогичным образом интегрируем по направлениям \vec{e} , но только в полушарии, направленном на \vec{w} (согласно θ -функциии) и включающем дополнительное скалярное произведение $\vec{e} \cdot \vec{w}_d$. В нашем случае в первом слагаемом присутствует произведение $(\vec{e} \cdot \vec{w}_d)^2$, а во втором слагаемом F_{ij}^2 присутствует произведение $(\vec{e} \cdot \vec{w})$ ($\vec{e} \cdot \vec{w}_d$). Они оцениваются как $\frac{1}{2}\vec{w}_d \cdot \vec{w}_d$ и $\frac{1}{2}\vec{w} \cdot \vec{w}_d$ соответственно (дополнительный множитель $|\vec{w}_d|$ будет добавлен в самом конце).

$$F_{ij}^{(3)} = -\frac{\text{ep}1^2 j^2 (\vec{w}_d \cdot \vec{w}_d)}{3(i+j)^2} + \frac{\text{ep}1 j (\vec{w} \cdot \vec{w}_d) \theta_i}{3(i+j) (\theta_i + \theta_j)}.$$

Если слагаемые, содержащие скалярные произведения с \vec{u} , все еще остаются, мы снова выполняем для нтх интегрирование по направлениям \vec{u} . В нашем случае слагаемых, содержащих \vec{u} , больше не осталось.

Затем мы интегрируем по абсолютным значениям \vec{u} и масштабируем \vec{w} и \vec{w}_d , определяя значения соответствующих скалярных произведений.

$$ws = \frac{1}{2(\theta_i + \theta_j)} \vec{w} \cdot \vec{w},$$
$$wds = \frac{1}{2(\theta_i + \theta_j)} \vec{w}_d \cdot \vec{w}_d$$
$$wwd = \frac{1}{2(\theta_i + \theta_j)} \vec{w} \cdot \vec{w}_d.$$

У нас не осталось \vec{u} , поэтому нам не нужно интегрироваться по абсолютным значениям \vec{u} , но если бы нам пришлось, то слагаемые, содержащие $(\vec{u} \cdot \vec{u})^a$, могут быть проинтегрированы в сферических координатах, что дает множитель $(2a + 1)!! \left(\frac{\theta_i \theta_j}{\theta_i + \theta_j}\right)^a$.

В конце концов, у нас остается многочлен в переменных ws, wds, wwd и $\vec{u}_d \cdot \vec{w}$, который нужно интегрировать по \vec{w} . Чтобы это сделать, мы сначала переходим к новым названиям переменных $\vec{w}_d \rightarrow \vec{w}$ и $\vec{w} \rightarrow \vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}$, где

$$\vec{c} = \sqrt{\frac{2}{\theta_i + \theta_j}} \left(\vec{u}_i - \vec{u}_j \right).$$

Затем каждый член $wds^aws^bwwd^c$ $(\vec{u}_d\cdot\vec{w})^d$ заменяется интегралом

$$\text{Int}[a,b,c,d] = \frac{1}{2\pi} \int |\vec{w}|^a \left| \vec{w} - \frac{\vec{c}}{2} \right|^b \left(\vec{w} \cdot \left(\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2} \right) \right)^c \left(\vec{u}_d \cdot \left(\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2} \right) \right)^d e^{-\left| \vec{w} - \frac{\vec{c}}{2} \right|^2} d\vec{w},$$
(75)

где в нашем случае интегрирование выполняется по $|\vec{w}|^2 > q_{ij}$, где q_{ij} определено в (69).

Результат с интегралами вида (75) записывается в разделе "Result". А именно, D_{ij}^{agg} имеет вид (где мы учли все внешние константы):

$$D_{ij}^{agg} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2\sqrt{\theta_i + \theta_j} \left(\frac{2j(1+\varepsilon)}{3(i+j)}\theta_i \text{Int}[1,0,1,0] - \frac{j^2(1+\varepsilon)^2}{3(i+j)^2}(\theta_i + \theta_j) \text{Int}[3,0,0,0]\right).$$

Некоторые значения для Int[a, b, c, d] не слишком сложны и записаны в Приложение D. В частности,

$$\operatorname{Int}[1,0,1,0] = 2\overline{I_{GH}}, \quad \operatorname{Int}[3,0,0,0] = 2\overline{I_G}.$$

При их подстановке мы получаем выражение

$$\begin{split} D_{ij}^{res} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2\sqrt{\theta_i + \theta_j} \left(\frac{4j}{3\left(i+j\right)}\left(1+\varepsilon\right)\theta_i\overline{I_{GH}}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_i + \theta_j}}\left(\vec{u}_i - \vec{u}_j\right)\right) \\ &- \frac{2j^2}{3\left(i+j\right)^2}\left(1+\varepsilon\right)^2\left(\theta_i + \theta_j\right)\overline{I_G}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_i + \theta_j}}\left(\vec{u}_i - \vec{u}_j\right)\right) \right). \end{split}$$

Аналогично можно получить выражение для D_{ij}^{agg} :

$$D_{ij}^{agg} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\frac{1}{\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\theta_{i}\theta_{j}I_{F}\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right.\\\left.\left.\left.\left.\left.\left.\left.\left.\left(q_{ij},\sqrt{\frac{2}{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\right)\right\right\right)\right\right.\right.\right\}$$

Тогда их сумма, $D_{ij} = D_{ij}^{agg} + D_{ij}^{res}$, совпадает с выражением для D_{ij} , приведенном в (68).

Код выполняет вычисление значений Int[a, b, c, d] следующим образом. Сначала в нем записываются общие выражения, а затем частный случай $\vec{u}_i = \vec{u}_j = 0$. Значения Int[a, b, c, d] можно вычислить, перейдя к цилиндрическим координатам (ось *z* направлена в сторону вектора \vec{c}) и используя интегрирование по частям для дифференцирования внутреннего интеграла. В конечном счете, результат выражается в виде гауссова интеграла от многочлена в *z* и |z| с границами, зависящими от q_{ij} .

В качестве примера проиллюстрируем вычисление I_F , которое имеет гораздо более простую форму, чем I_G или I_{GH} . Прежде всего, мы перепишем интеграл в цилиндрических координатах с высотой цилиндра h, ориентированного вдоль вектора \vec{c} , и проинтегрируем по углу φ .

$$\begin{split} I_F(Q,\vec{c}) &= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{0 < |\vec{w}|^2 < Q} |\vec{w}| \, e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{0}^{2\pi} d\varphi \int\limits_{-\sqrt{Q}}^{\sqrt{Q}} dh \int\limits_{0}^{\sqrt{Q-h^2}} r dr \sqrt{r^2 + h^2} e^{-r^2 - \left|h - \frac{|\vec{c}|}{2}\right|^2} \\ &= \int\limits_{-\sqrt{Q}}^{\sqrt{Q}} dh \int\limits_{0}^{\sqrt{Q-h^2}} r \, dr \sqrt{r^2 + h^2} e^{-r^2 - \left|h - \frac{|\vec{c}|}{2}\right|^2}. \end{split}$$

Затем мы делаем замену переменной во внутреннем интеграле с r на $R = r^2 + h^2$ и интегрируем по частям

$$I_{F}(Q,\vec{c}) = \frac{1}{2} \int_{-\sqrt{Q}}^{\sqrt{Q}} dh \int_{h^{2}}^{Q} dR \sqrt{R} e^{h^{2} - R - \left|h - \frac{|\vec{c}|}{2}\right|^{2}}$$
$$= \frac{1}{2} \int_{-\sqrt{Q}}^{\sqrt{Q}} dh \ e^{|\vec{c}|h - \frac{|\vec{c}|^{2}}{4}} \int_{h^{2}}^{Q} dR \sqrt{R} e^{-R}$$
$$= \int_{-\sqrt{Q}}^{\sqrt{Q}} |h| \ e^{|\vec{c}|h - \frac{|\vec{c}|^{2}}{4}} h \cdot \frac{e^{-h^{2}}}{|\vec{c}|} dh.$$
(76)

В общем случае, вместо коэффициента $\frac{e^{-|\vec{c}|z}}{|\vec{c}|}$, интегрирование по частям может привести к (вычислимым) значениям неполной гамма-функции. Результат уравнения (76), включая разложение неполных гамма-функций – это то, как определены интегралы в подразделе "Definitions of Int[a,b,c,d]" кода Mathematica. Как только параметры в Int фиксированы, становится возможным аналитическое интегрирование (76).

Определим $z = h - \frac{|\vec{c}|}{2}$ и разобьем интеграл на две части, соответствующие разным знакам h.

$$\begin{split} I_F\left(Q,\vec{c}\right) &= \frac{1}{|\vec{c}|} \left(\int\limits_{-\frac{|\vec{c}|}{2}}^{\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}} \left(z + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2 e^{-z^2} dz - \int\limits_{-\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}}^{-\frac{|\vec{c}|}{2}} \left(z + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2 e^{-z^2} dz \right) \\ &= \frac{1}{|\vec{c}|} \left(\int\limits_{-\frac{|\vec{c}|}{2}}^{\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}} \left(z^2 + \frac{|\vec{c}|^2}{4}\right) e^{-z^2} dz - \int\limits_{\frac{|\vec{c}|}{2}}^{\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}} \left(z^2 + \frac{|\vec{c}|^2}{4}\right) e^{-z^2} dz \right) \\ &+ \left(\int\limits_{-\frac{|\vec{c}|}{2}}^{\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}} z e^{-z^2} dz + \int\limits_{\frac{|\vec{c}|}{2}}^{\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}} z e^{-z^2} dz \right). \end{split}$$

Первое слагаемое может быть представлено с помощью функции ошибок, в то время как второе выражение может быть проинтегрировано с помощью замены $t = z^2$. Конечный результат можно найти в Приложение D.

3.3. Решение для агрегации падающих частиц

В качестве простой модели, где может быть применена наша теория, рассмотрим систему, в которой баллистическая агрегация происходит при вертикальном падении частиц.

Предположим, что система однородна в направлениях *x* и *y* и пренебрегаем движением в этих направлениях, так что $\theta_k = \langle v_k^2 \rangle = \langle v_{k,z}^2 \rangle$. Рассмотрим для примера капли небольшого размера (менее 30 мкм), чтобы мы могли применить уравнение Стокса для силы сопротивления воздуха, действующей на сферическую частицу:

$$\vec{F} = -6\pi R\eta \vec{v},$$

где \vec{v} – скорость частицы, R – ее радиус, а η – вязкость среды. Предположим также, что все столкновения приводят к агрегации. Тогда система (70)-(72) упрощается до

$$\frac{\partial}{\partial t}n_k + \frac{\partial}{\partial z}\left(n_k\vec{u}_k\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j, \quad k = \overline{1,\infty},\tag{77}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_k u_k) + \frac{\partial}{\partial z} \left(n_k u_k^2 \right) + \frac{\partial}{\partial z} (n_k \theta_k) + n_k g + 6\pi \eta \frac{\sigma_k}{m_k} n_k u_k$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} P_{ij} n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} R_{kj} n_k n_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$
(78)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\theta_{k}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(n_{k}u_{k}\theta_{k}\right) + 12\pi\eta\frac{\sigma_{k}}{m_{k}}n_{k}\theta_{k} = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}, \tag{79}$$

где g – это ускорение свободного падения, η – вязкость воздуха, а ядра агрегации равны

$$C_{ij} = \sigma_{ij}^{2} \left(\sqrt{2\pi} \sqrt{\theta_{i} + \theta_{j}} e^{-\frac{(u_{i} - u_{j})^{2}}{2(\theta_{i} + \theta_{j})}} + \pi(u_{i} - u_{j}) \operatorname{erf}\left(\frac{u_{i} - u_{j}}{\sqrt{2(\theta_{i} + \theta_{j})}}\right) \right)$$

$$P_{ij} = C_{ij} \frac{iu_{i} + ju_{j}}{i + j} + \pi\sigma_{ij}^{2} \frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i + j} \operatorname{erf}\left(\frac{u_{i} - u_{j}}{\sqrt{2(\theta_{i} + \theta_{j})}}\right)$$

$$R_{ij} = C_{ij}u_{i} + \pi\sigma_{ij}^{2}\theta_{i} \operatorname{erf}\left(\frac{u_{i} - u_{j}}{\sqrt{2(\theta_{i} + \theta_{j})}}\right)$$

$$B_{ij} = C_{ij}\left((\Delta u_{ijk})^{2} + \frac{i^{2}\theta_{i} + j^{2}\theta_{j}}{(i + j)^{2}}\right) + 2\Delta u_{ijk}\pi\sigma_{ij}^{2} \frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i + j} \operatorname{erf}\left(\frac{u_{i} - u_{j}}{\sqrt{2(\theta_{i} + \theta_{j})}}\right)$$

$$+\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2} \frac{(i\theta_{i} - j\theta_{j})^{2}}{(i + j)^{2}\sqrt{\theta_{i} + \theta_{j}}} e^{-\frac{(u_{i} - u_{j})^{2}}{2(\theta_{i} + \theta_{j})}}$$
(80)

$$D_{ij} = C_{ij}\theta_i + \sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{\theta_i^2}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} e^{-\frac{(u_i - u_j)^2}{2(\theta_i + \theta_j)}}$$

$$\Delta u_{ijk} = \frac{iu_i + ju_j}{i+j} - u_{i+j},$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_i + \sigma_j = \frac{i^{1/3} + j^{1/3}}{2}.$$

Чтобы решить уравнения (77)-(79), упростим выражения для коэффициентов. Мы предполагаем, что изначально имеем следующую систему единиц. Интенсивность дождя отвечает единичной общей массе капель в единицу времени на единичную площадь. Также мы предполагаем единичный диаметр мономеров $\sigma_1 = 2R_1 = 1$, единичную массу мономеров $m_1 = 1$ и единичную равновесную скорость мономеров $u_1 = 1$. Мы пренебрегаем ролью начальной температуры и начального распределения, так что мы можем начать только с мономеров и димеров с одинаковой общей массой (мы не можем начинать только с мономеров, поскольку мы предположили, что они имеют нулевую температуру и, следовательно, не будут агрегироваться сами с собой). Тогда единственным параметром в модели является безразмерное ускорение g, которое можно найти из исходных величин (для которых мы будем использовать индекс o, например d_o):

$$g = \frac{3\pi\eta_0}{m_{in}d_0}$$

Например, для случая небольших дождевых капель при высокой плотности дождя, мы можем использовать следующие параметры. Диаметр «мономеров»: $d_o = 2,5 \cdot 10^{-6}$ м. Масса «мономеров»: $m_o = 6,14 \cdot 10^{-15}$ кг. Интенсивность дождя (масса капель, падающих за единицу времени

на единичную площадь): $m_{in} = 0,03$ кг/м²/с. Вязкость воздуха: $\eta_o = 18 \cdot 10^{-5}$ кг/м/с. Ускорение свободного падения: $g_o = 9,8$ м/с².

Тогда безразмерное ускорение равно

$$g = 2,3 \cdot 10^4$$
.

Для $g \gg 1$ в уравнении (78) преобладает 5 и 6 членов в левой части (ускорение свободного падения в этом случае может быть компенсировано только за счет вязкости воздуха), оно поддерживает средние скорости близкими к стационарным $u_k = -\frac{m_k g}{6\pi\eta\sigma_k} = -k^{2/3}$, а температуры – почти нулевыми. В итоге мы получаем решение для скоростей потока такое же, как без агрегации. При меньшей интенсивности дождя агрегация будет еще медленнее, а *g* будет еще больше. Агрегация других мелких частиц близкого размера также привела бы к аналогичному значению *g*. С другой стороны, для более крупных капель величина безразмерного ускорения *g* оказывается меньше. Например, выбирая больший размер капель-мономеров, $d_0 = 0,03$ мм, мы получаем $g \approx 1900$, что уже достаточно, чтобы увидеть отличие скорости от стационарного падения без агрегации (см. рисунок 10). Стоит отметить, что здесь мы лишь иллюстрируем возможность отличия реального распределения скоростей от стационарного; настоящая модель формирования дождя должна также учитывать фрагментацию [107] и конденсацию [108].

Чтобы получить стационарное распределение, можно использовать высоту *z* в качестве аналога времени и использовать модифицированные числовые плотности $n'_k = n_k k^{2/3}$ и ядро $C'_{ij} = C_{ij}/(ij)^{2/3}$.

Тогда мы получаем классические уравнения Смолуховского [31]

$$\frac{d}{dz}n'_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C'_{ij}n'_in'_j - \sum_{j=1}^{\infty}C'_{kj}n'_kn'_j, \quad k = \overline{1,\infty}$$

с ядром

$$C_{ij}' = \pi \sigma_{ij}^2 \left| i^{-2/3} - j^{-2/3} \right|$$



Рис. 10: Пример стационарного распределения скоростей u_k с учетом агрегации по сравнению со стационарным распределением $u_k = -k^{2/3}$ без агрегации при безразмерном ускорении $g \approx 1900$. Значение $\sqrt{T_k/k} = \sqrt{T_k/m_k}$ соответствуют корню из дисперсии скорости капель соответствующего размера.

3.4. Уравнения Смолуховского-Навье-Стокса. Вывод транспортных коэффициентов

Продолжим вывод уравнений Смолуховского для пространственно-неоднородных системам. Здесь мы учтем вязкость и теплопроводность, чтобы получить уравнения Смолуховского-Невье-Стокса.

Начнем с обновления левой части уравнений. Мы должны отметить, что, поскольку кластеры различного размера считаются взаимодействующими, то это может привести к тому, что градиенты скорости потока и температуры для кластеров одного размера будут влиять на распределение скоростей (и, соответственно, вязкость и теплопроводность) кластеров других размеров. Поэтому, в общем случае, уравнения Смолуховского-Навье-Стокса следует записать в следующей форме (мы используем массы $m_k = k$ и температуры $T_k = k\theta_k$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}n_{k} + \vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) &= \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}, \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) + n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\vec{u}_{k} + \vec{u}_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) + \vec{\nabla}\left(n_{k}\theta_{k}\right) \\ -\frac{1}{k}\sum_{l=1}^{\infty}\eta^{kl}\vec{\nabla}\cdot\left(\nabla_{i}(u_{l})_{j} + \nabla_{j}(u_{l})_{i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\vec{\nabla}\cdot\vec{u}_{l}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}P_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}\vec{R}_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}, \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\theta_{k}\right) + n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\theta_{k} + \theta_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right) \\ -\frac{2}{3k}\sum_{l=1}^{\infty}\left(\eta^{kl}\left(\nabla_{i}(u_{l})_{j} + \nabla_{j}(u_{l})_{i} - \delta_{ij}\vec{\nabla}\cdot\vec{u}_{l}\right) : \vec{\nabla}\vec{u}_{k} + \frac{2}{3}\kappa^{kl}\Delta T_{l}\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}n_{k}n_{j}, \quad k = \overline{1,\infty}, \end{aligned}$$

$$(81)$$

где η^{kl} и κ^{kl} обозначают вязкость и теплопроводность частиц размера k относительно градиентов скорости потока и температуры кластеров размера l.

Для определения коэффициентов переноса мы можем использовать подход Чепмена-Энскога. Мы разделяем функции распределения в терминах градиентов следующим образом

$$f_k(\vec{v}_k) = f_k^{(0)}(\vec{v}_k) + f_k^{(1)}(\vec{v}_k),$$

где

$$f_k^{(0)}\left(\vec{v}_k\right) = f_k^M\left(\vec{v}_k\right)$$

есть распределение Максвелла, и

$$f_k^{(1)}\left(\vec{v}_k\right) = f_k^M\left(\vec{v}_k\right) \cdot \left(\sum_{l=1}^{\infty} \vec{\alpha}^{kl} \cdot \vec{\nabla} \log T_l + \sum_{l=1}^{\infty} \gamma_{ij}^{kl} \nabla_j(u_l)_i\right)$$

дает поправку первого порядка.

Эти поправки должны удовлетворять следующему набору уравнений [76]:

$$\frac{\partial f_k^{(1)}}{\partial t} = I\left(f^{(0)}, f^{(1)}\right) + I\left(f^{(1)}, f^{(0)}\right) - \vec{v}_k \left(\frac{v_k^2}{2\theta_k} - \frac{5}{2}\right) f_k^{(0)}\left(\vec{v}_k\right) \nabla \log T_k
- \frac{1}{\theta_k} \left((v_k)_i \left(v_k\right)_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}v_k^2\right) \nabla_i\left(\vec{u}_k\right)_j,$$
(82)

где I(f,g) – это интеграл столкновения, включающий все слагаемые для агрегации и отскока с разными *i* и *j*, но без интегрирования по \vec{v}_k .

Чтобы получить приближение первого порядка для α^{jk} и γ^{kl} , мы можем предположить, что они пропорциональны коэффициентам в правой части:

$$\vec{\alpha}^{kl} = \alpha_0^{kl} \vec{S}_k^1$$

И

$$\gamma_{ij}^{kl} = \gamma_0^{kl} S_k^2$$

где

$$\vec{S}_k^1 = \vec{v}_k \left(\frac{v_k^2}{2\theta_k} - \frac{5}{2} \right)$$

И

$$S_k^2 = \frac{1}{\theta_k} \left((v_k)_i (v_k)_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} v_k^2 \right).$$

Затем мы можем использовать связь между α_0 и κ и между γ_0 и η , полученную в [76]:

$$\eta^{kl} = -\gamma_0^{kl} n_k T_k,$$

$$\kappa^{kl} = -\frac{5}{2} \alpha_0^{kl} n_k \theta_k.$$

Чтобы вывести уравнения для α и γ , мы умножаем (82) на \vec{S}_k^1 или \vec{S}_k^2 , сохраняя только члены с градиентом температуры в первом случае или скорости потока во втором случае, и интегрируя по \vec{v}_k . Тогда мы получаем две бесконечные системы уравнений, которые определяют изменение транспортных коэффициентов с течением времени:

$$\frac{15}{2} \frac{\partial \left(\alpha_{0}^{kl} n_{k} \theta_{k}\right)}{\partial t} + \frac{15}{2} \delta_{kl} n_{k} \theta_{k} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \left(\alpha_{0}^{il} B_{ij}^{\alpha} + \alpha_{0}^{jl} B_{ji}^{\alpha}\right) n_{i} n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_{0}^{kl} C_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_{0}^{jl} C_{kj}^{\alpha 2}\right) n_{k} n_{j} + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_{0}^{kl} D_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_{0}^{jl} D_{kj}^{\alpha 2}\right) n_{k} n_{j},$$

$$10 \frac{\partial \left(\gamma_{0}^{kl} n_{k}\right)}{\partial t} + 10 \delta_{kl} n_{k} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \left(\gamma_{0}^{il} B_{ij}^{\gamma} + \gamma_{0}^{jl} B_{ji}^{\gamma}\right) n_{i} n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty} \left(\gamma_{0}^{kl} C_{kj}^{\gamma 1} + \gamma_{0}^{jl} C_{kj}^{\gamma 2}\right) n_{k} n_{j} + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\gamma_{0}^{kl} D_{kj}^{\gamma 1} + \gamma_{0}^{jl} D_{kj}^{\gamma 2}\right) n_{k} n_{j}.$$

$$(83)$$

Ядра $C^{\alpha 1}$, $C^{\alpha 2}$, $C^{\gamma 1}$, $C^{\gamma 2}$, B^{α} , B^{γ} , $D^{\alpha 1}$, $D^{\alpha 2}$, $D^{\gamma 1}$ и $D^{\gamma 2}$ снова доступны через код в Mathematica, если задать интеграл (Integral) с соответствующим именем.

Уравнения (84) могут быть упрощены в предположении равных потоков и температур. Действительно, если скорости потока равны, градиенты также одинаковы. Тогда достаточно знать $\eta^k = \sum_l \eta^{kl}$ или, что почти то же самое, $\gamma_0^k = \sum_l \gamma_0^{kl}$, которые удовлетворяют второму набору уравнений (84), суммируется по *l*. Поскольку это особый случай, он здесь рассматриваться не будет. Интересующихся читателей мы отсылаем к разделу 3.5, где полные вязкости η^k получены непосредственно из метода моментов Грэда.

3.5. Задача сдвигового течения

В модельной задаче сдвигового течения отсутствуют температурные градиенты, $T_k = T =$ const, а скорости потоков \vec{u}_k равны и фиксированы

$$\vec{u}_k = \dot{\gamma} y \vec{e}_x.$$

Тогда мы можем использовать систему Грэда, описанную в разделе 1.6.2, без потоков скоростей или тепла, но включающую все возможные массы частиц (здесь $f = \sum_{i=1}^{\infty} f_i$):

$$\begin{split} \frac{\partial n_k}{\partial t} &= \int I(f_k, f) d\vec{v}_k, \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_k \theta_k) + \frac{2}{3} \dot{\gamma} p_{k,xy} = \int \frac{v_k^2}{3} I(f_k, f) d\vec{v}_k, \\ \frac{\partial \hat{p}_k}{\partial t} + \dot{\gamma} \delta_{x\beta} p_{k,\alpha y} + \dot{\gamma} \delta_{x\alpha} p_{k,\beta y} - \frac{2}{3} \dot{\gamma} \delta_{\alpha\beta} p_{k,xy} + \dot{\gamma} (\delta_{x\alpha} \delta_{y\beta} + \delta_{x\beta} \delta_{y\alpha}) n_k \theta_k = \\ &= \int \left(v_{k,\alpha} v_{k,\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v_k^2 \right) I(f_k, f) d\vec{v}_k. \end{split}$$

Мы также можем непосредственно получить полный тензор давления $P_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta}n\theta$, который включает в себя температуры, а затем вычисляет температуру из $n\theta = \frac{1}{3}P_{\alpha\alpha}$:

$$\frac{\partial \hat{P}_k}{\partial t} + \dot{\gamma} \delta_{x\beta} P_{k,\alpha y} + \dot{\gamma} \delta_{x\alpha} P_{k,\beta y} = \int v_{k,\alpha} v_{k,\beta} I(f_k, f) d\vec{v}_k.$$
(85)

Отсюда уже видно, что $P_{xz} = P_{yz} = 0$.

Заметим, что скорости до и после столкновения второго сталкивающегося кластера с распределением скоростей $f(v_2)$ также должны изменены на $v_2 := v_2 - \dot{\gamma} \sigma e_y \vec{e}_x$ и на $v'_2 := v'_2 + \dot{\gamma} \sigma e_y \vec{e}_x$ соответственно. В частности, это приводит к $P_{yy} \neq P_{zz}$.

Наконец, мы должны включить влияние среды, которая может быть некоторой жидкостью или молекулярным газом. В следующем разделе мы сделаем это, оценив его влияние через интеграл столкновений $I(f_k, f)$. Здесь, однако, мы сделаем это, следуя [109], с помощью уравнения Фоккера-Планка:

$$\begin{split} \frac{\partial f_k}{\partial t} &= \zeta_k k^{-1/3} \frac{\partial}{\partial \vec{v}_k} \left(\left(\vec{v}_k + \frac{T_{ex}}{k} \frac{\partial}{\partial \vec{v}_k} \right) f_k \right) + I\left(f_k, f \right), \\ \zeta_k &= \zeta^0 \left(1 + \frac{3}{\sqrt{2}} \phi_k^{1/2} + \frac{135}{64} \phi_k \ln \phi_k + 11,26 \phi_k \left(1 - 5,1 \phi_k + 16,57 \phi_k^2 - 21,77 \phi_k^3 \right) \right. \\ \left. - \phi_k \frac{1 - \phi_k/2}{\left(1 - \phi_k \right)^3} \ln \epsilon_m \right), \\ \phi_k &= \frac{4\pi}{3} n_k \sigma_k^3, \quad \sigma_{ij} = \sigma_i + \sigma_j. \end{split}$$

Первый член в правой части последнего уравнения описывает воздействие молекулярного газа. Это приводит к дополнительному слагаемому $2\zeta_k k^{-1/3} \left(\hat{P}_k - n_k \frac{T_{ex}}{k} \delta_{ij} \right)$ в левой части (85). Здесь

 T_{ex} – температура молекулярного газа, а ϵ_m находится в районе 0,01 – 0,05. Мы также используем $m_k = k$.

Если для молекулярного газа также использовать модель твердых шаров, мы получим (см. следующий раздел):

$$\zeta^0 = \frac{2}{3}\sqrt{2\pi}n_g\sqrt{m_gT_{ex}},$$

где n_g – это плотность числа частиц молекулярного газа, а m_g – их масса.

Начнем с качественного анализа. Сначала рассмотрим случай, когда есть только частицы размером k = 1, а объемная доля частиц $\sum_k \phi_k$ мала, так что мы можем аппроксимировать $\zeta \approx \zeta^0$ и пренебречь изменением скорости потока на расстоянии порядка σ . Затем мы можем проинтегрировать правую часть (85) и получить

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} + \dot{\gamma}\delta_{x\beta}P_{\alpha y} + \dot{\gamma}\delta_{x\alpha}P_{\beta y} = \frac{16}{5}\sqrt{\pi T}n\sigma^2 \left(nT\delta_{\alpha\beta} - \hat{P}\right).$$
(86)

Решая это уравнение в равновесии $\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = 0$ (и учитывая молекулярный газ), можно найти

$$P_{xy} = -\frac{2\dot{\gamma} \left(2\zeta nT_{ex} + \frac{16}{5}\sqrt{\pi T}n^{2}\sigma^{2}T\right)}{\left(2\zeta + \frac{16}{5}\sqrt{\pi T}n\sigma^{2}\right)^{2}}.$$
(87)

Предполагая $n\sigma^3 \rightarrow 0$, находим

 $T \rightarrow T_{ex}$

И

$$P_{xy} \rightarrow -\frac{\dot{\gamma}}{\zeta^0} nT_{ex}.$$

То же самое должно быть верно и в случае агрегации для каждого размера k в отдельности. Однако, в случае, если объемная доля частиц $\sum_k n_k \sigma_k^3$ достаточно велика, полученные значения $P_{k,xy}$ будут другими, с отсутствием замкнутого выражения типа (87). Тем не менее, среднее значение тензора напряжений должно в конечном итоге зависеть только от молекулярного газа, поскольку столкновения с другими кластерами становятся все реже.

Найдем теперь среднее значение тензора напряжений $\hat{\sigma} = m\hat{P}$:

$$\langle \sigma_{xy} \rangle = \sum_{k} k P_{k,xy} \approx -\frac{\dot{\gamma} \sum_{k} k^{4/3} P_{k,yy}}{\zeta^0} \approx -\frac{\dot{\gamma} T_{ex} \sum_{k} k^{1/3} n_k}{\zeta^0},$$

далее мы можем использовать уравнение для общей вязкости:

$$\eta = -\left\langle \sigma_{xy} \right\rangle / \dot{\gamma} \approx \frac{T_{ex} \sum_{k} n_k k^{1/3}}{\zeta^0}.$$

Поскольку молекулярный газ поддерживает температуру гранулярного газа почти постоянной, мы можем найти соотношение $\sum_k n_k k^{1/3}$ используя стандартные уравнения баллистической
агрегации, не зависящей от температуры. Используя скейлинговую теорию, получим следующую асимптотику при $t \to \infty$:

$$\eta \sim n s^{1/3} \sim n^{2/3} \sim t^{-4/5}.$$

В случае агрегации без молекулярного газа, приняв все температуры равными и установив $\eta_k = n_k \eta/n$, мы можем оценить временную зависимость вязкости: как

$$\eta \sim \frac{\sqrt{mT}}{\sigma^2} \sim s^{-1/3} \sim t^{-1/3},$$

где $T \sim t^{-1/3}$. Поскольку на практике температура снижается медленнее, чем $t^{-1/3}$, η на практике также будет уменьшаться медленнее, чем $t^{-1/3}$ (см. рисунок 11).

Следовательно, общая вязкость смеси всегда сходится к вязкости молекулярного газа η_g :

$$\eta_{mix} = \eta + \eta_g \to \eta_g.$$

3.5.1. Численное решение для вязкости

Перейдем теперь к количественному рассмотрению. Предполагая, что все частицы движутся примерно с одинаковой локальной скоростью потока, мы можем преобразовать уравнение (85) в уравнение для вязкости, используя определение $\eta_k = k p_{k,xy}/\dot{\gamma}$ и разложение функции распределения по Грэду. Мы также пренебрегаем слагаемыми порядка $\dot{\gamma}^2$, получая таким образом $P_{k,xx} = P_{k,yy} = P_{k,zz}$. Тогда, для случая малой объемной доли гранулярных частиц $\sum_{k=1}^{\infty} \phi_k \ll 1$, получим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\eta_{k} - n_{k}T_{k} + \frac{4}{3}\sqrt{2\pi m_{g}T_{ex}}n_{g}k^{-1/3}\eta_{k} \\ &= \sum_{i+j=k} B_{ij}^{\eta}\eta_{i}n_{j} - \sum_{j} D_{kj}^{\eta i}\eta_{k}n_{j} - \sum_{j} D_{kj}^{\eta j}n_{k}\eta_{j}, \\ \frac{d}{dt}\left(n_{k}\theta_{k}\right) + \frac{4}{3}\sqrt{2\pi m_{g}T_{ex}}n_{g}k^{-4/3}n_{k}\left(T_{k} - T_{ex}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k} B_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j} D_{kj}n_{k}n_{j}, \\ \frac{d}{dt}n_{k} = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k} C_{ij}n_{i}n_{j} - \sum_{j} C_{kj}n_{k}n_{j}, \end{aligned}$$

где ядра B^{η} и $D^{\eta i, \eta j}$ могут быть найдены путем интегрирования соответствующих интегралов столкновений, что дает

$$B_{ij}^{\eta} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(\frac{\theta_{j}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-f_{ij}\right)+\frac{8}{3}\cdot\frac{\left(i\theta_{i}-j\theta_{j}\right)\theta_{j}}{\left(i+j\right)\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-g_{ij}\right)\right)$$
$$-\frac{8}{5}\cdot\frac{\left(i\theta_{i}-j\theta_{j}\right)^{2}}{\left(i+j\right)^{2}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-h_{ij}\right)\right),$$
$$D_{ij}^{\eta i} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(\frac{\theta_{j}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-f_{ij}\right)+\frac{8}{3}\cdot\frac{\theta_{i}\theta_{j}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-g_{ij}\right)+\frac{8}{5}\cdot\frac{\theta_{i}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-h_{ij}\right)\right),$$
$$-\frac{4}{3}\cdot\frac{j}{i+j}\cdot\frac{\theta_{j}}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(1+\varepsilon\right)g_{ij}+\frac{8}{5}\cdot\frac{j}{i+j}\cdot\frac{\theta_{i}}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(1+\varepsilon\right)h_{ij}-\frac{2}{5}\cdot\frac{j^{2}}{\left(i+j\right)^{2}}\left(1+\varepsilon\right)^{2}h_{ij}\right),$$

$$\begin{split} D_{ij}^{\eta j} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}} \left(\frac{\theta_{i}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-f_{ij}\right)-\frac{8}{3}\cdot\frac{\theta_{i}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-g_{ij}\right)+\frac{8}{5}\cdot\frac{\theta_{i}^{2}}{\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)^{2}}\left(1-h_{ij}\right)\right) \\ &-\frac{4}{3}\cdot\frac{j}{i+j}\cdot\frac{\theta_{i}}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(1+\varepsilon\right)g_{ij}+\frac{8}{5}\cdot\frac{j}{i+j}\cdot\frac{\theta_{i}}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(1+\varepsilon\right)h_{ij}-\frac{2}{5}\cdot\frac{j^{2}}{\left(i+j\right)^{2}}\left(1+\varepsilon\right)^{2}h_{ij}\right), \\ &f_{ij} = e^{-q_{ij}}\left(1+q_{ij}\right), \\ &g_{ij} = e^{-q_{ij}}\left(1+q_{ij}+q_{ij}^{2}/2\right), \\ &h_{ij} = e^{-q_{ij}}\left(1+q_{ij}+q_{ij}^{2}/2+q_{ij}^{3}/6\right), \\ &q_{ij} = \frac{a\frac{\left(i^{1/3}j^{1/3}\right)^{\lambda_{1}}}{\frac{ij}{i+j}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)}, \end{split}$$

где q_{ij} содержит три параметра $(a, \lambda_1 \le \lambda_2)$ и, как и ранее, описывает условие агрегации. А именно, насколько велика должна быть кинетическая энергия, чтобы сталкивающиеся кластеры отскакивали, а не слипались. Заметим, что $q_{ij} = 0$, если каждое столкновение приводит к отскоку, и $q_{ij} \to \infty$, когда каждое столкновение приводит к агрегации. Приложение А содержит выражения для ядер *C*, *B* и *D*.

Начиная с $\eta = \eta_1 = 0$ (что соответствует начальному максвелловскому распределению) и $T = T_1 = T_{ex} = 1$, численное решение выглядит так, как показано на рисунке 11.



(а) Зависимость общей вязкости от времени.

(b) Зависимость индивидуальных вязкостей η_k от массы k при t = 500.

Рис. 11: Вязкость агрегирующего гранулированного газа при наличии и отсутствии молекулярного газа. Параметры молекулярного газа были выбраны таким образом, чтобы в отсутствии агрегации выполнялось соотношение $\eta_k = 10k^{1/3}n_kT_k$. Решения получены с использованием температурно-зависимого метода Монте-Карло с 10^6 частицами (см. раздел 5.1.3).

Можно проверить, что если существует только один размер $k = 1, \varepsilon = 1$, нет молекулярного

$$B_{11}^{\eta} = 0,$$

$$D_{11}^{\eta_i} \eta_1 n_1 + D_{11}^{\eta_j} n_1 \eta_1 = \frac{16\sqrt{\pi}}{5} \sigma_{11}^2 \sqrt{T_1} n_1 \eta_1$$

и стационарным решением является

$$\eta = \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{T}{\pi}},$$

которое совпадает с решением для вязкости из уравнения (86) и из подхода Чепмена-Энскога [76].

3.6. Уравнения для смеси гранулярного и молекулярного газа

В предыдущем разделе мы использовали уравнение Больцмана-Фоккера-Планка для описания смеси гранулярного и молекулярного газа. Здесь мы получим уравнения для смеси непосредственно из уравнений Больцмана, то есть мы покажем, как добавить молекулярный газ в уравнения Смолуховского-Навье-Стокса.

Мы начнем с уравнений Эйлера, так как правая часть в них аналогична уравнениям Навье-Стокса. Молекулярный газ создает дополнительный член во всех интегралах столкновений, который соответствует столкновениям гранулярных частиц с частицами молекулярного газа. Поскольку агрегации с молекулярным газом нет, в простом случае отсутствия потока молекулярного газа (или в связанной с ним системе координат) можно показать, что дополнительный член имеет вид (предполагая, что $m_g \ll m_1 = 1$, $m_g/m_i \ll T_g/T_i$ и $\varepsilon = 1$ для столкновений с молекулярным газом):

$$D_{i}^{g} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3}i^{-4/3}\sqrt{T_{g}m_{g}}(T_{i} - T_{g}).$$

Тот же результат был получен в [77]. В общем случае, дополнительные члены $\vec{R}_k^g n_k n_g$ и $D_k^g n_k n_g$ добавляются в правую часть (71) и (72), где n_g – концентрация молекулярного газа:

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right)+n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\vec{u}_{k}+\vec{u}_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right)+\vec{\nabla}\left(n_{k}\theta_{k}\right)\\ &=\frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\vec{P}_{ij}n_{i}n_{j}-\sum_{j=1}^{\infty}\vec{R}_{kj}n_{k}n_{j}-\vec{R}_{k}^{g}n_{k}n_{g}, \quad k=\overline{1,\infty},\\ &\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\theta_{k}\right)+n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\theta_{k}+\theta_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right)\\ &=\frac{1}{2}\sum_{i+j=k}B_{ij}n_{i}n_{j}-\sum_{j=1}^{\infty}D_{kj}n_{k}n_{j}-D_{k}^{g}n_{k}n_{g}, \quad k=\overline{1,\infty}, \end{split}$$

где \vec{R}_k^g и D_k^g имеют вид:

$$\begin{split} \vec{R}_{k}^{g} &= \frac{1}{2} \sqrt{2\pi} k^{-1/3} \sqrt{T_{g} m_{g}} \left(\vec{u}_{k} - \vec{u}_{g} \right) \frac{T_{g} \overline{I_{H}} \left(0, \sqrt{\frac{2m_{g}}{T_{g}}} \left(\vec{u}_{k} - \vec{u}_{g} \right) \right)}{m_{g} \left| \vec{u}_{k} - \vec{u}_{g} \right|^{2}}, \\ D_{k}^{g} &= \frac{4}{3} \sqrt{2\pi} k^{-4/3} \sqrt{T_{g} m_{g}} \left(T_{k} \overline{I_{GH}} \left(0, \sqrt{\frac{2m_{g}}{T_{g}}} \left(\vec{u}_{k} - \vec{u}_{g} \right) \right) \right) \\ -T_{g} \overline{I_{G}} \left(0, \sqrt{\frac{2m_{g}}{T_{g}}} \left(\vec{u}_{k} - \vec{u}_{g} \right) \right) \right). \end{split}$$

Если в молекулярном газе существует градиент температур, изменение теплопроводности также становится важным. Тогда появляется дополнительный набор коэффициентов

$$\kappa_g^k = -\frac{5}{2}\alpha_{0g}^k n_k \theta_k,$$

дополнительные уравнения для α_{0g}^k :

$$\frac{15}{2} \frac{\partial \left(\alpha_{0g}^{k} n_{k} \theta_{k}\right)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \left(\alpha_{0g}^{i} B_{ij}^{\alpha} + \alpha_{0g}^{j} B_{ji}^{\alpha}\right) n_{i} n_{j} - \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_{0g}^{k} C_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_{0g}^{j} C_{kj}^{\alpha 2}\right) n_{k} n_{j} + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_{0g}^{k} D_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_{0g}^{j} D_{kj}^{\alpha 2}\right) n_{k} n_{j} + \alpha_{0g}^{k} D_{k}^{g 1} n_{k} n_{g} + \alpha_{0g} D_{k}^{g 2} n_{k} n_{g}$$

и дополнительные слагаемые в правой части (83):

$$\frac{15}{2} \frac{\partial \left(\alpha_0^{kl} n_k \theta_k\right)}{\partial t} + \frac{15}{2} \delta_{kl} n_k \theta_k = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \left(\alpha_0^{il} B_{ij}^{\alpha} + \alpha_0^{jl} B_{ji}^{\alpha}\right) n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_0^{kl} C_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_0^{jl} C_{kj}^{\alpha 2}\right) n_k n_j + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\alpha_0^{kl} D_{kj}^{\alpha 1} + \alpha_0^{jl} D_{kj}^{\alpha 2}\right) n_k n_j + \alpha_0^{kl} D_k^{g 1} n_k n_g + \alpha_{0g}^{l} D_k^{g 2} n_k n_g,$$

где α_{0g} соответствует теплопроводности молекулярного газа, а α_{0g}^k соответствует влиянию молекулярного газа на теплопроводность частиц гранулярного газа. D_k^{g1} и D_k^{g2} такие же, как $D_{kj}^{\alpha 1}$ и $D_{kj}^{\alpha 2}$, но с размером *j*, замененным размером молекулярного газа, и с учетом всех других упрощений. Напомним, что формулы для $D_{kj}^{\alpha 1,2}$ доступны в Wolfram Mathematica

https://github.com/RodniO/BoltzmannIntegrals/releases/tag/v1.0

Аналогичные изменения необходимо сделать в уравнениях для вязкости.

Глава 4. Распределения осколков при фрагментации

Чтобы включить фрагментацию в уравнения Смолуховского, необходимо сначала выяснить, как распределение осколков зависит от скоростей и размеров сталкивающихся частиц. Для этого мы провели моделирование методами молекулярной динамики.

Хотя на данный момент существует множество экспериментальных [110, 111] и численных исследований, большинство из них рассматривает распределение массы осколков (но не их скоростей) или учитывают удары о стену, вместо парных соударений. В настоящее время нет результатов, в которых была бы детально изучена температура или скорость осколков в лобовых столкновений агрегатов.

Здесь мы предоставляем необходимые данные, которые могут быть использованы для построения ядер фрагментации. Мы фокусируемся на поиске универсальных моделей поведения и различиях при фрагментации кластеров, с различными потенциалами взаимодействия. Мы также уделяем особое внимание распределению осколков по скоростям. Наиболее близкие результаты описаны [12], где авторы выдвинули гипотезу о зависимости $\langle |\vec{v}| \rangle \sim m^{-1/3}$ для столкновений плит, хотя численные результаты показали вместо 1/3 степени, близкие к 0. Здесь мы проверим гипотезу о распределении скоростей для сферических агрегатов.

Следует отметить, что в предыдущих работах всегда рассматривался один конкретный потенциал взаимодействия, и не было систематических исследований того, как различные типы потенциалов влияют на распределение осколков. Здесь мы устраняем этот пробел, изучая четыре различных потенциала взаимодействия: Леннарда-Джонса, Джонсона-Кендалла-Робертса (JKR), потенциал Терсоффа углерода и специально сконструированный модифицированный потенциал Леннарда-Джонса. Как мы увидим, разница в распределении осколков связана с шириной потенциальной ямы. В этом смысле потенциал JKR сильно отличается от потенциала Леннарда-Джонса, поскольку частицы взаимодействуют только с ближайшими соседями. Потенциал Терсоффа, с другой стороны, показывает распределения, очень похожие на последние для потенциала Леннарда-Джонса. Хотя разница между данными потенциальной ямы. В отличие от модели JKR, потенциалы Леннарда-Джонса и Терсоффа по-прежнему существенно влияют на частицы на расстоянии, немного большем, чем расстояние между ближайшими соседями.

4.1. Описание моделей

Для простоты мы ограничимся прямым столкновением сферических агрегатов одинакового размера при нулевой температуре. Мы рассмотрим четыре случая для потенциала:

- 1. Потенциал Леннарда-Джонса
- 2. Модель JKR

- 3. Потенциал Терсоффа для углерода
- 4. Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса (описанный ниже)



(а) Потенциал Джонсона-Кендалла-Робертса (JKR), *N* = 5947 частиц в каждом кластере, усреднение по 20 столкновениям.



(с) Потенциал Леннарда-Джонса, N = 757 частиц в каждом кластере, усреднение по 100 столкновениям.



(b) Потенциал Терсоффа для углерода, N = 801 частиц в каждом кластере, усреднение по 10 столкновениям.



(d) Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса, N = 757 частиц в каждом кластере, усреднение по 100 столкновениям.

Рис. 12: Зависимость максимального размера фрагмента от скорости сталкивающихся агрегатов. Каждый агрегат содержит N частиц, поэтому максимальный размер N показывает столкновение с отскоком. Когда максимальный размер равен 2N, происходит слипание. Линия E = 0 показывает скорость, которая приводит к нулевой общей энергии после столкновения. Потенциал JKR имеет две интересные особенности поведения распределения числа осколков, которые подробно показаны на рисунках 21 и 27.

Потенциал Леннарда-Джонса (L-J) имеет вид:

$$U_{L-J} = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^1 2 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right),$$

а соответствующая сила вычисляется следующим образом:

$$F_{L-J} = 24\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^7 - 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{13} \right).$$

Путем правильного масштабирования времени $t' = t \sqrt{\frac{12\varepsilon}{2^{1/6}\sigma^2}}$ и расстояния $r' = r/(2^{1/6}\sigma)$ мы приходим к более простому уравнению

$$F'_{L-J}(r') = 1/r'^7 - 1/r'^{13}.$$
(88)

Масса каждой частицы (мономера) в дальнейшем также принимается равной 1. Стоит отметить, что большой свободы в выборе скорости столкновения нет. Ее увеличение или уменьшение в два раза приводит либо к образованию, в основном, мономеров, либо к отсутствию фрагментации (см. рисунок 12с). То же самое относится и к другим потенциалам. Мы обсудим, как скорость столкновения влияет на распределение осколков в разделе 4.3.4.

Другой широко используемый при изучении пылевых агрегатов потенциал [41, 112] называется Johnson-Kendall-Roberts (JKR). По сравнению с потенциалом Леннарда-Джонса, у него есть дополнительный параметр, который определяет, расположение минимума потенциала, по сравнению с радиусом частицы. Сила JKR может быть определена как решение системы уравнений

$$F_{JKR}(a(r)) = \left(2a^3 - 3\xi a^{3/2}\right)/D,$$

$$1 - r = 2a^2 - 2\xi a^{1/2}.$$
(89)

где *D* и ξ являются параметрами, а *а* обозначает радиус области контакта частиц. Мы предполагаем, что частицы представляют собой сферы диаметром 1. Параметры определяются как $\xi = \sqrt{\frac{2}{3}\pi\gamma D}$ и $D = \frac{3}{2}(1 - v^2)/Y$, где v – модуль Юнга, Y – коэффициент Пуассона, а γ – коэффициент адгезии, то есть удвоенная свободная энергия поверхности на единицу площади твердого тела в вакууме.

Поскольку JKR предполагает применимость закона Гука, мы должны выбрать равновесие так, чтобы оно было как можно ближе к поверхности частицы. В экспериментах мы выбрали параметры ($D = 1,12 \cdot 10^{-5}, \xi = 7,4 \cdot 10^{-3}$ для R = 10) так, чтобы они приводили к фрагментации примерно с той же скоростью столкновения, что и Леннард-Джонс, и для потенциала Леннарда-Джонса, имели равновесие при $r \approx 0,9992$, что близко к r = 1. Минимальное расстояние между центрами частиц никогда не было меньше 0,95 во время столкновений. Значения, более близкие к 1, требуют меньшего временного шага, что увеличило бы время моделирования.

Таким образом, по сравнению с L-J, модели JKR соответствует очень узкая потенциальная яма. Поэтому, мы ожидаем увидеть более медленную скорость роста кинетических энергий от размера для малых осколков. Это очень важный потенциал для изучения из-за его использования при моделировании планетарных колец [112].

Мы также рассмотрим потенциал Терсоффа для углерода с параметрами из [113]. Это наиболее часто используемый на практике потенциал из изучаемых, его аналоги широко используются в симуляциях, связанных с графеном [114, 115]. Важность этого потенциала связана и с тем, что углеродные частицы относятся к распространенным загрязнителям воздуха. Наконец, мы также изучаем модельный потенциал, полученный из L-J (88) добавлением плоского плато единичной длины (см. рисунок 13). Это сделано, чтобы проверить, как увеличение ширины потенциала влияет на распределение скоростей осколков и верны ли будут полученные предсказания для более дальнодействующих потенциалов.



4.2. Численный алгоритм

Сталкивающиеся сферы были созданы путем фиксирования радиуса *R* и размещения частиц внутри него с наиболее близкой (гра-

Рис. 13: Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса, используемый в численных экспериментах.

нецентрированной кубической) упаковкой. Чтобы сделать сферу немного более случайной, мы устанавливали среднюю квадратическую скорость частиц равной $\langle v^2 \rangle = 0,1$, а затем медленно охлаждаем их до нулевой температуры T = 0. Для R = 5 это приводит к 757 частицам диаметром 1 в каждой сфере, а сфера радиуса R = 10 содержит 5947 частиц. В отличие от других, система с потенциалом Терсоффа моделировалась с помощью LAMMPS [116], где визучались кластеры с 801 частицами, для которых была использована структура алмаза.

Чтобы сделать алгоритм максимально простым, мы использовали схему leap-frog [117]. На *k*-м временном шаге $t_k = k\Delta t$ получаем

$$\vec{v}_i(t_k + \Delta t/2) = \vec{v}_i(t_k - \Delta t/2) + \sum_j \vec{F}_{ij}(t_k)\vec{x}_i(t_k + \Delta t) = \vec{x}_i(t_k) + \vec{v}_i(t_k + \Delta t/2).$$
(90)

Чтобы использовать эту схему, необходимо определить начальное условие для скорости при $\vec{v}_i(\Delta t/2)$. Мы делали это следующим образом.

Поскольку каждый агрегат находится при нулевой температуре и два агрегата изначально находятся далеко друг от друга, можно сделать вывод, что для каждой частицы *i*

$$\sum_{j} \vec{F}_{ij}(0) = \vec{0}$$

и остается нулевым в течение достаточно длительного времени. Поэтому скорости изначально не изменяются, то есть,

$$\vec{v}_i(\Delta t/2) = \vec{v}_i(0).$$
 (91)

В соответствии с уравнением (91) мы можем использовать начальные скорости, что не влияет на порядок аппроксимации¹.

U

¹Использование $\vec{v}'_i(t) = \vec{v}_i(t + \Delta t/2)$ вместо \vec{v}_i в уравнении (90) эквивалентно использованию схемы Эйлера вместо

Временной шаг был одинаковым для всех параметров моделирования (включая скорость столкновения) и был выбран таким образом, чтобы при любых использованных скоростях столкновений разность энергий в начале и в конце моделирования была менее 0,5% от общей кинетической энергии.

Затем уравнения движения решались до того момента, пока частицы не окажутся на значительном расстоянии друг от друга. А именно, мы заканичвали расчет и оценивали скорости, когда одна из частиц выходила из «коробки» с размерами, равными 200 × 200 × 200, с центром в центре масс системы. Рисунок 14 показывает, что к этому времени столкновение уже давно закончилось.



Рис. 14: Временная зависимость общего числа тесно связанных пар частиц (пар на расстоянии не более 2) для потенциала Леннарда-Джонса. Моделирование останавливалось, когда одна из частиц достигала границы области моделирования.

В этот момент мы оценивали количество и кинетическую энергию осколков. Определение соединений для потенциала JKR несложно. Та же ситуация с потенциалом Tersoff, который уже включает в себя ограничение на дальность взаимодействия. Для L-J и модифицированных L-J потенциалов мы считали частицы находящимися в одном и том же фрагменте, если они соответственно находятся на расстоянии не более 2 и 3 друг от друга.

4.3. Результаты

4.3.1. Качественный анализ распределения скоростей

Прежде чем углубляться в детали экспериментов, важно объяснить, почему мы ожидаем зависимость $\langle |\vec{v}| \rangle \sim m^{-1/3}$. Эта гипотеза основана на предположении, что импульс, передаваемый каждому фрагменту во время столкновения, пропорционален площади поверхности фрагмента $S \sim m^{2/3}$, что приводит к $|\vec{v}| \sim S/m \sim m^{-1/3}$. Поскольку нас на самом деле интересует температура осколков (второй момент), мы будем изучать среднюю кинетическую энергию, которая в этом случае должна вести себя как $T \sim \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle \sim S^2/m \sim m^{1/3}$.

Зависимость от *S* следует из количества частиц в осколке, на которые непосредственно влияет скорость столкновения. Поэтому, хотя мы ожидаем, что эта зависимость действительно будет верной для больших осколков, для малых масс она может быть иной. А именно, если рассмотреть потенциал с широкой потенциальной ямой, то столкновение может затронуть весь

схемы leap-frog, что, как ни удивительно, означает, что в наших условиях схема Эйлера имеет аппроксимацию второго порядка.

осколок, если он достаточно мал. Тогда мы можем ожидать зависимости до $T \sim m$. С другой стороны, для короткодействующего потенциала только часть поверхности фрагмента может быть непосредственно затронута столкновением. Поскольку у нас затронута вся «поверхность», когда осколок является мономером, эта доля уменьшается с увеличением массы. Следовательно, мы должны наблюдать более медленный рост температуры (или даже снижение температуры) с увеличением размера для короткодействующих потенциалов и малых размеров осколков.

4.3.2. Распределение скоростей и масс осколков



Рис. 15: Распределение температур фрагментов для различных потенциалов взаимодействия.

На рисунке 15 показано среднее распределение температуры для четырех изученных потенциалов за 100 пробных столкновений. Мы видим, что распределение кинетических энергий согласуется с прогнозируемой зависимостью $m^{1/3}$. Малые размеры также демонстрируют предсказанное поведение. Потенциал JKR, будучи чрезвычайно короткодействующим, показывает, что *T* уменьшается с размером для мелких частиц. Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса, с другой стороны, показывает температурную зависимость для мелких частиц более крутую, чем 1/3. Потенциал Леннарда-Джонса находится посередине, показывая температуры лишь немного ниже, чем $m^{1/3}$ для мелких частиц, и он очень быстро сходится к $T \sim m^{1/3}$. Потенциал Терсоффа показывает распределения, очень похожие на потенциал Леннарда-Джонса. Он не включает частицы, находящиеся на удвоенном расстоянии друг от друга, как модифицированный потенциал Леннарда-Джонса, и не включает только ближайший слой, как JKR. Потому размер потенциальной ямы схож с потенциалом Леннарда-Джонса, поэтому мы видим очень похожие результаты. Единственным исключением является то, что среди осколков для потенциала Терсоффа димеров больше, чем мономеров. Заметим, однако, что зависимость $m^{1/3}$ всегда нарушается для очень больших размеров.

На рисунке 16 построено количество осколков в зависимости от их размера. Хотя у нас здесь нет теоретических предсказаний для количества осколков, представляется, что зависимость также полиномиальная, со степенью, близкой к –2,75. Это согласуется с результатами [11], где наблюдался показатель 2,8 ± 0,05.

Следует отметить, что зависимость –2,75 остается верной для потенциалов Леннарда-Джонса и Терсоффа и для других скоростей. То же самое справедливо и для модифицированного потенциала L-J с показателем около –2. Естественно, эта зависимость нарушается раньше (и становится экспоненциальной) при больших или малых скоростях столкновения (ведущих к отскоку или крошению соответственно).

4.3.3. Угловое распределение осколков

Хотя изучение углового распределения не обязательно для построения ядра фрагментации, все же представляется интересным может быть интересно увидеть качественную картину. Здесь мы сосредоточимся только на потенциалах JKR и Леннарда-Джонса.

На рисунке 17 показано угловое распределение для модели JKR при *v* = 2. На рисунке 18 показано угловое распределение для потенциала Леннарда-Джонса.

Отметим, что распределения не являются гладкими, поскольку производная испытывает скачки при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Следовательно, коэффициенты полинома Лежандра могут быть большими, и плохо аппроксимировать распределение конечным числом полиномов.

4.3.4. Зависимость распределения от скорости столкновения

Чтобы построить приближение к распределению, нам также нужно будет найти выражение для числа мономеров (или общего числа фрагментов) и их кинетической энергии (или общей кинетической энергии фрагментов).

83



Рис. 16: Зависимость количества фрагментов от массы для различных потенциалов.

По мере увеличения скорости, количество мономеров должно приближаться к общему числу фрагментов, в конечном итоге достигая полного крошения. Общая потеря кинетической энергии также должна сходиться к изначальной потенциальной энергии. В случае модели JKR потери должны сходиться к общей потенциальной энергии плюс средние потери энергии из-за диссипации.

На рисунке 19 показана зависимость доли «немономеров» (то есть фрагментов, за исключением мономеров) от скорости столкновения для всех четырех потенциалов, в то время как на рисунке 20 показана зависимость общих потерь энергии от скорости. Зависимости приближаются либо полиномиальными, либо экспоненциальными функциями, подобранные параметры записаны в заголовках под каждым графиком.



(a) Угловое распределение мономеров и тримеров.



(b) Распределение, представленное через сумму полиномов Лежандра. На графике показаны соответствующие коэффициенты полиномов Лежандра.



(с) Пример распределения. Радиусы окружностей соответствуют массам фрагментов как $r \sim m^{1/3}$. Положение на осях x и y показывает компоненты скорости, параллельные и перпендикулярные направлению столкновения.

Рис. 17: Угловое распределение для «JKR фрагментов», v = 2.



(а) Угловое распределение осколков.

(b) Распределение, представленное через сумму полиномов Лежандра. На графике показаны соответствующие коэффициенты полиномов Лежандра.

(с) Пример распределения. Радиусы окружностей соответствуют массам фрагментов как $r \sim m^{1/3}$. Положение на осях *x* и *y* показывает компоненты скорости, параллельные и перпендикулярные направлению столкновения.

Рис. 18: Угловое распределение для «L-J фрагментов», v = 4.

Мы видим, что количество «немономеров» среди осколков зависит от скорости экспоненциально, как $e^{-c(v-v_0)}$, где v_0 можно интерпретировать как скорость, при которой начинается фрагментация.

Для полной кинетической энергии потенциалов Леннарда-Джонса и модифицированного Леннарда-Джонса мы видим зависимость вида

$$E_{loss} = E_{maxloss} / \left(1 + C \left(v / v_0 \right)^b \right)$$

Для JKR и потенциала Терсоффа при этом

$$E_{loss} \approx E_{maxloss} exp(-cv^2).$$

86





Здесь E_{loss} - это разница кинетической энергии фрагментов и начальных кластеров:

$$E_{loss} = 2\frac{N(\nu/2)^2}{2} - \sum_{j} \frac{m_j v_j^2}{2},$$

где сумма берется по всем фрагментам j с массой m_j и скоростью v_j в центре масс системы. v – это относительная скорость кластеров. $E_{maxloss}$ – это максимально возможное значение E_{loss} .

87





4.3.5. Построение функции фрагментации

Используя результаты моделирования, можно построить простую модель фрагментации, которая может быть использована в уравнениях Смолуховского. Здесь мы не будем создавать само ядро фрагментации, а вместо этого соберем полезную информацию из наших данных моделирования.

Наша цель – определить функцию фрагментации $F_k(i, j, \vec{v}_i, \vec{v}_j)$, которая равна количеству фрагментов размера *k* после столкновения агрегатов размера *i* и *j*. \vec{v}_i и \vec{v}_j обозначают скорости сталкивающихся кластеров.

Чтобы упростить модель, мы можем предположить, что фрагментация каждой из сталкивающихся частиц не зависит существенно от массы другой частицы (при изучении фрагментации часто рассматривается лишь один кластер, и передача кинетической энергии происходит лишь в одной точке [12], таким образом, размер и форма другого кластера не учитываются). Наконец, мы пренебрегаем частью скорости, ортогональной направлению столкновения, и используем скорости относительно центра масс. Это приводит нас к

$$F_{k}(i, j, \vec{v}_{i}, \vec{v}_{j}) = f_{k}\left(i, \left|(v_{i} - v_{c.m.})_{\parallel}\right|\right) + f_{k}\left(j, \left|(v_{j} - v_{c.m.})_{\parallel}\right|\right).$$

Функция f_k тогда может быть определена путем исключительно исследования прямых столкновений частиц одинакового размера, что мы и делаем. Наши результаты моделирования могут быть аппроксимированы следующим образом

$$f_k(N,v) \sim Nk^{-a} exp(-b_1k),\tag{92}$$

На низких скоростях мы имеем $b_1 = 0$, а оставшаяся масса содержится в агрегате после прилипания или в двух агрегатах после отскока. Для более высоких скоростей b_1 следует определять по количеству немономеров, которое экспоненциально уменьшается с увеличением скорости столкновения.

Для более сложной модели, как в [13], нам также нужна функция для второго момента скорости *g*, определяющая кинетическую энергию осколков. Опять же, наши эксперименты предсказывают

$$g_k(N,v) \approx C(v)k^{1/3}.$$

В случае модели JKR или модифицированного потенциала L-J функция может быть определена для $k \leq 5$. Коэффициент C(v) может быть определен таким образом, чтобы удовлетворять

$$\sum_{k} g_k = E_{kin} - E_{loss}.$$

4.4. Наблюдаемые типы столкновений

4.4.1. Слипание и отскок в модели JKR

Здесь мы подробно рассмотрим, что происходит для очень низких скоростей соударения. Сравнивая рисунки 12a и 12c, мы видим, что потенциал Леннарда-Джонса приводит к слипанию на низких скоростях, в то время как потенциал JKR приводит к отскоку. Причина этого различия заключается в том, что столкновение L-J кластеров приводит к неизбежной пластической деформации и перестройке частиц. Напротив, даже небольшая перестройка частиц в случае потенциала JKR приводит к фрагментации, и допускается только упругая деформация. Тем не менее, модель JKR все еще может описывать слипание, но по другой причине.

Сила в модели JKR (89) возникает только тогда, когда расстояние между частицами r становится меньше 1. Когда это происходит, радиус зоны контакта a испытывает скачок от 0 до конечного ненулевого значения. После этого для разрыва соединения требуется ненулевая дополнительная энергия. Это значение может быть получено путем интегрирования уравнений (89) от r = 1 до r, соответствующих нулевой силе, F = 0. Результат для энергии диссипации,

$$E_{diss} = \frac{3}{10} \left(3 - 2 \left(\frac{3}{4} \right)^{4/3} \right) \gamma^{10/3} / D$$
(93)

описывает величину потерь при формировании одного соединения мономеров.

Условием слипания кластеров является

$$E_{kin} = \frac{2N(\nu/2)^2}{2} < n_{bonds}E_{diss} + E_{totemp},$$
(94)

где E_{kin} – общая кинетическая энергия обоих кластеров в общем центре масс, n_{bonds} - количество образовавшихся связей после столкновения и E_{totemp} – часть кинетической энергии, которая превратилась во внутреннюю температуру (колебания частиц внутри кластеров). Для случая $n_{bonds} = 1$ мы наблюдали $E_{totemp} \approx E_{kin}/2$. С использованием (93), это приводит к условию

 $v <\sim 2 \cdot \gamma^{5/3} / \sqrt{ND}.$

Следовательно, для $v < v_1 = 2\gamma^{5/3}/\sqrt{ND}$ отскоки не происходят. Численные эксперименты подтверждают это предсказание (см. рисунок 21). При этом всегда есть некоторые случаи слипания даже при гораздо больших



v < 0,015 : В основном слипание

0,015 < v < 0,1 : В основном отскок

v > 0,1 : В основном отскок с эрозией
 или слипание с эрозией

Рис. 21: Вероятность слипания для потенциала JKR на низких скоростях, основанная на 100 столкновениях для каждой скорости. R = 5. При больших скоростях вероятность слипания возрастает из-за потерь энергии на образование осколков.

скоростях. При скоростях, больших $v \approx 0,08$, после столкновения начинают появляться осколки. Более высокие скорости приводят к увеличению вероятности слипания, хотя теперь большая часть энергии теряется не из-за диссипации, а из-за эрозии осколков.

4.4.2. Другие виды поведения

Можно также попытаться провести более детальную классификацию различных типов столкновений. Однако, как показывают рисунки 12а-12d, трудно определить точные значения кинетической энергии, которые разделяют указанные режимы соударений. Как следует из предыдущего



Рис. 22: Диаграмма типов столкновений для четырех изученных потенциалов. Разделительные линии находятся как описано ниже, с использованием данных из рисунков 12, 19 и 21. Горизонтальная ось представляет потенциалы, вертикальная ось показывает отношение кинетической энергии E_{kin} к общей потенциальной энергии соединения частиц в начальных кластерых E_{con} . Для модели агрегации высокий интерес представляют малые скорости, где происходит слипание, что на несколько порядков ниже энергии фрагментации. К гранулярным газам здесь относится только модель JKR.

раздела, разделение не является резким, и одинаковые скорости приводят к разным результатам столкновений.

Поскольку небольшие изменения скорости могут привести к резким изменениям результатов,

необходимо быть очень точными в отношении значений, разделяющих различные режимы, что, как правило, невозможно. Более того, рисунки 12а-12d также показывают, что даже если мы найдем такое значение для одного потенциала, это ничего не скажет нам о других, поскольку начало фрагментации напрямую не определяется скоростью, соответствующей нулевой полной энергия (линия E = 0).

Поэтому единственное, что можно сделать, – это, по крайней мере, попытаться провести различие между различными вариантами поведения фрагментации на основе конкретных примеров. Помещая результаты для режимов соударений четырех потенциалов на общую диаграмму (см. рисунок 22), мы обсудим наблюдаемые модели поведения и то, как их можно различить.

Более точное разделение различных режимов рассмотрено в [118], где также есть результаты для потенциала L-J, включающие непрямые столкновения.



Рис. 23: Пример агрегации, показывающий положение частиц в разное время. Модифицированный Леннард-Джонс, *v* = 2. Кружки обозначают отдельные частицы.

Агрегация. Мы можем определить агрегацию по наблюдаемому образованию общего кластера **без потери частиц**. В случае модели JKR вид агрегации обсуждался в предыдущем подразделе. Что касается потенциала Терсоффа, то он, по-видимому, допускает отскок. Для потенциала Леннарда-Джонса и модифицированного потенциала Леннарда-Джонса отскок отсутствует, а агрегация все еще существует при высоких значениях кинетической энергии столкновения. Напомним, что, в отличие от других потенциалов, в случае агрегации для модели JKR требуемая на это кинетическая энергия не растет с увеличением размера кластера. Она может расти только тогда, когда минимальное значение *n_{bonds}* увеличивается (94), что, по-видимому, не происходит.

Отскок. Под отскоком мы подразумеваем отскок **без потери частиц** из-за эрозии. Повидимому, этого не происходит для потенциалов Леннарда-Джонса и модифицированного потенциала Леннарда-Джонса, поскольку любое столкновение приводит к пластической деформации. Рисунки 12с-12d показывают, что для низких скоростей, действительно, происходит слипание, поскольку максимальный размер «фрагмента» в два раза превышает размер каждого кластера (что означает, что данный «фрагмент», по сути, является результатом слипания двух изначальных кластеров).



Рис. 24: Пример последствий отскока с фрагментацией для потенциала JKR. Круги представляют отдельные частицы. Мономеры черные, другие фрагменты фиолетовые.

Рис. 25: Количество фрагментов для модифицированного потенциала Леннарда-Джонса при *v* = 2. Большие «фрагменты» (являющиеся, по сути, начальными кластерами) указывают либо на отскок, либо на прилипание с эрозией.

Агрегация и отскок с эрозией. При больших значениях кинетической энергии, кластеры все еще могут прилипать после того, как достаточная часть кинетической энергии столкновения будет потрачена на фрагментацию (см. рисунок 21). Такая ситуация возникает и для других потенциалов. Стоит отметить, что мы не можем разделить случаи агрегации с эрозией и отскока с эрозией, поскольку они происходят при одинаковой скорости столкновения. В качестве другого примера на рисунке 25 показано распределение фрагментов для модифицированного потенциала L-J при низких скоростях. Можно видеть, что существуют как случаи отскока, так и слипания с присутствием эрозии, которые можно идентифицировать по большому количеству «фрагментов» в районе m = 757 (отскок) и около m = 1514 (слипание).

В то время как нижнюю границу эрозии легко определить по наличию каких-либо других частиц, определение перехода к фрагментации может быть выполнено несколькими способами. Мы решили определить его таким образом, чтобы сделать его полезным при численном анализе. А именно, как мы видели на рисунке 19, количество «немономеров» имеет универсальную экспоненциальную зависимость. Однако эта экспоненциальная зависимость проявляется не сразу. Если мы продолжим ее до тех пор, пока показатель степени не предскажет отсутствие мономеров (где пунктирная линия пересекает y = 1), в этот момент все равно останутся некоторые осколки. Поскольку это примерно та точка, где мы можем начать аппроксимировать число «немономеров» с помощью экспоненциального распределения, мы определим эту точку, как скорость, где эрозия переходит в фрагментацию.

Мы снова отмечаем, что, к сожалению, нет различия в скорости столкновения между слипанием с эрозией и отскоком с эрозией.





Рис. 26: Число осколков для потенциала Леннарда-Джонса, *v* = 5. Отчетливо виден переход на экспоненциальную зависимость.

Рис. 27: Зависимость максимального размера осколков от скорости сталкивающихся кластеров JKR, усреднение по 20 столкновениям. Столбики показывают вариацию максимального размера для одного столкновения. Происходит резкий переход к максимальному размеру около 5 при v = 3,4.

Фрагментация. Фрагментация на очень высоких скоростях не содержит крупных частиц и обычно имеет экспоненциальный хвост после полиномиальной зависимости (см. рисунок 26). Увеличение скорости столкновения приводит к тому, что экспоненциальный хвост начинает проявляться при меньших размерах, ближе к мономерам. С другой стороны, полиномиальная часть остается с тем же степенным показателем.

Для потенциала JKR можно увидеть большие фрагменты, которые напоминают части исходного сферического кластера (рисунок 28). Это означает, что энергии было недостаточно, чтобы разрушить кластеры. Такие большие фрагменты остаются при скоростях v < 3,5. Как показано на рисунке 27, ситуация меняется при v = 3,4 (на рисунке 12а можно увидеть излом). Хотя не все фрагменты являются мономерами при более высоких скоростях, частицы размером более 5 никогда не встречаются.

Крошение. Хотя всегда остаются «немономеры» и полного крошения никогда не происходит, мы называем «крошением» случаи, когда все частицы имеют размер 5 или меньше. В то время как для модели JKR можно увидеть переход (рисунок 27), для других потенциалов переход более плавный, и можно выбрать любой другой максимальный размер в качестве границы. Однако, когда мы выбираем одинаковый максимальный размер для всех потенциалов, их легче сравнивать.

93



(а) Пример фрагментации для модифицированного Леннарда-Джонса, *v* = 10. Кружки соответствуют отдельным частицам.



(b) Пример фрагментации для потенциала JKR, *v* = 1,4. Кружки соответствуют отдельным частицам. Мономеры черные, другие осколки фиолетовые.



4.5. Уравнения Смолуховского-Эйлера с фрагментацией

Возможный выбор функции распределения фрагментации описан в разделе 4.3.5. Он основан на трех предположениях:

- 1. Мы игнорируем эрозию, поскольку она занимает небольшой интервал скоростей (см. рисунок 22)
- 2. Мы не учитываем влияние направление столкновения (только проекцию скорости на него)
- 3. Предполагается, что распределение фрагментов одного кластера не зависит от размера (но не от скорости) другого кластера

Поскольку довольно тяжело определить показатель степени b_1 в уравнении (92), мы заменим экспоненциальное убывание на усечение. Пусть $S_{ij}n_in_j$ – количество фрагментационных столкновений между кластерами размера *i* и *j*. Тогда из распределения фрагментации мы получаем, что количество фрагментов размером *k* пропорционально

$$S_{ijk}^{0} = k^{-\alpha} \cdot \frac{iS_{ij}}{\sum\limits_{j=1}^{k_{\max}^{ij}} j^{-\alpha+1}}$$

где k_{\max}^{ij} – это наибольшее целое число, удовлетворяющее неравенству

$$\frac{\sum\limits_{k=2}^{k_{\max}^{ij}} k^{-\alpha}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty} k^{-\alpha}} < C_{tail}^{ij}, \tag{95}$$

а C_{tail}^{ij} описывает долю «немономеров» и экспоненциально зависит от скорости столкновения. Знаменатель был упрощен, чтобы включить суммирование по всем размерам. Пренебрегая влиянием направления столкновения, исходя из численных экспериментов можно сделать вывод, что C_{tail}^{ij} экспоненциально убывает с увеличением $|\vec{v}_i - \vec{v}_j|$. Кроме того, если предположить, что форма распределения осколков для кластеров достаточно большого размера определяется отношением $E_{kin}/E_{con} \sim E_{kin}/(i + j) \sim \frac{ij}{(i+j)^2} |\vec{v}_i - \vec{v}_j|^2$, то C_{tail}^{ij} обязано быть функцией от $\frac{\sqrt{ij}}{i+j} |\vec{v}_i - \vec{v}_j|$. Согласно численным экспериментам эта функция экспоненциальная, то есть $C_{tail}^{ij} = e^{c_2 - c_1} \frac{\sqrt{ij}}{i+j} |\vec{v}_i - \vec{v}_j| \le 0$, то есть $|\vec{v}_i - \vec{v}_j| > \frac{c_2(i+j)}{c_1\sqrt{ij}}$. Обозначим

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$

Чтобы получить среднее значение C_{tail}^{ij} , мы интегрируем по всем возможным скоростям кластеров

$$C_{tail}^{ij} = \frac{\iiint\limits_{\vec{v}_{ij}| > \frac{c_2(i+j)}{c_1\sqrt{ij}}}}{\iiint\limits_{\vec{v}_{ij}| > \frac{c_2(i+j)}{c_1\sqrt{ij}}}} \left|\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right| \theta\left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f\left(\vec{v}_i\right) f\left(\vec{v}_j\right) d\vec{v}_i d\vec{v}_j d\vec{e}}$$

В итоге, после определения k_{\max}^{ij} , мы можем найти фактическое количество фрагментов

$$S_{ijk} = \begin{cases} S_{ijk}^0, & k \leq k_{\max}^{ij}, \\ 0, & k > k_{\max}^{ij}, \end{cases}$$

которое может быть включено в первый набор уравнений Смолуховского-Эйлера как

$$\frac{\partial}{\partial t}n_k + \vec{\nabla}\left(n_k\vec{u}_k\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j + \sum_{i,j=1}^{\infty}S_{ijk}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}S_{kj}n_kn_j, \quad k = \overline{1,\infty}.$$

Поскольку определение k_{max} в этой модели является довольно затратным, мы можем упростить его, различая только два поведения фрагментации: $k_{\text{max}} = i$ и $k_{\text{max}} = 1$. Последний случай, который называется крошением, может быть определен из уравнения (95):

$$\frac{2^{-\alpha}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty} k^{-\alpha}} = e^{c_2 - c_1 \Delta v_{\max} \frac{\sqrt{ij}}{i+j}},$$

где Δv_{max} – максимальная скорость, при которой крошения еще нет, что соответствует k_{max}^{ij} = 2. Таким образом, мы приходим к условию $|\vec{v}_{ij}| > \Delta v_{\text{max}}$, которое может быть включено в кинетические интегралы для фрагментации

$$S_{ij}^{frag} = \sigma_{ij}^{2} \iiint_{\Delta v_{\text{max}} > \left|\vec{v}_{ij}\right| > \frac{c_{2}(i+j)}{c_{1}\sqrt{ij}}} \left|\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right| \theta\left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f\left(\vec{v}_{i}\right) f\left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e}$$

$$S_{ij}^{shat} = \sigma_{ij}^{2} \iiint_{|\vec{v}_{ij}| > \Delta v_{\text{max}}} \left| \vec{v}_{ij} \cdot \vec{e} \right| \theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e} \right) f \left(\vec{v}_{i} \right) f \left(\vec{v}_{j} \right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e}.$$

Тогда

И

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial t}n_k + \vec{\nabla}\left(n_k\vec{u}_k\right) = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j \\ &+ k^{-\alpha}\sum_{i\geq k}\frac{\sum_{j=1}^{\infty}iS_{ij}^{frag}n_in_j}{\sum_{j=1}^{i}j^{-\alpha+1}} + \delta_{k1}\sum_{i,j=1}^{\infty}iS_{ij}^{shat}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}\left(S_{kj}^{frag} + S_{kj}^{shat}\right)n_kn_j, \quad k = \overline{1,\infty} \end{split}$$

Далее мы будем придерживаться этой упрощенной модели. Если запретить крошение и разрешить только фрагментацию, а также упростить условие на границу скорости, задающей фрагментацию, то наша текущая модель фрагментации для классических уравнений Смолуховского (без учета влияния фрагментации на потоки и температуры) будет аналогична модели из [5].

Влияние на скорости потоков также полностью определяется распределением фрагментов по размерам. А именно, если мы предположим, что для каждого отдельного размера средняя скорость равна нулю в центре масс сталкивающихся частиц (то есть импульс в среднем сохраняется для каждого типа осколков в отдельности), изменение скорости потока должно быть аналогичным изменению, вызванному агрегацией. Тогда вторая система уравнений записывается следующим образом

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial t}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right)+n_{k}\vec{u}_{k}\cdot\vec{\nabla}\vec{u}_{k}+\vec{u}_{k}\vec{\nabla}\left(n_{k}\vec{u}_{k}\right)+\vec{\nabla}\left(n_{k}\theta_{k}\right)=\frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\vec{P}_{ij}n_{i}n_{j}-\sum_{j=1}^{\infty}\vec{R}_{kj}n_{k}n_{j}\\ &+k^{-\alpha}\sum_{i\geqslant k}\frac{\sum_{j=1}^{\infty}i\vec{S}_{ij}^{Vfrag}n_{i}n_{j}}{\sum_{j=1}^{i}j^{-\alpha+1}}+\delta_{k1}\sum_{i,j=1}^{\infty}i\vec{S}_{ij}^{Vshat}n_{i}n_{j}, \quad k=\overline{1,\infty}, \end{split}$$

где

$$\vec{S}_{ij}^{Vfrag} = \sigma_{ij}^{2} \iiint_{\Delta v_{\max} > |\vec{v}_{ij}| > \frac{c_{2}(i+j)}{c_{1}\sqrt{ij}}} \vec{v}_{C.M.} |\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}| \theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f \left(\vec{v}_{i}\right) f \left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e}$$
$$\vec{S}_{ij}^{Vshat} = \sigma_{ij}^{2} \iiint_{|\vec{v}_{ij}| > \Delta v_{\max}} \vec{v}_{C.M.} |\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}| \theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f \left(\vec{v}_{i}\right) f \left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e},$$

где ядро *R* также учитывает интервал скоростей, приводящий к фрагментации.

Чтобы рассчитать изменение температур (кинетических энергий) кластеров, мы прежде всего должны ввести аналоги коэффициентов восстановления ε^{frag} и ε^{shat} , которые описывают потери энергии при агрегации. В более сложных моделях, как показано в разделе 4.3.5, следует использовать $(1 - \varepsilon) \frac{v^2}{2} \sim 1 - a e^{-bv^2}$.

С точки зрения потери энергии частицами размера k после столкновения с частицами размера j, соответствующий интеграл будет похож на агрегацию (ядро D^{agg}). Единственное, что меняется, – это диапазон кинетической энергии, в котором происходит эта потеря энергии. Теперь он должен включать в себя и высокие скорости. С точки зрения полученной осколками кинетической энергии, она должна быть пропорциональна $k^{1/3-\alpha}$, где дополнительные 1/3 возникает из увеличивающегося кинетической энергии с увеличением размера, как показано в разделе 4. Следовательно, третьим набором уравнений будет

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_k \theta_k) + n_k \vec{u}_k \cdot \vec{\nabla} \theta_k + \theta_k \vec{\nabla} (n_k \vec{u}_k) = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k}^{\infty} B_{ij} n_i n_j - \sum_{j=1}^{\infty} D_{kj} n_k n_j + k^{1/3-\alpha} \sum_{i \ge k} \frac{\sum_{j=1}^{\infty} i S_{ijk}^{Efrag} n_i n_j}{\sum_{j=1}^{i} j^{4/3-\alpha}} + \delta_{k1} \sum_{i,j=1}^{\infty} i S_{ij}^{Eshat} n_i n_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$

где S_{ijk}^{Efrag} и S_{ij}^{Eshat} получаются интегрированием по v^2 :

$$\begin{split} S_{ijk}^{Efrag} &= \\ &= \sigma_{ij}^{2} \iiint_{\Delta v_{\max} > |\vec{v}_{ij}| > \frac{c_{2}(i+j)}{c_{1}\sqrt{ij}}}{\left(\frac{\varepsilon^{frag} |\vec{v}_{i} - \vec{v}_{C.M.}|^{2} + |\vec{v}_{C.M.} - \vec{u}_{k}|^{2}}{3}\right) |\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}| \,\theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f \left(\vec{v}_{i}\right) f \left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e} \\ &= \sigma_{ij}^{2} \iiint_{\Delta v_{\max} > |\vec{v}_{ij}| > \frac{c_{2}(i+j)}{c_{1}\sqrt{ij}}}{\left(\frac{\varepsilon^{frag} |\vec{v}_{i} - \vec{v}_{C.M.}|^{2} + v_{C.M.}^{2}}{3}\right) |\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}| \,\theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f \left(\vec{v}_{i}\right) f \left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e} \\ &- \frac{2}{3} \vec{u}_{k} \cdot \vec{S}_{ij}^{Vfrag} + \frac{u_{k}^{2}}{3} S_{ij}^{frag}, \\ S_{ij}^{Eshat} &= \sigma_{ij}^{2} \iiint_{|\vec{v}_{ij}| > \Delta v_{\max}} \left(\frac{\varepsilon^{shat} |\vec{v}_{i} - \vec{v}_{C.M.}|^{2} + |\vec{v}_{C.M.} - \vec{u}_{1}|^{2}}{3}\right) |\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}| \,\theta \left(-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{e}\right) f \left(\vec{v}_{i}\right) f \left(\vec{v}_{j}\right) d\vec{v}_{i} d\vec{v}_{j} d\vec{e}. \end{split}$$

Заметим, что для S_{ijk}^{Efrag} присутствует зависимость от k только через множители u_k^2 и \vec{u}_k . Следовательно, есть четыре дополнительных члена (3 для компонентов \vec{u}_k и 1 для u_k^2), которые можно рассматривать независимо, исключив зависимость от k. В противном случае эти 4 дополнительных условия рассматриваются так же, как и первое. В частности, для $\vec{u}_k \neq \vec{0}$ мы просто имеем в пять раз больший тензорный ранг (см. раздел 4.5.1).

В случае модели JKR мы имеем сначала отскок (мы не рассматриваем очень низкие скорости), затем агрегацию (с эрозией, которой мы пренебрегаем), затем фрагментацию и, наконец, крошение. Этот порядок поведения приводит к следующим ядрам:

$$\begin{split} C_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\\ S_{ij}^{frag} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(I_{F}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\\ S_{ij}^{shat} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(\frac{i\vec{u}_{i}+j\vec{u}_{j}}{i+j}\left(I_{F}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\\ &+ \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{i\theta_{i}-j\theta_{j}}{i+j}\right)\\ \times \left(\frac{1}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}}\left(I_{H}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{H}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right) - \frac{1}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\\ R_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\times\left(\vec{u}_{i}\overline{I_{F}}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right) - \frac{1}{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\\ + \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{\theta_{i}}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}}\overline{I_{H}}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - \frac{\theta_{i}}{\theta_{i}+\theta_{j}}\overline{I_{F}}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\\ + \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{i\theta_{i}}{\left|\vec{u}_{i}+\theta_{j}\right|\left(1+\varepsilon\right)\left(1+\varepsilon\right)\frac{1}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}}I_{H}\left(q_{ij},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\\ \times \left(\frac{I_{H}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{H}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right)}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}} - \frac{I_{F}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij}^{frag},\Delta\vec{u}_{ij}\right)}{\theta_{i}+\theta_{j}}\right)\right)\right)\\ + \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{i\theta_{i}-j\theta_{j}}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}}I_{H}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - \frac{1}{\theta_{i}+\theta_{j}}\overline{I_{F}}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\right)\\ + \left(\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right)\left(\frac{i\theta_{i}-j\theta_{j}}{\left|\vec{u}_{i}-\vec{u}_{j}\right|^{2}}I_{H}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right) - \frac{1}{\theta_{i}+\theta_{j}}\overline{I_{F}}\left(q_{ij}^{shat},\Delta\vec{u}_{ij}\right)\right)\right)\right)\\ \end{array}$$

$$\begin{split} & \mathcal{B}_{ij} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2} \frac{1}{\sqrt{\theta_{i}} + \theta_{j}} \left(\theta_{i}\theta_{j} \left(I_{F}\left(q_{ij}^{(rag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right)\right) \\ & + \left(\frac{\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)^{2}}{6} \left|\Delta \vec{u}_{ij(i+j)}\right|^{2} - \frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{6(i+j)} \left(\theta_{i} + \theta_{j}\right) \left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij(i+j)}\right)\right) \left(I_{F}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{F}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ & + \frac{\theta_{i} + \theta_{j}}{3(i+j)|\vec{c}|^{2}} \left(I_{H}\left(q_{jj}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{H}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ & + \frac{4}{3} \left(\frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2} \left(I_{GH2}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{GH2}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ & D_{ij} = 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2} \frac{1}{\sqrt{\theta_{i} + \theta_{j}}} \left(\theta_{i}\theta_{j}\overline{I_{F}}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \frac{4}{3}\theta_{i}^{2}\overline{I_{GH2}}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \frac{4}{3}\theta_{i}^{2}\overline{I_{GH2}}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \frac{4}{3}\theta_{i}^{2}\overline{I_{GH2}}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \frac{4}{3}\left(\theta_{i} - j\theta_{j}\right)^{2} \left(I_{GH2}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{GH2}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) - I_{F}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ & + \frac{4}{3}\theta_{i}^{2}\overline{I_{GH2}}\left(q_{ij}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \frac{4}{3}\left(\frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2} \left(I_{GH2}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{GH2}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ & + \frac{4}{3}\left(\frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2} \left(I_{GH2}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{G}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \right) \\ & + \frac{4}{3}\theta_{i}^{frag}\frac{j^{2}}{(i+j)^{2}}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)^{2} \left(I_{G}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) - I_{G}\left(q_{ij}^{frag}, \Delta u_{ij}\right)\right) \right) \\ & + \frac{4}{3}\left(\frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right) \right) \\ & + \left(\frac{(\theta_{i} + \theta_{j})\left(i\theta_{i} - j\theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right)}{\sqrt{\theta_{i} + \theta_{j}}}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) I_{F}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) \\ & + \left(\frac{(\theta_{i} + \theta_{j})\left(i\theta_{i} - j\theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right)}{\sqrt{\theta_{i} + \theta_{j}}}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right)\right) \\ \\ & + \frac{4}{3}\left(\frac{i\theta_{i} - j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)^{2}\left(\overline{I_{G}}\left(q_{ij}^{shat}, \Delta \vec{u}_{ij}\right) + \frac{4}{3}\left(\frac{\theta_{i} + \theta_{j}}\left(\theta_{i} + \theta_{j}\right)\left(\vec{c} \cdot \Delta \vec{u}_{ij}\right)}{\sqrt{\theta_{i} + \theta_$$

$$\begin{split} q_{ij} &= \frac{c_3 \left(i+j\right)^2}{ij \left(\theta_i + \theta_j\right)}, \\ q_{ij}^{frag} &= \frac{c_2 \left(i+j\right)^2}{c_1 ij \left(\theta_i + \theta_j\right)}, \\ q_{ij}^{shat} &= \frac{\left(c_2 - \ln \frac{2^{-\alpha}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty} k^{-\alpha}}\right) (i+j)^2}{c_1 ij \left(\theta_i + \theta_j\right)} \\ \Delta \vec{u}_{ij} &= \sqrt{\frac{2}{\theta_i + \theta_j}} \left(\vec{u}_i - \vec{u}_j\right), \\ \Delta \vec{u}_{ijk} &= \sqrt{\frac{2}{\theta_i + \theta_j}} \left(\frac{i\vec{u}_i + j\vec{u}_j}{i+j} - \vec{u}_k\right) \\ \sigma_{ij} &= \frac{i^{1/3} + j^{1/3}}{2} \end{split}$$

Мы меняем условие на q_{ij} по сравнению с [13], так здесь мы рассматриваем границу между отскоком и агрегацией с эрозией, а не между отскоком и слипанием.

4.5.1. Быстрое решение уравнений с фрагментацией

Здесь мы кратко опишем изменения, которые вносит фрагментация при попытке построить быстрые алгоритмы для решения уравнений Смолуховского-Эйлера. Методы для агрегации описаны в разделе 5.2.

Слагаемые вида $\sum_{j} S_{kj} n_k n_j$ аналогичны $\sum_{j} C_{kj} n_k n_j$, остаются лишь условия вида

$$k^{-\alpha} \sum_{i \ge k} \frac{\sum\limits_{j=1}^{N} i S_{ij}^{frag} n_i n_j}{\sum\limits_{j=1}^{i} j^{-\alpha+1}}.$$

В общем случае это сумма по трехмерному тензору, а не просто двумерная матрица. С другой стороны, если известно разложение $S_{ij}^{frag} n_i n_j$, то разложение тензора

$$T_{ijk} = k^{-\alpha} \frac{iS_{ij}^{frag} n_i n_j}{\sum_{j=1}^{i} j^{-\alpha+1}}$$

тривиально. Действительно, для вычисления всех сумм

$$s_i = \sum_{j=1}^i j^{-\alpha+1}.$$

требуется всего лишь O(N) операций. После этого, если у нас есть разложение ранга R

$$S_{ij}^{frag}n_in_j = \sum_{r=1}^R u_i^r v_j^r,$$

то

$$T_{ijk} = \sum_{r=1}^{R} \frac{iu_i^r}{s_i} \cdot v_j^r \cdot k^{-\alpha}$$

является разложением ранга R. Тогда лишь O(Nr) операций требуется, чтобы просуммировать по j:

$$\sum_{j} T_{ijk} = \sum_{r=1}^{R} \left(\sum_{j=1}^{N} v_j^r \right) \frac{i u_i^r}{s_i} k^{-\alpha}.$$

Сумма по $i \ge k$ также может быть посчитана за O(Nr) с помощью сумм

$$s_k^r = \sum_{i=k}^N \frac{iu_i^r}{s_i} = \frac{ku_k^r}{s_k} + s_{k+1}^r.$$

В результате,

$$k^{-\alpha} \sum_{i \ge k} \frac{\sum_{j=1}^{N} i S_{ij}^{frag} n_i n_j}{\sum_{j=1}^{i} j^{-\alpha+1}} = \sum_{r=1}^{R} \left(\sum_{j=1}^{N} v_j^r \right) s_k^r k^{-\alpha}.$$

Как и агрегация, фрагментация также будет влиять на вычисление транспортных коэффициентов. Дополнительные члены, подобные тем, которые мы добавили в уравнения Смолуховского, могут быть в общем случае добавлены и в уравнения для кинетических коэффициентов в случае уравнений Смолуховского-Навье-Стокса, однако это является еще более сложной задачей, которую мы венесем за рамки данной работы.

Глава 5. Численные методы решения обобщенных уравнений Смолуховского

5.1. Быстрые алгоритмы метода Монте-Карло

Не так давно появились новые методы быстрого решения обыкновенных дифференциальных уравнений Смолуховского (ОДУ) [16]. Они основаны на малоранговой аппроксимации ядра коагуляции C, которая позволяет уменьшить сложность каждого временного шага с $O(N^2)$ до $O(NR \log N)$, где R – ранг матрицы $C \in \mathbb{R}^{N \times N}$, а N – это число уравнений. Значение N соответствует максимальному размеру кластеров в системе.

Однако не все уравнения могут быть решены таким образом. Хотя все популярные ядра (баллистические, броуновское и т.д.) имеют малый ранг, проблемы возникают, когда происходит гелеобразование, после чего решение ОДУ не существует. Более того, условие сохранения массы на значительном отрезке времени может потребовать очень больших значений N, чтобы иметь конечную систему, которая аппроксимирует бесконечную систему. Наконец, с течением времени обычно требуется соответствующим образом менять временной шаг, поскольку эволюция системы сильно влияет на скорость изменения концентраций.

В то время как вышеупомянутые проблемы могут быть решены с помощью специальных подходов, существует другой простой способ их обойти. А именно, вместо решения ОДУ можно выполнить моделирование методом Монте-Карло с некоторым очень большим конечным числом частиц; в этом случае матрица *C* определяет вероятности столкновения для частиц соответствующего размера. Тогда условие сохранения массы всегда выполняется, что позволяет изучать гелеобразование, а временной шаг автоматически определяется временем между столкновениями. К сожалению, известные методы Монте-Карло (см. раздел 1.7) требуют слишком много времени для выбора сталкивающихся частиц.

Здесь мы предлагаем модификацию метода Монте-Карло, которая позволяет использовать свойство малого ранга ядра коагуляции для уменьшения требуемого количества операций до значения $O(R \log N)$. Более того, наш подход не требует, чтобы само ядро было малоранговым или имело хорошую малоранговую аппроксимацию, вместо этого достаточно ограничить его сверху некоторым малоранговым ядром \tilde{C} .

Описанный подход является весьма общим и может быть также использован для температурно-зависимых моделей коагуляции [13] или прямого моделирования методом Монте-Карло, где каждая частица имеет индивидуальную скорость.

5.1.1. Структура методов Монте-Карло

Здесь и далее будем обозначать через N_i , $i = \overline{1, N}$ число частиц размера i. Пусть $N_p = \sum_{i=1}^N N_i -$ общее число частиц. Элементы C_{ij} обозначают частоту агрегации частиц размером i и j. Тогда,

$$P_{ij} = \frac{C_{ij}N_iN_j}{\sum\limits_{i,j}C_{ij}N_iN_j}.$$

Метод Монте-Карло выполняется следующим образом:

- 1. Инициализируется система с N_i частиц размера *i*. Устанавливается t = 0.
- 2. Находится интервал Δt до следующего столкновения. Время обновляется на $t := t + \Delta t$ (или, что более точно, учитывая тот факт, что исследуемый процесс пуассоновский, $t := t - \Delta t \ln rand(0, 1]$).
- 3. Выбираются размеры в соответствии с вероятностями P_{ij} .
- 4. Выполняется агрегация:

$$N_i := N_i - 1, \quad N_j := N_j - 1, \quad N_{i+j} := N_{i+j} + 1.$$

5. Пока не достигнут конечный момент времени, возвращаемся к шагу 2.

Простейший способ выбора вероятностей связан с перебором всех N^2 возможных значений P_{ij} , что весьма неэффективно. Несколько широко используемых методов используют разные подходы для уменьшения этого числа, а также используют разные подходы для определения временного интервала Δt (см. раздел 1.7). Другие алгоритмы, упомянутые ниже, изменяют только то, как вычисляется время, как виртуальные частицы связаны с реальными и как они появляются или исчезают.

В частности, можно ускорить традиционные методы, используя дифференциально взвешенный метод Монте-Карло [119], где вместо реальных используются «взвешенные фиктивные частицы». Он использует комбинацию методов Монте-Карло с постоянным объемом [99] и постоянным числом [120]. Эти методы существенно меняют ядро столкновений и имеют разные подходы к тому, когда добавлять новые частицы и какова связь между реальными и виртуальными частицами. Однако, до настоящего времени не было никаких попыток напрямую уменьшить сложность выбора сталкивающихся частиц, что мы и стремимся сделать. Вместо того, чтобы предоставлять еще одно расширение, мы полностью заменяем обратные методы и методы принятия-отклонения нашим собственным алгоритмом вычисления вероятностей. Наш подход отвечает более фундаментальному уровню рассмотрения, поэтому все разработанные методы Монте-Карло могут улучшить наш подход так же, как они улучшают чистые обратный метод и метод принятия-отклонения.

5.1.2. Малоранговый Монте-Карло метод

В этом разделе обсуждается применение приближений малого ранга в контексте метода Монте-Карло.

Прежде всего, напомним понятие ранга матрицы.

Определение 1. Пусть $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$ – матрица $M \times N$ с вещественными элементами A_{ij} . Минимальное значение R, для которого A может быть выражена как сумма внешних (диадных) произведений

$$A = \sum_{k=1}^{R} \vec{u}^k \otimes \vec{v}^k \tag{96}$$

двух наборов векторов

$$\vec{u}^k \in \mathbb{R}^M, \quad k = \overline{1, R}, \\ \vec{v}^k \in \mathbb{R}^N, \quad k = \overline{1, R}, \end{cases}$$

называется рангом матрицы А.

Когда $R < \min(M, N)$, выражение (96) называется малоранговым разложением матрицы A.

Пусть, например, $A_{ij} = C_{ij}N_iN_j$. Тогда для линейного ядра $C_{ij} = i + j$ матрица A имеет ранг не быльше R = 2 для любого размера, поскольку она может быть выражена как

$$A = \vec{u}^1 \otimes \vec{v}^1 + \vec{u}^2 \otimes \vec{v}^2$$

или, поэлементно,

$$A_{ij} = iN_i \cdot N_j + N_i \cdot jN_j = u_i^1 v_j^1 + u_i^2 v_j^2$$

с

$$u_i^1 = iN_i, \quad v_j^1 = N_j$$

И

$$u_i^2 = N_i, \quad v_j^2 = jN_j.$$

Причина использовать малоранговое разложение заключается в том, что оно обеспечивает более простой способ выбора размеров частиц. Например, пусть R = 1, так что $C_{ij}N_iN_j = u_i \cdot v_j$. Тогда вероятность того, что первая частица имеет размер *i*, может быть вычислена как

$$p_{i} = \frac{\sum_{j=1}^{N} C_{ij} N_{i} N_{j}}{\sum_{i,j=1}^{N} C_{ij} N_{i} N_{j}} = \frac{\sum_{j=1}^{N} u_{i} v_{j}}{\sum_{i,j=1}^{N} u_{i} v_{j}} = \frac{u_{i} \sum_{j=1}^{N} v_{j}}{\sum_{i=1}^{N} u_{i} \sum_{j=1}^{N} v_{j}} = \frac{u_{i}}{\sum_{i=1}^{N} u_{i} \sum_{j=1}^{N} v_{j}}$$
(97)

и зависит только от компонент вектора *й*. Аналогично,

$$p_j = \frac{v_j}{\sum\limits_{j=1}^N v_j}$$
(98)

зависит только от компонент вектора \vec{v} .

Если ранг больше 1, мы можем представить $A_{ij} = C_{ij}N_iN_j$ как сумму ядер ранга 1 (96) и рассматривать их отдельно, как будто мы рассматриваем разные механизмы агрегации. Чтобы определить, какое ядро использовать, мы можем сравнить общие скорости агрегации и выбрать k-й член вида $\vec{u}^k \otimes \vec{v}^k$ с вероятностью

$$p_{k} = \frac{\sum_{i,j=1}^{N} u_{i}^{k} v_{j}^{k}}{\sum_{k=1}^{R} \sum_{i,j=1}^{N} u_{i}^{k} v_{j}^{k}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} u_{i}^{k} \sum_{j=1}^{N} v_{j}^{k}}{\sum_{k=1}^{R} \left(\sum_{i=1}^{N} u_{i}^{k} \sum_{j=1}^{N} v_{j}^{k}\right)}.$$

На данный момент еще не видно преимуществ в скорости малорангового подхода. Теперь рассмотрим этот подход более подробно.

Наша задача состоит в том, чтобы ускорить выбор размеров частиц в соответствии с вероятностями p_i и p_j (97, 98). Мы можем сделать это, используя дерево отрезков (см. рисунок 29).

Дерево отрезков – это двоичное дерево, которое содержит частичные суммы элементов массива. Всякий раз, когда мы выбираем случайную величину

$$r := rand(0,1] \cdot \sum_{i=1}^{N} u_i$$

$u_1 + \dots + u_N$			
u ₁ +u ₂	u₃+u₄	u₅+u₅	····
	u ₃ u ₄	u₅ u₅	U _N

Рис. 29: Дерево отрезков для вектора *й*.

чтобы определить размер первой частицы, мы

можем определить размер за $O(\log N)$ шагов, вычитая частичные суммы u_i из r. Кроме того, дерево отрезков может быть обновлено за $O(\log N)$ операций путем обновления частичных сумм от измененного листа дерева к его корню. Поскольку в общем случае требуется обновить R деревьев, общая сложность составляет $O(R \log N)$. Поскольку R подбирается так, чтобы оно не росло с увеличением максимального размера частиц N, асимптотическая сложность ниже, чем $O(N^{\alpha})$ для любого $\alpha > 0$.

В случае, если ядро C не является малоранговым, мы можем применить стратегию принятияотклонения. А именно, мы можем аппроксимировать ядро C сверху другим ядром \tilde{C} , которое является малоранговым. Например, баллистическое ядро

$$C_{ij} = \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}$$
(99)

может быть приближено сверху как

$$\tilde{C}_{ij} = \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{1}{i}} + \sqrt{\frac{1}{j}}\right)$$

Ядро \tilde{C} является малоранговым (как и комбинация $\tilde{C}_{ij}N_iN_j$), что можно увидеть, раскрыв скобки. Чтобы учесть тот факт, что мы используем более высокие частоты столкновений, чем они есть на самом деле, мы добавляем дополнительный шаг принятия-отклонения. А именно, мы принимаем столкновение частиц *i* и *j* с вероятностью

$$p_{ij} = \frac{C_{ij}}{\tilde{C}_{ij}} = \frac{\sqrt{i+j}}{\sqrt{i} + \sqrt{j}}.$$

Поскольку ядро коагуляции \tilde{C} симметрично, мы также можем использовать несимметричную матрицу A, такую, что

$$\tilde{C}_{ij}N_iN_j = A_{ij} + A_{ji}.$$

В случае баллистической агрегации

$$A_{ij} = \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \sqrt{\frac{1}{i}} N_i N_j,$$

что существенно уменьшает ранг.

Чтобы связать решение ОДУ с решением Монте-Карло, мы также определяем понятие концентрации, соответствующей одной виртуальной частице n_1 . Это означает, что каждая виртуальная частица может соответствовать нескольким реальным частицам, которые в сумме имеют общую концентрацию n_1 в исследуемой системе.

В целом, алгоритм выглядит следующим образом:

Малоранговый метод Монте-Карло.

Вход: Изначальный максимальный размер частиц N.

Вектор начальных чисел частиц N_i , $i = \overline{1, N}$.

Концентрация одной виртуальной частицы n_1 .

Матрица $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ в виде $A = \sum_{k=1}^{R} \vec{u}^{k} \otimes \vec{v}^{k}, \quad \vec{u}^{k}, \vec{v}^{k} \in \mathbb{R}^{N}$, таком что $C_{ij}N_{i}N_{j} \leq \tilde{C}_{ij}N_{i}N_{j} = A_{ii} + A_{ji}$.

Требуемое финальное системное время *maxtime*.

Выход: n_1N_i равно концентрации частиц размера *i* в момент времени t = maxtime.

1: {Задание начального числа частиц N_{p0} }

2:
$$N_{p0} := \sum_{i=1}^{N} N_i$$

3: {Задание текущего числа частиц N_p }

4:
$$N_p := N_{p0}$$

- 5: Создание деревьев отрезков u_t^k и v_t^k на векторах \vec{u}^k и \vec{v}^k
- 6: *curtime* := 0
- 7: while *curtime* < *maxtime* do
- 8: repeat

9: {Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму частот столкновений, которую мы можем использовать для вычисления общей скорости агрегации}

10:
$$total_rate := \sum_{k=1}^{K} (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$$

11: {Обновление времени}

12:
$$curtime := curtime + \frac{2}{total_rate \cdot n_1 \cdot N_{p0}}$$

13: {Выбор компоненты ранга 1}

14:
$$r := total_rate \cdot rand(0, 1]$$

- 15: **for** k := 1 **to** R **do**
- 16: {Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму, которую мы вычитаем из *r* }
- 17: $r := r (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$

18: **if**
$$r \leq 0$$
 then

19: **break**

20: end if

- 21: **end for**
- 22: Выбор размеров i и j с помощью двоичного поиска в деревьях отрезков u_t^r и v_t^r
- 23: {Отклонение из-за переоценки частот}

24: **if**
$$\tilde{C}_{ij} \cdot rand(0, 1] > C_{ij}$$
 then

25: continue

- 26: **end if**
- 27: {Отклонение столкновения с собой}

28: **if**
$$(i = j)$$
 and $(N_i \cdot rand(0, 1] \le 1)$ **then**

- 29: continue
- 30: end if
- 31: **until** *i* и *j* не выбраны
- 32: {Агрегация}
- 33: **if** i + j > N **then**

34:
$$N := 2N$$

- 35: Увеличение размеров всех массивов и инициализация новых значений нулями
- 36: **end if**

$$37: \quad N_i := N_i - 1$$

38: $N_j := N_j - 1$

39:
$$N_{i+j} := N_{i+j} + 1$$

40:
$$N_p := N_p - 1$$

- 41: {Удвоение числа частиц}
- 42: **if** $N_p \leq N_{p0}/2$ **then**

43: $N_p := 2N_p$

44: $n_1 := n_1/2$

45: **end if**

46: Обновление деревьев отрезков

47: end while

Здесь мы используем стратегию удвоения, чтобы сохранить число частиц примерно одинаковым и тем самым не потерять точность, хотя существует способ сохранить обновлять число частиц после каждого события агрегации [120].

Мы также должны сделать замечание, что здесь мы требовали положительности всех компонентов ранга 1. Однако это не является необходимым предположением. Если аппроксимация не положительна, можно пропустить выбор компоненты k (строка 13) и выполнять поиск по всем компонентам одновременно, выбирая размер *i* с вероятностью, пропорциональной

$$p_i \sim \sum_{k=1}^R u_i^k v_{\Sigma}^k, \quad v_{\Sigma}^k = \sum_{j=1}^N v_j^k \in \mathbb{R}^R.$$

Общая оценка сложности не меняется, поскольку сложность выбора теперь $O(R \log N)$.

Пример. Мы тестируем новый метод на линейном ядре $C_{ij} = i + j$, баллистическом ядре (99) и броуновском ядре

$$C_{ij} = \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right) \left(i^{-1/3} + j^{-1/3}\right)$$

Броуновское ядро также уже является малоранговым, поэтому нам не нужно строить \tilde{C} .

Чтобы выполнялось соотношение $C_{ij}N_iN_j = A_{ij} + A_{ji}$, мы можем выбрать

$$A_{ij} = 1 + (i/j)^{1/3}$$

Очевидно, ранг A_{ij} равен 2.

Начнем с монодисперсных начальных условий n_i $(t = 0) = \frac{N_i(t=0)}{V} = \delta_{ij}$, где V – объем системы. Мы будем сравнивать малоранговый метод с обратным методом и методом принятияотклонения. Поскольку в конечном итоге все три метода приводят к одинаковым вероятностям, пропорциональным C_{ij} , а все остальные шаги те же, то они имеют одинаковую точность. Единственная разница во время вычисления, поэтому мы сосредоточимся на нем. Результаты сравнения времени симуляций представлены в таблице 3 для броуновского ядра, таблице 4 для баллистического ядра и таблице 5 для линейного ядра. Отметим, что значение максимального размера N удваивается каждый раз, когда появляется более крупная частица.

Как следует из полученных результатов, поскольку броуновское ядро очень близко к константе, принятие-отклонение работает очень хорошо и быстрее, чем малоранговое, до тех пор пока $N < 10^7$. С другой стороны, этот метод имеет полиномиальную асимптотику $O(N^{1/3})$, в то
время как для малорангового метода время вычисления каждого столкновения пропорционально $O(\log N)$. Более того, метод принятия-отклонения значительно проигрывает на линейном ядре. Следовательно, мы приходим к выводу, что малоранговый метод следует использовать либо для быстрорастущих ядер, либо когда максимальный размер N очень велик.

Обратный метод проигрывает обоим, поскольку он всегда имеет линейное время вычисления. Знак «–» в таблице означает, что длительность работы алгоритма превысила лимит времени в четыре дня.

Время, t $N =$		Обратный,	Принятие-отклонение,	Малоранговый,	Столкновений
		сек	сек	сек	Столкновении
10	1024	228	18	30	$2,8 \cdot 10^{7}$
100	16384	10924	34	53	$4, 4 \cdot 10^{7}$
1000	131072	_	56	76	$6,0 \cdot 10^{7}$
10000	1048576	_	104	111	$7,7 \cdot 10^{7}$
100000	8388608	_	158	163	$9,4 \cdot 10^{7}$
1000000	134217728	_	347	289	$1,1 \cdot 10^{8}$

Таблица 3: Время Монте-Карло моделирования с 107 частицами, броуновское ядро.

Таблица 4: Время Монте-Карло моделирования с 107 частицами, баллистическое ядро.

Browg t N-		Обратный,	Принятие-отклонение,	Малоранговый,	Столинораний
время, і	<i>IV</i> –	сек	сек	сек	Столкновении
1	256	18,4	13,1	14,8	$1,6 \cdot 10^{7}$
5	1024	462	29,6	30,0	$2,9 \cdot 10^{7}$
50	16384	15156	87,6	51,0	$4,9 \cdot 10^{7}$
500	262144	_	282	85,6	$6,9 \cdot 10^{7}$
5000	4194304	_	1118	166	$8,9 \cdot 10^{7}$

5.1.3. Моделирование температурно-зависимой агрегации

Описанный подход также может быть использован в случае неравномерного распределения температур.

Пусть частицы размера *i* имеют температуру T_i . Модель из [13] также включает уравнения (5) для температур, описанные в разделе 1.2 и выведенные в разделе 2.1:

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k} C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty} \left(C_{kj}^{agg} + D_{kj}^{res}\right)n_kn_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$
(100)

Bnemg t	N =	Обратный,	Принятие-отклонение,	Малоранговый,	Столкновений
Бреми, і	1, –	сек	сек	сек	Crossiciloseinin
1	2048	275	80	15	$1,5 \cdot 10^{7}$
2	65536	32418	600	32	$2,9 \cdot 10^{7}$
3	2097152	_	3890	53	$4, 4 \cdot 10^{7}$

Таблица 5: Время Монте-Карло моделирования с 10⁷ частицами, линейное ядро.

$$\frac{d}{dt}n_k T_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k} B_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty} \left(D_{kj}^{agg} + D_{kj}^{res}\right)n_kn_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$
(101)

где ядра $B, D = D^{agg} + D^{res}$ и ядро коагуляции C теперь также зависят от парциальных температур.

Ядро *В* учитывает изменение температуры частиц размера k, которые появляются в результате агрегации частиц размера i и j. Ядро D^{agg} учитывает изменение температуры частиц размера k, когда они исчезают при агрегации с частицами размера j.

Ядро D^{res} учитывает изменение температуры частиц размера k, когда они сталкиваются с частицами размера j, но не агрегируют. Этот случай называется восстановлением (restitution).

В случае баллистической агрегации с единичными массами и диаметрами частиц, ядро *С* определяется как

$$C_{ij} = \hat{C}_{ij}P\left(i, j, T_i, T_j\right) = \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}}P\left(i, j, T_i, T_j\right),$$
(102)

где \hat{C} – ядро столкновений, а функция $P(i, j, T_i, T_j)$ определяет вероятность агрегации.

Модель предполагает, что распределение скоростей близко к максвелловскому для каждого размера частиц до и после каждого столкновения. Конечно, это неверно, когда есть только несколько частиц некоторого размера, и одна из них участвует в столкновении (нам нужно большое количество частиц, чтобы построить распределение), но, как правило, частиц каждого размера достаточно много.

Если мы сохраняем предположение о максвелловском распределении, мы можем использовать те же ядра C, B и D для Монте-Карло моделирования. Вместо того, чтобы выбирать температуры для сталкивающихся частиц случайным образом из соответствующих распределений, мы просто вычисляем среднее изменение температуры, сохраняя приближение среднего поля для температур. Ядро C содержит только агрегацию, поэтому вместо этого мы используем ядро столкновений \hat{C} из уравнения (102) с элементами

$$\hat{C}_{ij} = \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}}.$$
(103)

После принятия решения о том, какие частицы сталкиваются, мы выполняем агрегацию с вероятностью $P(i, j, T_i, T_j)$ и отскок с вероятностью $1 - P(i, j, T_i, T_j)$.

Ядра *B* и *D* описывают изменение температур за небольшой промежуток времени, но не за одно столкновение. Отметим, что мы снова используем виртуальные частицы, соответствующие достаточно большому числу реальных частиц, так что мы можем использовать удвоение любое количество раз.

Чтобы получить временной интервал, который равен времени, необходимому для столкновения соответствующего количества реальных частиц, отвечающих одной виртуальной частице, нам нужно разделить B_{ij} и D_{ij} на C_{ij} (что соответствует числу агрегировавших частиц) в случае агрегации и на $(1 - P)\hat{C}_{ij}$ (это число столкновений с отскоком) в случае восстановления.

В конце концов, мы приходим к следующим уравнениям для изменения температуры, когда частицы размера *i* и *j* сталкиваются и объединяются в частицу размера *i* + *j*

$$\begin{cases} T_{i} := T_{i} + \frac{T_{i} - D_{ij}^{agg}/C_{ij}}{N_{i} - 1} \\ T_{j} := T_{j} + \frac{T_{j} - D_{ij}^{agg}/C_{ij}}{N_{j} - 1} \\ T_{i+j} := T_{i+j} + \frac{B_{ij}/C_{ij} - T_{i+j}}{N_{i+j} + 1} \end{cases}$$
(104)

и к следующему набору уравнений, когда агрегации не происходит

$$\begin{cases} T_i := T_i - \frac{D_{ij}^{res}}{N_i \hat{C}_{ij} (1 - P)} \\ T_j := T_j - \frac{D_{ij}^{res}}{N_j \hat{C}_{ij} (1 - P)} \end{cases}$$
(105)

Аналогично случаю постоянной температуры, мы можем рассмотреть матрицу *A* с элементами

$$A_{ij} = \sqrt{\pi/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{i}} N_i N_j$$

Ранг последней равен 3, и мы можем использовать ее для приближения матрицы \hat{C} сверху, см. уравнение (103):

$$\hat{C}_{ij}N_iN_j \leqslant A_{ij} + A_{ji}. \tag{106}$$

Мы можем использовать выборку с отклонением для случаев, когда оценка завышена (см. «температурно-зависимый метод Монте-Карло» ниже, строка 23), что происходит с вероятностью $1 - \frac{\sqrt{T_i/i+T_j/j}}{\sqrt{T_i/i+\sqrt{T_j/j}}} \leq 1 - 1/\sqrt{2} < 0,3$. Выбор A_{ij} выполняется заранее, поэтому нам не нужно его пересчитывать (кроме самих компонент ранга 1).

Обновление всей структуры целиком снова требует $O(R \log N)$ операций (см. «температурнозависимый метод Монте-Карло» ниже, строка 41) и в нашем случае R = 3. Чтобы выбрать пару частиц, мы сначала выбираем матрицу ранга 1 с вероятностью, пропорциональной сумме ее элементов (O(R) операций, строка 13). Затем мы выбираем элемент u^k с вероятностью, пропорциональной его значению ($O(\log N)$ операций: бинарный поиск в дереве отрезков), который определяет строку *i*, а затем аналогично элемент v^l , который определяет столбец *j* (также $O(\log N)$ операций, строка 22). Таким образом, общая сложность снова определяется обновлением деревьев отрезков и составляет $O(R \log N)$.

Полный алгоритм с соответствующими изменениями представлен ниже:

Температурно-зависимый метод Монте-Карло.

Вход: Изначальный максимальный размер частиц N.

Вектор начальных чисел частиц N_i , $i = \overline{1, N}$.

Вектор начальных парциальных температур T_i , $i = \overline{1, N}$.

Концентрация в одной виртуальной частице n_1 .

Матрица $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ в виде $A = \sum_{k=1}^{R} \vec{u}^k \otimes \vec{v}^k$, $\vec{u}^k, \vec{v}^k \in \mathbb{R}^N$, таком что $C_{ij}N_iN_j \leq \tilde{C}_{ij}N_iN_j = A_{ij} + A_{ji}$.

Требуемое финальное системное время *maxtime*.

Выход: T_i равна температуре частиц размера *i* в момент времени t = maxtime.

 n_1N_i равно концентрации частиц размера *i* в момент времени t = maxtime.

1: {Задание начального числа частиц N_{p0} }

2:
$$N_{p0} := \sum_{i=1}^{N} N_i$$

3: {Задание текущего числа частиц
$$N_p$$
 }

4:
$$N_p := N_{p0}$$

- 5: Создание деревьев отрезков u_t^k и v_t^k на векторах \vec{u}^k и \vec{v}^k
- 6: *curtime* := 0
- 7: while *curtime* < *maxtime* do
- 8: repeat
- 9: {Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму частот столкновений,
 которую мы можем использовать для вычисления общей скорости агрегации }

10:
$$total_rate := \sum_{k=1}^{R} (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$$

11: {Обновление времени}

12:
$$curtime := curtime + \frac{2}{total_rate \cdot n_1 \cdot N_{p0}}$$

- 13: {Выбор компоненты ранга 1}
- 14: $r := total_rate \cdot rand(0, 1]$
- 15: **for** k := 1 **to** R **do**
- 16: {Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму, которую мы вычитаем из *r*}

17:	$r := r - (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$
18:	if $r \leq 0$ then
19:	break
20:	end if
21:	end for
22:	Выбор размеров i и j с помощью двоичного поиска в деревьях отрезков u_t^r и v_t^r
23:	{Отклонение из-за переоценки частот}
24:	if $\tilde{C}_{ij} \cdot rand(0,1] > \hat{C}_{ij}$ then
25:	continue
26:	end if
27:	{Отклонение столкновения с собой}
28:	if $(i = j)$ and $(N_i \cdot rand(0, 1] \le 1)$ then
29:	continue
30:	end if
31:	until i и j не выбраны
32:	if $rand(0, 1] \leq P(i, j, T_i, T_j)$ then
33:	{Отскок}
34:	Обновление T_i и T_j с помощью (105)
35:	else
36:	{Агрегация}
37:	if $i + j > N$ then
38:	N := 2N
39:	Увеличение размеров всех массивов и инициализация новых значений нулями
40:	end if
41:	Обновление T_i, T_j и T_{i+j} с помощью (104)
42:	$N_i := N_i - 1$
43:	$N_j := N_j - 1$
44:	$N_{i+j} := N_{i+j} + 1$
45:	$N_p := N_p - 1$
46:	end if
47:	{Удвоение числа частиц}
48:	if $N_p \leq N_{p0}/2$ then
49:	$N_p := 2N_p$
50:	$n_1 := n_1/2$
51:	end if
52:	Обновление деревьев отрезков

53: end while

Пример. Чтобы проверить наш подход, выберем начальные условия и ядра *C*, *B* и *D* (100, 101) такими, как в [13]. Отметим, что поскольку мы предполагаем максвелловское распределение для каждого размера в отдельности, температурно-зависимый метод Монте-Карло эквивалентен решению ОДУ с парциальными температурами. На рисунке 30 показаны плотности числа частиц, полученные методом Монте-Карло и прямым решением системы ОДУ (100, 101). Мы видим то же распределение плотности чисел вплоть до стохастического шума, присутствующего в Монте-Карло. Исчезновение малых частиц является следствием свойств масштабирования баллистического ядра, которые соответствуют Случаю III [1].



Рис. 30: Плотность числа частиц с размерами от 1 до 1000 в момент времени t = 100000.

Хотя прямое моделирование Монте-Карло (DSMC) ближе к реальности, поскольку оно не требует, чтобы распределение было максвелловским, для вычисления требуется гораздо больше времени. Причина заключается в том, что в DSMC нужно сохранять, обновлять и выбирать скорости сталкивающихся частиц, в то время как здесь распределение скоростей уже учтено при выводе ядер C, B и D и характеризуется температурами. В DSMC различают частицы одинакового размера, поскольку они могут иметь разные скорости. В рассматриваемом подходе все виртуальные частицы одинакового размера эквивалентны.

Мы сравниваем наш метод с обратным и методом принятия-отклонения в таблице 6. В методе принятия-отклонения мы использовали неравенство

$$\max_{ij} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{i} + \frac{T_j}{j}} \le \left(1 + N^{1/3} \right)^2 \sqrt{1 + \frac{1}{N}} \sqrt{\max_i T_i}$$
(107)

для определения границы максимального значения элементов баллистического ядра. Большинство столкновений здесь не приводят к агрегации, и поэтому распределение температуры близко к равномерному распределению. Следовательно, неравенство (107) близко к равенству.

Время, t	N =	Обратный, сек	Принятие, сек	Малоранговый, сек	Столкновений
1000	128	1099	1162	1199	$1,2 \cdot 10^{9}$
10000	4096	95871	4242	2879	$2,6 \cdot 10^9$
100000	131072	_	14017	4829	$3,9 \cdot 10^{9}$
1000000	2097152	_	56213	7595	$5,2 \cdot 10^{9}$

Таблица 6: Время вычисления методами Монте-Карло для 10⁷ частиц, температурно-зависимое баллистическое ядро [13].

Мы видим, что при малоранговом подходе время вычислений логарифмически зависит от максимального размера частиц, в то время как обратный метод имеет линейную зависимость. Когда максимальный размер достигает тысяч, малоранговый подход становится в 30 раз быстрее, чем обратный метод. С другой стороны, метод принятия-отклонения намного лучше, чем обратный, но также становится медленнее, чем малоранговый, когда максимальный размер частиц достигает тысяч.

5.1.4. Прямое моделирование методом Монте-Карло (DSMC)

Наконец, та же идея может быть реализована в прямом моделировании Монте-Карло (DSMC), где каждая частица имеет свою собственную скорость $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$.

Разница между DSMC и обычным методом Монте-Карло заключается в том, что раньше мы не различали частицы одинакового размера. В случае баллистических траекторий частота столкновений между k-й частицей размера i со скоростью \vec{V}_i^k и l-й частицей размера j со скоростью \vec{V}_i^l вдоль случайного направления \vec{e} равна

$$C_{ij}^{kl} = \frac{\pi r^2}{V} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left| \left(\vec{V}_i^k - \vec{V}_j^l \right) \cdot \vec{e} \right|,$$
(108)

где r – радиус мономера, а V – объем системы [14]. Здесь мы не делаем различия между направлениями \vec{e} и – \vec{e} .

Как и ранее, первое, что мы делаем, это строим простую верхнюю границу \tilde{C} такую, что

$$C_{ij}^{kl}N_iN_j \leq \tilde{C}_{ij}N_iN_j = A_{ij} + A_{ji}.$$

В случае ядра С из уравнения (108), мы можем использовать

$$A_{ij} = \frac{\pi r^2}{V} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \max_k \left| \vec{V}_i^k \right| N_i N_j.$$
(109)

Сохраненное значение $\max_{k} \left| \vec{V}_{i}^{k} \right|$ можно увеличивать всякий раз, когда частица превышает предыдущее максимальное значение скорости для всех частиц того же размера. Можно также обновлять максимум после достато большого количества столкновений, непосредственно проверив скорости всех частиц. С матрицей А, определенной как в уравнении (109), мы имеем

$$\tilde{C}_{ij} = \frac{\pi r^2}{V} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left(\max_k \left| \vec{V}_i^k \right| + \max_l \left| \vec{V}_j^l \right| \right)$$

и следующий критерий принятия пары частиц

$$C_{ij}^{kl} > rand(0,1] \cdot \tilde{C}_{ij}$$

который принимает вид:

$$\left| \left(\vec{V}_i^k - \vec{V}_j^l \right) \cdot \vec{e} \right| > rand(0, 1] \cdot \left(\max_k \left| V_i^k \right| + \max_l \left| V_j^l \right| \right).$$
(110)

Вектор \vec{e} , а также частицы k и l могут быть выбраны случайным образом.

Таким образом, выбор сталкивающихся частиц выполняется в два этапа. Сначала мы выбираем размеры в соответствии с матрицей A (109), что делается аналогично предыдущим разделам. Затем выбирается направление \vec{e} и равновероятно среди частиц размера i и j выбираются частицы с номерами k и l. Если соотношение (110) не выполняется, мы возвращаемся к выбору размеров.

После выбора пары частиц мы можем также выбрать, будут ли они агрегироваться с заданной вероятностью $P(i, j, V_i^k, V_i^l)$, которая определяется конкретной моделью столкновений.

В целом, малоранговый метод DSMC реализуется следующим образом:

Малоранговый метод DSMC.

Вход: Изначальный максимальный размер частиц *N*.

Вектор начальных чисел частиц N_i , $i = \overline{1, N}$.

Начальные скорости \vec{V}_i^k , $i = \overline{1, N}$, $k = \overline{1, N_i}$.

Концентрация в одной виртуальной частице n_1 .

Матрица $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ в виде $A = \sum_{k=1}^{R} \vec{u}^k \otimes \vec{v}^k$, $\vec{u}^k, \vec{v}^k \in \mathbb{R}^N$, таком что $\hat{C}_{ij}N_iN_j \leq \tilde{C}_{ij}N_iN_j = A_{ij} + A_{ji}$.

Требуемое финальное системное время *maxtime*.

Выход: Скорости \vec{V}_i^k частиц размера *i* в момент времени t = maxtime для каждого *i*.

 n_1N_i равно концентрации частиц размера *i* в момент времени t = maxtime.

1: {Задание начального числа частиц N_{p0} }

2:
$$N_{p0} := \sum_{i=1}^{N} N_i$$

- 3: {Задание текущего числа частиц N_p }
- 4: $N_p := N_{p0}$
- 5: Создание деревьев отрезков u_t^k и v_t^k на векторах \vec{u}^k и \vec{v}^k
- 6: curtime := 0
- 7: while *curtime* < *maxtime* do

8: repeat

9: {Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму частот столкновений, которую мы можем использовать для вычисления общей скорости агрегации }

10:	$total_rate := \sum_{k=1}^{N} (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$
11:	{Обновление времени}
12:	$curtime := curtime + \frac{2}{total_{rate \cdot n_1 \cdot N_{p0}}}$
13:	{Выбор компоненты ранга 1}
14:	$r := total_rate \cdot rand(0, 1]$
15:	for $k := 1$ to R do
16:	{Первые элементы деревьев отрезков содержат общую сумму, которую мы вычитаем
	ИЗ r }
17:	$r := r - (u_t^k)_1 (v_t^k)_1$
18:	if $r \leq 0$ then
19:	break
20:	end if
21:	end for
22:	Выбор размеров i и j с помощью двоичного поиска в деревьях отрезков u_t^r и v_t^r
23:	Равновероятный выбор частиц k и l размера i и j и направления столкновения \vec{e} .
24:	{Отклонение из-за переоценки частот}
25:	if $\tilde{C}_{ij}^{kl} \cdot rand(0,1] > \hat{C}_{ij}$ then
26:	continue
27:	end if
28:	{Отклонение столкновения с собой}
29:	if $(i = j)$ and $(k = l)$ then
30:	continue
31:	end if
32:	until i, j, k и l не выбраны
33:	if $rand(0,1] \leq P(i,j,V_i^k,V_j^l)$ then
34:	{Отскок}
35:	Обновление V_i^k и V_j^l
36:	else
37:	{Агрегация}
38:	if $i + j > N$ then
39:	N := 2N
40:	Увеличение размеров всех массивов и инициализация новых значений нулями
41:	end if

42: Удаление частиц k и l

43: Добавление новой частицы размера i + j

44: **end if**

45: Обновление деревьев отрезков

46: end while

Здесь мы не выполняем удвоение частиц, поскольку невозможно заменить потерянные частицы, не повлияв каким-либо образом на распределение скоростей, хотя в целом может быть разумным удвоение путем добавления копий частиц с той же скоростью, противоположной скоростью или той же скоростью в случайном направлении (в случае симметрии в системе).

Пример. В качестве примера рассмотрим систему без агрегации.

Для простоты рассмотрим столкновения с постоянным коэффициентом восстановления ε = 0,99. Мы будем использовать экспоненциальное распределение для числа частиц:

$$N_k = \lfloor N_1 \exp\left(-a \cdot (k-1)\right) \rfloor.$$

Все температуры T_k изначально равны 1, а начальное распределение скоростей является максвелловским (но, естественно, перестанет им быть в процессе взаимодействия из-за диссипации энергии). Плотность составляет 0,01 частиц на единицу объема. Мономеры имеют единичную массу и диаметр.

Мы сравниваем наш метод с методом принятия-отклонения [14], где столкновение частиц размером *i* и *j* принимается, если

$$\left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \left| \left(\vec{V}_i^k - \vec{V}_j^l\right) \cdot \vec{e} \right| > rand(0, 1] \cdot 2\max_i \left(i^{1/3} + N^{1/3}\right)^2 \max|V_i|.$$
(111)

Поскольку

$$\max_{i} \left(i^{1/3} + N^{1/3} \right)^2 \max |V_i| \le \max_{i,j} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left(\max |V_i| + \max |V_j| \right)$$

И

$$\max_{i,j} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left(\max |V_i| + \max |V_j| \right) \le 2 \max_i \left(i^{1/3} + N^{1/3} \right)^2 \max |V_i|,$$

то условие принятие (111) недалеко от наилучшего возможного, при котором заранее известно значение

$$\max_{i,j} \left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^2 \left(\max |V_i| + \max |V_j| \right).$$

Время моделирования для обоих методов представлено в таблицах 7 и 8. Из таблиц видно существенное преимущество малорангового метода.

Время, t	Принятие-отклонение, сек	Малоранговый, сек	Столкновений
1	22	0,09	$6,1 \cdot 10^{4}$
10	152	0,85	$5,2 \cdot 10^{5}$
100	727	4,2	$2,5 \cdot 10^{6}$

Таблица 7: Время выполнения DSMC для 10^5 частиц и экспоненциального распределения $N_k \sim \exp(-0.1 \cdot k)$.

Таблица 8: Время выполнения DSMC для 10^5 частиц и экспоненциального распределения $N_k \sim \exp{(-0.01 \cdot k)}$.

Время, t	Принятие-отклонение, сек	Малоранговый, сек	Столкновений
1	95	1,2	$7,1 \cdot 10^{5}$
10	335	7,7	$3,1 \cdot 10^{6}$
100	722	12,4	$6,7 \cdot 10^{6}$

5.2. Быстрые алгоритмы решения систем ОДУ

Здесь мы представляем малоранговый метод, который может быть использован для решения больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), даже когда коэффициенты в правой части зависят от времени. В случае уравнений Смолуховского это происходит, когда ядро зависит от парциальных температур или других параметров распределения скоростей.

Мы начнем с ограничения числа уравнений некоторым достаточно большим числом N, пренебрегая тем самым частицами еще большего размера, даже если они существуют. Это необходимый шаг, так как численно невозможно напрямую решить бесконечную систему дифференциальных уравнений. Тогда (100) и (101) становятся двумя наборами N обыкновенных дифференциальных уравнений. В [16, 84, 103] была предложена идея использования малоранговых методов для решения классических ОДУ Смолуховского. Они позволяют уменьшить сложность с $O(N^2)$ до $O(Nr \log N)$, если C_{ij} не зависит от парциальных температур. Опишем и разовьем теперь эту идею на случай температурно-зависимых ядер.

Во-первых, обозначим $A_{ij} = C_{ij}n_in_j$ и построим малоранговую аппроксимацию $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$:

$$A_{ij} = \sum_{l=1}^{r} u_i^l v_j^l,$$
 (112)

где *г* – ранг аппроксимации. Уравнение (112) может быть переписано в матричном виде как

$$A = UV^T, \tag{113}$$

где $U, V \in \mathbb{R}^{N \times r}$ – это факторы малорангового разложения.

Коэффициенты U и V могут быть получены за $O(Nr^2)$ операций с помощью алгоритма maxvol [25], описанного в Приложение Е. Матрицы $B_{ij}n_in_j$ и $D_{ij}n_in_j$ могут быть аппроксимированы аналогично $A_{ij} = C_{ij}n_in_j$, поэтому мы сосредоточимся на описании использования аппроксимации A.

Обозначим через

[101].

$$\boldsymbol{u}_i = \begin{bmatrix} u_i^1, \dots, u_i^r \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_i = \begin{bmatrix} v_i^1, \dots, v_i^r \end{bmatrix}, \quad i = \overline{1, N}$$
(114)

строки матриц *U* и *V*.

Путем подстановки (113) в уравнения коагуляции Смолуховского (100) и использования обозначения для строк (114), мы получаем

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}u_iv_j^T - u_k\left(\sum_{j=1}^N v_j\right)^T, \quad k = \overline{1,N}.$$
(115)

T

Заранее вычислив сумму

$$\boldsymbol{s} = \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{v}_j,\tag{116}$$

мы уменьшаем сложность вычисления произведения $u_k \left(\sum_{j=1}^N v_j\right)^T$ от $O(N^2)$ до O(Nr). Первое слагаемое, однако, нуждается в более детальном анализе.

Первый член в (115) равен

$$\sum_{i+j=k} u_i v_j^T = \sum_{l=1}^r \sum_{i+j=k} u_i^l v_j^l = \sum_{l=1}^r \sum_{i=1}^{k-1} u_i^l v_{k-i}^l,$$

то есть, это сумма r дискретных сверток u^l и v^l .

Дискретные свертки могут быть эффективно вычислены с помощью быстрого преобразования Фурье (FFT). Аналогично (114), обозначим

$$\boldsymbol{u}^{j} = \begin{bmatrix} u_{1}^{j} \\ \vdots \\ u_{N}^{j} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}^{j} = \begin{bmatrix} v_{1}^{j} \\ \vdots \\ v_{N}^{j} \end{bmatrix}, \quad j = \overline{1, r}$$

столбцы матриц U и V.

Сначала мы добавляем столбец из *N* нулей $0_N = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^N$ для получения столбцов

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}^l\\ \boldsymbol{0}_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}$$
 и $\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^l\\ \boldsymbol{0}_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}$ для всех $l = \overline{1, r}.$

Мы можем вычислить все r сверток, выполнив преобразование Фурье u^l и v^l , вычислив поэлементное произведение, а затем выполнив обратное преобразование Фурье. Обозначим

$$\boldsymbol{u}^{l,FFT} = \operatorname{FFT}\left(\left[\begin{array}{c}\boldsymbol{u}^{l}\\\boldsymbol{0}_{N}\end{array}\right]\right) \in \mathbb{R}^{2N}, \quad \boldsymbol{v}^{l,FFT} = \operatorname{FFT}\left(\left[\begin{array}{c}\boldsymbol{v}^{l}\\\boldsymbol{0}_{N}\end{array}\right]\right) \in \mathbb{R}^{2N}, \quad l = \overline{1,r}$$
(117)

результаты соответствующих преобразований Фурье. С помощью обратного преобразования Фурье IFFT мы теперь можем заменить первый член в (115) и вычислить $\frac{d}{dt}n_k$ следующим образом:

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2} \left[\text{IFFT}\left(\sum_{l=1}^r u^{l,FFT} \odot v^{l,FFT}\right) \right]_k - u_k \left(\sum_{j=1}^N v_j\right)^l, \quad k = \overline{1,N}, \quad (118)$$

где \odot обозначает поэлементное произведение. Все 2*r* прямых преобразования Фурье и 1 обратное преобразование Фурье могут быть вычислены за $O(Nr \log N)$ операций.

После того, как найдены малоранговые факторы и выполнены преобразования Фурье, можно использовать любую подходящую схему дискретизации по времени для численного решения (118). При моделировании использовалась схема предиктор-корректор второго порядка.

Проиллюстрируем работу малорангового метода на следующем примере. Пусть $C_{ij} = T_i + T_j$. Тогда мы можем явно выписать малоранговое разложение A_{ij} ранга 2:

$$A_{ij} = C_{ij}n_in_j = T_in_i \cdot n_j + n_i \cdot T_jn_j = \sum_{l=1}^{2} u_i^l v_j^l = u_i v_j^T,$$
$$u_i^1 = T_in_i, \qquad v_j^1 = n_j,$$
$$u_i^2 = n_i, \qquad v_j^2 = T_jn_j.$$

Затем мы вычисляем сумму строк *s* (116):

$$s = \sum_{j=1}^{N} v_j = \left[\sum_{j=1}^{N} n_j \sum_{j=1}^{N} T_j n_j \right].$$

Следовательно, второй член в (118) будет равен

$$\boldsymbol{u}_k \left(\sum_{j=1}^N \boldsymbol{v}_j\right)^T = \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{s}^T = T_i n_i \sum_{j=1}^N n_j + n_i \sum_{j=1}^N T_j n_j.$$

Чтобы вычислить первый член в (118), нужно подставить преобразования Фурье $u^{l,FFT}$ и $v^{l,FFT}$ (117) векторов

$$\boldsymbol{u}^{l,FFT} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}^{l} \\ \boldsymbol{0}_{N} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}, \text{ and } \boldsymbol{v}^{l,FFT} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^{l} \\ \boldsymbol{0}_{N} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}, \quad l = \overline{1,2}$$
$$\boldsymbol{u}^{1} = \begin{bmatrix} T_{1}n_{1} \\ \vdots \\ T_{N}n_{N} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}^{1} = \begin{bmatrix} n_{1} \\ \vdots \\ n_{N} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{u}^{2} = \begin{bmatrix} n_{1} \\ \vdots \\ n_{N} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}^{2} = \begin{bmatrix} T_{1}n_{1} \\ \vdots \\ T_{N}n_{N} \end{bmatrix}.$$

Аналогичные уравнения можно использовать для ядер B_{ij} и D_{ij} , чтобы найти $\Delta(n_k T_k)$, а затем пересчитать T_k как $T_k = \frac{n_k T_k}{n_k}$.

Заметим, что на практике также необходимо избавиться от отрицательных или очень малых ненулевых значений, которые могут появиться в результате численной реализации быстрого преобразования Фурье. Весь метод целиком представлен в виде алгоритма 1.

Алгоритм 1 Малоранговый метод для решения ОДУ

Вход: Максимальный размер частиц *N*.

Вектор начальных концентраций n_i , $i = \overline{1, N}$. Вектор начальных температур T_i , $i = \overline{1, N}$.

Ядра C_{ij} , B_{ij} и D_{ij} , заданные в виде функций от T_i и T_j .

Параметр точности т (см. следующий подраздел «Ускорения»).

Финальное время t_{max} .

Выход: T_i равно температуре частиц размера *i* в момент времени t_{max} .

 n_i равно концентрации частиц размера i в момент времени t_{max} .

- 1: curtime := 0
- 2: **while** *curtime* < *t*_max **do**
- 3: Использование maxvol [25] для вычисления малоранговых аппроксимаций $A_{ij} = C_{ij}n_in_j$, $B_{ij}n_in_j$ и $D_{ij}n_in_j$ {См. Приложение E}
- 4: Выбор временного шага $\Delta t := \tau \min\left(\frac{\max_{i} n_{i}}{\max_{i} |dn_{i}/dt|}, \frac{\max_{i} (n_{i}T_{i})}{\max_{i} |d(n_{i}T_{i})/dt|}\right)$
- 5: Вычисление $n_i(curtime + \Delta t)$ и $n_i T_i(curtime + \Delta t)$ с использованием уравнений (116-118) и любой подходящей схемы дискретизации по времени.
- 6: Задание $T_i := (n_i T_i)/n_i$
- 7: *curtime* := *curtime* + Δt
- 8: end while

Выше было приведено описание метод в целом. В следующих подразделах описывается несколько идей, которые используются для значительного ускорения вычислений и уменьшения погрешности.

5.2.1. Дополнительное ускорение метода

Прежде всего, нужно обратить внимание на выбор временного шага, потому что с течением времени столкновения становятся все реже и реже. В предположении, что все производные от $n_i(t)$ и $n_iT_i(t)$ имеют одинаковый порядок (для фиксированных *i* и *t*), мы можем выбрать временной шаг Δt так, чтобы отношение

$$\tau \approx \frac{\max_{i} |n_i(t + \Delta t) - n_i(t)|}{\max_{i} n_i(t)}$$
(119)

всегда было близко к некоторой малой постоянной τ . Аналогично, можно ограничить изменение n_iT_i в случае температурно-зависимых уравнений. Для этого достаточно использовать шаг по времени (см. строку 4 в алгоритме 1)

$$\Delta t = \tau \min\left(\frac{\max_{i} n_{i}}{\max_{i} |dn_{i}/dt|}, \frac{\max_{i} (n_{i}T_{i})}{\max_{i} |d(n_{i}T_{i})/dt|}\right)$$

с заранее заданным значением τ . Тогда каждый n_i изменяется медленно, и ошибка остается порядка $O(\tau^2)$ для схемы второго порядка. Этот подход был проверен на постоянном ядре, результаты показаны в таблице 9.

Отметим, что предложенный метод выбора шага не требует дополнительных вычислений правой части, в отличие от стандартных адаптивных методов. Для оценки или подбора необходимой точности достаточно лишь подобрать значение τ в начале вычислений, после чего размер каждого шага в дальнейшем будет выбран без дополнительных вычислений правых частей. При этом, согласно гипотезе масштабирования, форма распределения сходится к некоторой предельной, а потому с некоторого момента времени (который наступает довольно быстро), форма погрешности тоже сойдется и обновлять значение τ больше не понадобится. В проведенных экспериментах значение τ фиксировалось сразу и далее не менялось.

Во всех последующих примерах и симуляциях используется временной шаг Δt , соответствующий $\tau = 0.01$.

Далее, были также использованы аппроксимации хвостов распределений для избежания потерь массы и учета влияния частиц размером больше N. Всякий раз, когда начальное распределение имеет экспоненциально или более быстро убывающий хвост, он остается экспоненциальным [69]. В результате, возможно аппроксимировать концентрации кластеров, превышающих размер N как ae^{-ck} , или, допуская еще один параметр, мы можем использовать аппроксимацию вида

$$n_k \approx a x^b e^{-ck},$$

которая предсказывается теорией масштабирования [1]. Здесь присутствуют три коэффициента,

Время, t	τ	Ошибка п	Ошибка т
10	0,1	$6,48 \cdot 10^{-3}$	$1,58 \cdot 10^{-3}$
10	0,01	$5,86 \cdot 10^{-5}$	$1,47 \cdot 10^{-5}$
100	0,1	$6,65 \cdot 10^{-3}$	$1,31 \cdot 10^{-3}$
100	0,01	$6,04 \cdot 10^{-5}$	$1,23 \cdot 10^{-5}$
1000	0,1	$7,29 \cdot 10^{-3}$	$1,85 \cdot 10^{-3}$
1000	0,01	$6,65 \cdot 10^{-5}$	$1,74 \cdot 10^{-5}$

Таблица 9: Относительные ошибки концентрации и массы для $C_{ij} = 2$ с шагом по времени, зависящим от τ . Относительные погрешности показаны для общей концентрации *n* и общей массы *m*.

которые могут быть оценены с использованием любых трех значений, близких к N

$$v_1 = n_{N-2s}$$
$$v_2 = n_{N-s}$$
$$v_3 = n_N$$

с достаточно малым шагом s (в экспериментах использовалось $s = \lfloor \ln N \rfloor$). Тогда

$$b = \frac{\ln \frac{v_1 v_3}{v_2^2}}{\ln \left(1 - \frac{s^2}{(n-s)^2}\right)},$$

$$c = \frac{\ln \frac{v_3}{v_2} - b \ln \left(1 + \frac{s}{n-s}\right)}{s}$$

$$a = \frac{v_3}{N^b} e^{-cN}.$$

Если необходимо вычислить общую концентрацию частиц с размером больше *N*, мы можем просто приблизить сумму с помощью неполной гамма-функции

$$\sum_{i=N+1}^{\infty} n_i \approx a c^{-b-1} \Gamma \left(b + 1, c \left(N + 0, 5 \right) \right)$$

Массу в хвосте распределения можно вычислить аналогичным образом, используя b + 1 вместо b, что эквивалентно умножению n_i на i.

Однако, нам также нужно знать, как это приближение влияет на дифференциальные уравнения для концентраций n_i , $i \leq N$. Для этого применим тот же метод аппроксимации к строкам $C_{ij}n_in_j$ и, таким образом, аппроксимируем сумму $\sum_{j=N+1}^{\infty} C_{kj}n_kn_j$ (заметим, что на практике $C_{kj} \sim j^{\nu}$ при $j \gg k$). Если мы не используем малоранговое приближение, то нам нужны Nвычислений неполной гамма-функции на каждом шаге, но если

$$C_{ij}n_in_j = UV^T, \quad U \in \mathbb{R}^{N \times r}, \quad V \in \mathbb{R}^{N \times r},$$

то требуется всего лишь r вычислений, поскольку мы работаем только с матрицей V.

Можно также использовать более простую модель с экспоненциальным хвостом, который соответствует b = 0. Тогда при s = 1 сумма аппроксимируется как

$$\sum_{i=N+1}^{\infty} n_i \approx \frac{n_N^2}{n_{N-1} - n_N}.$$
 (120)

Необходимо сделать важное замечание, что мы не требуем, чтобы хвост был экспоненциальным, нам нужно только иметь возможность аппроксимировать его интеграл экспонентой. Например, $n_k \sim e^{-k^2}$ относительно далеки от экспоненты, но уравнение (120) дает относительную ошибку порядка O(1/N).

Преимущества данного подхода можно увидеть из таблиц 10 и 11 и рисунка 31, где мы используем данную идею для постоянных и линейных ядер. Масса в хвосте при этом равна $\sum_{k=N+1}^{\infty} kn_k$. Благодаря высокой точности аппроксимации хвоста распределения концентраций, оказывается достаточным использование лишь небольшого числа уравнений *N*, даже когда почти вся масса находится в хвосте. Поскольку линейное ядро очень близко к случаю геляции, то почти полиномиальный хвост (приводящий к высоким потерям) виден уже для малых *t*.

На рисунке 31 численные решения сравниваются с точными (их вывод можно найти в [2]). Точные решения имеют вид:

$$n_k(t) = \left(\frac{t}{t+1}\right)^{k-1} (1+t)^{-2}, \text{ if } C_{ij} = 2,$$

$$n_k(t) = \frac{k^{k-1}}{k!} e^{-t} (1-e^{-t})^{k-1} e^{-k(1-e^{-t})}, \text{ if } C_{ij} = i+j.$$

Таблица 10: Относительные ошибки концентрации и массы для $C_{ij} = 2$ с учетом аппроксимации хвоста распределения концентраций, N = 100. Относительные погрешности показаны для общей концентрации *n* и массы *m* до размера *N*. См. соответствующие рисунки 31а-31b.

Время, t	Ошибка п	Ошибка т	Потери массы в хвосте, %	Масса в хвосте, %
1000	$1,47 \cdot 10^{-4}$	$1,13 \cdot 10^{-4}$	0,0054%	99,53%
1000000	$6,33 \cdot 10^{-4}$	$6,57 \cdot 10^{-4}$	0,11%	99,999999496%

Видно, что можно получить решение, близкое к аналитическому, даже когда в хвосте накапливается значительная масса, которая непосредственно не учитывается в конечной системе.

В работе [121] можно найти сравнение аппроксимации хвоста распределения со схемой конечного объема [15], которая аппроксимирует хвост с использованием неравномерной сетки. Показано, что для того же числа уравнений метод приближения с аппроксимацией хвоста превосходит метод использования неравномерной сетки как по точности, так и благодаря меньшей

Таблица 11: Относительные ошибки концентрации и массы для $C_{ij} = i + j$ с учетом аппроксимации хвоста распределения концентраций, N = 100. Относительные погрешности показаны для общей концентрации n и массы m до размера N. См. соответствующие рисунки 31с-31d.

Время, t	Ошибка п	Ошибка т	Потери массы в хвосте, %	Масса в хвосте, %
2	$1,91 \cdot 10^{-4}$	$6,30 \cdot 10^{-4}$	0.18%	17.4%
3	$8,67 \cdot 10^{-2}$	$7,17 \cdot 10^{-2}$	29%	62%

сложности. Это связано с тем, что схема конечного объема имеет дополнительную ошибку из-за неточности интерполяции по пространству, вызванной неравномерной сеткой.

5.2.2. Улучшение точности метода

Как уже упоминалось выше, для построения малоранговой аппроксимации используется алгоритм maxvol[25]. К сожалению, этот алгоритм теоретически не может заранее гарантировать качество аппроксимации и поэтому должен применяться с осторожностью. Причина, по которой мы, все же, применяем его, заключается в том, что для теоретической гарантии качества аппроксимации необходимо полное знание исходной матрицы. Полное знание подразумевает вычисление всех N^2 элементов, что в нашем случае слишком затратно по времени.

Чтобы увеличить вероятность получения высокой точности аппроксимации, можно разделить исходную матрицу (ядро) на несколько частей, имеющих разную структуру. Также продуктивной идеей является использование симметричных компонент или компонент вида Af(i)g(j)с $A = A^T$, имеющих большие значения на диагонали. Причина такой предварительной обработки заключается в том, чтобы сделать матрицу близкой к положительно определенной. Для положительно определенных матриц поиск максимального объема (что и делает maxvol) намного проще, а подматрица максимального объема, как известно, лежит на диагонали [122].

Проиллюстрируем подход на системе уравнений для температур (101), описанной в Приложение А. Например, мы можем разделить матрицу *D* на слудующие компоненты:

$$D_{ij} = D_{ij}^{agg} + D_{ij}^{res} + \left(D_{ij}^{exch} - D_{ji}^{exch}\right)$$

Здесь D_{ij}^{agg} соответствует потере энергии из-за агрегации, D_{ij}^{res} соответствует потере энергии изза неэластичных столкновений с осткоком, а D_{ij}^{exch} соответствует обмену кинетической энергии при столкновениях частиц размера *i* и *j*. Точные значения компонент определяются конкретной моделью столкновений.

Например, если мы рассматриваем столкновения без агрегации с постоянным коэффициен-



Рис. 31: Относительные ошибки концентрации и массы для постоянных ядер с аппроксимацией хвоста распределения концентраций, *N* = 100. На графиках построены плотности числа частиц (концентрации) в зависимости от массы. См. также таблицы 10 и 11.

том восстановления ε , то

$$D_{ij}^{agg} = 0,$$

$$D_{ij}^{res} \sim \left(1 - \varepsilon^2\right) T_i \left(R_i + R_j\right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}} \cdot \frac{m_j}{m_i + m_j},$$

$$D_{ij}^{exch} \sim (1 + \varepsilon)^2 T_i \left(R_i + R_j\right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}} \cdot \frac{m_i m_j}{\left(m_i + m_j\right)^2}$$

А в случае, когда все столкновения приводят к агрегации,

$$D_{ij} = D_{ij}^{agg} \sim T_i \left(R_i + R_j \right)^2 \sqrt{\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j}} \left(1 + \frac{1}{3} \frac{T_i/m_i}{T_i/m_i + T_j/m_j} \right)$$

Здесь разумно разделить D_{ij} на два ядра, раскрыв последние скобки. Приведенный выше подход может быть применен для любых других ядер, используемых в обобщенных уравнениях Смолуховского.

127

5.2.3. Параллельные свойства

Здесь мы кратко опишем, как именно можно дополнительно распараллелить малоранговый метод решения ОДУ. В нем присутствует два наиболее затратных этапа: малоранговая аппроксимация и быстрое преобразование Фурье (БПФ). К счастью, библиотека Intel MKL [123] может автоматически использовать многопоточные вычисления для вычислений операций линейной алгебры и быстрого преобразования Фурье. В [124] для решения классических уравнений Смолуховского низкого ранга было достигнуто ускорение в 44 раза с 256 ядрами за счет распараллеливания отдельных преобразований Фурье.

Существуют также способы использования свойств самого алгоритма. В терминах быстрого преобразования Фурье, для каждой матрицы необходимо 2r прямых преобразований и одно обратное преобразование Фурье (118). Следовательно, эти первые 2r преобразований Фурье также могут быть выполнены полностью параллельно. В температурно-зависимом баллистическом ядре для t > 100000 ранг $r \approx 20$, так что можно добиться дополнительного ускорения в 20 раз. После этого изменение плотности числа частиц и температуры может быть рассчитано для каждого размера независимо.

Как описано в предыдущем подразделе, исходные матрицы разбиваются на легко аппроксимируемые части малого ранга. Все эти части могут быть аппроксимированы и использованы параллельно. В нашем случае есть 7 разных частей (см. Приложение А), поэтому можно добиться ускорения до 7 раз в этой части алгоритма, аппроксимируя их одновременно.

Наконец, для ускорения самой крестовой малоранговой аппроксимации существуют также некоторые известные методы, описанные в [125]. Для матрицы размером N = 100000 было достигнуто ускорение примерно в 70 раз при использовании 256 ядер.

5.3. Сравнение теоретических предсказаний и численных решений для температурно-зависимой агрегации

Здесь представлены результаты моделирования предложенных алгоритмов для температурно-зависимого ядра. Параметры те же, что и в [13], и описаны в Приложение А. Заметим, что в [121] нами впервые получено численное решение температурно-зависимых уравнений Смолуховского.

В таблице 12 показано сравнение времени малорангового и обычного решения ОДУ Смолуховского. Мы видим, что для размера системы, превышающего 200, малоранговый метод уже дает существенное ускорение. По мере увеличения размера системы малоранговый метод становится все более выгодным. Для тысяч уравнений он в 60 раз быстрее, чем решение ОДУ без использования малоранговой аппроксимации.

На рисунке 32 можно увидеть зависимость температур частиц с малыми размерами от времени, а также эволюцию средней температуры.

Системное	N _	Потери	Macca	Малоранговый метод,	Стандартный метод,
время, t	<i>I</i> v =	массы, %	в хвосте, %	сек	сек
1000	20	0,012%	0,83%	0,27	0,103
10000	200	0,021%	4,96%	6,0	16,6
100000	6400	0,060%	3,52%	530	30862

Таблица 12: Время решения ОДУ для модели и параметров из Приложение А.



Рис. 32: Температурная зависимость различных частиц для модели и параметров из Приложение А. *T_i* – температура частиц размера *i*. *T_{AVG}* – средняя температура. Пунктирной линией показано предсказание теории масштабирования. График взят из [121].

Важной особенностью эволюции системы является то, что средняя температура продолжает увеличиваться, даже несмотря на снижение температуры частиц каждого конкретного размера. Увеличение соответствует степенному закону с показателем $\approx 0,17$, что хорошо согласуется с теоретическим предсказанием $\frac{2\Lambda}{5-\Lambda} = \frac{4}{23}$ из [13] (см. Приложение для обозначений). Отметим, что в [13] вместо этого было использован метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC), который имеет свои недостатки. А именно, результаты, представленные для плотности агрегатов в [13], достаточно зашумленные. Ожидается, что новый метод обладает значительным преимущество с точки зрения точности вычислений. В [13] предполагалось, что средняя температура в конечном итоге снижается. Однако, высокие вычислительные ресурсы, связанные с методом Монте-Карло, препятствовали проверке этой гипотезы. Используя разработанные в диссертации методы, теперь можно достичь очень больших времен и показать, что снижения средней температуры не происходит. Следовательно, разработанный подход может приводить к качественным выводам о динамике системы. Без применения малорангового подхода вычисления в течение такого длительного времени были бы невозможны. Действительно, повышение температуры на-

чинается не сразу. Следовательно, для определения точного показателя требуется значительное время моделирования.

Если рассмотреть распределение температуры, представленое на рисунке 33, мы увидим, что частицы большого размера имеют почти одинаковую температуру, так что частицы малого размера не являются репрезентативной выборкой. Это является следствием того факта, что частицы малого размера исчезают из системы, как видно из рисунка 33, что, в свою очередь, является следствием свойств баллистического ядра C_{ij} . В [13] наблюдались только частицы небольшого размера, что привело к ложному выводу о том, что температура в конечном итоге начнет снижаться.



Рис. 33: Распределение температуры и концентрации при *t* = 100000. Приложение А содержит описание модели и параметров.

Быстрое исчезновение частиц малого размера является следствием того, что ядро имеет параметры масштабирования [1] $\frac{2}{3} = v > \mu = \frac{1}{6} + \frac{2}{3}\Lambda$, что соответствует Случаю III, см. раздел 1.4.

Мы видим, что, вопреки прогнозу [13], средняя температура в конечном итоге не снижается. Однако скейлинг со снижением температуры все еще возможен. Если задать параметр a = 10, то вероятность отскока будет много меньше 1. В этом случае мы действительно увидим снижение температуры, как показано на рисунке 34. Тем не менее, снижение все еще происходит медленнее $(T \sim t^{-0,22})$, чем для случая равных парциальных температур, показанного на том же рисунке. Если искусственно задать все температуры равными, то полученная зависимость $T \sim t^{-0,33}$ совпадает с предсказанием из [13]. Причина этого различия заключается в том, что теория масштабирования была выведена только для случая равных температур, а здесь температуры всех частиц значительно различаются. Напротив, при a = 0,1 только частицы малого размера имеют другие температуры, и их количество быстро уменьшается (см. рисунок 33).



Рис. 34: Температурная зависимость кластеров различного размера, a = 10. Приложение A содержит описание модели и других параметров. t_i – температура частиц размера i. $T = t_{avg}$ – средняя температура.

Хотя нет никакой гарантии, что теория масштабирования может быть использована для температурно-зависимых ядер, есть возможное объяснение того, почему мы в конечном итоге не видим снижения средней температуры для a = 0,1.

Прежде всего, заметим, что снижение температуры происходит только тогда, когда доля столкновений с отскоком мала, то есть $f_{ij} \ll 1$, что соответствует $W_{ij}/T \gg 1$ (A.1). Можно утверждать, что это неравенство в конечном итоге достигается для больших времен из-за агрегации (тогда W_{ij} обычно велико) и, как мы уже видели, малые частицы тогда быстро исчезают из системы. Однако температура также повышается, поэтому отношение W_{ij}/T может из-за этого уменьшиться. Поэтому возникает вопрос, увеличивается ли средний размер частиц быстрее, чем средняя температура?

Скейлинговое решение для случая повышения температуры ($W_{ij}/T \ll 1$) дает [13]

$$s \sim t^{z}, \quad T \sim t^{-\beta},$$

 $z = \frac{6}{5 - \Lambda}, \quad \beta = -\frac{2\Lambda}{5 - \Lambda},$
 $\Lambda = 2\lambda_{1} - \lambda_{2} = 0.4,$

где *s* – параметр масштаба (типичный размер кластера).

Из предположения о масштабировании для W_{ij} следует,

$$W_{ij} \sim W_{ss} \sim s^{\Lambda/3} = t^{z\Lambda/3} = t^{\frac{2\Lambda}{5-\Lambda}}.$$

Но для Т мы также имеем

$$T \sim t^{-\beta} = t^{\frac{2\Lambda}{5-\Lambda}},$$

а потому отношение W_{ij}/T остается неизменным для размеров порядка *s*. Если отношение W_{ss}/T изначально мало, его значение не будет расти со временем, вероятность агрегации останется малой, и скейлинговое решение не изменится. С другой стороны, если $W_{ss}/T \gg 1$, то снижение температуры действительно происходит, как видно из рисунка 34.

Мы видим, что поведение решения зависит от начальной температуры: высокая начальная температура будет постоянно увеличиваться, а низкая начальная температура будет постоянно уменьшаться в этой модели. Однако, мы должны отметить, что для системы с конечным числом частиц, число событий агрегации будет конечным, и повышение температуры не будет происходить неограниченно. Непрерывная модель, с другой стороны, допускает бесконечное число событий агрегации и, таким образом, приводит к таким неожиданным результатам.

5.3.1. Теоретический анализ различных режимов эволюции

Здесь мы проводим аналитическое исследование температурно-зависимой системы уравнений (2-5) для баллистической агрегации (см. разделы 1.2 и 2.1). Мы основываемся на уже полученных решениях из [13], но также представляем некоторые упущенные варианты поведения. Чтобы упростить вывод, мы используем уравнения для случая равных температур (здесь $\theta_i = T/i$):

$$\frac{d}{dt}n_k = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}C_{ij}n_in_j - \sum_{j=1}^{\infty}C_{kj}n_kn_j, \quad k = \overline{1, \infty},$$

$$\frac{d}{dt}NT = -\sum_{i,j=1}^{\infty}P_{ij}n_in_j,$$
(121)

где

$$C_{ij} = 2\sqrt{2\pi T} \sigma_{ij}^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}} (1 - f_{ij})$$

$$P_{ij} = \frac{4}{3}\sqrt{2\pi T^3} \sigma_{ij}^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}} \left(1 - g_{ij} + \frac{1}{2} \left(1 - \varepsilon^2\right) g_{ij}\right)$$

$$f_{ij} = e^{-q_{ij}} (1 + q_{ij})$$

$$g_{ij} = e^{-q_{ij}} (1 + q_{ij} + q_{ij}^2/2)$$

$$q_{ij} = \frac{W_{ij}}{\varepsilon^2 T}$$

Начальное поведение. Начальное поведение может быть получено путем учета только столкновений мономеров ($N \approx n_1$). Тогда

$$\begin{split} \dot{N} &\approx -\frac{1}{2}N^2C_{11} \\ \dot{N}T + N\dot{T} &\approx -N^2P_{11} \\ \dot{T} &\approx N\left(-P_{11} + \frac{1}{2}TC_{11}\right) \end{split}$$

$$= -N\sigma_{11}^2 \sqrt{4\pi T^3} \left(\frac{1}{3} + f_{11} - \frac{4}{3}g_{11} + \frac{2}{3} \left(1 - \varepsilon^2 \right) g_{11} \right)$$
(122)

Существует три варианта того, какое слагаемое здесь доминирует. Мы запишем их в терминах $q_{11}(0) = W_{11}/\varepsilon^2$. Большие значения $q_{11}(0)$ могут быть интерпретированы (с точностью до изменения масштаба времени) как меньшая начальная температура или больший размер мономеров.

1. $q_{11}^2(0) \ll 1 - \varepsilon^2$ В этом случае

$$\dot{T} \approx -N\sigma_{11}^2 \sqrt{4\pi T^3} \left(\frac{2}{3} \left(1 - \varepsilon^2\right)\right)$$
$$\dot{T} \sim -N^{-1} T^{3/2}$$

Более того, $\dot{N} \ll \dot{T}$, поэтому изменение концентраций практически не влияет на температуру, а значит

$$\dot{T} \sim -T^{3/2}.$$

В результате мы получаем закон Хаффа

$$T \approx (1 + c_1 t)^{-2}$$

Значение с1 при этом может быть найдено явно из (122).

2.
$$1 - \varepsilon^2 \ll q_{11}^2(0) \ll 1$$

В этом случае

$$\dot{T} \approx N \sigma_{11}^2 \sqrt{4\pi T^3} q_{11}^2 / 2 = -T \dot{N} / N,$$

поэтому $T \approx N^{-1}$.

После подстановки получаем следующие решения

$$T = (1 + c_1 t)^{2/5},$$

$$N = (1 + c_1 t)^{-2/5}.$$

Хотя переход между этим поведением и предыдущим является плавным, мы можем определить пограничный случай как $\dot{T}(0) = 0$, что соответствует переходу от понижения к повышению температуры. Это происходит, когда

$$q_{11}(0) \approx \sqrt{\frac{4}{3}(1-\varepsilon^2)} \approx 0.16$$

3. $e^{-q_{11}(0)} (1 + q_{11}(0)) \ll 1$

В этом случае

$$\dot{T}\approx -\frac{1}{3}N\sigma_{11}^2\sqrt{4\pi T^3}=\frac{1}{3}T\dot{N}/N$$

и $T = N^{1/3}$ (если начальные значения единичные).

После подстановки получаем следующие решения

$$T = (1 + c_1 t)^{-2/7},$$
$$N = (1 + c_1 t)^{-6/7}.$$

К сожалению, данное поведение практически невозможно увидеть из-за быстрой агрегации, приводящей к быстрой сходимости к скейлинговому решению. Тем не менее, данный результат показывает, что температура начинает снижаться сразу.

Мы также можем снова найти значение q_{11} , для которого $\dot{T}(0) = 0$. На этот раз оно будет решением

$$e^{q_{11}} - 1 - q_{11} - 2q_{11}^2 + 2(1 - \varepsilon^2)(1 + q_{11} + q_{11}^2/2) \approx 0$$

Для $\varepsilon = 0,99$ получаем

$$q_{11}(0) \approx 3,18.$$

Использование скейлинговой теории. Ниже мы приводим скейлинговый анализ уравнений. Последний не является строгим, но помогает понять качественное поведение системы и, в свою очередь, оценить численное решение системы уравнений. Пусть *s* - типичный размер частиц. Из гипотезы масштабирования следует, что

$$s \sim t^{-z}$$
,

когда $t \to \infty$. Пусть также $T \sim t^{\beta}$. Нашей целью будет найти значения z и β . Есть всего два случая.

1. $e^{-q_{11}(0)} (1 + q_{11}(0)) = f_{11}(0) \ll 1$

 $q_{11}(0)$.

В [13] было доказано, что в этом случае

$$z = 1, \quad \beta = -1/3.$$

Следует отметить, что предположение о равенстве температур для всех размеров в этом случае не работает. Поэтому моделирование показало большее значение β . Мы уже знаем, что для $q_{11}(0) > 3,18$ снижение температуры начинается сразу. Однако, как следует из дальнейшего, этот вид поведения может появиться и для меньших значений 2. $q_{11}(0) \ll 1$

В этом случае происходит рост температуры.

Обозначим через μ_c и μ_p коэффициенты однородности для ядер *C* и *P*, а через ν_c и ν_p степени температуры в *C* и *P*:

$$\begin{split} C(ai,aj) &\approx a^{\mu_c} C(i,j); \quad P(ai,aj) \approx a^{\mu_p} P(i,j); \\ C &\sim T^{\nu_c}; \quad P \sim T^{\nu_p}. \end{split}$$

В нашем случае $C_{ij} \sim q_{ij}^2$ (когда $q_{ij}^2 \ll 1$) или $C_{ij} \sim q_{ij}^0$ (когда $q_{ij}^2 \sim 1$) и $P_{ij} \sim q_{ij}^3$ (когда $q_{ij}^3 \gg (1 - \varepsilon^2)$) ог $P_{ij} \sim q_{ij}^0$ (когда $q_{ij}^3 \ll (1 - \varepsilon^2)$). Поэтому

$$\mu_c = \frac{1}{6} + \frac{1}{3}\Lambda k_c, \quad \nu_c = \frac{1}{2} - k_c, \quad k_c = 0$$
или 2;
 $\mu_p = \frac{1}{6} + \frac{1}{3}\Lambda k_p, \quad \nu_p = \frac{3}{2} - k_p, \quad k_p = 0$ или 3.

Заметим, что k_c и k_p не могут быть равны 0 одновременно (это как раз будет предыдущий случай). Из [13] мы знаем, что выполняются следующие соотношения

$$z(1 - \mu_c) = 1 + v_c \beta,$$

 $z(1 - \mu_p) = 1 + (v_p - 1)\beta$

Решением этих уравнений будут

$$z = \frac{6}{5 - \Lambda}, \quad \beta = \frac{2\Lambda}{5 - \Lambda} \tag{123}$$

вне зависимости от значений k_c и k_p .

Как уже обсуждалось выше, это решение является стабильным, а потому мы никогда не достигнем больших значений q_{ss} и не перейдем к первому случаю масштабирования.

Отметим также, что $\Lambda > 5$ приведет к противоречию, так как предсказывает рост концентрации. Однако мы увидим, что указанное поведение уже будет нарушено для гораздо меньших значений Λ .

Об отсутствии геляции. Мы выдвигаем гипотезу, что система (2-5) не может приводить к геляции (появлению кластера с бесконечной массой за конечное время) даже при $\Lambda > 5$. Этот вывод подтверждается сотнями численных экспериментов с $q_{11}(0)$ от 0,002 до 10 и Λ от 0 до 10. Некоторые соображения, поддерживающие гипотезу об отсутствии геляции, приведены в [126]. Заметим, однако, что строгое доказательство справедливости этой гипотезы отсутствует.

Эволюция температуры кластеров фиксированного размера. Из-за неравномерного распределения температуры и быстрого исчезновения малых кластеров, последние имеют температуры, которые значительно отличаются от средних значений. Оказывается, масштабирование этих температур тоже можно оценить. Рассмотрим два случая.

1. Стандартная баллистическая агрегация

Такое поведение происходит, когда температура снижается и вероятность агрегации стремится к 1. Тогда частицы размера i агрегируют в основном с частицами размера s, что приводит к оценкам

$$\frac{d}{dt}n_i \sim n_i n_s s^{2/3} \sqrt{\theta_i},$$
$$\frac{d}{dt}n_i \theta_i \sim n_i n_s s^{-1/3} \theta_i^{3/2}.$$

Если подставить первое уравнение во второе, мы можем пренебречь правой частью второго уравнения, потому что оно в *s* раз меньше правой части первого уравнения. Тогда

$$\frac{d}{dt}\theta_i \sim n_s s^{2/3} \theta_i^{3/2},$$
$$\frac{d}{dt} \theta_i^{1/2} \sim n_s s^{2/3}.$$

Правая часть последнего уравнения не зависит от *i*, а значит $\frac{d}{dt}\theta_i^{1/2} \approx \frac{d}{dt}\theta_j^{1/2}$ и θ_k становятся почти равными, вне зависимости от их начальных значений. Таким образом, $\theta_i = \theta_j$ для малых *i* и *j*, и $T_i \sim i$. Это действительно близко к тому, что показано на рисунке 34, и что также происходит на рисунках 37 (c), (f) и (g).

Используя скейлинговый подход, можно также оценить зависимость температуры от времени для кластеров фиксированного размера. Если мы предположим, что $T_i \sim i$ вплоть до i = s, то

$$T_s \approx sT_1,$$

$$T_1 \approx T_s/s \approx T_{avg}/s \sim t^{-4/3}.$$
(124)

Моделирование показывает $T_1 \sim t^{-1.24}$, что отвечает более медленному убыванию. Причина в том, что наблюдаемое среднее снижение температуры составляет $\sim t^{-0,22}$ вместо $t^{-1/3}$, что влияет и на другие параметры поведения системы.

2. Агрегация с ростом температуры

Этот режим реализуется, когда ядро для мелых частиц далеко от классического баллистического ядра из-за того, что вероятности агрегации малы. Рисунок 37 показывает, что это в конечном итоге приводит к $\frac{d}{dt}T_i = 0$ для малых частиц, поэтому мы не можем использовать те же рассуждения, что и раньше. Однако, аналог (124) все еще верен, поэтому, если мы предположим, что $T_i \sim i^{\alpha}$, то

$$T_s/s^{\alpha} \approx T_1 = const,$$
$$\frac{t^{2\Lambda/(5-\Lambda)}}{t^{6\alpha/(5-\Lambda)}} = const,$$
$$\alpha = \Lambda/3.$$

Итак, $T_i \sim i^{\Lambda/3}$. Этот результат хорошо согласуется с рисунками 32 и 37 (a), (d), (e). К сожалению, мы не можем проверить это на рисунке 37 (b), потому что там остаются только

мономеры, и даже тримеры быстро исчезают из системы. Однако, мы можем предположить, что $T_i \sim i^{\Lambda/3}$ там не выполняется, потому что масштабирование с ростом температуры прерывается для $\Lambda > 3$, что означает, что мы не должны видеть $T_i \sim i^{\alpha}$ для $\alpha > 1$. Отметим, что невозможность больших степеней α также предотвращает гелеобразование.

5.3.2. Фазовая диаграмма

Здесь мы строим фазовую диаграмму, показывающую связь между параметрами $q_{11}(0)$ и Λ и различными типами поведения решений температурно-зависимых уравнений. Кроме начального поведения и масштабирования на больших временах мы также выделяем довольно интересное поведение на промежуточных временах, которое создает «разрыв» в распределении концентраций кластеров. Пример разделения концентраций показан на рисунке 36.



Рис. 35: Фазовая диаграмма для системы (2-5). Разделительные линии построены на основе результатов Монте-Карло моделирования. Все точки моделирования отмечены светло-серыми кружками. Температурные зависимости для точек-крестов можно найти на рисунке 37.



Рис. 36: Пример «разрыва» концентраций. $\Lambda = 1,4, q_{11}(0) = 1,8$ и $N = 10^7$ мономеров в начале моделирования. Момент времени t = 10000. Левый рисунок имеет логарифмическую шкалу только для размера частиц, правый рисунок также имеет логарифмическую шкалу для концентраций. Заметим, что на рисунке 37 (b), (e) видно исчезновение более крупных частиц до исчезновения мономеров, в отличие от (d).

Интересно отметить, что разрыв распределения концентраций всегда существует для достаточно малых $q_{11}(0)$ и $\Lambda > 5/4$. Мы ожидаем экспоненциальной сходимости границы области с существованием разрыва к оси $q_{11}(0) = 0$ (что соответствует a = 0). Причина в том, что малые массы проявляют баллистическое поведение, когда $q_{1n} \gg 0$ для $n \gg 1$, поэтому критерий для границы определяется

$$q_{1n}(t) \approx \frac{q_{11}(0)2^{\Lambda}}{T_1(t)} \gg 0,$$

что экспоненциально зависит от Λ . К сожалению, трудно использовать этот критерий, чтобы точно определить, где происходит разрыв, потому что $T_1(t)$ зависит от длительности убывания температур по закону Хаффа и может быть намного меньше начальной температуры, когда агрегация начинает доминировать.

На рисунке 37 показаны все типичные варианты поведения из диаграммы.

5.3.3. Поведение при сильной диссипации

Здесь мы кратко исследуем поведение системы с малыми значениями коэффицента восстановления ε , что соответствует большим потерям кинетической энергии в столкновениях. Чтобы изучить этот вид агрегации, нам прежде всего нужно изменить коэффициенты системы (А.1), так как они являются хорошим приближением только для $\varepsilon \approx 1$. Чтобы разделить агрегацию и отскок в случае отсутствия диссипации для тангенциальной составляющей скорости (трения), нужно учесть то, что потери энергии происходят только в направлении столкновения, а потому условие на агрегацию меняется: $\theta \left(W_{ij} - \varepsilon^2 \frac{\mu_{ij} v^2}{2} \right)$ следует заменить на $\theta \left(W_{ij} - \varepsilon^2 \frac{\mu_{ij} \vec{v}_{\perp}^2}{2} - \frac{\mu_{ij} \vec{v}_{\perp}^2}{2} \right)$, где диссипация затрагивает только часть относительной скорости \vec{v}_{\parallel} , параллельной направлению



Рис. 37: Типичные примеры поведения изменения температуры, соответствующие различным точкам на диаграмме (рисунок 35). Монте-Карло моделирование проведено с 10⁷ частицами. Период повышения температуры существует для всех режимов, кроме режима на панели (g). Для режима на панели (f) *T*_{max} ≈ 1,05.

столкновения \vec{e} . Это условие изменяет только значения f_{ij} и g_{ij} и дает следующие коэффициенты

$$\begin{split} C_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2\sqrt{\theta_i + \theta_j} \left(1 - f_{ij}\right) \\ B_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{1}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} \left(\theta_i\theta_j \left(1 - f_{ij}\right) + \frac{4}{3} \left(\frac{i\theta_i - j\theta_j}{i + j}\right)^2 \left(1 - g_{ij}\right)\right) \\ D_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{1}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} \left(\theta_i\theta_j \left(1 - f_{ij}\right) + \frac{4}{3}\theta_i^2 \left(1 - g_{ij}\right) \right) \\ &+ \frac{4}{3}\frac{j}{i + j} \left(\theta_i + \theta_j\right) \left(1 + \varepsilon\right) \left(\theta_i - \frac{1}{2} \left(1 + \varepsilon\right) \frac{j}{i + j} \left(\theta_i + \theta_j\right) \right) h_{ij}\right) \\ f_{ij} &= \left(e^{-q_{ij}} - \varepsilon^2 e^{-q_{ij}/\varepsilon^2}\right) / \left(1 - \varepsilon^2\right) \\ g_{ij} &= \left(\left(1 + q_{ij}/2\right)e^{-q_{ij}} - \left(\varepsilon^2 + q_{ij}/2\right)e^{-q_{ij}/\varepsilon^2}\right) / \left(1 - \varepsilon^2\right) \end{split}$$

139

$$\begin{split} h_{ij} &= \left(e^{-q_{ij}} - \left(2\varepsilon^2 + \varepsilon^4 + q_{ij}(1 - \varepsilon^2) \right) e^{-q_{ij}/\varepsilon^2} \right) / \left(1 - \varepsilon^2 \right)^2 \\ q_{ij} &= \frac{W_{ij}}{\frac{ij}{i+j} \left(\theta_i + \theta_j \right)} \\ W_{ij} &= a \frac{\left(i^{1/3} j^{1/3} \right)^{\lambda_1}}{\left(i^{1/3} + j^{1/3} \right)^{\lambda_2}} \\ \sigma_{ij} &= \frac{i^{1/3} + j^{1/3}}{2} \end{split}$$

Заметим, что мы ввели h_{ij} вместо g_{ij} в части ядра с диссипацией при отскоке и удалили ε^2 из определения q_{ij} . В пределе $\varepsilon \to 1$, эти коэффициенты будут совпадать с (А.1).

Начальное поведение. Уравнение (122) теперь преобразуется в

$$\dot{T} \approx N\left(-P_{11} + \frac{1}{2}TC_{11}\right)$$
$$= -N\sigma_{11}^2\sqrt{4\pi T^3}\left(\frac{1}{3} + f_{11} - \frac{4}{3}g_{11} + \frac{2}{3}\left(1 - \varepsilon^2\right)h_{11}\right).$$
(125)

Нас интересует равенство нулю правой части, что соответствует решениям уравнения

$$1 = \left((2q_{11} - 1)e^{-q_{11}} + (3\varepsilon^2 - 2\varepsilon^4 - 2\varepsilon^2 q_{11})e^{-q_{11}/\varepsilon^2} \right) / (1 - \varepsilon^2).$$
(126)

Из последнего уравнения получаем, что существует $\varepsilon_{crit} \approx 0,79$, соответствующий $q_{11} = 3/2$, так что для $\varepsilon > \varepsilon_{crit}$, как и ранее, существуют два решения, разделяющие три различных поведения температур. Однако, если $\varepsilon < \varepsilon_{crit}$ решений нет, что означает, что начальное повышение температуры невозможно, и закон Хаффа медленно переходит в баллистическое охлаждение при $q_{11} = 3/2$, где снижение температуры минимально.

Скейлинг. Рассмотрим здесь только отличия от случая малой диссипации. Когда q_{ss} мало, мы получаем уравнения

$$1 - f_{ss} \approx \frac{q_{ss}^2}{2\varepsilon^2},$$

$$1 - g_{ss} \approx \frac{q_{ss}^3(1 + \varepsilon^2)}{12\varepsilon^4},$$

$$1 - h_{ss} \approx \frac{q_{ss}^3}{6\varepsilon^4}.$$

с теми же степенями q_{ss} , что и раньше, а потому вид масштабирования не меняется. Однако, когда $\varepsilon < \varepsilon_{crit}$ повышения температуры происходить не может, поскольку правая часть (125) остается отрицательной не только для мономеров, но и для любых *i* и *j*. В случае равновесия температур это означало бы, что температура будет снижаться до тех пор, пока ядро не станет классическим баллистическим, и что возможно только падение температур. Однако, когда частицам малого

размера, как и раньше, позволено иметь гораздо меньшие температуры, чем средняя, это может в достаточной степени повлиять на агрегацию, что, в свою очередь, приводит к промежуточной асимптотике с медленным снижением температуры. В отличие от бесконечного повышения температуры, это вызывает уменьшение q_{ss} , что в конечном итоге приводит к баллистическому охлаждению. Тем не менее, такое поведение может занять существенный промежуток времени, особенно для ε , близкого к ε_{crit} (см. рисунок 38).



Рис. 38: Поведение при высокой диссипации для $\Lambda = 0$ и $q_{11}(0) = 0,75$. Рассчитано с использованием метода Монте-Карло с 10^8 частицами .

Заключение

В диссертационной работе получен целый ряд обобщений уравнений Смолуховского. Также были построены высокоскоростные численные методы, которые способны эффективно решать эти уравнения.

- Получены точные решения температурно-зависимых уравнений Смолуховского. Данные решения необходимы для тестирования численных методов и дают представление о возможных режимах эволюции агрегирующих систем.
- Методом Монте-Карло получен вид распределения температур для неагрегирующих гранулярных газов. Рассмотрены как случаи теплообмена с окружающим молекулярным газом, так и общий случай внешнего подвода энергии в модели гауссова термостата.
- Разработана модель тройных столкновений, которая позволяет корректно описывать тройные столкновения в уравнениях Смолуховского. Модель свободна от ошибочного повторного учета бинарных столкновений в существующих подходах.
- Получено разложение по полиномам Сонина функции распределения скоростей в баллистически агрегирующих системах. Разложение позволяет с высокой точностью описывать отклонение распределения скоростей от распределения Максвелла. Разложение получено путем Монте-Карло моделирования уравнений Больцмана, но коэффициенты разложения также можно получить путем решения полученных систем дифференциальных уравнений.
- Из первых принципов выведены новые уравнения Смолуховского-Эйлера и Смолуховского-Навье-Стокса, которые описывают кинетику агрегации в неоднородных средах, в том числе при наличии потоков частиц. Получены микроскопические выражения для соответствующих новым уравнениям кинетических коэффициентов в зависимости от характера взаимодействия частиц. Написан код, содержащий пошаговый вывод кинетических коэффициентов. Приведены примеры решений новых уравнений баллистической агрегации в случае наличия вертикального ускорения и в случае сдвигового течения.
- На основе проведенного методами молекулярной динамики моделирования столкновений кластеров разработана физически обоснованная модель фрагментации частиц для использования последней в кинетических уравнениях. Численные эксперименты содержат распределения числа и кинетических энергий осколков в зависимости от потенциала взаимодействия, угловое распределение осколков, зависимость числа осколков и потерь кинетической энергии от скорости столкновения.

- Для решения обобщенных уравнений Смолуховского разработан целый ряд эффективных численных методов, в основе которых лежит метод малоранговой аппроксимации матриц кинетических коэффициентов. Малоранговый метод аппроксимации ядер кинетических коэффициентов при решении ОДУ обобщен на ядра, зависящие от времени. Показано, как эффективно выбирать временной шаг и приближать «хвост» распределения концентраций. Также, малоранговая аппроксимация была применена для ускорения методов Монте-Карло моделирования. Новые методы позволяют получать решения как классических, так и обобщенных уравнений Смолуховского, а также существенно ускорить метод прямого Монте-Карло моделирования уравнений Больцмана.
- С использованием новых численных методов была построена кинетическая фазовая диаграмма агрегирующего гранулярного газа. Обнаружен и объяснен целый ряд новых агрегационных режимов, включая перманентный рост средней температуры и режим агрегации с разделением концентраций, который отвечает дефициту кластеров среднего размера. Показано совпадение предсказаний скейлинговой теории, решений ОДУ и результатов Монте-Карло моделирования. Также выявлены все возможные виды эволюции температур в начале баллистической агрегации.

Список сокращений и условных обозначений

Сокращения

DSMC – прямое моделирование Монте-Карло.

FFT – быстрое преобразование Фурье.

IFFT – быстрое обратное преобразование Фурье.

JKR – модель Джонсона-Кендалла-Робертса.

L-J – потенциал Леннарда-Джонса.

Функции и символы

 $\delta(expr)$ – дельта-функция Дирака. Значение соответствующего функционала определено как $\int f(x)\delta(x)dx = f(0)$ для любой непрерывной в нуле f(x).

 $\delta_{ij} \stackrel{def}{=} \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$ - дельта символ. $erf(x) \stackrel{def}{=} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} e^{-t^{2}} dt - функция ошибок.$

k = 1, n обозначает, что k принимает значения начиная с 1 и заканчивая n.

 $\log x = \ln x -$ натуральный логарифм.

O(f(N,...)) - «О» большое. В контексте определенного алгоритма означает, что число элементарных операций (сложений, умножений, сравнений и т.д.) ограничено Cf(N,...) для некоторого C > 0.

g(x) = O(f(x)) - «О» большое для функции g. Означает, что $g(x) \le Cf(x)$ для всех достаточно больших (или достаточно малых, в зависимости от контекста) значений x.

g(x) = o(f(x)) -«о» малое для функции g. Означает $\lim_{x} \frac{g(x)}{f(x)} = 0$. Предельное значение x зависит от контекста.

rand(0, 1] – случайное действительное значение между 0 и 1, исключая 0 и включая 1, взятое из равномерного распределения.

 $\mathbb R$ – множество всех действительных чисел.

 $\theta (expr) \stackrel{def}{=} \begin{cases} 1, expr \ge 0, \\ 0, expr < 0. \end{cases}$ - функция Хевисайда (ступенька).

 $\theta_i = T_i/m_i = \langle v_i^2 \rangle/3$ – взвешенная на массу температура частиц размера *i*. Размерность температуры выбирается так, что постоянная Больцмана $k_B = 1$.

х := у – присвоение значения переменной.

Векторы

 \vec{x} – вектор в 3-х мерном пространстве.

 $\vec{\nabla}$ – оператор Набла.
$|\vec{x}| = x$ – евклидова норма 3-х мерного вектора.

 $\vec{x} \cdot \vec{y}$ – скалярное произведение векторов \vec{x} и \vec{y} .

 $\vec{x}\vec{y}$ – внешнее (диадное) произведение векторов \vec{x} и \vec{y} .

 $x \in \mathbb{R}^N - N$ -мерный вектор действительных чисел.

 $x \odot y$ – поэлементное произведение векторов x и y.

 $x\otimes y$ – внешнее произведение векторов x и y.

Матрицы

 $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$ – матрица действительных чисел размера $M \times N$.

A_{ij} – элемент матрицы A на пересечении строки i и столбца j.

*А*_{*i*,:} – вся *i*-я строка матрицы *A*.

А:,*j* – весь *j*-й столбец матрицы *А*

 $A_{I,:}$ – подматрица строк с индексами $i \in I$.

 $A_{:,\mathcal{J}}$ – подматрица столбцов с индексами $j \in \mathcal{J}$.

 $A_{I,\mathcal{J}}$ – подматрица матрицы A на пересечении строк с индексами $i \in I$ и столбцов с индексами $j \in \mathcal{J}$.

Тензоры

 $\hat{p} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ – 2-мерный тензор с элементами p_{ij} . Хотя он является матрицей 3 × 3, такие матрицы обычно называются тензорами.

 $P_{i_1...i_N} \in \mathbb{R}^{3 \times 3 \times ... \times 3}$ – элемент *N*-мерного тензора.

 $\hat{p}: \hat{q} = \sum_{ij} p_{ij} q_{ij}$ – скалярное произведение тензоров.

В отличие от матриц, выражения с тензорами подразумевают суммирование по повторяющимся индексам $p_{ij}q_{jk} = \sum_{j} p_{ij}q_{jk}$.

Список литературы

- [1] Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation // Physics Reports. — 2003. — Vol. 383, no. 2–3. — P. 95–212.
- [2] Krapivsky P.L., Redner S., Ben-Naim E.A. Kinetic View of Statistical Physics. Cambridge University Press, 2010.
- [3] Friedlander S.K. Smoke, Dust, and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics. Topics in chemical engineering. — New York : Oxford University Press, 2000.
- [4] Zereini F., Wiseman C.L. Urban Airborne Particulate Matter: Origin, Chemistry, Fate and Health Impacts. – Springer, 2011.
- [5] Birnstiel, T., Dullemond, C.P., Brauer, F. Gas- and dust evolution in protoplanetary disks // Astronomy & Astrophysics. – 2010. – Vol. 513. – P. A79.
- [6] Esposito L.W. Planetary Rings. Cambridge University Press, 2006.
- [7] Zhao H., Maisels A., Matsoukas T., Zheng C. Analysis of four Monte Carlo methods for the solution of population balances in dispersed systems // Powder Technology. 2007. Vol. 173, no. 1. P. 38–50.
- [8] Sorokin A.A., Strizhov V.F., Demin M.N., Smirnov A.M. Monte-Carlo Modeling of Aerosol Kinetics // Atomic Energy. – 2015. – Vol. 117, no. 4. – P. 289–293.
- [9] Davari S.A., Mukherjee D. Kinetic Monte Carlo simulation for homogeneous nucleation of metal nanoparticles during vapor phase synthesis // AIChE Journal. — 2018. — Vol. 64, no. 1. — P. 18–28.
- [10] Wei J. Comparison of computational efficiency of inverse and acceptance –rejection scheme by Monte Carlo methods for particle coagulation on CPU and GPU // Powder Technology. – 2014. – Vol. 268. – P. 420–423.
- [11] Timár G., Kun F., Carmona H.A., Herrmann H.J. Scaling laws for impact fragmentation of spherical solids // Physical Review E. – 2012. – Vol. 86, no. 1. – P. 016113.
- [12] Pál G., Kun F. Mass-velocity correlation in impact induced fragmentation of heterogeneous solids // Granular Matter. — 2016. — Vol. 18, no. 4. — P. 1–11.
- [13] Brilliantov N.V., Formella A., Pöschel T. Increasing temperature of cooling granular gases // Nature Communications. – 2018. – Vol. 9, no. 1. – P. 797.

- [14] Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. New York : Oxford University Press, 1994.
- [15] Forestier-Coste L., Mancini S. A Finite Volume Preserving Scheme on Nonuniform Meshes and for Multidimensional Coalescence // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2012. — Vol. 34, no. 6. — P. B840–B860.
- [16] Матвеев С.А., Тыртышников Е.Е., Смирнов А.П., Бриллиантов Н.В. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. — 2014. — Т. 15, № 1. — С. 1–8.
- [17] Sabelfeld K.K., Eremeev G. A hybrid kinetic-thermodynamic Monte Carlo model for simulation of homogeneous burst nucleation // Monte Carlo Methods and Applications. — 2018. — Vol. 24, no. 3. — P. 193–202.
- [18] Wei J. A Monte Carlo simulation for particle aggregation containing a sol–gel phase transition // Journal of Sol-Gel Science and Technology. – 2016. – Vol. 78, no. 2. – P. 270–278.
- [19] Kotalczyk G., Kruis F.E. Fractional Monte Carlo time steps for the simulation of coagulation for parallelized flowsheet simulations // Chemical Engineering Research and Design. — 2018. — Vol. 136. — P. 71–82.
- [20] Wei J., Kruis F.E. GPU-accelerated Monte Carlo simulation of particle coagulation based on the inverse method // Journal of Computational Physics. — 2013. — Vol. 249. — P. 67–79.
- [21] Kotalczyk G., Kruis F.E. A Monte Carlo method for the simulation of coagulation and nucleation based on weighted particles and the concepts of stochastic resolution and merging // Journal of Computational Physics. – 2017. – Vol. 340. – P. 276–296.
- [22] Timár G., Blömer J., Kun F., Herrmann H.J. New universality class for the fragmentation of plastic materials // Physical Review Letters. – 2010. – Vol. 104, no. 9. – P. 095502.
- [23] Pál G., Varga I., Kun F. Emergence of energy dependence in the fragmentation of heterogeneous materials // Physical Review E. – 2014. – Vol. 90, no. 6. – P. 062811.
- [24] Spahn F., Albers N., Sremcevic M., Thornton C. Kinetic description of coagulation and fragmentation in dilute granular particle ensembles // Europhysics Letters. — 2004. — Vol. 67, no. 4. — P. 545–551.
- [25] Goreinov S.A., Oseledets I.V., Savostyanov D.V. et al. How to find a good submatrix // Matrix Methods: Theory, Algorithms, Applications. — World Scientific Publishing, 2010. — P. 247– 256.

- [26] Zacharov I., Arslanov R., Gunin M. et al. "Zhores"—Petaflops supercomputer for data-driven modeling, machine learning and artificial intelligence installed in Skolkovo Institute of Science and Technology // Open Engineering. — 2019. — Vol. 9, no. 1. — P. 512–520.
- [27] Evans C.G., Winfree E. Physical principles for DNA tile self-assembly // Chemical Society reviews. – 2017. – Vol. 46, no. 12. – P. 3808–3829.
- [28] Poeschel T., Brilliantov N.V., Frommel C. Kinetics of prion growth // Biophysics Journal. 2003. – Vol. 85, no. 6. – P. 3460–3474.
- [29] Demortire A., Snezhko A., Sapozhnikov M.V. et al. Self-assembled tunable networks of sticky colloidal particles // Nature communications. — 2014. — Vol. 5, no. 1. — P. 1–7.
- [30] Rothemund P.W.K., Papadakis N., Winfree E., Condon A. Algorithmic Self-Assembly of DNA Sierpinski Triangles // PLoS Biology. – 2004. – Vol. 2, no. 12. – P. e424.
- [31] Falkovich G., Fouxon A., Stepanov M.G. Acceleration of rain initiation by cloud turbulence // Nature. 2002. Vol. 419. P. 151–154.
- [32] Shrivastava R.C. A simple model of particle coalescence and breakup // Journal of Atmospheric Sciences. — 1982. — Vol. 39, no. 6. — P. 1317–1322.
- [33] Güttler C., Blum J., Zsom A. et al. The outcome of protoplanetary dust growth: pebbles, boulders, or planetesimals? I. Mapping the zoo of laboratory collision experiments // Astronomy & Astrophysics. – 2010. – Vol. 513. – P. A56.
- [34] Brilliantov N.V., Krapivsky P.L., Bodrova A.S. et al. Size distribution of particles in Saturn's rings from aggregation and fragmentation // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2015. – Vol. 112, no. 31. – P. 9536–9541.
- [35] Brilliantov N.V., Bodrova A.S., Krapivsky P.L. A model of ballistic aggregation and fragmentation // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2009. Vol. 2009, no. 06. —
 P. P06011.
- [36] Dorogovtsev S.N., Mendes J.F.F. Evolution of networks: From biological nets to the Internet and WWW. Oxford University Press, 2003.
- [37] Grabisch M., Rusinowska A. A model of influence based on aggregation functions // Mathematical Social Sciences. – 2013. – Vol. 66, no. 3. – P. 316–330.
- [38] Skyrms B., Pemantle R. A Dynamic Model of Social Network Formation // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2000. – Vol. 97, no. 16. – P. 9340–9346.

- [39] Cuzzi J.N., Burns J.A., Charnoz S. et al. An evolving view of Saturn's dynamic rings // Science. – 2010. – Vol. 327, no. 5972. – P. 1470–1475.
- [40] Angelo J.A. Encyclopedia of Space and Astronomy. Infobase Publishing, 2014.
- [41] Chokshi A., Tielens A.G.G.M., Hollenbach D. Dust coagulation // The Astrophysical Journal. —
 1993. Vol. 407, no. 2. P. 806–819.
- [42] Dominik C., Tielens A.G.G.M. The physics of dust coagulation and the structure of dust aggregates in space // The Astrophysical Journal. — 1997. — Vol. 480, no. 2. — P. 647–673.
- [43] Guimaraes A.H.F., Albers N., Spahn F. et al. How adhesion influences the growth and resistivity of aggregates in Saturn's rings // Icarus. – 2012. – Vol. 220, no. 2. – P. 660–678.
- [44] Stadnichuk V., Bodrova A., Brilliantov N. Smoluchowski aggregation–fragmentation equations: Fast numerical method to find steady-state solutions // International Journal of Modern Physics B. – 2015. – Vol. 29, no. 29. – P. 1550208.
- [45] Longaretti P.Y. Saturn's main ring particle size distribution: An analytic approach // Icarus. 1989. Vol. 81. P. 51–73.
- [46] Schrapler R., Blum J. The physics of protoplanetesimal dust agglomerates. VI. Erosion of large aggregates as a source of micrometer-sized particles // The Astrophysical Journal. — 2011. — Vol. 734, no. 2. — P. 108.
- [47] Cheng Y., Suen J., Zhang D. et al. Finite element analysis of the time-dependent Smoluchowski equation for acetylcholinesterase reaction rate calculations // Biophysical journal. — 2007. — Vol. 92, no. 10. — P. 3397–406.
- [48] Zueva S., Ostrikov A., Ryazhskikh V., Veglio F. A Solution to Smoluchowski's Coagulation Equation Based on Experimental Data and a Model to Describe the Frequency of Particle Collisions // Modern Applied Science. — 2015. — Vol. 9, no. 2. — P. 252.
- [49] Murthy C.R., Gao B., Tao A.R., Arya G. Dynamics of nanoparticle assembly from disjointed images of nanoparticle-polymer composites // Physical Review E. – 2016. – Vol. 93, no. 2. – P. 022501.
- [50] Ariga K., Hill J. P., Lee M. V. et al. Challenges and breakthroughs in recent research on self-assembly // Science and Technology of Advanced Materials. — 2008. — Vol. 9, no. 1. — P. 014109.

- [51] Smoluchowski M. Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetik kolloider lo sungen // Zeitschrift für Physikalische Chemie. — 1917. — Vol. 92. — P. 129–168.
- [52] Muller H. Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation // Kolloidchemische Beihefte. –
 1928. Vol. 27, no. 6–12. P. 223–250.
- [53] Smoluchowski M. Drei vortrage uber diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen // Zeitschrift fur Physik. — 1916. — Vol. 17. — P. 557–585.
- [54] Melzak Z.A. The effect of coalescence in certain collision processes // Quarterly of Applied Mathematics. — 1953. — Vol. 11, no. 2. — P. 231–234.
- [55] Scott W.T. Analytic Studies of Cloud Droplet Coalescence I // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1968. — Vol. 25, no. 1. — P. 54–65.
- [56] Ziff R.M., Stell G. Kinetics of polymer gelation // The Journal of Chemical Physics. 1980. —
 Vol. 73, no. 7. P. 3492–3499.
- [57] Leyvraz F., Tschudi H.R. Singularities in the kinetics of coagulation processes // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1981. — Vol. 14, no. 12. — P. 3389–3405.
- [58] Lushnikov A.A. Coagulation in finite systems // Journal of Colloid and Interface Science. 1978. — Vol. 65, no. 2. — P. 276 – 285.
- [59] Spouge J.L. Solutions and critical times for the monodisperse coagulation equation when aij=A + B(i + j) + Cij // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1983. Vol. 16, no. 4. P. 767–773.
- [60] Spouge J.L. Solutions and critical times for the polydisperse coagulation equation when a(x,y)=A + B(x + y) + Cxy // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1983. Vol. 16, no. 13. P. 3127–3132.
- [61] Calogero F., Leyvraz F. New results on a parity-dependent model of aggregation kinetics // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2000. – Vol. 33, no. 32. – P. 5619–5629.
- [62] Leyvraz F., Redner S. Nonuniversality and breakdown of scaling in two-species aggregation // Physical Review A. – 1987. – Vol. 36, no. 8. – P. 4033–4049.
- [63] Calogero F., Leyvraz F. A new solvable model of aggregation kinetics // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1999. — Vol. 32, no. 44. — P. 7697.

- [64] Brilliantov N.V., Krapivsky P.L. Nonscaling and source-induced scaling behaviour in aggregation model of movable monomers and immovable clusters // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1991. — Vol. 24, no. 20. — P. 4787.
- [65] Melzak Z.A. A scalar transport equation // Transactions of the American Mathematical Society. – 1957. – Vol. 85, no. 2. – P. 547–560.
- [66] Melzak Z.A. A scalar transport equation. II. // Michigan Mathematical Journal. 1957. Vol. 4, no. 3. — P. 193–206.
- [67] Melzak Z.A. Entire operators and functional equations // Proceedings of the American Mathematical Society. — 1959. — Vol. 10, no. 3. — P. 438–447.
- [68] Melzak Z.A. The positivity sets of the solutions of a transport equation. // Michigan Mathematical Journal. – 1959. – Vol. 6, no. 4. – P. 331–334.
- [69] Галкин В.А. Уравнение Смолуховского. Физматлит, М., 2001.
- [70] Norris J.R. Smoluchowski's coagulation equation: uniqueness, nonuniqueness and a hydrodynamic limit for the stochastic coalescent // The Annals of Applied Probability. — 1999. — Vol. 9, no. 1. — P. 78–109.
- [71] Friedlander S.K., Wang C.S. The self-preserving particle size distribution for coagulation by brownian motion // Journal of Colloid and Interface Science. 1966. Vol. 22, no. 2. P. 126 132.
- [72] Lai F.S., Friedlander S.K., Pich J., Hidy G.M. The self-preserving particle size distribution for Brownian coagulation in the free-molecule regime // Journal of Colloid and Interface Science. — 1972. — Vol. 39, no. 2. — P. 395 – 405.
- [73] Ernst M.H. Kinetics of clustering in irreversible aggregation // Fractals in Physics / Ed. by L. Pietronero, E. Tosatti. — Amsterdam : North-Holland, 1986. — P. 289.
- [74] van Dongen P.G.J., Ernst M.H. Dynamic Scaling in the Kinetics of Clustering // Physical Review Letters. 1985. Vol. 54, no. 13. P. 1396–1399.
- [75] Wilkinson F.J. Chemical kinetics and reaction mechanisms. Van Nostrand Reinhold Company, 1980.
- [76] Brilliantov N.V., Poschel T. Kinetic Theory of Granular Gases. Oxford University Press, 2004.
- [77] Brilliantov N.V., Spahn F. Dust coagulation in equilibrium molecular gas // Mathematics and Computers in Simulation. – 2006. – Vol. 72, no. 2. – P. 93–97.

- [78] Аджиев С.З., Веденяпин В.В., Волков Ю.А., Мелихов И.В. Обобщенные уравнения типа Больцмана для агрегации в газе // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017. — Т. 57, № 12. — С. 2065–2078.
- [79] Bodrova A.S., Osinsky A., Brilliantov N.V. Temperature distribution in driven granular mixtures does not depend on mechanism of energy dissipation // Scientific Reports. — 2020. — Vol. 10, no. 1. — P. 693.
- [80] Bodrova A., Levchenko D., Brilliantov N. Universality of temperature distribution in granular gas mixtures with a steep particle size distribution // Europhysics Letters. – 2014. – Vol. 106, no. 1. – P. 14001.
- [81] Trizac E. Kinetics and scaling in ballistic annihilation // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88, no. 16. — P. 160601.
- [82] Fournier N., Laurençot P. Existence of self-similar solutions to Smoluchowski's coagulation equation // Communications in Mathematical Physics. – 2005. – Vol. 256, no. 3. – P. 589– 609.
- [83] Brilliantov N.V., Osinsky A.I., Krapivsky P.L. Role of energy in ballistic agglomeration // Physical Review E. – 2020. – Vol. 102, no. 4. – P. 042909.
- [84] Matveev S.A., Krapivsky P.L., Smirnov A.P. et al. Oscillations in aggregation-shattering processes // Physical Review Letters. — 2017. — Vol. 119, no. 26. — P. 260601.
- [85] Spahn F., Neto E.A., Guimaraes A.H.F. et al. A statistical model of aggregate fragmentation // New Journal of Physics. – 2014. – Vol. 16, no. 1. – P. 013031.
- [86] Wada K., Tanaka H., Suyama T. et al. Numerical simulation of dust aggregate collisions. II. Compression and disruption of three-dimensional aggregates in head-on collisions // The Astrophysical Journal. — 2008. — Vol. 677, no. 2. — P. 1296–1308.
- [87] Ohnishi N., Bringa E.M., Remington B.A. et al. Numerical analysis of nanograin collision by classical molecular dynamics // Journal of Physics: Conference Series. – 2008. – Vol. 112, no. 4. – P. 042017.
- [88] Ringl C., Bringa E.M., Bertoldi D.S., Urbassek H.M. Collisions of porous clusters: a granularmechanics study of compaction and fragmentation // The Astrophysical Journal. — 2012. — Vol. 752, no. 2. — P. 151.
- [89] Веденяпин В.В., Аджиев С.З. Энтропия по Больцману и Пуанкаре // Успехи математических наук. — 2014. — Т. 69, № 6. — С. 45–80.

- [90] Megías A., Santos A. Kullback–Leibler Divergence of a Freely Cooling Granular Gas // Entropy. – 2020. – Vol. 22, no. 11.
- [91] Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1959. Vol. 2, no. 4. P. 331–407.
- [92] Kremer G.M. An introduction to the Boltzmann equation and transport processes in gases. Springer Science & Business Media, 2010.
- [93] Gupta V.K., Shukla P., Torrilhon M. Higher-order moment theories for dilute granular gases of smooth hard spheres // Journal of Fluid Mechanics. — 2018. — Vol. 836. — P. 451–501.
- [94] Gupta V.K. Moment theories for a d-dimensional dilute granular gas of Maxwell molecules // Journal of Fluid Mechanics. — 2020. — Vol. 888. — P. A12.
- [95] Багдасарова И.Р., Галкин В.А. Моделирование процесса коагуляции в пространственно однородном случае // Математическое моделирование. 1999. Т. 11, № 6. С. 82–112.
- [96] Godunov S.K., Ryabenkii V.S. Difference schemes: an introduction to the underlying theory. Elsevier Science, 1987.
- [97] Meakin P. The growth of fractal aggregates // Time-Dependent Effects in Disordered Materials /
 Ed. by R. Pynn, T. Riste. Boston, MA : Springer US, 1987. Vol. 167. P. 45–70.
- [98] Garcia A.L., Alejandro L., van den Broeck C. et al. A Monte Carlo simulation of coagulation // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 1987. — Vol. 143, no. 3. — P. 535–546.
- [99] Zhao H., Zheng C. A new event-driven constant-volume method for solution of the time evolution of particle size distribution // Journal of Computational Physics. – 2009. – Vol. 228, no. 5. – P. 1412–1428.
- [100] Patterson R.I.A., Kraft M. Models for the aggregate structure of soot particles // Combustion and Flame. – 2007. – Vol. 151, no. 1–2. – P. 160–172.
- [101] Matveev S.A., Zheltkov D.A., Tyrtyshnikov E.E., Smirnov A.P. Tensor train versus Monte Carlo for the multicomponent Smoluchowski coagulation equation // Journal of Computational Physics. – 2016. – Vol. 316. – P. 164–179.
- [102] Gillespie D.T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions // Journal of Computational Physics. 1976. Vol. 22, no. 4. P. 403–434.

- [103] Matveev S.A., Ampilogova N.V., Stadnichuk V.I. et al. Anderson acceleration method of finding steady-state particle size distribution for a wide class of aggregation–fragmentation models // Computer Physics Communications. – 2018. – Vol. 224. – P. 154–163.
- [104] Wada K., Tanaka H., Suyama T. et al. Collisional growth conditions for dust aggregates // The Astrophysical Journal. — 2009. — Vol. 702, no. 2. — P. 1490–1501.
- [105] Piasecki J., Trizac E., Droz M. Dynamics of ballistic annihilation // Physical Review E. 2002. – Vol. 66, no. 6. – P. 066111.
- [106] Osinsky A.I., Bodrova A.S., Brilliantov N.V. Size-polydisperse dust in molecular gas: Energy equipartition versus nonequipartition // Physical Review E. 2020. Vol. 101, no. 2. P. 022903.
- [107] Seifert A., Khain A., Blahak U., Beheng K.D. Possible effects of collisional breakup on mixedphase deep convection simulated by a spectral (bin) cloud model // Journal of The Atmospheric Sciences. – 2005. – Vol. 62, no. 6. – P. 1917–1931.
- [108] Falkovich G., Stepanov M., Vucelja M. Rain initiation time in turbulent warm clouds // Journal of Applied Meteorology and Climatology. — 2006. — Vol. 45, no. 4. — P. 591–599.
- [109] Hayakawa H., Takada S., Garzó V. Kinetic theory of shear thickening for a moderately dense gassolid suspension: From discontinuous thickening to continuous thickening // Physical Review E. – 2017. – Vol. 96, no. 4. – P. 042903.
- [110] Gundlach B., Blum J. The stickiness of micrometer-sized water-ice particles // The Astrophysical Journal. 2014. Vol. 798, no. 1. P. 34.
- [111] Wurm G., Paraskov G., Krauss O. Growth of planetesimals by impacts at 25 m/s // Icarus. 2005. — Vol. 178, no. 1. — P. 253–263.
- [112] Brilliantov N.V., Albers N., Spahn F., Pöschel T. Collision dynamics of granular particles with adhesion // Physical Review E. – 2007. – Vol. 76, no. 5. – P. 051302.
- [113] Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Physical Review B. — 1989. — Vol. 39, no. 8. — P. 5566–5568.
- [114] Lindsay L.R., Broido D.A. Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81, no. 20. – P. 205441.

- [115] Si C., Wang X.D., Fan Z. et al. Impacts of potential models on calculating the thermal conductivity of graphene using non-equilibrium molecular dynamics simulations // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2017. — Vol. 107. — P. 450–460.
- [116] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // Journal of Computational Physics. — 1995. — Vol. 117, no. 1. — P. 1–19.
- [117] Frenkel D., Smith B. Understanding molecular dynamics simulation from algorithms to applications. – 2nd ed. – New York : Academic Press, 2002.
- [118] Kalweit M., Drikakis D. Collision dynamics of nanoscale Lennard-Jones clusters // Physical Review B. – 2006. – Vol. 74, no. 23. – P. 235415.
- [119] Hai-bo Z., Chu-guang Z., Ming-hou X. Multi-monte-carlo method for general dynamic equation considering particle coagulation // Applied Mathematics and Mechanics. — 2005. — Vol. 26, no. 7. — P. 953–962.
- [120] Smith M., Matsoukas T. Constant-number Monte Carlo simulation of population balances // Chemical Engineering Science. — 1998. — Vol. 53, no. 9. — P. 1777 – 1786.
- [121] Osinsky A.I. Low-rank method for fast solution of generalized Smoluchowski equations // Journal of Computational Physics. – 2020. – Vol. 422. – P. 109764.
- [122] Gu M., Miranian L. Strong rank revealing cholesky factorization // Electronic Transactions on Numerical Analysis. — 2004. — Vol. 17. — P. 76–92.
- [123] Intel Math Kernel Library [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://software.intel. com/en-us/intel-mkl (дата обращения: 20.03.2021).
- [124] Матвеев С.А. Параллельная реализация быстрого метода решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // Вычислительные методы и программирование. — 2015. — Т. 16, № 3. — С. 360–368.
- [125] Желтков Д.А., Тыртышников Е.Е. Параллельная реализация матричного крестового метода // Вычислительные методы и программирование. — 2015. — Т. 16, № 3. — С. 369–375.
- [126] Osinsky A.I., Brilliantov N.V. Anomalous aggregation regimes of temperature-dependent Smoluchowski equations // Physical Review E. – 2022. – Vol. 105, no. 3. – P. 034119.
- [127] Saitoh K., Bodrova A., Hayakawa H., Brilliantov N.V. Negative normal restitution coefficient found in simulation of nanocluster collisions // Physical Review Letters. — 2010. — Vol. 105, no. 23. — P. 238001.

- [128] Muller P., Krengel D., Poschel T. Negative coefficient of normal restitution // Physical Review
 E. 2012. Vol. 85, no. 4. P. 041306.
- [129] Горейнов С.А., Тыртышников Е.Е. Квазиоптимальность скелетного приближения матрицы в чебышевской норме // Доклады Академии наук. — 2011. — Т. 438, № 5. — С. 593–594.

Приложение А. Температурно-зависимая модель и параметры

Во всех вычислениях в разделе 5 используются ядра *C*, *B* и *D*, определенные в [13]. Обозначим

$$\theta_i = T_i/m_i = T_i/i.$$

Точные формулы для коэффициентов ядер следующие:

$$\begin{split} C_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}\left(1-f_{ij}\right) \\ B_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\frac{1}{\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\theta_{i}\theta_{j}\left(1-f_{ij}\right)+\frac{4}{3}\left(\frac{i\theta_{i}-j\theta_{j}}{i+j}\right)^{2}\left(1-g_{ij}\right)\right) \\ D_{ij} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^{2}\frac{1}{\sqrt{\theta_{i}+\theta_{j}}}\left(\theta_{i}\theta_{j}\left(1-f_{ij}\right)+\frac{4}{3}\theta_{i}^{2}\left(1-g_{ij}\right)\right) \\ &+\frac{4}{3}\frac{j}{i+j}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)\left(1+\varepsilon\right)\left(\theta_{i}-\frac{1}{2}\left(1+\varepsilon\right)\frac{j}{i+j}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)\right)g_{ij}\right) \\ f_{ij} &= e^{-q_{ij}}\left(1+q_{ij}\right) \\ g_{ij} &= e^{-q_{ij}}\left(1+q_{ij}+q_{ij}^{2}/2\right) \\ q_{ij} &= \frac{W_{ij}}{\varepsilon^{2}\frac{ij}{i+j}\left(\theta_{i}+\theta_{j}\right)} \\ W_{ij} &= a\frac{\left(i^{1/3}j^{1/3}\right)^{\lambda_{1}}}{\left(i^{1/3}+j^{1/3}\right)^{\lambda_{2}}} \\ \sigma_{ij} &= \frac{i^{1/3}+j^{1/3}}{2} \end{split}$$
(A.1)

Они включают в себя четыре параметра: a, λ_1 , λ_2 и ε . Первые три влияют на вероятность агрегации для разных размеров и зависят от конкретного типа и величины силы взаимодействия. ε – это коэффициент восстановления, который определяет потери энергии при столкновениях, происходящие из-за отсутствия полной упругости. Для того, чтобы была возможность сравнения, параметры выбраны такими же, как в [13]:

$$\varepsilon = 0,99$$

 $a = 0,1$
 $\Lambda = \lambda_1 = \lambda_2 = 0,4$

При моделировании рассматривается начальное условие, при котором все частицы являются мономерами с безразмерной температурой $T_1 = 1$. Чтобы получить ту же начальную плотность числа частиц и, следовательно, проверить результаты, мы задаем n_1 (t = 0) = $0.3/\pi$.

Согласно разделу 5.2.2, ядра *B* и *D* разбиты на несколько более простых при их аппроксимации. Ядро *B* разбивается следующим образом:

$$\begin{split} B &= B^{(1)} + B^{(2)} - B^{(3)} \\ B_{ij}^{(1)} &= 2\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{\theta_i\theta_j}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} \left(1 - f_{ij}\right) \\ B_{ij}^{(2)} &= \frac{8}{3}\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{(i\theta_i)^2 + (j\theta_j)^2}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} \left(1 - g_{ij}\right) \frac{1}{(i+j)^2} \\ B_{ij}^{(3)} &= \frac{16}{3}\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^2 \frac{\theta_i\theta_j}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} \left(1 - g_{ij}\right) \frac{ij}{(i+j)^2} \end{split}$$

Заметим, что мы избавились от множителя $(i\theta_i - j\theta_j)^2$ в B_{ij} , который привел бы к существенным потерям в точности аппроксимации.

Для матрицы D можно начать с разделения по физическим процессам (агрегация, температурный обмен и диссипация), а затем снова разделить часть агрегации на две, поскольку одна из ее частей равна $B^{(1)}$:

$$D = D^{aggr} + D^{exch} + D^{cool}$$

$$D^{aggr} = D^{(1)} + D^{(2)}$$

$$D^{exch}_{ij} = D^{(3)}_{ij}\theta_i - D^{(3)}_{ij}\frac{j}{i}\theta_j$$

$$D^{(1)} = B^{(1)}$$

$$D^{(2)}_{ij} = \frac{8}{3}\sqrt{2\pi}\sigma^2_{ij}\frac{\theta^2_i}{\sqrt{\theta_i + \theta_j}} (1 - g_{ij})$$

$$D^{(3)}_{ij} = \frac{4}{3}\sqrt{2\pi}\sigma^2_{ij}\sqrt{\theta_i + \theta_j}g(1 + \varepsilon)^2\frac{ij}{(i + j)^2}$$

$$D^{cool}_{ij} = \frac{4}{3}\sqrt{2\pi}\sigma^2_{ij}\sqrt{\theta_i + \theta_j}g\frac{1 - \varepsilon^2}{(i + j)^2}$$

Всего требуется вычислить 7 аппроксимаций, по сравнению с 3 без разбиения, что не слишком увеличивает сложность. Напомним, что все аппроксимации могут быть легко вычислены параллельно.

Приложение В. Анализ распределения температур при отсутствии агрегации

Сделав несколько умеренных допущений, можно доказать, что распределение температур в полидисперсных газах без агрегации с внешнем притоком энергии стремится к форме $T_k \sim k^{\alpha}$, где α не зависит от конкретной модели диссипации энергии. Здесь мы не рассматриваем случай частиц, которые могут обладать отрицательным коэффициентом восстановления [127,

128]. Мы приводим доказательство для распределения Максвелла, но те же методы могут быть использованы и в других случаях. Для простоты определим единицу массы *m*₁ = 1 и перепишем (32) как

$$\xi_{ki}(t) = \frac{8}{3}\sqrt{2\pi}n_i \left(i^{1/3} + k^{1/3}\right)^2 (T_k/k + T_i/i)^{1/2} \\ \times \left(\frac{i}{i+k} \left[1 - \frac{i}{2(i+k)} \left(1 + \langle \varepsilon_{ki} \rangle\right) \left(1 + \frac{T_ik}{T_ki}\right)\right] \\ + \frac{i}{i+k} \left[\langle \varepsilon_{ki} \rangle - \frac{i}{2(i+k)} \left(\langle \varepsilon_{ki} \rangle + \langle \varepsilon_{ki}^2 \rangle\right) \left(1 + \frac{T_ik}{T_ki}\right)\right]\right).$$
(B.1)

Сначала проверим сходимость $\sum_{i=1}^{\infty} |\xi_{ki}|$. Оценив $|\xi_{ki}|$ из (В.1), мы находим, что для $i \ge k$

$$\sum_{i=k}^{\infty} |\xi_{ki}| \leq \operatorname{const} \cdot \sum_{i=k}^{\infty} n_i i^{2/3} \sqrt{1 + \frac{T_i}{i}} \sqrt{1 + \frac{T_k}{k}} \left(1 + \frac{T_i k}{T_k i}\right).$$
(B.2)

Следовательно, если T_i увеличивается с *i* медленнее, чем *i*, то мы имеем сходимость, если $\sum_{i=1}^{\infty} n_i i^{2/3} < \infty$. В противном случае, когда T_i увеличивается с *i* быстрее, чем *i*, то ряд сходится, если

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i i^{-5/6} T_i^{3/2} < \infty.$$
(B.3)

Введем еще болеее сильное ограничение

$$\frac{T_k \sum_{i=k}^{\infty} |\xi_{ki}|}{k^{\gamma}} \xrightarrow{k \to \infty} 0, \tag{B.4}$$

которое будет верным, если

$$\frac{1}{k^{\gamma}} \sum_{i=k}^{\infty} n_i i^{2/3} (T_k + T_i \frac{k}{i}) \sqrt{1 + \frac{T_i}{i}} \stackrel{k \to \infty}{\to} 0.$$
(B.5)

Рассмотрим теперь частичную сумму от $i = i_0$ до k, которая удовлетворяет

$$\sum_{i=i_0}^k |\xi_{ki}| \le \sum_{i=i_0}^k n_i i k^{-1/3} \sqrt{1 + \frac{T_k}{k}}$$

и наложим условие

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists i_0 \quad \forall k \ge i_0 \quad \frac{T_k \sum_{i=i_0}^k |\xi_{ki}|}{k^{\gamma}} < \epsilon, \tag{B.6}$$

которое будет выполняться, если $\sum_{i=1}^{\infty} n_i i < \infty$, и $T_k = O(k^{\alpha})$ для α из (33). Объединив условия (B.4) и (B.6), мы видим, что

$$\forall \epsilon > 0 \quad \forall k \ge i_0 \quad \frac{T_k \sum_{i=i_0}^{\infty} |\xi_{ik}|}{k^{\gamma}} < \epsilon, \tag{B.7}$$

что, по сути, означает, что полный ряд может быть заменен его первыми i_0 членами с любой желаемой точностью ϵ (i_0 , безусловно, зависит от ϵ). Следовательно, для $k \gg i_0$ мы имеем ту же асимптотику для T_k , полученную для неполной суммы, что и для всего ряда. Они отличаются только коэффициентом $1 + \epsilon$, сходящимся к 1 по мере увеличения i_0 и k (далее подразумевается, что ϵ может быть принят сколь угодно малым).

Теперь покажем, что для $k \gg i_0$ члены ξ_{ki} (В.1) действительно сходятся. Мы имеем

$$\left(i^{1/3} + k^{1/3}\right)^2 = (1+\epsilon) k^{2/3}$$

$$\sqrt{\frac{T_i}{i} + \frac{T_k}{k}} = \begin{cases} (1+\epsilon) \sqrt{\frac{T_i}{i}}, & \text{if } T_k/k \to 0\\ (1+\epsilon) \sqrt{\cosh t + \frac{T_k}{k}}, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\frac{i}{i+k} = (1+\epsilon) \frac{1}{k}$$

$$\frac{i}{i+k} \cdot \frac{T_i k}{T_k i} \to 0 \quad \text{if } T_k \to \infty$$

Последнее условие означает, что члены с отрицательным знаком в (В.1) исчезают. Тогда мы остаемся с

$$\xi_{ki}(t) = \operatorname{const} \cdot (1+\epsilon) \, k^{-1/3} \sqrt{\frac{T_i}{i} + \frac{T_k}{k}} \left(1 + \langle \varepsilon_{ki} \rangle \right), \qquad k \gg 1.$$
(B.8)

Если $\langle \varepsilon_{ki} \rangle$ непрерывно зависит от скоростей и имеет предел для $k \to \infty$, то $1 + \langle \varepsilon_{ki} \rangle$ также является значением (которое зависит только от *i*) между 1 и 2 с точностью до коэффициента $(1 + \epsilon)$. Решая затем стационарное уравнение для T_k

$$T_k \sum_i \xi_{ki} = \Gamma_1 k^{\gamma} \tag{B.9}$$

с *ξ_{ki}* из (В.8), приходим к

$$T_k = \operatorname{const} \cdot (1 + \epsilon) k^{\alpha}$$

с а из (33), что доказывает требуемую асимптотику.

Обращаем внимание, что к специальному случаю $\alpha = 1$ следует относиться с особой осторожностью. В этом случае предел $\langle \varepsilon_{ik} \rangle$ для $k \to \infty$ может зависеть от предела T_k/k^{α} ; уравнение (В.9) для T_k , с ξ_{ki} из (В.8), превращается в уравнение для неявной функции $f(x, \epsilon)$ с $x = T_k/k^{\alpha}$. В этом конкретном случае также необходимо проверить, что ξ_{ki} , заданный уравнением (В.8) является монотонной функцией $x = T_k/k^{\alpha}$. В противном случае может существовать несколько решений уравнения (В.9) для $\lim_{k\to\infty} \frac{T_k}{k^{\alpha}}$. Во всех рассмотренных выше случаях величина $\langle \varepsilon_{ik} \rangle$ уменьшается медленнее, чем $1 - c |\vec{v}|$; следовательно, монотонность гарантирована, так что $\lim_{k\to\infty} \frac{T_k}{k^{\alpha}} = \text{const} > 0$ даже для $\alpha = 1$.

Подставляя $T_k \sim k^{\alpha}$ в (В.3) и (В.5), мы видим, что для сходимости полученных асимптотик достаточны следующие условия:

1.
$$n_k = O\left(1/k^{\max(2,\gamma+1)+\delta}\right)$$
, with $\delta > 0$
2. $\gamma > -1/3$

Удивительно, но среди них нет условий, налагаемых на эффективные коэффициенты восстановления $\langle \varepsilon_{ik} \rangle$, за исключением естественных – непрерывности и существования некоторого предела для высоких скоростей, которые, очевидно, удовлетворяются по физическим причинам. Однако, следует также отметить, что степенная асимптотика справедлива только для больших k и не ожидается для $k \sim 1$. При моделировании использовалось распределение $n_k \sim k^{-3}$, что означает, что в системе доминируют мономеры, и сходимость к асимптотике уже видна для довольно малых k.

Приложение С. Наилучшее приближение для распределения скоростей при баллистической агрегации

Обозначим U_{n+} гильбертово пространство функций $f(\vec{v})$, которые могут быть записаны в терминах разложения по полиномам Сонина, начиная с S_n :

$$f(\vec{v}) = \sum_{j=n}^{\infty} \alpha^{(j)} S_j\left(v^2/2\right) \frac{e^{-v^2/2}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{j=n}^{\infty} \alpha^{(j)} S_j\left(v^2/2\right) f_M(\vec{v})$$

со скалярным произведением

$$(f,g) = \int f(\vec{v}) g(\vec{v}) e^{v^2/2} d\vec{v}.$$

Обозначим P_{2+} ортогональный проектор с U_{0+} на U_{2+} .

Определим линейный оператор $A: U_{2+} \to U_{2+}$ как

$$Af(\vec{v}) = P_{2+} \sum_{i+j=k} \frac{n_i n_j}{n_k} \varepsilon(i) \varepsilon(j) \sigma_{ij}^2 \left(I_+ \left(f_{i,M}, f\left(\vec{v} / \sqrt{\theta_j} \right) \right) - \frac{1}{2} f\left(\vec{v} / \sqrt{\theta_j} \right) \right).$$
(C.1)

Формально мы также должны доказать, что $||A|| < \infty$. Хотя, в принципе, это должно быть возможно проверить, эта часть заняла бы слишком много времени, поэтому мы опускаем эту часть доказательства.

Применим проектор P_{2+} к стационарному варианту уравнения (64). Левая часть (64) имеет вид $A + Bv_k^2 + Cf_{k,NM}$, который может быть выражен как $A'S_0 + B'S_1 + Cf_{k,NM}$. По определению, $P_{2+}(S_0) = 0$ и $P_{2+}(S_1) = 0$, поэтому мы получим ноль в левой части после того, как переместим $f_{k,NM}$ в правую:

$$0 = P_{2+} \sum_{i+j=k} \frac{n_i n_j}{n_k} \sigma_{ij}^2 \left(\varepsilon(i) \varepsilon(j) I_+ \left(f_{i,M}, f_{j,NM} \right) - \frac{\varepsilon(k)}{2} f_{k,NM} \right) = A f_{1,NM} \left(\vec{v} \right), \quad (C.2)$$

где мы использовали уравнения (60) и (С.1).

Будем обозначать через $p_n(x)$ произвольные многочлены степени не больше, чем n. Тогда, по определению,

$$cp_n(x) = p_n(x)$$

И

$$p_m(x) + p_n(x) = p_{\max(m,n)}(x).$$

Теперь оценим $A(S_n f_M)$. Поскольку мы работаем с функциями, которые масштабируются до единичной температуры, мы имеем $\theta_i = 1/i$, $\theta_j = 1/j$, $\theta_k = 1/k$. Введем разность скоростей

$$\vec{w} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$

и скорость центра масс сталкивающихся кластеров

$$\vec{u} = \vec{v}_k = \frac{i\vec{v}_i + j\vec{v}_j}{i+j}.$$

Тогда

$$\vec{v}_i = \vec{u} + \frac{j}{i+j}\vec{w},$$

$$\vec{v}_j = \vec{u} - \frac{i}{i+j}\vec{w}.$$

Подставив их в определение I_+ (62), мы получим

$$I_{+}\left(f_{i,M}, S_{n}f_{M}\left(\vec{v}_{j}/\sqrt{\theta_{j}}\right)\right) = \frac{1}{(2\pi)^{3}\theta_{i}^{3/2}\theta_{j}^{3/2}}e^{-\frac{i+j}{2}u^{2}} \iint d\vec{e}d\vec{w}\theta \left(-\vec{w}\cdot\vec{e}\right)|\vec{w}\cdot\vec{e}| \times S_{n}\left(\frac{j}{2}\left(u^{2}+\frac{i^{2}}{(i+j)^{2}}w^{2}+\frac{2i}{i+j}\vec{u}\cdot\vec{w}\right)\right)e^{-\frac{ij}{2(i+j)}w^{2}},$$

что, после упрощений, дает

$$I_{+}\left(f_{i,M}, S_{n}f_{M}\left(\vec{v}_{j}/\sqrt{\theta_{j}}\right)\right) = \left(p_{n-1}\left(v_{k}^{2}\right) + C_{n}S_{n}\left(kv_{k}^{2}/2\right)\left(\frac{j}{i+j}\right)^{n}\right)f_{M}\left(\vec{v}_{k}/\sqrt{\theta_{k}}\right),$$

где $C_n \neq 0$ – некоторая константа. Следовательно, мы получаем в общей сложности многочлен степени *n* от v_k^2 , который лежит в подпространстве первых *n* многочленов Сонина.

Суммируя по i + j = k, мы получаем

$$A(S_n f_M) = p_{n-1} \left(v_k^2 \right) f_M \left(\vec{v}_k / \sqrt{\theta_k} \right) + C_n S_n \left(v_k^2 / (2\theta_k) \right) f_M \left(\vec{v}_k / \sqrt{\theta_k} \right) \sum_{i+j=k} \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}} \frac{n_i n_j}{n_k} \sigma_{ij}^2 \left(\frac{i^n \varepsilon(i) + j^n \varepsilon(j)}{(i+j)^n} - \varepsilon(k) \right).$$
(C.3)

Пусть скалярные произведения $(S_n f_M, A(S_n f_M)) \neq 0$ для любого $n \ge 2$. Тогда $A(S_n f_M)$ линейно независим от всех $A(S_m f_M), m < n$, так как скалярное произведение $(S_n f_M, A(S_n f_M)) \neq 0$ и $(S_n f_M, A(S_m f_M)) = 0$, поскольку $A(S_m f_M)$ лежит в подпространстве первых m < n полиномов Сонина. В результате, если $A(S_2 f_M) \neq 0$, то функции $A(S_n f_M)$, $n \ge 2$ формируют базис в U_{2+} . Следовательно, оператор A обратим, и из Af = 0 следует f = 0. То есть $f_{k,NM} = 0$ и потому $f_k = f_{k,M}$, что неверно.

Из полученного противоречия следует, что найдется значение *n*, такое что $A(S_n f_M) = 0$. Уравнение (С.3) в этом случае имеет решение $\varepsilon(k) = \text{const} \cdot k^{-(n-1)} + o(k^{-(n-1)})$. Следовательно, наибольшее возможное $\varepsilon(k)$ соответствует n = 2. Тогда Ker $A = \{S_2 f_M\}$ (в подпространстве, ортогональном $S_2 f_M$ есть базис, по тем же причинам, что и раньше) и потому $f_{k,NM} = S_2 f_{k,M}$ единственное решение (64), с точностью до постоянного множителя, который можно перенести в $\varepsilon(k)$.

Приложение D. Интегралы в коэффициентах уравнений Смолуховского-Эйлера

Здесь мы записываем интегралы, используемые при определении ядер для уравнений Смолуховского-Эйлера.

$$\begin{split} I_F\left(Q,\vec{c}\right) &= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{0<|\vec{w}|^2 < Q} |\vec{w}| \, e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= -\frac{\sqrt{\pi}}{4 \, |\vec{c}|} \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{2 \, |\vec{c}|} erf\left(\frac{|\vec{c}|}{2}\right) \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{8} \, |\vec{c}| \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{4} \, |\vec{c}| \, erf\left(\frac{|\vec{c}|}{2}\right) \\ &+ \frac{1}{2 \, |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} - \frac{1}{2 \, |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\frac{|\vec{c}|^2}{4}} - \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} - \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &\stackrel{\longrightarrow}{|\vec{c}| \to 0} \\ 1 - (1 + Q) \, e^{-Q} \end{split}$$

$$\begin{split} \overline{I_F}\left(Q,\vec{c}\right) &= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{|\vec{w}|^2 > Q} |\vec{w}| \, e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{4 \, |\vec{c}|} \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{8} \, |\vec{c}| \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &- \frac{1}{2 \, |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2 \, |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \end{split}$$

 $\stackrel{\rightarrow}{|\vec{c}| \to 0} (1+Q) e^{-Q}$

$$\begin{split} I_{G}\left(Q,\vec{c}\right) &= \frac{1}{4\pi} \int_{0<|\vec{w}|^{2} < Q} |\vec{w}|^{3} e^{-\left|\vec{w} - \frac{2}{2}\right|^{2}} d\vec{w} \\ &= -\frac{3\sqrt{\pi}}{16|\vec{c}|} \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{3\sqrt{\pi}}{8|\vec{c}|} erf\left(\frac{|\vec{c}|}{2}\right) \\ &- \frac{3\sqrt{\pi}}{16}|\vec{c}| \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{3\sqrt{\pi}}{8}|\vec{c}| erf\left(\frac{|\vec{c}|}{2}\right) \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{64}|\vec{c}|^{3} \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{32}|\vec{c}|^{3} erf\left(\frac{|\vec{c}|}{2}\right) \\ &+ \frac{3}{8|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} - \frac{3}{8|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} \\ &+ \frac{1}{4|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{3} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} - \frac{1}{4|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{3} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} \\ &+ \frac{3}{8} |\vec{c}| \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} - \frac{3}{8} |\vec{c}| \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} \\ &+ \frac{5}{8} e^{-\frac{|\vec{c}|^{2}}{4}} + \frac{13}{16} |\vec{c}|^{2} e^{-\frac{|\vec{c}|^{2}}{4}} \\ &- \frac{1}{2} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} \\ &- \frac{1}{2} |\vec{c}|^{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} - \frac{1}{2} |\vec{c}|^{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^{2}} \end{split}$$

 $\xrightarrow{|\vec{c}| \to 0}$

$$1 - \left(1 + Q + \frac{Q^2}{2}\right)e^{-Q}$$

$$\begin{split} \overline{I_G}\left(\mathcal{Q}, \vec{c}\right) &= \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\vec{w}|^2 < Q} |\vec{w}|^3 e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= \frac{3\sqrt{\pi}}{16 |\vec{c}|} \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{3\sqrt{\pi}}{16} |\vec{c}| \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &+ \frac{3\sqrt{\pi}}{64} |\vec{c}|^3 \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) \right) \\ &- \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &- \frac{1}{4 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{4 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &- \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &- \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{3}{8 |\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} e^{-Q} \\ &\\ I_H \left(Q, \vec{c}\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{0 |\vec{w}|^2 < Q} |\vec{w}| \left(\vec{w}, \vec{c}\right) e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}|^2}{|\vec{c}|}\right|^2} d\vec{w} \\ &= 4I_G \left(Q, \vec{c}\right) - 4I_F \left(Q, \vec{c}\right) - \frac{Q^{3/2}}{|\vec{c}|} \left(e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|^2\right)^2} - e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|^2\right)^2}}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{split} I_{GH}\left(Q,\vec{c}\right) &= \frac{1}{4\pi} \int_{0<|\vec{w}|^{2}$$

$$\begin{split} |\vec{c}| \to 0 \\ 1 - \left(1 + Q + \frac{Q^2}{2}\right) e^{-Q} \\ \overline{I_{GH}} \left(Q, \vec{c}\right) &= \frac{1}{4\pi} \int_{|\vec{w}|^2 > Q} |\vec{w}| \left(\vec{w}, \vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right) e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{4|\vec{c}|} \left(1 + \frac{|\vec{c}|^2}{2}\right) \left(erf\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)\right) \\ &+ \frac{1}{2|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} - \frac{1}{2|\vec{c}|} \left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right) e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{Q^{3/2}}{4|\vec{c}|} \left(e^{-\left(\sqrt{Q} - \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2} - e^{-\left(\sqrt{Q} + \frac{|\vec{c}|}{2}\right)^2}\right) \\ &\overrightarrow{|\vec{c}|} \to 0 \\ &\left(1 + Q + \frac{Q^2}{2}\right) e^{-Q} \end{split}$$

$$\begin{split} I_{GH2}\left(\mathcal{Q},\vec{c}\right) &= \frac{1}{4\pi} \int_{0<|\vec{w}|^2 < \mathcal{Q}} |\vec{w}| \left| \vec{w} - \frac{\vec{c}}{2} \right|^2 e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= I_G\left(\mathcal{Q},\vec{c}\right) - \frac{1}{2} I_H\left(\mathcal{Q},\vec{c}\right) + \frac{\left|\vec{c}\right|^2}{8} I_F\left(\mathcal{Q},\vec{c}\right) \\ &= \frac{3}{8} e^{-\frac{\left|\vec{c}\right|^2}{4}} + \frac{\sqrt{\pi}}{16\left|\vec{c}\right|} \left(10 + 3\left|\vec{c}\right|^2\right) erf\left(\frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right) \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{32\left|\vec{c}\right|} \left(10 + 3\left|\vec{c}\right|\right) \left(erf\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)\right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\mathcal{Q}}}{8\left|\vec{c}\right|} \left(2\mathcal{Q} + 5\right) \left(e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2} - e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2}\right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(2\mathcal{Q} - 3\right) \left(e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2} + e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2}\right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(2\mathcal{Q}, \vec{c}\right) = \frac{1}{4\pi} \int_{\left|\vec{w}\right|^2 > \mathcal{Q}} \left|\vec{w}\right| \left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2 e^{-\left|\vec{w} - \frac{\vec{c}}{2}\right|^2} d\vec{w} \\ &= \overline{I_G} \left(\mathcal{Q}, \vec{c}\right) - \frac{1}{2} \overline{I_H} \left(\mathcal{Q}, \vec{c}\right) + \frac{\left|\vec{c}\right|^2}{8} \overline{I_F} \left(\mathcal{Q}, \vec{c}\right) \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{32\left|\vec{c}\right|} \left(10 + 3\left|\vec{c}\right|^2\right) \left(erf\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right) - erf\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)\right) \right) \\ &- \frac{\sqrt{\mathcal{Q}}}{8\left|\vec{c}\right|} \left(2\mathcal{Q} + 5\right) \left(e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2} - e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2}\right) \\ &- \frac{1}{16} \left(2\mathcal{Q} - 3\right) \left(e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2} + e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2}\right) \\ &= \frac{1}{16} \left(2\mathcal{Q} - 3\right) \left(e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} + \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2} + e^{-\left(\sqrt{\mathcal{Q}} - \frac{\left|\vec{c}\right|}{2}\right)^2}\right) \end{split}$$

Приложение Е. Малоранговая аппроксимация ядер агрегации

Здесь можно найти описание того, как эффективно использовать maxvol [25] в уравнениях Смолуховского. Мы начнем с написания этого алгоритма в его простейшей форме как алгоритм 2.

Заметим, что на вход maxvol подаются несколько уже выбранных столбцов r и начальная подматрица \hat{A} . Хотя в обоих случаях они могут быть взяты с предыдущего временного шага,

Алгоритм 2 maxvol [25]

Вход: Матрица $A \in \mathbb{R}^{N \times r}$. Начальная подматрица $\hat{A} \in \mathbb{R}^{r \times r}$. Выход: Подматрица $\hat{A} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ с большим объемом $vol(\hat{A}) = |\det \hat{A}|$. 1: $C := A\hat{A}^{-1}$ 2: $\{i, j\} := \arg \max_{i,j} |C_{i,j}|$ 3: while $|C_{i,j}| > 1$ do 4: $\hat{A}_{j,:} := A_{i,:}$ 5: $C := C - C_{:,j} \left(C_{i,:} - I_{j,:}^r\right) / C_{ij}$ $I^r -$ это единичная матрица размера $r \times r$. 6: $\{i, j\} := \arg \max_{i,j} |C_{i,j}|$ 7: end while

ранг *r* все еще необходимо определить. Это можно сделать с помощью неполного исключения Гаусса (алгоритм 3). В алгоритме используется понятие нормы Чебышева

$$||A||_C = \max_{i,j} |A_{ij}|.$$

Она выбрана из-за существования гарантированных оценок нормы Чебышева для крестовых аппроксимаций [129].

Наборы индексов I и \mathcal{J} обозначают подматрицу $\hat{A} = A_{I,\mathcal{J}}$ со строками из набора I и столбцами из набора \mathcal{J} .

Отметим, что исключение Гаусса уже дает приближение малого ранга. Однако, оно слишком дорого для применения ко всей матрице, и качество может быть значительно улучшено, если набор строк I и соответствующая матрица V будут пересчитаны с использованием maxvol в столбцах C. Исключение по Гауссу используется только для выбора соответствующего ранга r. На практике был устанавлен порог точности $\varepsilon = 10^{-7}$, так что ошибка аппроксимации была намного ниже, чем ошибка из других источников.

Весь алгоритм целиком выглядит следующим образом (см. алгоритм 4). Мы начинаем с нахождения аппроксимации немного большего ранга k = r + Deltar (мы брали $\Delta r = 4$). Затем мы используем исключение по Гауссу для выбора подходящего r leqslantk и, наконец, улучшаем аппроксимацию с помощью алгоритма maxvol.

Поскольку мы выполняем аппроксимацию на каждом временном шаге, а ядро меняется медленно, maxvol выполняет всего несколько замен столбцов и строк (не больше O(r)) и, следовательно, имеет сложность $O(Nr^2)$. Каждый шаг исключения Гаусса также стоит $O(Nk^2) = O(Nr^2)$. Другая дорогостоящая часть решения - это быстрое Преобразования Фурье, на которое требуется $O(Nr \log N)$ операций. В общей сложности один временной шаг метода решения ОДУ

Алгоритм 3 Неполное исключение Гаусса с полным выбором пивота

Вход: Матрица $A \in \mathbb{R}^{N \times k}$.

Порог ошибки ε .

Выход: Столбцы $A_{:,\mathcal{J}} \in \mathbb{R}^{N \times r}$ и матрица $V \in \mathbb{R}^{r \times k}$ такая, что

$$\|A - A_{:,\mathcal{J}}V\|_C \leq \varepsilon \|A\|_C$$

1: $\delta := \varepsilon ||A||_C$ 2: E := A3: $I, \mathcal{J} := \emptyset$ 4: **for** *r* := 1 **to** *k* **do** $\{i, j\} := \arg \max_{i,j} |E_{i,j}|$ $I := I \cup \{i\}$ 5: 6: 7: $\mathcal{J} := \mathcal{J} \cup \{j\}$ 8: $E := E - E_{:,j} E_{ij}^{-1} E_{i,:}$ if $||E||_C \leq \delta$ then 9: 10: break end if 11: 12: **end for** 13: $V := A_{I,\mathcal{J}}^{-1} A_{I,:}$

Алгоритм 4 Алгоритм малоранговой аппроксимации

Вход: Матрица ядра агрегации $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$.

Порог ошибки ε .

Максимально возможный рост ранга Δr .

Начальная подматрица $\hat{A} = A_{I,\mathcal{J}} \in \mathbb{R}^{r \times r}$, где наборы индексов I и \mathcal{J} берутся с предыдущего временного шага (на первом шаге $I = \mathcal{J} = \emptyset$).

Выход: Факторы разложения $U, V \in \mathbb{R}^{N \times r}$, которые аппроксимируют ядро $A: A \approx UV^T$.

- 1: $k := r + \Delta r$
- 2: Добавление Δr следующих индексов в наборы строк I и столбцов \mathcal{J} .
- 3: $A_{I,\mathcal{J}}^T := \max \operatorname{vol}(A_{I,:}^T, \hat{A} = A_{I,\mathcal{J}}^T)$ {Здесь $|I| = |\mathcal{J}| = k$ }
- 4: Применение неполного исключения Гаусса к $A_{:,\mathcal{J}}$ и нахождение r.
 - $\{\text{Теперь} |\mathcal{I}| = |\mathcal{J}| = r\}$
- 5: $A_{I,\mathcal{J}} := \max \operatorname{vol}(A_{:,\mathcal{J}}, \hat{A} = A_{I,\mathcal{J}})$

6:
$$U := A_{:,\mathcal{J}}$$

7: $V := A_{I,\mathcal{J}}^{-1} A_{I,:}$

выполняется за $O(Nr(r + \log N))$.