

Efficient solution of the Smoluchowski coagulation equation using a hybrid linear-logarithmic mesh

Bianca Bietti Managó^{1,2}, ORCID: 0009-0000-1842-3026 ; Ezequiel Rodolfo Soule^{1,2}, ORCID: 0000-0002-2135-2510 ; Cristian Balbuena^{1,2}, ORCID: 0000-0002-6343-2084

¹Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, Av. Colón 10850, Mar del Plata, Argentina

²Universidad Nacional de Mar del Plata, Deán Funes 3350, Mar del Plata, Argentina

biancabiettimanago@gmail.com, ersoule@fi.mdp.edu.ar, cbalbuena@fi.mdp.edu.ar

Abstract. Modeling particulate systems via population balance equations, such as the Smoluchowski coagulation equation, is central to describing nucleation, growth, and aggregation. Traditionally, numerical resolution requires integrating a coupled system of Ordinary Differential Equations (ODEs) using explicit methods. This linear discretization approach, formulating an equation for each exact nanoparticle size, ensures maximum fidelity but incurs prohibitive computational costs due to the increasing number of variables. Therefore, an alternative algorithm is proposed using a hybrid discretization of the size domain (linear-logarithmic), based on Man Hoi Lee's "On the Validity of the Coagulation Equation and the Nature of Runaway Growth". Initially, the algorithm models the unitary growth of each particle size. Upon exceeding a population activity tolerance, the computational domain transitions to a mixed discretization with two subdomains: a linear one, and a geometrically spaced one that groups particles with similar dynamic behaviors into "pseudo-species", allowing their evolution to be resolved with acceptable precision and lower cost. Consequently, this study aims to evaluate the trade-off between computational efficiency and numerical precision by contrasting the traditional linear approach with the proposed algorithm.

Keywords: coagulation equation, explicit methods, linear-logarithmic discretization, numerical optimization, computational cost.

Resolución de la ecuación de coagulación de Smoluchowski con una malla híbrida lineal-logarítmica

Resumen. El modelado de sistemas particulados mediante ecuaciones de balance de población, como la ecuación de coagulación de Smoluchowski, constituye una herramienta central para describir procesos de nucleación, crecimiento y agregación. Tradicionalmente, la resolución numérica de este problema requiere integrar un sistema acoplado de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDOs) mediante métodos explícitos. Este enfoque de discretización lineal, que formula una ecuación para cada tamaño exacto de nanopartícula, garantiza la máxima fidelidad del sistema. Pero el aumento del número de variables necesarias vuelve prohibitivo el costo computacional. Por esto se propone un algoritmo de resolución alternativo basado en una discretización híbrida del dominio de tamaños (lineal-logarítmica) basado en el trabajo de Man Hoi Lee "On the Validity of the Coagulation Equation and the Nature of Runaway Growth". En su etapa inicial, el algoritmo modela el crecimiento unitario de cada tamaño de partícula. Al superar una tolerancia de actividad poblacional, el dominio computacional transiciona hacia una discretización mixta donde se definen dos subdominios: uno lineal y otro de espaciado geométrico que agrupa partículas con comportamientos dinámicos similares en "pseudo-especies", permitiendo resolver su evolución con una precisión aceptable y un costo menor. El objetivo de este estudio es, entonces, evaluar la relación de compromiso entre la eficiencia computacional y la precisión numérica del sistema, contrastando el enfoque lineal tradicional con el algoritmo propuesto.

Palabras clave: ecuación de coagulación, métodos explícitos, discretización lineal-logarítmica, optimización numérica, costo computacional.

Introducción

La ecuación de balance de población de Smoluchowski es el formalismo clásico para describir la dinámica de nucleación, crecimiento y agregación en sistemas particulados. En el marco del Simposio de Modelado y Simulación (SIMS), este trabajo aplica dicho marco al estudio de la formación de nanopartículas bajo dos enfoques cinéticos: uno limitado estrictamente por la difusión espacial y un modelo integral que acopla la reducción química, la difusión y la reacción superficial. Cabe destacar que el sistema se modela asumiendo homogeneidad espacial (reactor idealmente mezclado), por lo que el problema se reduce a un sistema de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDOs) dependientes únicamente del tiempo y del dominio de tamaños de las partículas.

La evolución de la concentración de agregados de tamaño k (n_k) se describe matemáticamente mediante la forma discreta de la ecuación de Smoluchowski (Smoluchowski, 1916) (Ec. 1). Donde $K_{i,j}$ es el coeficiente cinético de coalescencia entre partículas de tamaños i y j . En el modelo puramente difusivo, este parámetro depende de los coeficientes de difusión (D) y los radios de colisión (R) de las especies interactuantes. Asumiendo una geometría esférica para los clústeres, el radio de una partícula es proporcional a la raíz cúbica de su volumen ($R_i \propto i^{1/3}$), mientras que su coeficiente de difusión, según la relación de Stokes-Einstein, es inversamente proporcional a dicho radio ($D_i \propto i^{-1/3}$).

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{i,j} n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} K_{k,i} n_i \quad (1)$$

$$K_{i,j}^{sup} = A(R_i + R_j)^2 \quad (2)$$

$$K_{i,j} = \left(\frac{1}{K_{i,j}^{dif}} + \frac{1}{K_{i,j}^{sup}} \right)^{-1} \quad (3)$$

$$K_{i,j}^{dif} = 4\pi(D_i + D_j)(R_i + R_j) \quad (4)$$

$$\frac{dC_{pre}}{dt} = -k_{red} C_{pre} \quad (5)$$

$$\frac{dn_1}{dt} = k_{red} C_{pre} + \text{Ec. 1} \quad (6)$$

Para el modelo integral, que contempla limitantes adicionales, el núcleo cinético global se define combinando las resistencias en serie de la etapa difusiva ($K_{i,j}^{dif}$) y la etapa de reacción superficial ($K_{i,j}^{sup}$), como se observa en las ecuaciones. Adicionalmente, la etapa de nucleación primaria se introduce acoplando la cinética de reducción de la sal precursora, la cual actúa como un término fuente continuo que alimenta exclusivamente a la población de monómeros o partículas de tamaño unitario (n_1). Esto modifica la diferencial de la primera especie, donde k_{red} es la constante de velocidad de reducción.

El modelado numérico de estas cinéticas acopladas resulta de gran interés en el campo de la ciencia de materiales. Su resolución computacional permite no solo predecir la distribución final de tamaños —un factor crítico que define las propiedades macroscópicas del material—, sino también identificar los mecanismos físicos preponderantes. Esta comprensión fenomenológica es indispensable para optimizar racionalmente las condiciones operativas de síntesis y facilitar el eventual escalado industrial del proceso.

Metodología y Estrategia Computacional

La metodología propuesta se fundamenta en una comparación estructural entre el enfoque clásico y el esquema híbrido desarrollado, centrando el análisis en el caso difusivo.

Para documentar la arquitectura algorítmica, se desarrollaron tres diagramas de flujo extendidos (Figuras 1, 2 y 3), los cuales se encuentran disponibles en el repositorio público del proyecto como material suplementario. La *Figura 1* ilustra el flujo de trabajo del modelo lineal tradicional; la *Figura 2* describe el modelo híbrido (Lin-Log) que optimiza el dominio mediante una discretización adaptativa; y la *Figura 3* detalla la lógica interna de cálculo de las diferenciales.

El sistema Lin-Log inicia con iteraciones puramente lineales hasta alcanzar un valor de transición crítica ($i_{intermedia}$), para luego continuar en el dominio logarítmico. Esta partición obedece a dos motivos. Primero, el algoritmo de redistribución de fracciones de masa requiere de un perfil estadístico preexistente para inicializarse. Segundo, las simplificaciones heurísticas al evaluar colisiones cruzadas inducen un error de truncamiento; realizar una simulación inicial exacta acota este efecto y asegura la estabilidad de la masa total.

Para estructurar el dominio en la etapa logarítmica, se define el parámetro $n_{linealizacion}$, el cual establece el tamaño físico máximo de clúster con discretización unitaria. La malla geométrica comienza en $n_{linealizacion+1}$. Los límites abarcados por cada nueva malla n se calculan en función de la amplitud del rango logarítmico (z):

$$Limite_n^{max} = Limite_n^{min} + z^{(n-n_{linealizacion})} \quad (7)$$

Definidos estos límites, una rutina mapea las concentraciones lineales hacia las nuevas pseudo-especies. Para cada malla agrupada, el sistema almacena un Val_{medio} que representa el tamaño promedio de los clústeres allí contenidos.

Para contener el esfuerzo computacional, se incorpora un control dinámico basado en un criterio de “Actividad Poblacional”. Se define una tolerancia (tol); si la concentración de una pseudo-especie es inferior a este umbral, su probabilidad de colisión es despreciable. Esto permite rastrear el clúster activo de mayor tamaño y expandir las matrices de cálculo únicamente cuando el frente de crecimiento lo exige, optimizando drásticamente la integración de Runge-Kutta.

Finalmente, para los términos de creación y destrucción en el dominio logarítmico, se asume (siguiendo a Lee, 2000) que la densidad de partículas dentro de un compartimento j sigue una ley de potencia. Los parámetros de interpolación b_j y q_j aseguran que la redistribución de masa sea físicamente coherente, garantizando la convergencia:

$$q_j = \frac{\log\left(\frac{N_{j+1}}{\Delta x_{j+1}}\right) - \log\left(\frac{N_j}{\Delta x_j}\right)}{\log(x_{j+1}) - \log(x_j)} \quad (8) \quad b_j = \frac{(q_j + 1)N_j}{x_{j+1/2}^{q_j+1} - x_{j-1/2}^{q_j+1}} \quad (9)$$

Nota: Para los casos donde q_j no puede calcularse por singularidades en el entorno, el modelo implementa una salvaguardia utilizando el valor de q_{j-1} .

El código fuente desarrollado en Scilab para la ejecución de este modelo, junto con los diagramas de flujo algorítmicos extendidos de la discretización, se encuentran alojados en un repositorio público de GitHub y pueden ser consultados en:

<https://github.com/biancabiettimanagodoc-ux/JAII0-2026-Smoluchowski.git>

Resultados

Las Figuras A y B presentan el costo computacional en función del avance de las iteraciones. Y evidencian que en una etapa temprana el método lineal estricto resulta más económico. Sin embargo, a medida que la malla se expande, su costo crece aceleradamente. Para el final de la simulación difusiva (50.000 iteraciones), el proceso lineal conlleva aproximadamente 98.375 s (27,3 h), mientras que el esquema híbrido Lin-Log requiere apenas 35.852 s (10,0 h), representando una reducción del tiempo de cómputo del 63 %. Esta misma proporción de ahorro se verifica en el modelo con reacción superficial. El equipo utilizado para ejecutar todas las simulaciones numéricas fueron ejecutadas bajo un entorno de Ubuntu/Linux en un servidor institucional equipado con un procesador AMD Ryzen 9 7950X de 16 núcleos y 32 GB de memoria RAM.

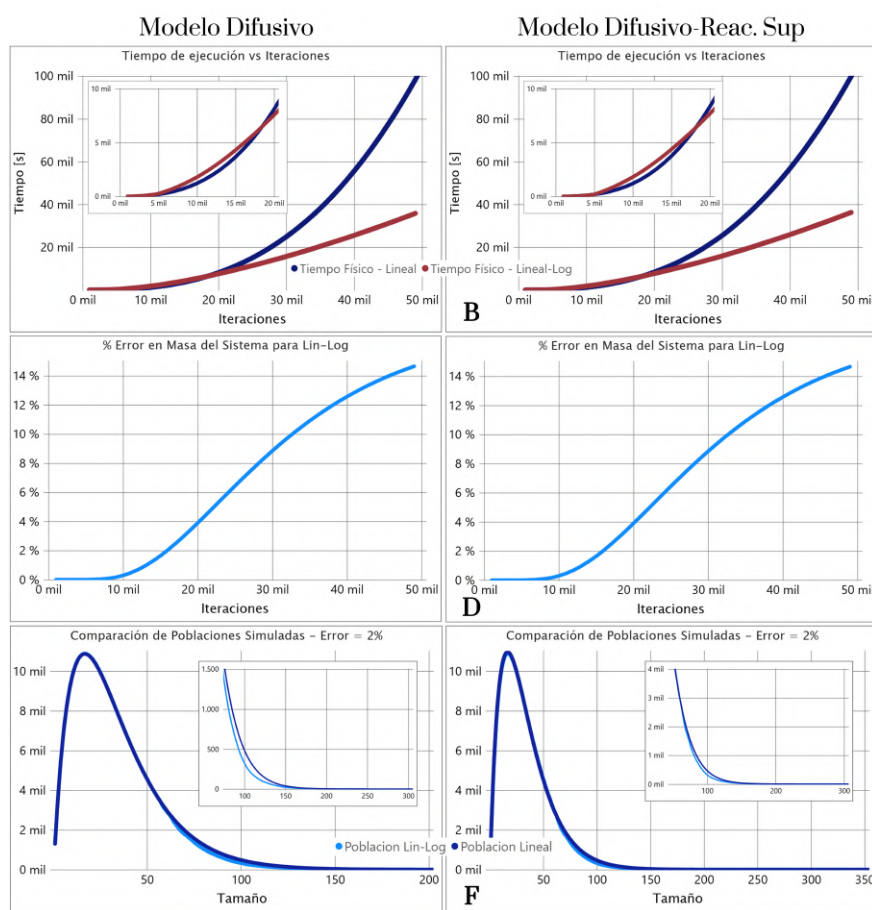


Figura 1: Rendimiento y precisión de los modelos. **A-B:** Costo computacional vs iteraciones. **C-D:** Evolución del error de masa. **E-F:** Comparación de distribuciones.

Respecto a la precisión numérica, las Figuras C y D reportan la evolución del error asociado a la pérdida de masa por truncamiento, alcanzando valores cercanos al 15 % hacia

el final del proceso. A pesar de esta deriva en la conservación de la masa total, las Figuras E y F demuestran que la distribución poblacional se mantiene físicamente coherente. Y para localizar con mayor precisión el punto de cruce en la eficiencia, el Cuadro 1 desglosa el tiempo requerido por cada metodología.

Cuadro 1: Tiempos de ejecución requeridos por cada metodología cada 1000 iteraciones (Modelo Difusivo).

Iteraciones	Esquema Lin-Log [s]		Esquema Lineal [s]	
	Tiempo Físico	Δ Tiempo	Tiempo Físico	Δ Tiempo
6.000	485,50	229,83	304,17	116,85
7.000	753,23	267,72	460,00	155,84
8.000	1.061,50	308,27	659,62	199,62
9.000	1.413,00	351,50	908,37	248,75
10.000	1.791,79	378,79	1.210,52	302,15
11.000	2.214,32	422,53	1.569,98	359,46
12.000	2.684,19	469,87	1.990,49	420,51
13.000	3.193,77	509,58	2.478,27	487,78
14.000	3.732,10	538,33	3.036,33	558,06
15.000	4.311,68	579,59	3.667,53	631,20

Conclusiones

El modelo híbrido Lin-Log representa una mejora sustancial en la eficiencia computacional frente al crecimiento cuadrático $O(N^2)$ del método lineal tradicional. Mientras que el enfoque exacto se ve limitado por el aumento exponencial de variables, el esquema propuesto adopta un perfil casi lineal tras superar el punto de transición.

Los resultados demuestran un balance favorable entre velocidad y precisión. A pesar de la pérdida de masa por truncamiento, el error muestra un comportamiento asintótico y un cambio de concavidad que sugiere una tendencia a la estabilidad del sistema a largo plazo. Asimismo, el modelo preserva la coherencia física de la distribución poblacional, capturando la posición y amplitud del pico de máxima concentración. Finalmente, se concluye que el rendimiento global puede optimizarse ajustando el parámetro $i_{intermedia}$ hacia las 15.000 iteraciones.

Bibliografía

- Inaba, S., Tanaka, H., Ohtsuki, K., & Nakazawa, K. (1999). High-accuracy statistical simulation of planetary accretion: 1. Test of the accuracy by comparison with the solution to the stochastic coagulation equation. *Earth, Planets and Space*, 51(3), 205-217.
- Lee, M. H. (2000). On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth. *Icarus*, 143(1), 74-88.
- Ramkrishna, D. (2000). *Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press.
- Smoluchowski, M. V. (1916). Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Physikalische Zeitschrift*, 17, 557-571.
- Wetherill, G. W., & Stewart, G. R. (1989). Accumulation of a swarm of small planetesimals. *Icarus*, 77(2), 330-357.